

Kappa

Redaktör: Anders Rehult

Version xx

Status

Granskad	DOK	18-03-05
Godkänd		

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2

Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz	Viktor Bernholtz (VB)	073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping**Kontaktperson hos kund:** Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se**Kursansvarig:** Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se**Handledare:** Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	v
1 Inledning	1
1.1 Parter	1
1.2 Syfte och mål	1
1.3 Användning	1
1.4 Begränsningar	1
1.5 Definitioner	2
2 Kunskapsbas	2
3 Fasplan	2
3.0.1 Före-fas	2
3.0.2 Under-fas	3
3.0.3 Efter-fas	3
4 Fördjupningsarbeten	3
4.1 Fermi-ytor	3
4.2 Visualisering av volymdata	3
5 Teknisk beskrivning	3
5.1 Datakonvertering	4
5.1.1 HDF5	4
5.1.2 VASP	5
5.2 Visualisering	5
5.2.1 Utriting	5
5.2.2 Användarindata	6
5.2.3 Interaktivitet	6
5.2.4 HDF5-indata	6
5.2.5 Kristallstruktur	6
5.2.6 Elektrontäthet	6
5.2.7 Tillståndstäthet	6
5.2.8 Fermi-ytor	6
5.2.9 Dynamisk visualisering av kristallstrukturer	6
6 Resultat	6

7 Slutsats	6
Referenser	7
Bilaga A Användarmanual	7
Bilaga B Designspekifikation	8
Bilaga C Fördjupningsarbete - Fermi-ytor	37
Bilaga D Fördjupningsarbete - Visualisering av volymdata	37
Bilaga E Gruppkontrakt	38
Bilaga F Kravspecifikation	39
Bilaga G Projektdirektiv	58
Bilaga H Projektplan	61
Bilaga I Systemskiss	117
Bilaga J Tidplan	127
Bilaga K Teknisk dokumentation	128

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-02-27	Första utkast.	Projektgruppen	SE
0.2	2018-03-05	Andra utkast.	Projektgruppen	DOK

1 Inledning

Dokumentet är en kappan för kandidatprojektet i visualisering av elektronstrukturer. Visualisering av elektronstrukturer är ett av projekten i kursen TFYA75 vid Linköpings universitet. Kappan är en sammanfattning av hela projektet.

1.1 Parter

Rickard Armiento har beställt systemet som är beskrivet i kappan. Medlemmarna i projektgruppen, som är listade under rubriken projektidentitet ovan, är mottagare av denna beställning och har haft i uppgift att implementera systemet. Projektgruppens handledare är Johan Jönsson.

1.2 Syfte och mål

Inom materialfysik är elektronstrukturberäkningar ett viktigt teoretiskt verktyg. Detta för att få en så bra förståelse som möjligt av hur olika material är uppbyggda, bland annat vad gäller kristallers egenskaper sett ur ett kvantmekaniskt perspektiv. Det kan exempelvis handla om att man vill ta reda på olika materials egenskaper vad gäller värmeledningsförmåga, strömledningsförmåga etc.

För att öka förståelsen samt för att enklare kunna presentera resultat från forskning inom området är det viktigt att kunna göra olika typer av visualiseringar baserat på elektronstrukturberäkningar.

I många av de system som används för att utföra dessa beräkningar, exempelvis VASP, ges ingen eller begränsad möjlighet till detta. Vidare är de system som idag finns tillgängliga för visualisering förhållandevis ineffektiva, dåligt standardiserade samt har få visualiseringsfunktioner.

Syftet och målet för projektet har varit att uppdatera och utöka det modifierbara verktyg för visualisering av resultaten från elektronstrukturberäkningar som togs fram av 2017 års projektgrupp. Utöver det konkreta målet med utvecklingen av mjukvara för visualisering ska även projektet ge projektmedlemmarna erfarenhet av att arbeta i projekt och utöka deras förmåga till analytiskt och fysikaliskt tänkande för att ge värdefull erfarenhet inför arbetslivet.

1.3 Användning

Denna produkt kommer användas vid Linköpings universitet för att analysera data från elektronstruktursberäkningar.

1.4 Begränsningar

I projektet kommer visualiseringsverktyget Inviwo och programmeringsspråken Python och C++ användas. Det kommer inte utredas om det är bättre att använda andra verktyg.

1.5 Definitioner

C++ är ett programmeringsspråk. [**C++**]

I Inviwo används C++ för att skriva programkod till processorer.

Fermi-yta är, för elektroners k-punkter i reciproka rummet, isoytan där elektronernas energi är lika med Fermi-energin. [**Fermi-yta**]

HDF5 är ett filformat som kan hantera stora mängder data. [**hdf5**]

Inviwo (Interactive Visualization Workshop) är programvara för visualisering som tillhandahåller en nätverksredigerare för designen av dataflödesnätverk. Noderna i dessa dataflödesnätverk kallas processorer. Indata till nätverket behandlas i dessa processorer och utdata genereras. [**Inviwo**]

Python är ett programmeringsspråk. [**Python**]

I Inviwo används Python för att knyta samman processorer.

2 Kunskapsbas

Projektgruppen har efter att tagit del av projektdirektivet, se appendix G skrivit en kravspecifikation, se appendix F. Därefter skrevs en projektplan, se appendix H, tidplan, se appendix J och en systemskiss, se appendix I enligt LIPS-modellen [**LIPS**]. Dessa dokument har sedan fungerat som en utgångspunkt för projektets utformning. Utöver dessa har en designspecifikation, se appendix B skrivits som är en fördjupning i systemskissen och ger en mer detaljerad beskrivning av systemet.

Projektgruppen har skrivit två fördjupningsarbeten, se appendix C och D knutna till projektarbetet.

Utöver detta har projektgruppen haft ett antal föreläsningar och laborationer inom området.

3 Fasplan

Projektet drivs enligt LIPS-modellen, som är en modell med regler, instruktioner och mallar för att bedriva projekt. Projektet delas upp i tre faser - före, under, och efter.

3.0.1 Före-fas

Före-fasen är ämnad att undersöka om projektet bör genomföras och, om så är fallet, definiera och konkretisera projektets mål samt organisera arbetet som krävs för att uppnå dessa. Under före-fasen skrivs bland annat ett projektdirektiv, se appendix G, en kravspecifikation, se appendix F, en systemskiss, se appendix I och en projektplan, se appendix H. Projektdirektivet skrevs innan projektgruppen skapades och gavs till projektgruppen vid projektets start. Projektgruppen har under före-fasen skrivit ett gruppkontrakt, se appendix E, en kravspecifikation, en systemskiss samt en projektplan.

3.0.2 Under-fas

Under under-fasen utförs det arbete som leder till att projektets krav uppfylls. Projektgruppen skriver en designspecifikation, se appendix B som beskriver hur systemet ska konstrueras i mer detalj än systemskissen. Projektgruppen arbetar sedan med att, utgående från denna designspecifikation, konstruera och testa systemet. En teknisk dokumentation, se appendix K, skrivs parallellt med systemets konstruktion för att reflektera den faktiska implementationen av idéerna beskrivna i designspecifikationen.

Projektgruppen har också skrivit två fördjupningsarbeten knutna till projektet. Det ena, se appendix C, behandlar Fermi-ytor som är ett av fördjupningsområdena i projektet. Det andra, se appendix D, behandlar visualisering som är en mer generell del av projektet.

3.0.3 Efter-fas

Under efter-fasen överförs projektresultatet till beställaren och projektet avslutas. Projektgruppen skriver en kopia som bifogas vid slutleveransen av produkten och även en användarmanual, se appendix A. Vid slutleveransen ska även en demonstration hållas som visar att produkten uppfyller kraven ställda på den. Efter produkten levererats skriver projektgruppen en efterstudie.

4 Fördjupningsarbeten

Nedan beskrivs kortfattat de fördjupningsarbeten som gjorts under projektet. Dessa finns även i sin helhet i appendix C och D.

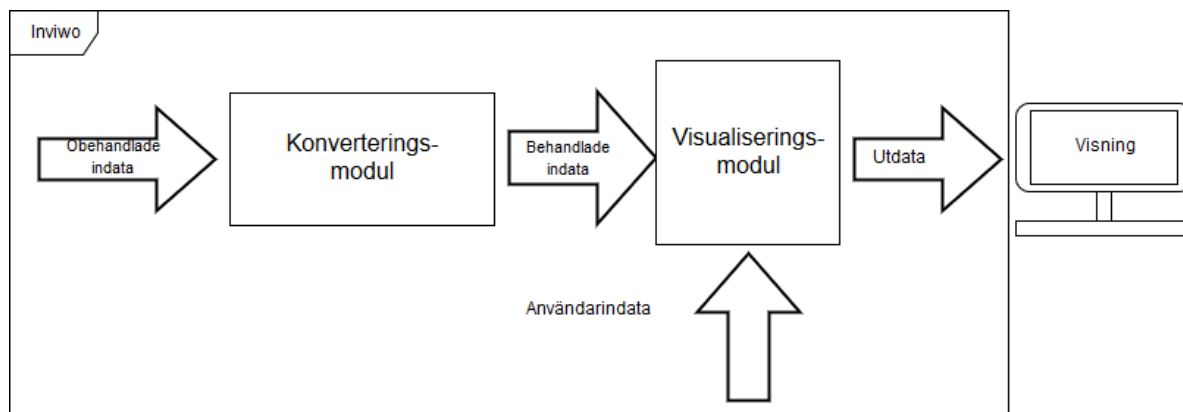
4.1 Fermi-ytor

Syftet med fördjupningsarbetet om Fermi-ytor var att besvara följande frågor: Vad är Fermi-ytor och hur kan dessa beräknas numeriskt. Detta var av intresse för projektet eftersom en del av det bestod i att visualisera Fermi-ytor...

4.2 Visualisering av volymdata

5 Teknisk beskrivning

En teknisk beskrivning av det färdigställda systemet kan ses i figur 1. Systemet hanterar indata från VASP. Datan kommer från elektronstrukturberäkningar och konverteras till HDF5-format för att därefter visualiseras. Användaren kan välja vad som ska visualiseras, kontrollera renderingens utseende och ställa in egenskaper såsom färg, transparens och rotation. Systemet har delats in i delsystem och dessa har utvecklats och testats enskilt i den mån det inte funnits beroenden till andra delsystem.

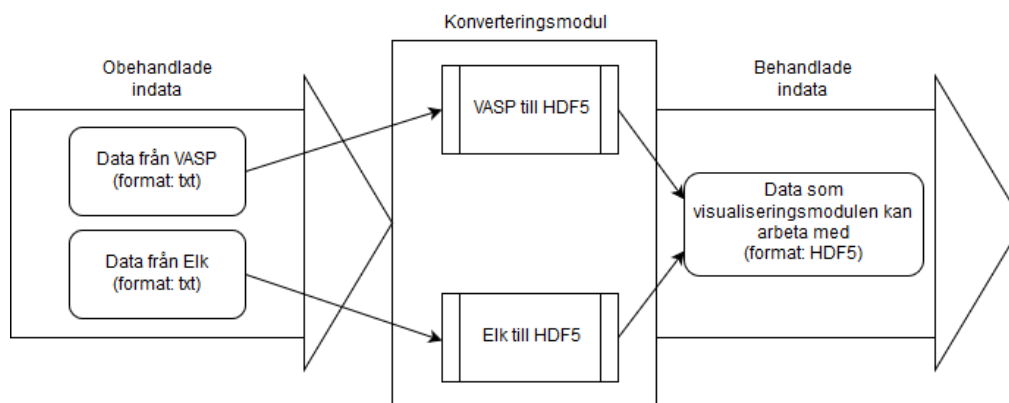


Figur 1: Grov design av systemet

I avsnitt 5.1 och 5.2 nedan ges en övergripande inblick av det två stora delsystemen och deras delsystem. För en mer detaljerad teknisk beskrivning av systemet se den tekniska dokumentationen, se appendix K.

5.1 Datakonvertering

Detta avsnitt behandlar delsystemet datakonvertering, figur 2 ger en grov översikt av delsystemet. Obehandlad data skickas in, obehandlad data är i form av textfiler med data från beräkningar gjorda i VASP. Indata behandlas sedan i konverteringsmodulen. Från konverteringsmodulen kommer behandlad data i HDF5-format.



Figur 2: Grov design av konverteringsmodulen

5.1.1 HDF5

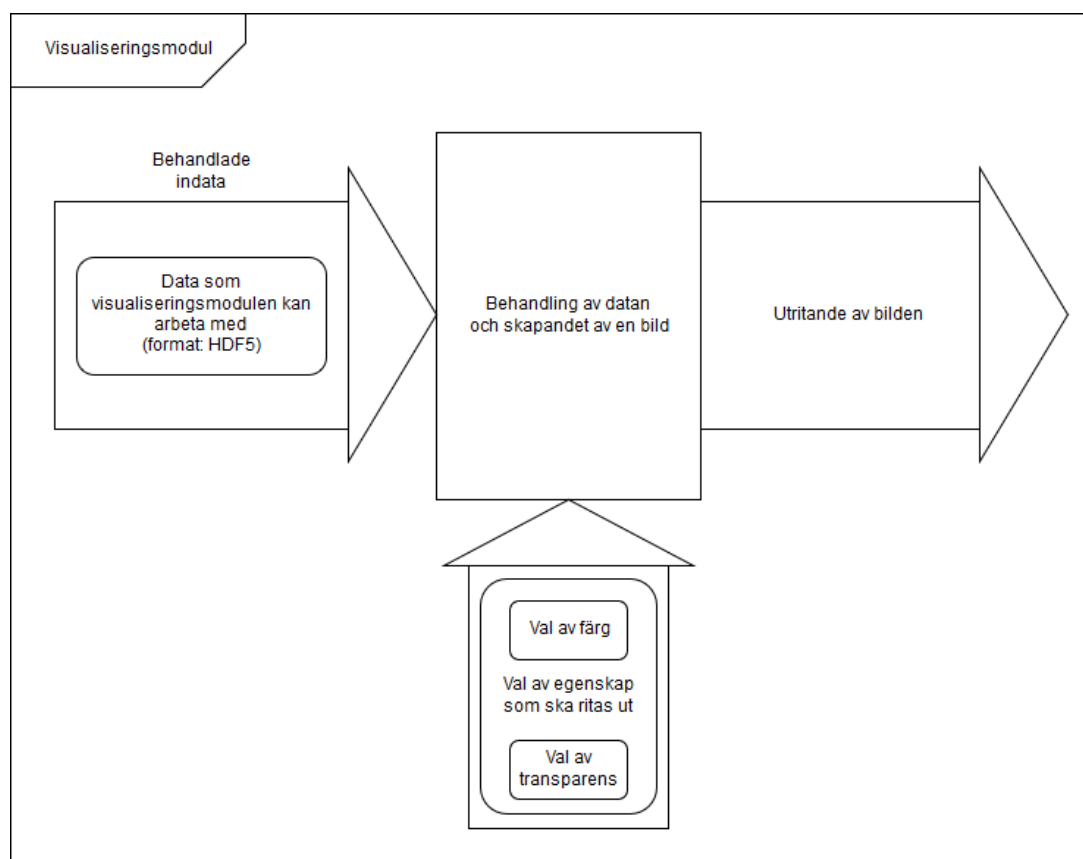
Systemet kan hantera de olika utdatafilerna från VASP. Detta görs genom att konvertera datan till HDF5-format. HDF5 är ett filformat som är designat för att hantera stora mängder data på ett flexibelt sätt [hdf5]. HDF5 har flera olika datatyper, se Figur 3, och ett HDF5-objekt som antingen är lagrat på disk eller hålls i minnet är uppdelat i två huvudsakliga underobjekt, nämligen grupper och dataset.

5.1.2 VASP

Från beräkningsprogrammet VASP fås en rad olika utdatafiler. Dessa listas och beskrivs i designspecifikationen (se appendix X). Ur dessa utdatafiler läses saker som atompositionsdata, gittervektorer, elektrontäthetsdata, tillståndstäthetsdata, Fermi-energi och så vidare för att kunna visualisera kristallstrukturer, elektrontäthet, ELF, tillståndstäthet och Fermi-ytor. I designspecifikationen beskrivs närmare vad som läses från vilka utdata filer.

5.2 Visualisering

Figur 3 visar hur delsystemet Visualisering är uppbyggt. Behandlad samt användarindata skickas in. Användarindata består av val av färg, val av egenskap som ska ritas ut, val av transparens etc. Dessa behandlas sedan i visualiseringsmodulen som skapar en bild utifrån dem. Den utritade bilden skickas sedan ut från modulen. Detta är en allmän beskrivning av visualiseringen, för de olika egenskaperna som visualiseras är mittenrektangeln i Figur 3 uppbyggd på olika sätt med olika processorer.



Figur 3: Grov design av delsystemet Visualisering

5.2.1 Utritning

Delsystemet ritar ut bilder utefter den behandlade datan. Utritningen ger en visualisering av den egenskap som modulen behandlar och kan till exempel vara en volymrendering eller en 2D-graf, beroende på vilket som är mest lättölatkat.

Utritningen görs via Inviwos inbyggda funktionalitet för att rendera via OpenGL.

5.2.2 Användarindata

5.2.3 Interaktivitet

5.2.4 HDF5-indata

5.2.5 Kristallstruktur

5.2.6 Elektrontäthet

5.2.7 Tillståndstäthet

5.2.8 Fermi-yltor

5.2.9 Dynamisk visualisering av kristallstrukturer

6 Resultat

7 Slutsats

A Användarmanual

B Designspecifikation

Designspecifikation

Redaktör: Anders Rehult

Version 1.0

Status

Granskad	VB	18-03-28
Godkänd	Johan Jönsson	18-04-11

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2
Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz	Viktor Bernholtz (VB)	073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Kontaktperson hos kund: Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se

Kursansvarig: Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se

Handledare: Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	v
1 Inledning	1
1.1 Parter	1
1.2 Projektets bakgrund	1
1.3 Syfte och mål	1
1.4 Användning	2
1.5 Begränsningar	2
1.6 Definitioner	2
2 Översikt av systemet	3
2.1 Beroenden till andra system	3
2.2 Delsystem	3
2.3 Designfilosofi	4
3 Datakonvertering	4
3.1 HDF5	4
3.1.1 HDF5-struktur för VASP-data	6
3.2 VASP	7
3.2.1 Kristallstruktur	7
3.2.2 Elektrontäthet	8
3.2.3 Tillståndstäthet	9
3.2.4 Fermi-ytor	10
3.2.5 Dynamisk kristallstruktur	10
3.3 Elk	10
4 Visualisering	11
4.1 Utritning	11
4.2 Användarindata	12
4.3 Interaktivitet	13
4.4 HDF5-indata	13
4.5 Kristallstruktur	13
4.5.1 Översiktlig beskrivning	13
4.5.2 Inwiwo-nätverk för visualisering av kristallstruktur	13
4.6 Elektrontäthet	14
4.6.1 Översiktlig beskrivning	14

4.6.2	Inviwo-nätverk för visualisering av elektrontäthet	14
4.7	Tillståndstäthet	15
4.7.1	Översiktlig beskrivning	15
4.7.2	Inviwo-nätverk för visualisering av tillståndstäthet	15
4.8	Fermi-yltor	17
4.8.1	Inviwo-nätverk för Brillouin-zonuppritning	17
4.8.2	Inviwo-nätverk för Fermi-ylte-uppritning	18
4.9	Dynamisk visualisering av kristallstruktur	19
4.9.1	Översiktlig beskrivning	19
4.9.2	Inviwo-nätverk för dynamisk visualisering av kristallstruktur	19
Referenser		21
Bilaga A HDF5-datastruktur		22
Bilaga B HDF5-datastruktur i två delar		23

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-02-27	Första utkast.	Projektgruppen	SE
0.2	2018-03-05	Andra utkast.	Projektgruppen	DOK
0.3	2018-03-28	Tredje utkast.	Projektgruppen	VB
1.0	2018-03-28	0.3 godkänd.	Projektgruppen	VB

1 Inledning

Dokumentet är en designspecifikation för kandidatprojektet i visualisering av elektronstrukturer. Visualisering av elektronstrukturer är ett av projekten i kursen TFYA75 vid Linköpings universitet. Designspecifikationen är en fördjupning av systemskissen och beskriver detaljerat hur systemet kommer att designas.

1.1 Parter

I Tabell 1 listas de olika parter som är inblandade i projektet.

Roll	Namn	E-post
Beställare	Rickard Armiento	rickard.armiento@liu.se
Expert	Rickard Englund	rickard.englund@liu.se
Handledare	Johan Jönsson	johan.jonsson@liu.se
Projektledare	Anders Rehult	andre449@student.liu.se

Tabell 1: Parter i organisationen.

1.2 Projektets bakgrund

Ett viktigt verktyg inom teoretisk fysik är elektronstrukturberäkningar. Med hjälp av dessa beräkningar går det att förutsäga hur material med vissa egenskaper kommer att bete sig.

För att förstå beräkningarna är det viktigt att kunna analysera data som beräknats. I vissa fall förenklas detta med hjälp av visualisering och i andra fall krävs det mer eller mindre att man visualiserar sin data för att förstå den. Ett kraftfullt verktyg för att visualisera data är visualiseringsprogrammet Inviwo.

Inviwo är ett forskningsverktyg som utvecklats vid Linköpings universitet och ger användaren möjlighet att styra visualisering med hjälp av programmering i Python 3 eller grafiskt. Det tillhandahåller även användargränssnitt för interaktiv visualisering.

1.3 Syfte och mål

Målet med projektet är att utveckla ett system för visualisering av resultat av elektronstrukturberäkningar. Detta ska göras i visualiseringsverktyget Inviwo och systemets funktionalitet ska demonstreras genom att använda det för att illustrera resultat från befintliga beräkningar. I och med att den framtagna mjukvaran ämnas användas i forskningssammanhang måste projektet hålla en hög vetenskaplig och teknisk kvalitet.

Utöver det konkreta målet med framtagandet av mjukvara för visualisering ska även projektet ge projektmedlemmarna erfarenhet av att arbeta i projekt och utöka deras förmåga till analytiskt och fysikaliskt tänkande för att ge värdefull erfarenhet inför arbetslivet.

1.4 Användning

Denna produkt kommer användas vid Linköpings universitet för att analysera data från elektronstruktursberäkningar.

1.5 Begränsningar

I projektet kommer visualiseringsverktyget Inviwo och programmeringsspråken Python och C++ användas. Det kommer inte utredas om det är bättre att använda andra verktyg.

1.6 Definitioner

API (Application Programming Interface) är en specifikation av hur olika applikationer kan använda och kommunicera med en specifik programvara. Detta utgörs oftast av ett dynamiskt länkat bibliotek. [10]

BSD2 är en licens för öppen källkod. [3]

C++ är ett programmeringsspråk. [4]

I Inviwo används C++ för att skriva programkod till processorer.

Elk är ett program som använder sig av metoden linjäriserad förstärkt planvåg (Linearized Augmented Planewave (LAPW)) för att lösa ekvationer av täthetsfunktionalteori (Density Functional Theory (DFT)). [5]

Fermi-energi definieras som en energinivå där antalet tillstånd som har en energi lägre än Fermi-energin är lika med antalet elektroner i systemet. [2]

Fermi-yta är, för elektroners k-punkter i reciproka rummen, isoytan där elektronernas energi är lika med Fermi-energin. [11]

Git är ett decentraliserat versionshanteringssystem. [6]

GUI (Graphical User Interface) är ett grafiskt användargränssnitt. [12]

HDF5 är ett filformat som kan hantera stora mängder data. [7]

Inviwo (Interactive Visualization Workshop) är programvara för visualisering som tillhandahåller en nätverksredigerare för designen av dataflödesnätverk. Noderna i dessa dataflödesnätverk kallas processorer. Indata till nätverket behandlas i dessa processorer och utdata genereras. [14]

Processor är benämningen på ett visuellt funktionsblock i Inviwos nätverksredigerare. I detta dokument avser en processor alltid en inviwoprocessor om inte annat anges.

Python är ett programmeringsspråk. [15]

I Inviwo används Python för att knyta samman processorer.

Reciproka rummen, även känd som k-rummet, är en fouriertransformering av det normala rummet. I reciproka rummen motsvarar varje punkt ett visst k-värde för en partikel. [13]

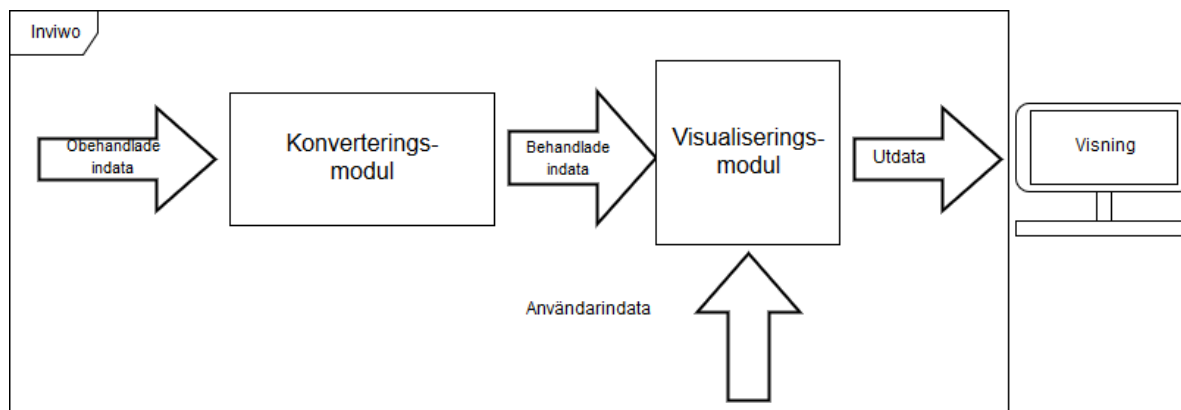
VASP är ett program för modellering på atomnivå, för t.ex. elektronstruktursberäkningar och kvantmekanisk molekylodynamik. [1]

Wigner-Seitz-radie är en radie tillhörande en atom definierad så att summan av volymerna av alla sfärer, bildade för varje atom i enhetscellen utifrån denna radie, är samma som enhetscellens totala volym. I en kristall bestående av flera atomslag finns inget entydigt sätt att välja denna radie. [16]

2 Översikt av systemet

Det färdigställda systemet, se Figur 1, ska kunna hantera indata från VASP och, i mån av tid, även från Elk. Datan kommer från elektronstrukturberäkningar och ska konverteras till HDF5-format för att därefter visualiseras. Användaren ska kunna välja vad som ska visualiseras, kontrollera renderingens utseende och ställa in egenskaper såsom färg, transparens och rotation.

Systemet har delats in i delsystem och dessa kommer utvecklas och testas enskilt i den mån det inte finns beroenden till andra delsystem.



Figur 1: Grov design av systemet

2.1 Beroenden till andra system

Projektet använder sig av Inviwo för att tillhandahålla ett gränssnitt, behandla data och rendera visualiseringar.

2.2 Delsystem

Detta avsnitt behandlar de olika delsystemen projektet innehåller.

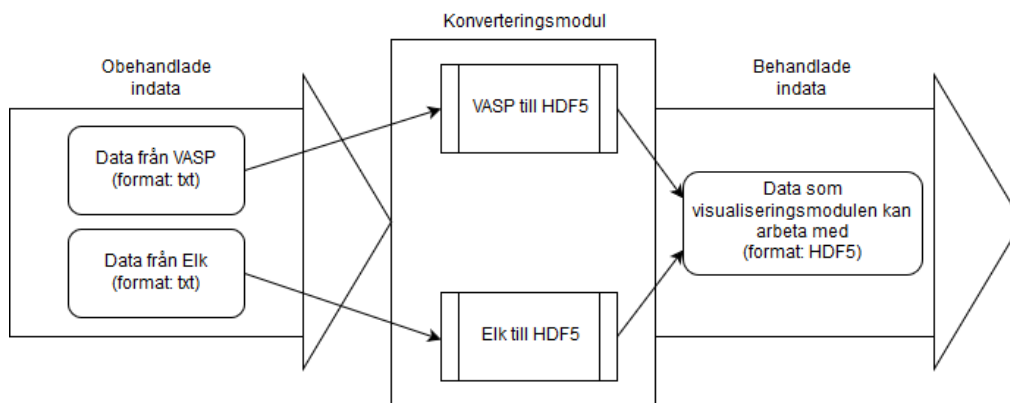
- Datakonvertering VASP
- Datakonvertering Elk
- Visualisering av kristallstruktur
- Visualisering av elektrontäthet
- Visualisering av total och partiell tillståndstäthet
- Visualisering av Fermi-ytor
- Dynamisk visualisering av kristallstruktur

2.3 Designfilosofi

Projektet kommer att drivas med hjälp av versionshanteringsystemet Git och koden kommer vara licensierad med BSD 2, men även utvecklas under Inviwos utvecklaravtal för att, om önskvärt, kunna officiellt integreras i programvaran. Tester kommer skrivas löpande i den mån det är möjligt.

3 Datakonvertering

Detta avsnitt behandlar delsystemet datakonvertering, figur 2 ger en grov översikt av delsystemet. Obehandlad data skickas in, obehandlad data är i form av textfiler med data från beräkningar gjorda i VASP eller Elk. Indata behandlas sedan i konverteringsmodulen. Från konverteringsmodulen kommer behandlad data i HDF5-format.



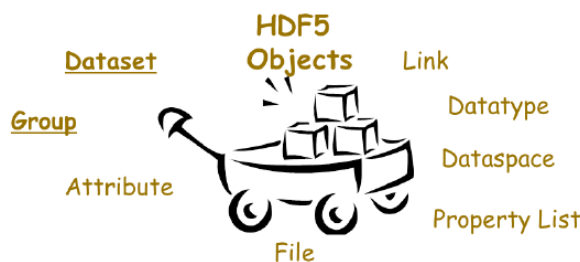
Figur 2: Grov design av konverteringsmodulen

3.1 HDF5

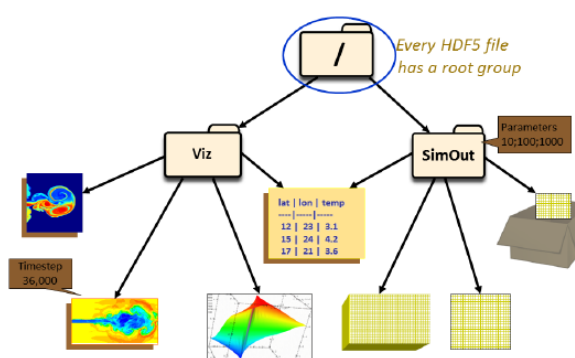
Systemet måste kunna hantera de olika utdatafilerna från VASP. Det bör även kunna hantera utdatafiler från Elk. Detta görs genom att konvertera datan till HDF5-format.

HDF5 är ett filformat som är designat för att hantera stora mängder data på ett flexibelt sätt [7].

HDF5 har flera olika datatyper, se Figur 3, och ett HDF5-objekt som antingen är lagrat på disk eller hålls i minnet är uppdelat i två huvudsakliga underobjekt, nämligen grupper och dataset. [8, s. 3-4]



Figur 3: Överblick av de ingående objektstyperna i HDF5-formatet. Tagen från dokumentet *High Level Introduction to HDF5* [8, s. 3].



Figur 4: Exempel på en HDF5-datastruktur. Tagen från dokumentet *High Level Introduction to HDF5* [8, s. 5].

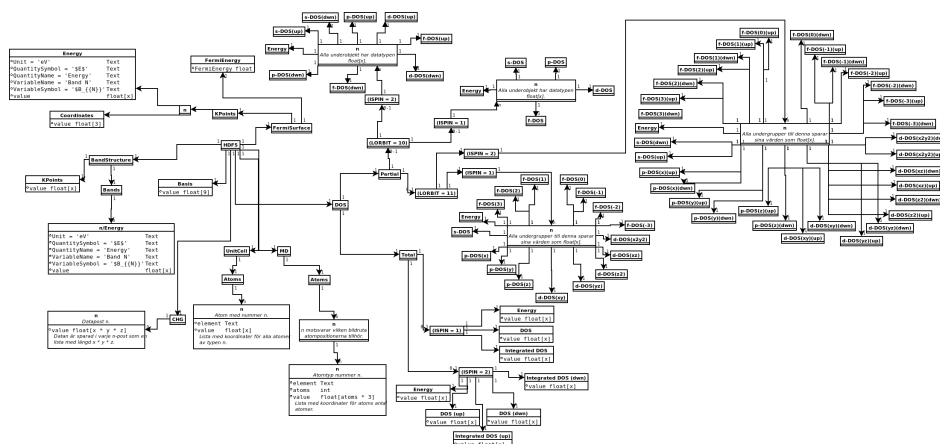
Alla HDF5-objekt har en rotgrupp som äger alla andra objekt i datastrukturen. Denna grupp innehåller i sin tur all övrig data i form av andra grupper, länkar till andra grupper eller dataset. Dataset innehåller rådata av något slag. Rådata kan i sammanhanget vara bilder, utdata från beräkningar, programdata, etcetera. [8, s. 4-5]

I Figur 4 ses ett exempel på hur en HDF5-datastruktur kan se ut. Den har en rotnod betecknad med ett snedstreck som har två undergrupper med namnen Viz och SimOut. De två undergrupperna innehåller sedan data av olika slag. [8, s. 5]

Strukturen i Figur 4 kan liknas vid ett Unix-filsystem [8, s. 5]. Noden Viz kan således kommas åt via sökvägen /Viz, medan noden SimOut kan kommas åt via sökvägen /SimOut [8, s. 5]. Skulle en extra grupp kallad NewGroup läggas till under SimOut skulle den således kommas åt via sökvägen /SimOut/NewGroup.

Två sökvägar kan peka på samma dataset då data kan delas mellan grupper [8, s. 6].

De övriga objektstyperna går inte igenom i detalj i detta dokument, men finns väl beskrivna i *High Level Introduction to HDF5* [8].



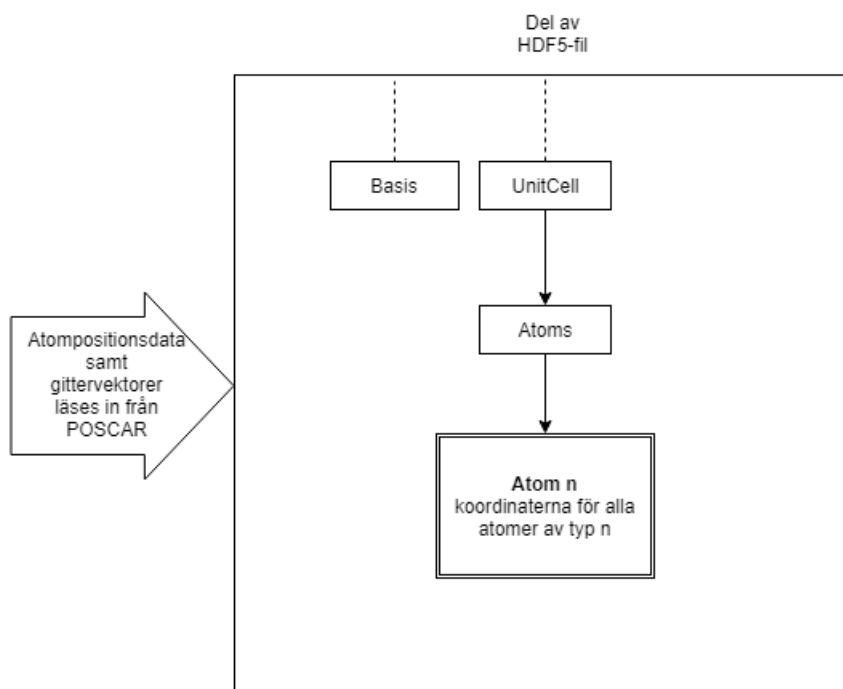
3.2 VASP

Från beräkningsprogrammet VASP fås en rad olika utdatafiler och dessa listas nedan.

- POSCAR innehåller data för enhetscellen samt atompositionsdata.
- CHG innehåller laddningstäthetsdata.
- DOSCAR innehåller tillståndstäthetsdata.
- EIGENVAL innehåller data för alla energier i k-rummet.
- POTCAR innehåller data om atomtyper.
- OUTCAR innehåller all utdata. I detta fall är information om Fermi-energi, den irreducibla 1:a Brillouin-zonens basvektorer och den 1:a Brillouin-zonens symmetriegenskaper vad som söks.
- XDATCAR innehåller data om enhetscell, atompositionsdata för varje beräkningssteg och även atomtyp.
- CONTCAR på samma format som POSCAR men CONTCAR fylls med information om atompositioner uppdaterats.

3.2.1 Kristallstruktur

Atompositionsdata läses in från POSCAR. Dessa kan vara angivna i kartesiska koordinater och måste därför konverteras till koordinater med gittervektorer som bas. Gittervektorer läses in från POSCAR och läggs in i gruppen Basis i HDF5-filen. Atompositionsdatan läggs in i gruppen Unitcell och sorteras in efter atomslag.

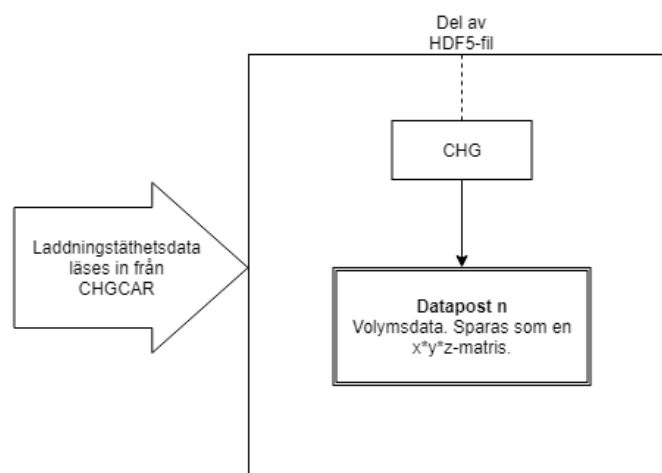


Figur 6: Schematisk bild över sorteringen av data från POSCAR fil.

Figur 6 illustrerar var i HDF5-filen som gittervektorer och atompositionsdata hamnar. Den dubbelstreckade rektangeln representerar datasetet för ett atomslag n och innehåller koordinaterna för alla atomer av det slaget.

3.2.2 Elektrontäthet

Elektrontäthetsdata läses in från utdatafilen CHGCAR. Det är alltså volymsdata som behöver läsas in. Denna volymsdata förs sedan in i HDF5-filen i gruppen CHG och sparas som en matris av dimensionen $x * y * z$.

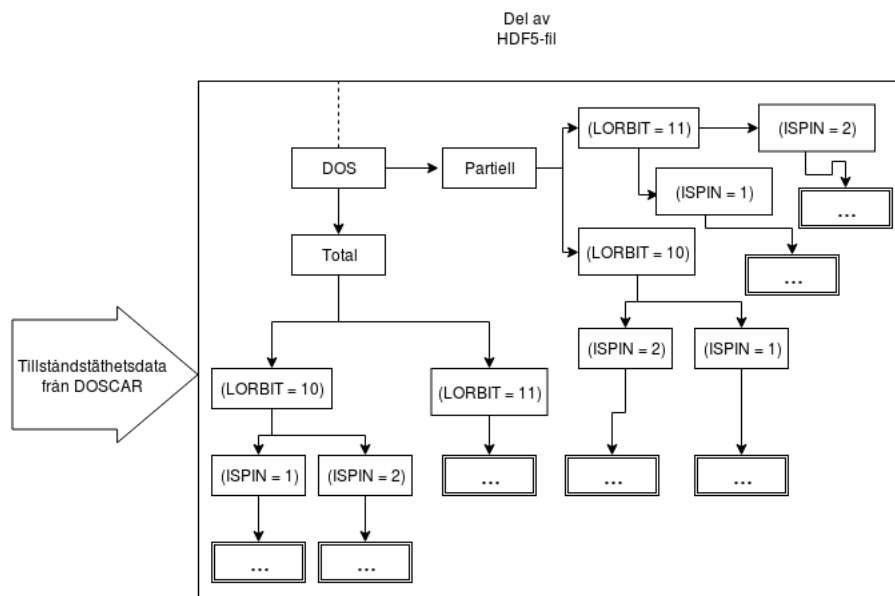


Figur 7: Schematisk bild över sortering av data från CHGCAR fil.

Figur 7 illustrerar sorteringen av volymdatan från CHGCAR.

3.2.3 Tillståndstäthet

Tillståndstäthetsdata läses in från utdatafilen DOSCAR. Flaggorna ISPIN, RWIGS och LORBIT sätts i INCAR-filen och avgör vad som skrivs i DOSCAR-filen. ISPIN-flaggan informerar om spinn har tagits hänsyn till vid beräkningar, RWIGS-flaggan specificerar Wigner-Seitz-radie för varje atomtyp och LORBIT-flaggan (kombinerat med RWIGS) avgör om PROCAR- eller PROOUT-filer skrivs. Vad flaggorna är satta till medför att datan sorteras in på olika sätt i HDF5-filen. Datan förs in i HDF5-filen enligt Figur 8.



Figur 8: Schematisk bild över sortering av data från DOSCAR fil.

Figuren illustrerar en del av HDF5-filen som en stor rektangel och inuti den beskrivs uppdelningen av den inlästa datan från DOSCAR-filen. Detaljer kan läsas ur Figur 5.

3.2.4 Fermi-yltor

Varje k-punkts möjliga energier parsas från EIGENVAL-filen. OUTCAR-filen parsas för att hitta Fermi-energin och basvektorer för den irreducibla 1:a Brillouin-zonen i kartesiska koordinater, samt den irreducibla zonens symmetrigrupp.

3.2.5 Dynamisk kristallstruktur

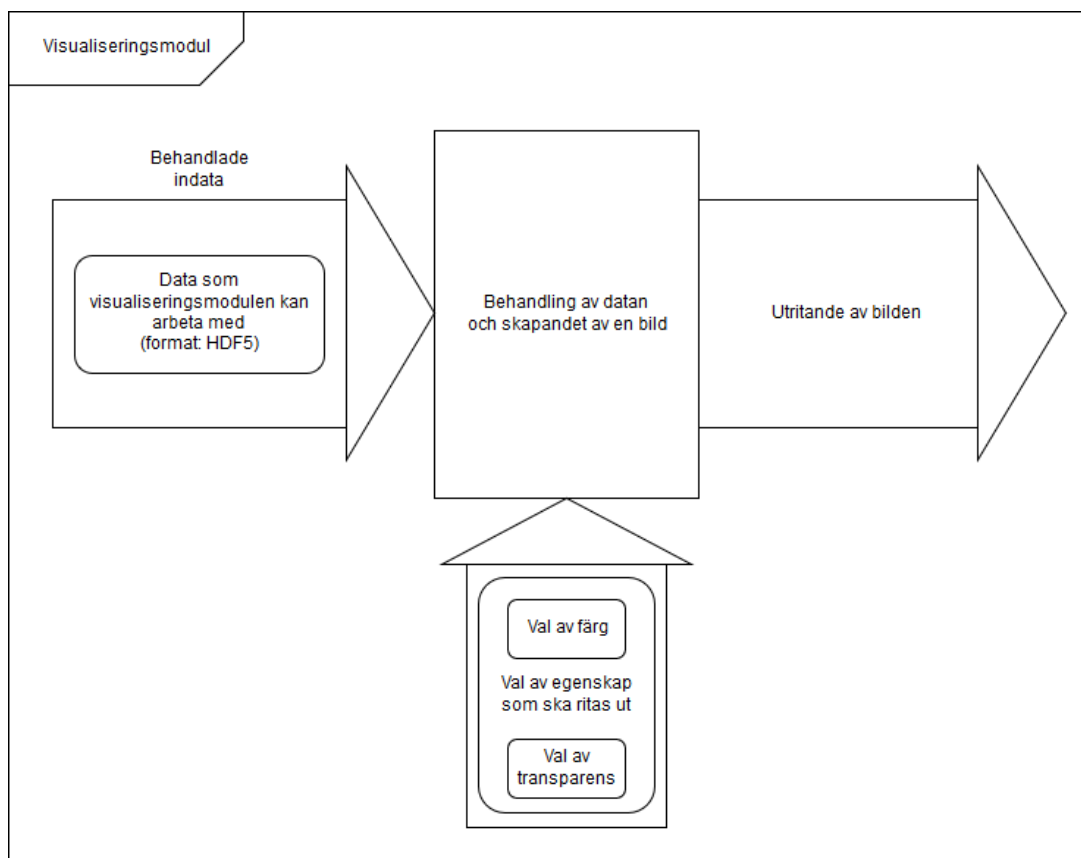
Delsystemet läser in utdata från XDATCAR. Även data för enhetscell och atomposition fås från XDATCAR. Den data som fås är alltså en lista med data om enhetscell och atomposition för varje beräkningssteg där någon atomposition har ändrats.

3.3 Elk

Om tid finns så kommer även utdata för elektrontäthet från Elk, ett annat beräkningsprogram än VASP, behandlas. Från Elk ska elektrontäthet visualiseras. För detta måste utdatafilerna GEOMETRY.OUT och RHO3D.OUT läsas. I GEOMETRY.OUT finns bland annat data för atompositioner för att kunna bygga upp geometrin. Från filen RHO3D.OUT fås elektrontäthetsdatan.

4 Visualisering

Figur 9 visar hur delsystemet Visualisering är uppbyggt. Behandlad samt användarindata skickas in. Användarindata består av val av färg, val av egenskap som ska ritas ut, val av transparens etc. Dessa behandlas sedan i visualiseringsmodulen som skapar en bild utifrån dem. Den utritade bilden skickas sedan ut från modulen. Detta är en allmän beskrivning av visualiseringen, för de olika egenskaperna som ska visualiseras kommer mittenrektangeln i Figur 9 att vara uppbyggd på olika sätt med olika processorer. Detta går mer in på i avsnitt 4.5-4.8.



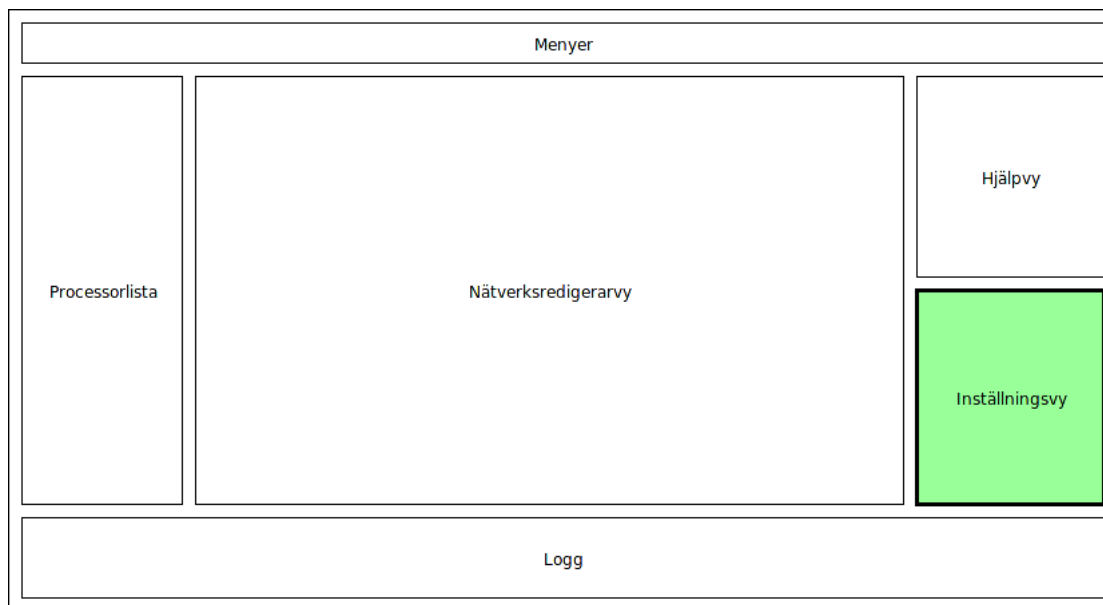
Figur 9: Grov design av delsystemet Visualisering

4.1 Utritning

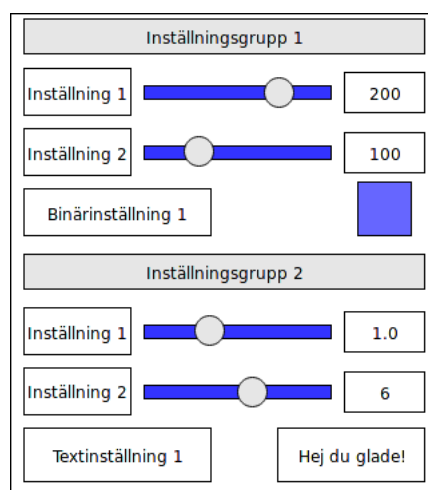
Delsystemet ska rita ut bilder utefter den behandlade datan. Utritningen skall ge en visualisering av den egenskap som modulen behandlar och kan till exempel vara en volymrendering eller en vanlig 2D-graf, beroende på vilket som är mest lättolkat.

Utritningen görs via Inviwos inbyggda funktionalitet för att rendera via OpenGL. Grafisk behandling görs också med Inviwo och OpenGL, där möjligheten finns att både använda färdig funktionalitet och att utveckla nya renderingsfunktioner.

4.2 Användarindata



Figur 10: Skiss som visar det tänkta användargränssnittet.



Figur 11: Skiss som visar den tänkta inställningsrutan i Inviwo.

Användaren kommer kunna ändra inställningar som kontrollerar utseendet på visualiseringarna. Denna indata matas in i Inviwos användargränssnitt, se Figur 10, och i inställningsrutan för en processor, se Figur 11.

Visualiseringsfunktionaliteten kommer att läggas till i form av processorer som via Inviwo tillhandahåller inställningsmöjligheter på det sätt som beskrivits ovan. Således blir inte användarinställningar ett eget separat delsystem, utan kommer att bakas in i visualiseringssystemen. Detta görs genom att processorerna skrivs att exponera de inställningar som användaren är menad att justera. Inviwo kommer då automatiskt lägga till inställningarna i rutan skisserad i Figur 11.

4.3 Interaktivitet

Användaren ska kunna modifiera visualiseringen genom att reglera ett intervall av värden för någon egenskap, där full transparens fås för alla värden inom intervallet, rotera 3D-bilder etc.

Ny användarindata, som skickas in efter att den första bilden har ritats upp, skickas tillbaka till visualiseringsmodulen för att utföra en ny rendering.

4.4 HDF5-indata

I Inviwo 0.9.9 finns en modul som tillåter importering av data från HDF5-fil [9]. Denna kommer användas för att ladda in data som sedan ska visualiseras. Se avsnitt 3.1 för beskrivning av uppbyggnaden av HDF5-filen.

4.5 Kristallstruktur

Kristallstruktur ska visualiseras som atompositioner i enhetscellen. Sfärer som representerar atomer ska ritas ut genom volymsrendering. Nedan följer en översiktlig beskrivning av hur detta ska byggas upp.

4.5.1 Översiktlig beskrivning

Koordinaterna (tre dimensioner) för atomerna läses in från HDF5-fil. Utifrån dessa positioner ritas sedan atomerna ut. Färginställningar för atomerna kan ändras av användaren.



Figur 12: Översiktligt flödesdiagram över dynamisk visualisering av kristallstruktur.

I Figur 12 beskrivs detta med ett flödesschema. Inviwo-nätverket näst sist i flödesschemat skickar ut en 3D-bild av kristallstrukturen där atomerna har placerats ut på sina positioner som hämtats från HDF5-filen.

4.5.2 Inviwo-nätverk för visualisering av kristallstruktur

En 3D-bild ska ritas ut vilket kommer kräva ett antal steg. Varje steg kommer att implementeras i Inviwo med en eller flera processorer.

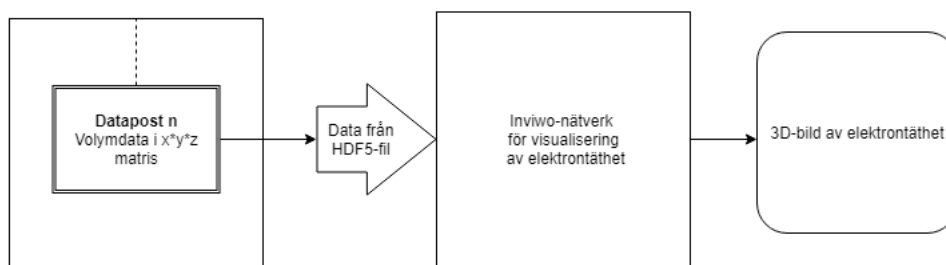
- HDF5-inläsning
 - Ladda in data från HDF5-fil.
- Koordinatläsning
 - Läs in koordinaterna för atomerna från HDF5-fil.
- Mesh-konstruering
 - Bygga upp ett mesh utifrån koordinaterna från koordinatläsar-processorn.
- Canvas
 - Visa 3D-bilden.

4.6 Elektrontäthet

Elektrontäthet visualiseras genom volymsrendering. Nedan följer en översiktlig beskrivning av hur detta ska byggas upp.

4.6.1 Översiktlig beskrivning

Datan som ritas ut är sannolikheten för att hitta elektroner på olika positioner. Sannolikheterna visualiseras med färger och skiftande transparens.



Figur 13: Översiktligt flödesdiagram över visualisering av elektrontäthet.

4.6.2 Inviwo-nätverk för visualisering av elektrontäthet

En 3D-bild ska ritas upp vilket kräver ett antal steg som implementeras med processorer i Inviwo.

- HDF5-inläsning
 - Ladda in data från HDF5-fil.
- Konvertering till volym

- Konvertera datan till en volym.
- Canvas
 - Visa 3D-bilden.

4.7 Tillståndstäthet

Tillståndstätheten, total och partiell, ska visualiseras med en 2D-graf. Nedan följer en översiktlig beskrivning av hur detta ska byggas upp.

4.7.1 Översiktlig beskrivning

Data hämtas från dataseten i gruppen tillståndstäthet i HDF5-filen. För partiell-tillståndstäthet hämtas energi, tillståndstäthet och så vidare för varje atom. Detta ska sedan plottas i en 2D-graf med tillståndstätheten på y-axeln och energin på x-axeln. Energin ska ha sitt nollställe vid Fermi-energin.



Figur 14: Översiktligt flödesdiagram över visualisering av tillståndstäthet.

I figur 14 beskrivs förloppet översiktligt. För partiell-tillståndstäthet hämtas alltså datan i första rektangeln i figuren för varje atom. För total-tillståndstäthet är detta dataseten för gruppen Total. Ett Inviwo nätverk för visualisering av tillståndstäthet måste skapas, detta nätverk illustreras i figur 14 av en stor kvadrat som skickar ut en 2D-graf på en canvas.

4.7.2 Inviwo-nätverk för visualisering av tillståndstäthet

En 2D-graf ska ritas upp vilket kräver ett antal steg. Dessa implementeras i Inviwo på en eller flera processorer.

- HDF5-inläsning
 - Ladda in data från HDF5-fil.
- Plottning
 - Plotta en graf av den laddade datan.

- Canvas
 - Visa den plottade grafen.

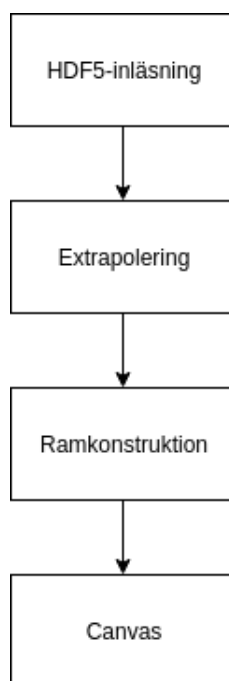
4.8 Fermi-ytor

Fermi-ytor och godtyckliga energi-isoytor ska kunna ritas upp i reciproka rummen, k -rummet. Detta görs genom att den 1:a Brillouin-zonen ritas upp och inuti denna ritas ytan.

4.8.1 Inviwo-nätverk för Brillouin-zonuppritning

Fermi-ytor ritas upp inuti 1:a Brillouin-zonen, som är den samling k -punkter i reciproka rummen vars närmsta gitterpunkt är origo. Den irreducibla 1:a Brillouin-zonen är den minsta samling vektorer som behövs för att extrapolera den fullständiga zonen, som kan byggas upp från kristallens symmetrigrupp. Brillouin-zonuppritningsnätverkets uppgift är att ta den irreducibla 1:a Brillouin-zonens basvektorer i kartesiska koordinater samt dess symmetriegenskaper, beräkna alla k -punkter som ingår i den 1:a Brillouin-zonen och rita upp en ram för denna. Basvektorerna parsas från OUTCAR-filen av en VASP-beräkning rörande Fermi-ytor, och återfinns på HDF5-format.

Inviwo-nätverket för att rita upp den 1:a Brillouin-zonen består av ett antal steg som beskrivs nedan. Se figur 15 för en skiss av hur dessa förhåller sig till varandra. Varje steg implementeras i Inviwo i form av en eller flera processorer.



Figur 15: Översiktlig beskrivning av de nödvändiga stegen för Brillouin-zonuppritning

- HDF5-inläsning
 - Hämtar data om basvektorerna för den irreducibla 1:a Brillouin-zonen
- Extrapolering
 - Använder basvektorerna och symmetrigruppen från HDF5-inläsningen för att extrapolera vilka punkter som ingår i den 1:a Brillouin-zonen

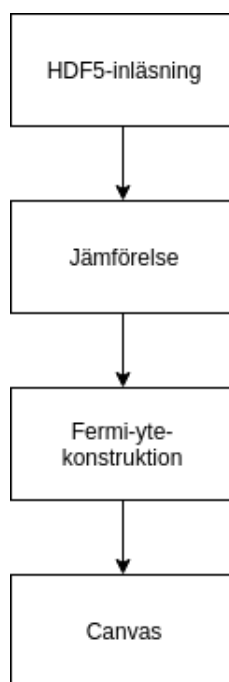
- Ramkonstruktion
 - Beräknar vilka k-punkter som utgör “ramen” för 1:a Brillouin-zonen
- Canvas
 - Ritar upp ramen

4.8.2 Inviwo-nätverk för Fermi-yte-uppritning

En sorts utdata från VASP-beräkningar är möjliga energier för alla k-punkter i reciproka rummet. Fermi-yte-uppritningsnätverkets uppgift är att ta dessa punkter med tillhörande energier och beräkna samt rita upp isoytan där energin är lika med Fermi-energin inuti ramarna för 1:a Brillouin-zonen. Energierna för alla k-punkter parsas från EIGENVAL-filen. Fermi-energin parsas från OUTCAR-filen. Dessa data återfinns på HDF5-form.

Denna visualisering ska även kunna göras för en godtycklig energi, inte bara för Fermi-energin. Denna energi väljs med hjälp av en slider eller genom att manuellt skriva in önskad energi.

Inviwo-nätverket för att rita upp Fermi-energin består av ett antal steg som beskrivs nedan. Se figur 16 för en skiss av hur dessa förhåller sig till varandra. Varje steg implementeras i Inviwo i form av en eller flera processorer.



Figur 16: Översiktlig beskrivning av Inviwo-nätverket för Fermi-yte-uppritning

- HDF5-inläsning
 - Hämtar data om Fermi-energin samt de möjliga energierna hos alla k-punkter inuti 1:a Brillouin-zonen
- Jämförelse

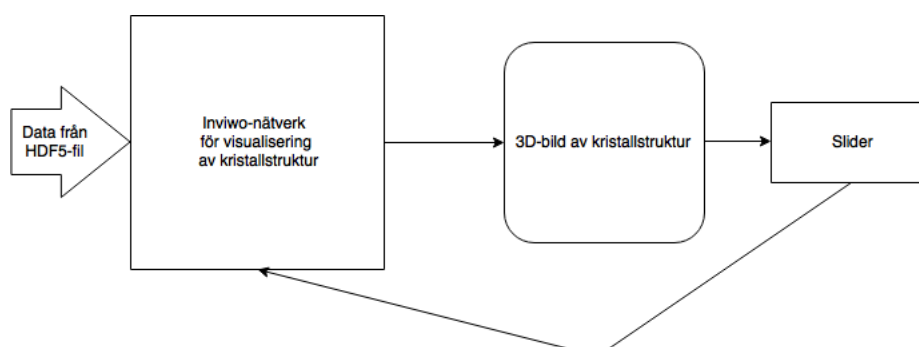
- Jämför de möjliga energierna för varje k-punkt med Fermi-energin för att se vilka k-punkter som ingår i Fermi-ytan
- Fermi-yte-konstruktion
 - Beräknar vilka k-punkter som utgör Fermi-ytan
- Canvas
 - Ritar upp Fermi-ytan

4.9 Dynamisk visualisering av kristallstruktur

Dynamisk visualisering baserad på en serie atompositioner. Användaren ska med hjälp av en slider kunna ändra visualiseringen.

4.9.1 Översiktlig beskrivning

Koordinaterna (tre dimensioner) för atomerna läses in från HDF5-fil. Utifrån dessa positioner ritas sedan atomerna ut. Användaren kan sedan med hjälp av en slider ändra tiden och se hur visualiseringen ändrar sig därefter. Se figur 17 för ett enklare flödesschema.



Figur 17: Översiktligt flödesdiagram över dynamik.

4.9.2 Inviwo-nätverk för dynamisk visualisering av kristallstruktur

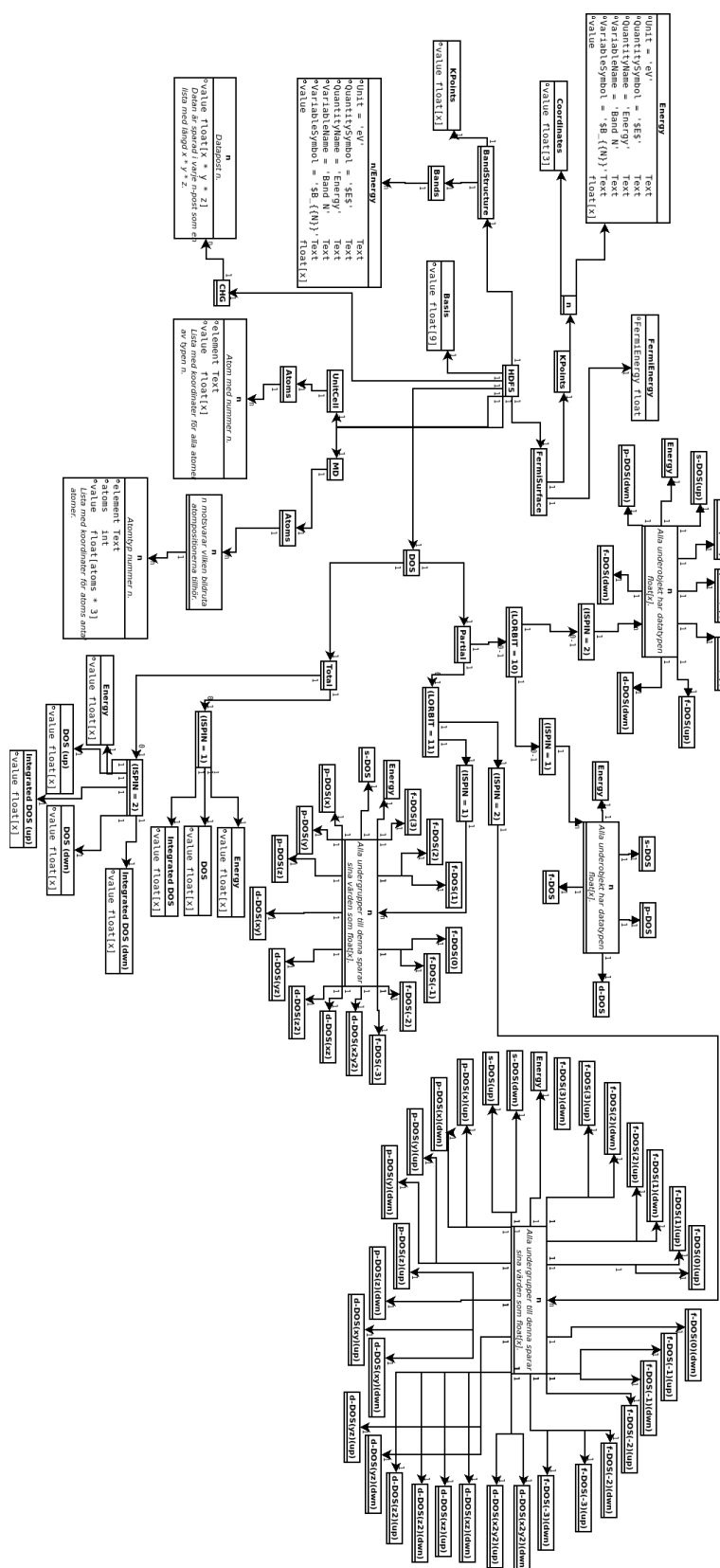
En 3D-bild ska ritas ut med hjälp av ett antal steg. Det är denna 3D-bild som sedan kommer att uppdateras om användaren väljer att justera slidern för tid. Varje steg kommer att implementeras i Inviwo med en eller flera processorer.

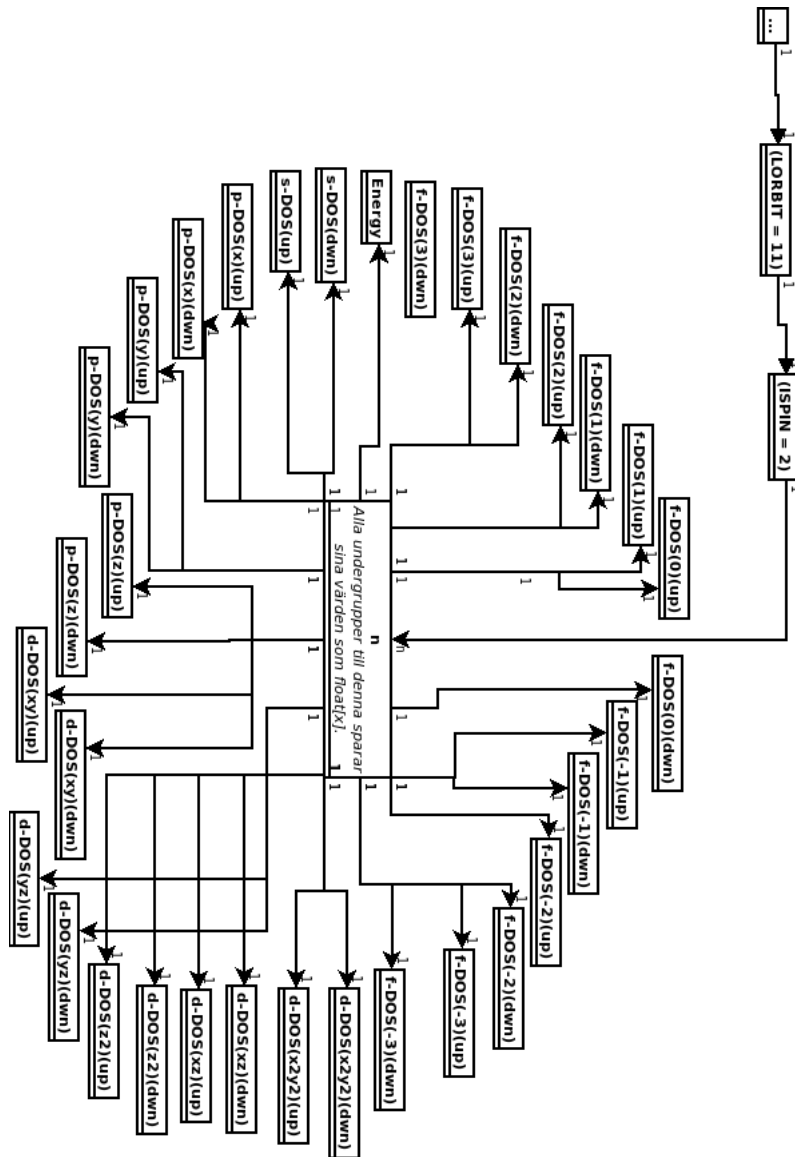
- HDF5-inläsning
 - Ladda in data från HDF5-fil.
- Koordinatläsning
 - Läs in koordinaterna för atomerna från HDF5-fil.
- Mesh-konstruering

- Bygga upp ett mesh utifrån koordinaterna från koordinatläsar-processorn.
- Canvas
 - Visa 3D-bilden.
- Slider
 - Ändra tiden.
- Koordinatläsning...

Referenser

- [1] *About VASP*. URL: <https://www.vasp.at/index.php/about-vasp/59-about-vasp> (hämtad 2018-02-22).
- [2] Neil Ashcroft och David Mermin. *Solid State Physics*. 1976, s. 141.
- [3] *BSD2*. URL: <https://opensource.org/licenses/BSD-2-Clause> (hämtad 2018-02-23).
- [4] *C++*. URL: <http://www.cplusplus.com/info/description/> (hämtad 2018-02-23).
- [5] *ELK*. 31 mars 2017. URL: <http://elk.sourceforge.net/elk.pdf> (hämtad 2018-02-22).
- [6] *Git*. URL: <https://git-scm.com> (hämtad 2018-02-23).
- [7] The HDF Group. *Hierarchical Data Format, version 5*. 1997-2018. URL: <https://support.hdfgroup.org/HDF5/> (hämtad 2018-02-21).
- [8] The HDF Group. *High Level Introduction to HDF5*. 23 sept. 2016. URL: <https://support.hdfgroup.org/HDF5/Tutor/HDF5Intro.pdf> (hämtad 2018-02-21).
- [9] *Inviwo Release. HDF5 module*. URL: <https://www.inviwo.org/2017/10/04/inviwo-0-9-9-released/> (data) (hämtad 2018-02-27).
- [10] *Nationalencyklopedin. API*. URL: <https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/api-> (data) (hämtad 2018-02-23).
- [11] *Nationalencyklopedin. Fermi-yta*. URL: <https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/fermi-yta> (hämtad 2018-02-23).
- [12] *Nationalencyklopedin. GUI*. URL: <https://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/api-> (data) (hämtad 2018-02-23).
- [13] *Nationalencyklopedin. reciproka rymden*. URL: <http://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/l%C3%A5ng/reciproka-rymden> (hämtad 2018-02-27).
- [14] *Overview - Inviwo*. URL: <http://www.inviwo.org/overview/> (hämtad 2018-02-23).
- [15] *Python*. URL: <https://www.python.org> (hämtad 2018-02-23).
- [16] *VASP. Wigner-Seitz-radie*. URL: <https://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/RWIGS.html> (hämtad 2018-03-08).





Figur 20: Dataformatet som används när VASP konverteras till HDF5 del 2.

C Fördjupningsarbete - Fermi-yltor

D Fördjupningsarbete - Visualisering av volymdata

E Gruppkontrakt

Gruppkontrakt - Visualisering av elektronstrukturer

Om gruppen har beslutat att träffas skall alla deltagare vara på plats på förutbestämd tid. Vid sjukdom eller dylikt skall gruppmedlemmen meddela övriga om detta.

Tider som enbart är specificerade med timme medför att akademisk kvart tillämpas.

Varje möte skall inledas med en genomgång av vad varje person har gjort. Detta så att alla har koll på hur resten av gruppen ligger till.

I slutet av varje gruppmöte skall en genomgång av vad som skall göras inför nästa möte hållas.

Protokoll från mötet skall skickas ut av mötessekreteraren för att komma de andra i gruppen till handa.

Gruppen skall ses en gång i veckan under en lunch, om inte annat beslutas, för att stämma av hur arbetet fortskrider.

Arbetsbördan under projektets gång skall delas rättvist av gruppmedlemmarna.

Har någon medlem problem med gruppen bör detta tas upp på ett av de schemalagda gruppmötena, eller vid annat lämpligt tillfälle.

Gruppen strävar efter att göra ett så bra arbete som möjligt inom de 1 000 timmar som budgeterats åt projektet.

F Kravspecifikation**Kravspecifikation**

Redaktör: Andreas Kempe

Version 1.0

Status

Granskad	Anders Rehult	2018-01-30
Godkänd	Rickard Armiento	2018-01-30

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2
Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz		073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Kontaktperson hos kund: Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se

Kursansvarig: Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se

Handledare: Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	iv
1 Inledning	1
1.1 Parter	1
1.2 Syfte och Mål	1
1.3 Användning	1
1.4 Bakgrundsinformation	1
1.5 Definitioner	2
2 Utförande	3
3 Översikt av systemet	4
3.1 Grov beskrivning av produkten	4
3.2 Produktkomponenter	4
3.3 Beroenden till andra system	4
3.4 Ingående delsystem	4
3.5 Avgränsningar	4
3.6 Designfilosofi	5
3.7 Generella krav på hela systemet	6
4 Delsystem - Datakonvertering	8
5 Delsystem - Datahantering	9
6 Delsystem - Visualisering	10
7 Krav på vidareutveckling	11
8 Ekonomi	12
9 Leveranskrav och delleranser	13
10 Dokumentation	14
11 Utbildning	15
Referenser	15

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-01-24	Första utkast.	Projektgruppen	Marian Brännvall
0.2	2018-01-26	Andra utkast.	Projektgruppen	Anders Rehult
0.3	2018-01-29	Tredje utkast.	PL och DOK	Anders Rehult
1.0	2018-01-30	Slutgiltig version.	PL	Anders Rehult

1 Inledning

I detta dokument beskrivs alla krav med en tabellrad enligt nedan. Kravnummer är löpande genom hela dokumentet. Kolumn 2 anger om kravet är ett originalkrav eller om kravet har reviderats. Vid revidering finns en hänvisning till beslut. I kolumn 3 finns själva lydelsen av kravtexten. I kolumn 4 finns dess prioritet beskriven.

Prioritet *Ska* betyder att kravet är ett av baskraven som projektet måste uppfylla. Prioritet *Bör* betyder att kravet inte är avgörande för projektets fullbordande, men att kravet bör uppfyllas. Prioritet *Kanske* är den lägsta prioriteten, och betyder att kravet inte är avgörande för projektets fullbordande och inte kommer arbetas med förrän alla *Bör*- och *Ska*-krav är uppfyllda.

Krav nr x	Förändring	Kravtext för krav nr x	Prioritet
-----------	------------	------------------------	-----------

1.1 Parter

Rickard Armiento är beställare av detta projekt med Johan Jönsson som handledare och Anders Rehult som projektledare. Övriga gruppmedlemmar är Viktor Bernholtz, Andreas Kempe och Marian Brännvall.

1.2 Syfte och Mål

Målet med projektet är att utveckla ett system för visualisering av resultatet av elektronstrukturberäkningar. Detta ska göras i visualiseringsverktyget Inwiwo och systemets funktionalitet ska demonstreras genom att använda det för att illustrera resultat från befintliga beräkningar. I och med att den framtagna mjukvaran ämnas användas i forskningssammanhang måste projektet hålla en hög vetenskaplig och teknisk kvalitet.

Utöver det konkreta målet med framtagandet av mjukvara för visualisering ska även projektet ge projektmedlemmarna erfarenhet av att arbeta i projekt och utöka deras förmåga till analytiskt och fysikaliskt tänkande för att ge värdefull erfarenhet inför arbetslivet.

1.3 Användning

Inom teoretisk fysik är elektronstrukturberäkningar ett viktigt verktyg för att förstå hur materials och molekylers egenskaper utifrån kvantmekaniska principer. Denna produkt kommer användas vid Linköpings universitet för att analysera data från sådana beräkningar.

1.4 Bakgrundsinformation

Detta projekt genomförs som en del i kursen TFYA75 vid Linköpings universitet. Visualisering av data från beräkningar kan i vissa fall förenkla, och ofta vara nödvändigt, för att kunna analysera datan och förstå materials och molekylers egenskaper.

Inwiwo gör det möjligt att styra visualisering programmatiskt och att konstruera användargränssnitt för interaktiv visualisering.

1.5 Definitioner

Python är ett programmeringsspråk som används i Inviwo för att knyta samman processorer.

C++ är ett programmeringsspråk som är baserat på programspråket C. I Inviwo används det för att skriva programkod till processorer.

Inviwo (Interactive Visualization Workshop) är programvara för visualisering som tillhandahåller en nätverksredigerare för designen av dataflödesnätverk. Noderna i dessa dataflödesnätverk kallas processorer. Indata till nätverket behandlas i dessa processorer och utdata genereras.

BSD 2 är en licens för öppen källkod.

Git är ett versionshanteringsprogram.

Lisam är en lärplattform som används i projektet för att dela och samla information.

HDF5 är ett binärt filformat.

GUI (Graphical Use Interface) är ett grafiskt användargränssnitt.

LIPs är en modell med regler, instruktioner och mallar för att bedriva projekt. Detta projekt utformas utifrån LIPsmodellen.

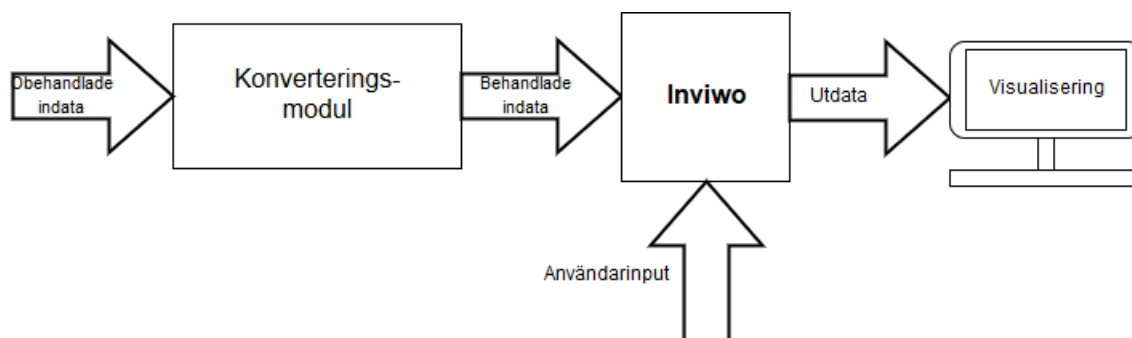
API (Application Programming Interface) är en specifikation av hur olika applikationer kan använda och kommunicera med en specifik programvara. Detta utgörs oftast av ett dynamiskt länkat bibliotek.

2 Utförande

Här listas krav för utförandet av projektet.

Krav nr 1	Original	Projektet ska drivas enligt LIPS-modellen.	Ska
Krav nr 2	Original	Vid begäran ska projektgruppen skicka en statusrapport till beställaren.	Ska

3 Översikt av systemet



Figur 1: Grov skiss av systemet

Systemet tar in data från elektronstrukturberäkningar och visualiserar egenskaper valda av användaren. Detta illustreras i figur 1.

3.1 Grov beskrivning av produkten

Produkten är ett verktyg för att visualisera viktiga egenskaper från elektronstrukturberäkningar.

3.2 Produktkomponenter

Produkten ska bestå av API:er för att programmatiskt utföra visualisering samt, eventuellt, ett grafiskt användargränssnitt. En demonstration av funktionalitet och en teknisk dokumentation ingår även i slutleveransen, se sektion 8.

3.3 Beroenden till andra system

Projektet använder sig av Inviwo för att behandla indata i form av resultat från elektronstrukturberäkningar och visualisera relevant data på ett interaktivt sätt.

3.4 Ingående delsystem

Systemet består av tre delsystem, ett som hanterar konvertering av data till format som resten av systemet kan arbeta med, ett som hanterar den konverterade datan och ett som hanterar visualiseringen av denna data. Datan som ska visualiseras kommer att kunna väljas av användaren.

3.5 Avgränsningar

Projektet innefattar att visualisera två egenskaper från listan i krav 5, varav den ena som väljs ska vara en som redan påbörjats av 2017 års projektgrupp och den andra ska göras från grunden.

3.6 Designfilosofi

Systemet kommer utvecklas som en påbyggnad av 2017 års projektgrupp. Kod som inte fungerar med den aktuella versionen av Inviwo kommer att uppdateras.

Projektet kommer att drivas med hjälp av versionshanteringssystemet Git och koden kommer vara licensierad med BSD 2, men även utvecklas under Inviwos utvecklaravtal för att, om önskvärt, kunna officiellt integreras i programvaran.

All design av systemet kommer att utgå från en designspecifikation som löpande kommer att uppdateras under projektets gång. I slutändan kommer detta att resultera i teknisk dokumentation som beskriver systemet.

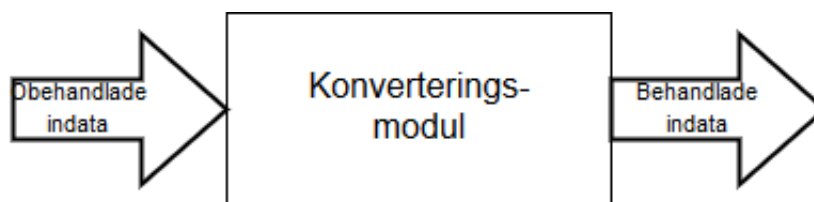
3.7 Generella krav på hela systemet

Här listas krav för det generella systemet.

Krav nr 3	Original	Källkoden i systemet ska vara BSD 2-clauselicensierad.	Ska
Krav nr 4	Original	Kod som integreras med Inviwo ska tillgängliggöras under Inviwos utvecklaravtal.	Ska
Krav nr 5	Original	Systemet ska implementera, alternativt utöka befintlig implementation, med visualisering av minst två av följande egenskaper: <ul style="list-style-type: none"> • Elastiska konstanter • Fermi-ytor • ELF (Electron Localization Function) • Krafter på atomer • Bandstruktur • Total DOS (Density Of States) • Parkorrelationsfunktionen • Illustration av partiell elektrondensitet 	Ska
Krav nr 6	Original	Projektgruppen ska undersöka och lära sig om samtliga egenskaper ur listan i kravet ovan.	Ska
Krav nr 7	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna anropas med enkla funktionsanrop.	Ska
Krav nr 8	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna hantera indata.	Ska
Krav nr 9	Original	En beskrivning av vilka indata en tillhandahållen python-modul kräver ska kunna erhållas.	Ska
Krav nr 10	Original	En beskrivning av vilka utdata en tillhandahållen python-modul producerar ska kunna erhållas.	Ska
Krav nr 11	Original	En beskrivning av vad en tillhandahållen python-modul gör ska kunna erhållas.	Ska
Krav nr 12	Original	Användaren ska kunna ändra indata till python-moduler.	Ska
Krav nr 13	Original	Användaren ska kunna välja vilken typ av visualisering som ska visas.	Ska

Krav nr 14	Original	Användaren ska kunna länka samman olika python-moduler.	Ska
Krav nr 15	Original	Systemet ska implementeras i Inviwo.	Ska
Krav nr 16	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna ta emot en eller flera typer av indata.	Ska
Krav nr 17	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna ge utdata.	Ska
Krav nr 18	Original	Tillhandahållna python-moduler ska inte fortskrida som vanligt vid indata av fel typ.	Ska
Krav nr 19	Original	Tillhandahållna python-moduler ska vid felaktiga indata varna användaren.	Ska
Krav nr 20	Original	Tillhandahållna python-modulers egenskaper bör kunna ändras.	Bör
Krav nr 21	Original	Systemet bör tillhandhålla ett grafiskt gränssnitt (GUI) för vanligt förekommande visualiseringsuppgifter.	Bör
Krav nr 22	Original	Uppstart av systemet bör vara enkelt för användaren.	Bör
Krav nr 23	Original	Installation av systemet bör vara enkelt för användaren.	Bör

4 Delsystem - Datakonvertering



Figur 2: Skiss av hur systemet hanterar indata

Här listas krav för hur systemet ska hantera indata och konvertera de till format som resten av systemet kan arbeta med. Datakonverteringsmodulen tar in obehandlade indata från något beräkningsprogram, behandlar dem så att resten av systemet kan hantera dem, och skickar sedan vidare dem. Processen illustreras i figur 2.

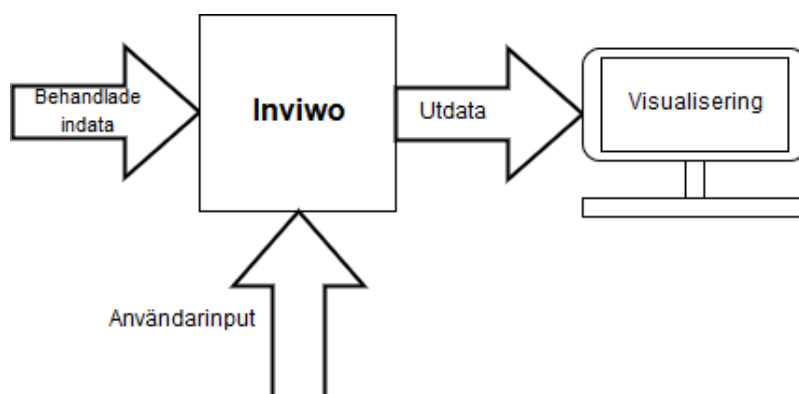
Krav nr 24	Original	Systemet ska kunna läsa in resultat från VASP.	Ska
Krav nr 25	Original	Systemet ska kunna konvertera data från kristallstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 26	Original	Systemet ska kunna konvertera data från elektronstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 27	Original	Systemet ska kunna konvertera data från tillståndstäthetsberäkningar.	Ska
Krav nr 28	Original	Systemet ska översätta input-filer i textformat till det binära filformatet HDF5.	Ska
Krav nr 29	Original	Systemet bör kunna läsa in resultat från något annat beräkningsprogram, t.ex. Elk.	Bör
Krav nr 30	Original	Systemet bör utnyttja befintlig kod för hantering av inläsning av datafiler.	Bör

5 Delsystem - Datahantering

Här listas krav för hur systemet ska kunna hantera data.

Krav nr 31	Original	Systemet ska kunna hantera data från kristallstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 32	Original	Systemet ska kunna hantera data från elektronstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 33	Original	Systemet ska kunna hantera data från tillståndstäthetsberäkningar.	Ska
Krav nr 34	Original	Systemet bör utnyttja befintlig kod för hantering av bland annat kristallstrukturer.	Bör
Krav nr 35	Original	Systemet bör effektivt kunna hantera stora filer.	Bör

6 Delsystem - Visualisering



Figur 3: Skiss av hur visualiseringen sker

Här listas krav för hur systemet ska visualisera data. Visualiseringsmodulen tar in indata behandlade av datakonverteringsmodulen, behandlar dem, och ritar sedan upp utdata på skärmen, se figur 3.

Krav nr 36	Original	Systemet ska visualisera projicerad tillståndstäthet härrörande till varje separat atom i en kristalls enhets-cell.	Ska
Krav nr 37	Original	Systemet ska visualisera kristallstruktur som atompositioner i enhetscellen.	Ska
Krav nr 38	Original	Systemet ska kunna visualisera den elektrontäthet som resulterar från en beräkning.	Ska
Krav nr 39	Original	Användaren ska, vid volymsrendering, kunna reglera en brytpunkt, i form av något specifikt värde av någon egenskap, för vilken full transparens inträder.	Ska
Krav nr 40	Original	Användaren ska, vid volymsrendering, kunna reglera ett intervall av värden av någon egenskap, där full transparens fås för alla värden inom intervallet.	Ska
Krav nr 41	Original	Användaren ska, vid volymsrendering, kunna ändra opaciteten/transparensnivån för valfria värden av någon egenskap.	Ska
Krav nr 42	Original	Systemet bör tillåta dynamisk visualisering baserad på en serie atompositioner från utdatafiler.	Bör
Krav nr 43	Original	Systemet bör tillåta att visualisering av egenskaper tillhörande atomer bara visas på vissa atomer, som kan väljas dynamiskt med musklick.	Bör

7 Krav på vidareutveckling

Här listas krav för hur systemet ska kunna vidareutvecklas.

Krav nr 44	Original	All kod ska vara välkommenterad alternativt självförklarande.	Ska
Krav nr 45	Original	Koden ska fungera för Inviwo 0.9.9 eller någon efterkommande version.	Ska
Krav nr 46	Original	Den tekniska dokumentationen ska vara tydlig så att det är möjligt att bygga vidare på systemet utifrån denna.	Ska

8 Ekonomi

Projektgruppen har total 1000 timmar för att slutföra projektet, dessa är fördelade jämnt över gruppens medlemmar.

Krav nr 47	Original	Efter godkänd projektplan (BP2) ska projektet maximalt ta 1000 arbetstimmar att slutföra.	Ska
Krav nr 48	Original	Projektgruppen ska utföra kontinuerlig tidsredovisning.	Ska
Krav nr 49	Original	Tidsredovisning ska skickas till beställaren inför varje beslutspunkt.	Ska

9 Leveranskrav och delleveranser

Tisdag 30/1 Kravspecifikationen ska vara klar och godkänd (BP1).

Tisdag 13/2 Första version av projektplan, tidplan och systemskiss ska vara inlämnad till beställaren.

Fredag 16/2 Slutgiltig version av projektplan, tidplan och systemskiss ska vara inlämnad till beställaren, efter detta hålls beslutsmöte BP2.

Fredag 2/3 Första version av designspecifikationen ska vara inlämnad till handledaren.

Senast 8/3 Designspecifikationen ska vara godkänd av handledaren vid beslutsmöte BP3.

Senast 11/4 Nuvarande design ska vara presenterad för och godkänd av handledaren vid ett beslutsmöte BP4.

Senast 14/5 Färdig kapp för slutrapport ska vara inskickad till TEMA.

Senast 23/5 Kraven ska vara verifierade (BP5).

Senast 28/5 Teknisk dokumentation, resultat av teknisk/naturvetenskaplig undersökning, användarhandledning och slutrapport för kandidatarbetet ska vara godkända.

Tisdag 5/6 Efterstudien ska vara inlämnad och inkluderad i slutrapporten. Gruppens källkod ska ha lagrats i ett system för källkodshantering och lämnats in i denna form.

Fredag 8/6 All utrustning och lånat material ska vara återlämnat.

En uppdaterad tidrapport ska lämnas till beställare inför varje beslutspunkt.

Här listas krav för leveranser och delleveranser.

Krav nr 50	Original	Vid slutleverans ska det finnas ett fungerande interaktivt visualiseringssystem.	Ska
Krav nr 51	Original	Vid slutleverans ska det finnas en teknisk/naturvetenskaplig rapport.	Ska
Krav nr 52	Original	Projektets delleveranser ska ske senast vid de datum som specificeras på kursens hemsida.	Ska

10 Dokumentation

Dokumentation av projektet ska utgå från LIPS-mallar. Syftet med dokumentationen är att ha en grund som utgår ifrån när arbetet sätter igång. Krav på systemet specificeras, designen specificeras och en projektplan, tidplan och systemskiss görs. Se tabell nedan för information om vilka dokument som ska skrivas.

Krav nr 53	Original	Projektgruppen ska ta fram en tidsplan.	Ska
Krav nr 54	Original	Dokumentationen ska sparas på kursens hemsida.	Ska
Krav nr 55	Original	Projektets slutleverans ska ske senast vid det datum som finns specificerat på kursens hemsida.	Ska
Krav nr 56	Original	Vid slutleverans ska det finnas en slutrapport.	Ska
Krav nr 57	Original	Vid slutleverans ska det finnas teknisk dokumentation med användaranvisning.	Ska
Krav nr 58	Original	Samtliga dokument som projektgruppen tar fram ska godkännas enligt listan med leveranser, se avsnitt 9.	Ska
Krav nr 59	Original	Designspecifikationen ska godkännas av handledaren.	Ska
Krav nr 60	Original	Projektgruppen ska ta fram en kravspecifikation.	Ska
Krav nr 61	Original	Projektgruppen ska ta fram en systemskiss.	Ska
Krav nr 62	Original	Projektgruppen ska ta fram en projektplan.	Ska
Krav nr 63	Original	Projektets dokument ska utgå ifrån LIPS-mallar.	Ska

11 Utbildning

Gruppens medlemmar kommer att utbildas i visualiseringsverktyget Inviwo och programmeringsspråket Python. Föreläsningar om relevanta fysikaliska fenomen kommer dessutom att hållas.

Referenser

- [1] *LIPS – nivå 1. Version 1.0.* Tomas Svensson och Christian Krysander. Kompendium, LiTH, 2002.

Projekt direktiv

Visualisering av elektronstruktur

Personer

- Beställare: Rickard Armiento
- Handledare: Johan Jönsson
- Expert: Peter Steneteg

Bakgrund

Elektronstrukturberäkningar är ett viktigt verktyg inom teoretisk fysik för att förstå hur materials och molekylers egenskaper kan härledas från kvantmekaniska effekter. För att förstå dessa egenskaper är det viktigt att kunna analysera data från sina beräkningar, något som i vissa fall förenklas genom visualisering och ofta helt och hållet kräver att man kan visualisera sin data. Inviwo är ett kraftfullt forskningsverktyg som utvecklas av Visualiseringscenter i Norrköping. Inviwo gör det möjligt att styra visualisering med programmering och att konstruera användargränssnitt för interaktiv visualisering.

Projektidé

Projektet går ut på att skapa ett verktyg för att visualisera viktiga egenskaper från elektronstrukturberäkningar. Verket ska bestå av APlar för att programmatiskt utföra visualisering samt eventuellt ett grafiskt användargränssnitt för dessa APlar.

Mjukvara ifrån tidigare projektomgång finns tillgänglig för projektgruppen och får användas för att underlätta uppfyllandet av kraven.

Syfte

Projektet syftar till att utveckla kreativiteten samt att ge färdigheter i fysikaliskt tänkande och analys av teoretiska resultat. Projektet bedrivs så realistiskt som möjligt för att vara en träning inför det kommande yrkeslivet. Resultatet av projektarbetet ska hålla hög vetenskaplig och teknisk kvalitet och

baseras på moderna kunskaper, dokumenteras i form av projekt-och tidsplan, krav-och designspecification samt i en teknisk/vetenskaplig rapport, presenteras muntligt, demonstreras och följas upp i en efterstudie.

Mål

Att i visualiseringsverktyget Inviwo utveckla ett system för visualisering av resultatet av elektronstrukturberäkningar. Att demonstrera systemets funktionalitet genom att använda det till att illustrera några befintliga beräkningsresultat.

Krav på systemet

- Systemet ska implementeras i Inviwo.
- Källkoden i systemet bör licensieras med BSD 2-clause "simplified" licence.
- Kod som integreras med Inviwo ska tillgängliggöras under Inviwos utvecklaravtal.
- Tillhandahållna python-moduler ska vara användarvänliga och möjliggöra visualisering med kommandon på hög nivå.
- Systemet bör effektivt kunna hantera stora filer.
- Systemet bör översätta input-filer i textformat till det binära filformatet HDF5.
- Systemet bör tillhandahålla ett grafiskt gränssnitt (GUI) för vanligt förekommande visualiseringsuppgifter.
- Installation och uppstart av systemet bör vara enkel för användaren.
- Systemet bör utnyttja befintlig kod för hantering av inläsning av datafiler och hantering av bl.a. kristallstrukturer.
- Ska kunna läsa in resultat skapade med beräkningsprogrammet VASP.
- Bör kunna läsa in resultat från något annat beräkningsprogram, t.ex. Elk.
- Systemet ska kunna läsa indata direkt ifrån utdatafiler ifrån beräkningsprogram och visualisera detta.
- Ska visualisera kristallstruktur som atompositioner i enhetscellen.
- Systemet ska kunna visualisera den elektrontäthet som resulterat ifrån en beräkning.
- Visualiseringen ska utnyttja Inviwos funktionalitet för volymsrendering för partiell transparens.
- Visualiseringen ska tillåta interaktion i form av rotering, skalning, etc.
- Användaren ska kunna reglera en brytpunkt för vilken full transparens inträder för att kunna tydliggöra strukturer bättre.
- Systemet bör tillåta dynamisk visualisering baserad på en serie av atompositioner i utdatafiler.
- Ska visualisera projicerad tillståndstäthet härrörande till varje separat atom i en kristalls enhets-cell.

- Tillåta att visualisering tillhörande atomer bara visas på vissa atomer, som kan väljas dynamiskt med t.ex. musklick.
- Ska implementera (alternativt utöka befintlig implementation med) visualisering av minst två av följande egenskaper:
 - Elastiska konstanter.
 - Fermi-ypor.
 - ELF.
 - Krafter på atomer.
 - Bandstruktur.
 - Total DOS.
 - Parkorrelationsfunktionen.
 - Illustration av partiell elektrondensitet.

Slutgodkännande

För systemets godkännande krävs en interaktiv demonstration av systemets färdigheter som utförs i samband med leverans.

Leveranser

Se kursens Lisamsida.

Övriga krav

Projektet ska bedrivas enligt LIPS-modellen och samtliga dokument ska utgå från LIPS-mallar.

I förefasen ingår att projektgruppen ska ta fram en kravspecifikation, en systemskiss och en projektplan med tidplan. Samtliga dessa dokument ska godkännas av beställaren. Efter godkänd projektplan (BP2) får projektet ta maximalt 1500 arbetstimmar att slutföra.

Projektgruppen ska utföra kontinuerlig tidsredovisning som skickas till beställaren en gång per vecka. Vid begäran ska gruppen även skicka in en statusrapport. Vid slutleveransen ska det finnas ett fungerande interaktivt visualiseringssystem, teknisk dokumentation med användaranvisning, en teknisk/naturvetenskaplig rapport samt slutrapport. Projektets delleranser

och slutleverans ska senast ske vid de datum som finns specificerade på kursens Lisamsida.

Även

formen för slutleveransen beskrivs på denna sida. Dokumentationen sparas på kursens Lisamsida.

H Projektplan

Projektplan

Redaktör: Anders Rehult

Version 1.0

Status

Granskad	VB	18-02-20
Godkänd		

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2

Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz	Viktor Bernholtz (VB)	073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping**Kontaktperson hos kund:** Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se**Kursansvarig:** Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se**Handledare:** Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	v
1 Parter	1
2 Översiktlig beskrivning av projektet	1
2.1 Syfte och Mål	1
2.2 Leveranser	1
2.3 Begränsningar	2
3 Fasplan	2
3.1 Före-fasen	2
3.2 Under-fasen	3
3.3 Efter-fasen	3
4 Organisationsplan för hela projektet	3
4.1 Organisationsplan	3
4.2 Villkor för samarbetet inom projektgruppen	4
4.3 Definition av arbetsinnehåll och ansvar	4
5 Dokumentplan	4
6 Utvecklingsmetodik	5
7 Utbildningsplan	6
7.1 Egen utbildning	6
7.2 Kundens utbildning	6
8 Rapporteringsplan	6
9 Mötesplan	7
10 Resursplan	7
10.1 Personer	7
10.2 Material	7
10.3 Lokaler	7
10.4 Ekonomi	7

11 Milstolpar och beslutspunkter	7
11.1 Milstolpar	8
11.2 Beslutspunkter	8
12 Aktiviteter	9
12.1 Dokumentation	9
12.2 Möte	10
12.3 Utbildning	10
12.4 Presentation	11
12.5 Delsystem datakonvertering	11
12.6 Delsystem visualisering	13
12.7 Tester	15
12.8 Övrigt	16
13 Tidsplan	16
14 Förändringsplan	16
15 Kvalitetsplan	16
15.1 Granskningar	16
15.2 Testplan	17
16 Riskanalys	17
17 Prioriteringar	17
18 Projektavslut	17
Bilaga A Gruppkontrakt	18
Bilaga B Kravspecifikation	19
Bilaga C Projektdirektiv	38
Bilaga D Systemskiss	41
Bilaga E Tidsplan	51

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-02-13	Första utkast.	Projektgruppen	VB
0.2	2018-02-14	Andra utkast.	Projektgruppen	AK
0.3	2018-02-16	Tredje utkast.	Projektgruppen	AK
0.4	2018-02-20	Fjärde utkast.	Projektgruppen	VB
1.0	2018-02-20	Godkänd version.	Projektgruppen	VB

1 Parter

I Tabell 1 listas de olika parter som är inblandade i projektet. En schematisk bild över de ingående parternas relationer i projektet hittas i avsnitt 4.1.

Roll	Namn	E-post
Beställare	Rickard Armiento	rickard.armiento@liu.se
Expert	Rickard Englund	rickard.englund@liu.se
Handledare	Johan Jönsson	johan.jonsson@liu.se
Projektledare	Anders Rehult	andre449@student.liu.se

Tabell 1: Parter i organisationen.

2 Översiktlig beskrivning av projektet

I detta avsnitt beskrivs syfte och mål med projektet, leveranser i projektet samt projektets begränsningar.

2.1 Syfte och Mål

Målet med projektet är att utveckla ett system för visualisering av resultat av elektronstrukturberäkningar. Detta ska göras i visualiseringsverktyget Inviwo och systemets funktionalitet ska demonstreras genom att använda det för att illustrera resultat från befintliga beräkningar. I och med att den framtagna mjukvaran ämnas användas i forskningssammanhang måste projektet hålla en hög vetenskaplig och teknisk kvalitet.

Utöver det konkreta målet med framtagandet av mjukvara för visualisering ska även projektet ge projektmedlemmarna erfarenhet av att arbeta i projekt och utöka deras förmåga till analytiskt och fysikaliskt tänkande för att ge värdefull erfarenhet inför arbetslivet.

2.2 Leveranser

I projektet ingår ett antal leveranser, dessa listas nedan.

- **Tisdag 30/1** Kravspecifikationen ska vara klar och godkänd. Lämnas in till handledare och beställare.
- **Tisdag 13/2** Första version av projektplan, tidsplan och systemskiss ska vara inlämnad till beställaren.
- **Fredag 16/2** Slutgiltig version av projektplan, tidsplan och systemskiss ska vara inlämnad till beställaren.
- **Fredag 2/3** Första version av designspecifikation ska vara inlämnad till handledaren.
- **Senast 8/3** Designspecifikationen ska vara godkänd av handledaren.

- **Senast 11/4** Nuvarande design ska vara presenterad för och godkänd av handledaren.
- **Senast 14/5** Färdig kapp för slutrapport ska vara inskickat till TEMA.
- **Senast 23/5** Kraven ska vara verifierade av handledare och beställare.
- **Senast 28/5** Teknisk dokumentation, resultat av teknisk/naturvetenskaplig undersökning, användarhandledning och slutrapport för kandidatarbetet ska godkännas av handledare och beställare.
- **Tisdag 5/6** Efterstudien ska vara inlämnad och inkluderad i slutrapporten, lämnas till handledare och beställare. Gruppens källkod ska ha lagrats i ett system för källkodshantering och lämnats in i denna form till handledare och beställare.
- **Fredag 8/6** All utrustning och lånat material ska vara återlämnat.
- **Inför varje beslutspunkt** En uppdaterad tidsrapport lämnas till beställaren.
- **Preliminärt vecka 22** En slutleverans till beställaren.

2.3 Begränsningar

I projektet kommer visualiseringsverktyget Inviwo och programmeringsspråken Python och C++ användas. Det kommer inte utredas om det är bättre att använda andra verktyg.

3 Fasplan

Projektet drivs enligt LIPS-modellen, som är en modell med regler, instruktioner och mallar för att bedriva projekt. Projektet delas upp i tre faser - före, under, och efter. Se avsnitt 11 för information om beslutspunkter och avsnitt 13 för en detaljerad tidsplan.

3.1 Före-fasen

Före-fasen är ämnad att undersöka om projektet bör genomföras och, om så är fallet, definiera och konkretisera projektets mål samt organisera arbetet som krävs för att uppnå dessa. Under före-fasen skrivs bland annat ett *projektdirektiv* (Bilaga C), en *kravspecifikation* (Bilaga B), en *systemskiss* (Bilaga D) och en projektplan.

Projektdirektivet skrevs innan projektgruppen skapades och gavs till projektgruppen vid projektets start.

Projektgruppen har under före-fasen skrivit ett *gruppkontrakt* (Bilaga A), en kravspecifikation, en systemskiss samt denna projektplan.

3.2 Under-fasen

Under under-fasen utförs det arbete som leder till att projektets krav uppfylls. Projektgruppen skriver en *designspecifikation* som beskriver hur systemet ska konstrueras i mer detalj än systemskissen. Projektgruppen arbetar sedan med att, utgående från denna designspecifikation, konstruera och testa systemet. En *teknisk dokumentation* skrivs parallellt med systemets konstruktion för att reflektera den faktiska implementationen av idéerna beskrivna i designspecifikationen.

3.3 Efter-fasen

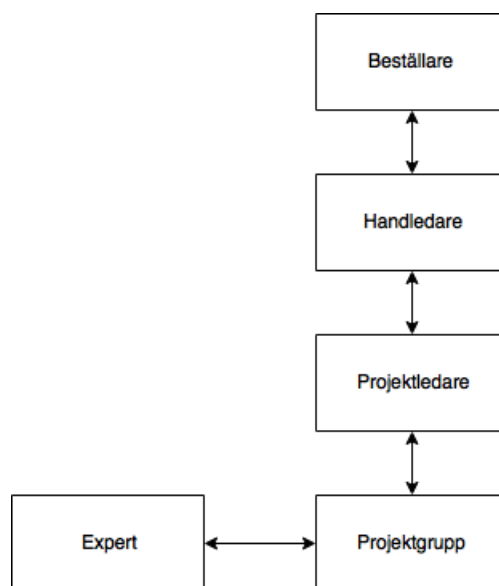
Under efter-fasen överförs projektresultatet till beställaren och projektet avslutas. Projektgruppen skriver en *slutrapport* som bifogas vid slutleveransen av produkten. Vid slutleveransen ska även en demonstration hållas som visar att produkten uppfyller kraven ställda på den. Efter produkten levererats skriver projektgruppen en *efterstudie*.

4 Organisationsplan för hela projektet

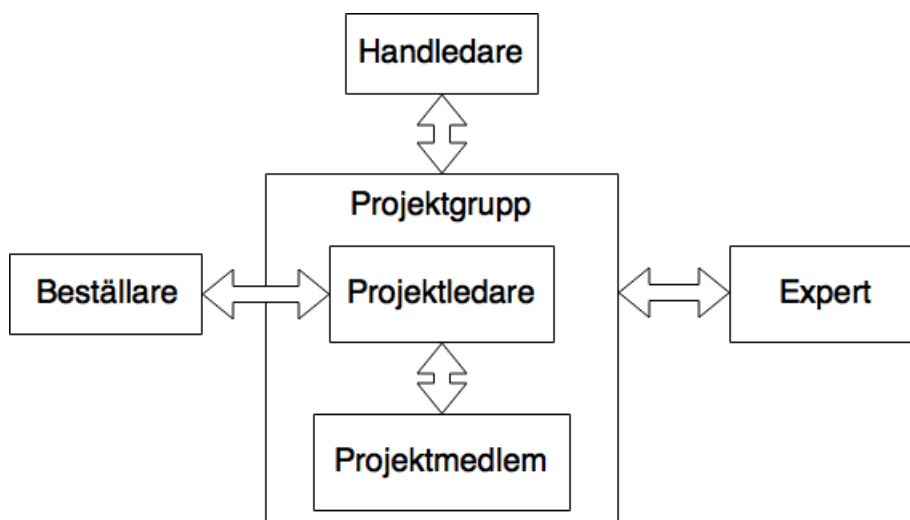
Detta avsnitt behandlar hur organisationen för projektet ser ut.

4.1 Organisationsplan

Figur 1 visar en schematisk bild över projektets hierarki. Figur 2 visar kontakten mellan de inblandade parterna. Beställaren har kontakt med projektledaren som i sin tur har kontakt med projektets medlemmarna. Både handledaren och experten har kontakt med projektgruppen.



Figur 1: Projektets organisation



Figur 2: Projektets organisation

4.2 Villkor för samarbetet inom projektgruppen

Projektgruppen har skrivit ett gruppkontrakt som hittas i Bilaga A.

4.3 Definition av arbetsinnehåll och ansvar

Anders Rehult är projektledare och har den huvudsakliga kontakten med beställaren. Marian Brännvall är dokumentansvarig och har ansvar för att färdigställda dokument finns i grupprummet på Lisam. Andreas Kempe är sekreterare och Viktor Bernholtz är gruppmedlem.

5 Dokumentplan

Detta avsnitt behandlar de dokument som ingår i projektet. Dokumenten lagras dels på Lisam och dels sparar dokumentansvarig dem på sin dator. Utskrivna dokument sparas som fysiska exemplar av dokumentansvarig.

Dokumenterna skrivs på svenska eller engelska.

Samtliga gruppmedlemmar har tillgång och möjlighet att redigera samtliga dokument med undantag för den sammanställda tidrapporten som endast projektledare redigerar.

Samtliga dokument ska ha en dokumenthistorik där versionsnummer, datum för förändring, utförd förändring, ansvarig för förändring samt granskare finns angiven. Versionsnummer är 0.x innan dokumentet är godkänt och godkänt dokument får versions nummer 1.0. Förändringar efter godkännande får alltså nummer 1.x.

Dokument	Ansvarig/godkänns av	Syfte	Distribueras till	Färdig datum
Gruppkontrakt	Projektgrupp	Sätta upp villkor för samarbetet i gruppen.	Projektgrupp	2018-01-25
Krav-specifiaktion	Projektgrupp/beställare och handledare	Specificera krav för projektet.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-01-30
Systemskiss	Projektgrupp/beställare och handledare	Beskriva de olika delsystemen som systemet består av.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-02-16
Projektplan	Projektgrupp/beställare och handledare	Beskriva hur projektet ska utföras, tidsåtgång och ansvarsområden.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-02-16
Tidsplan	Projektgrupp/beställare och handledare	Planera olika aktiviteter och tidsåtgång för dessa.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-02-16
Design-specifikation	Projektgrupp/handledare	Specificera designen för systemet utifrån systemskiss och kravspecifikation.	Projektgrupp och handledare	2018-03-08
Teknisk-dokumentation	Projektgrupp/beställare och handledare	Beskrivning av hur systemet/produkten är konstruerad.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-05-28
Slutrapport	Projektgrupp/beställare och handledare	Sammanställa arbetet i en rapport.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-05-28
Teknisk/vetenskaplig rapport	Projektgrupp/beställare och handledare	Två rapporter, en på Fermi-ytor och en på volymrendering.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-05-28
Användarhandledning	Projektgrupp/beställare och handledare	Beskriva hur systemet används.	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-05-28
Efterstudie	Projektgrupp/beställare och handledare	Samla erfarenheter från projektet	Projektgrupp, beställare och handledare	2018-06-05
Mötesprotokoll	Projektgrupp	Dokumentation från möten under projektets gång.	Projektgrupp	Löpande

6 Utvecklingsmetodik

Projektet kommer genomföras i steg enligt *tidsplanen* (Bilaga E). Enhetstester kommer, i största möjliga mån, löpande skapas för den kod projektgruppen skriver.

7 Utbildningsplan

Detta avsnitt behandlar de utbildningar personer i projektet kommer genomgå.

7.1 Egen utbildning

Projektgruppen erhåller utbildning från universitet i form av föreläsningar och laborationer. Nedan finns en lista över de utbildningsmoment som skall utföras:

- Introduktionsföreläsning med utdelning av projektdirektiv och information om LIPS-projektmodellen.
- Föreläsning om valt projekt.
- Tre stycken etikföreläsningar.
- Två etikseminarier.
- Föreläsning om LIPS-modellens kravspecifikation.
- Föreläsning om simuleringsmjukvaran Inviwo.
- Föreläsning om materialfysik.
- Inspirationsföreläsning om solceller.
- Föreläsning LIPS-modellens tidsplanering.
- Föreläsning om Python-programmering.
- Python-laboration.
- Laboration i beräkningsfysik.
- Föreläsning om beräkningsfysik.
- Föreläsning om LIPS-modellens designspecifikation.
- Seminarium om om rapportgranskning.
- Föreläsning om slutdokumentation enligt LIPS-modellen.

7.2 Kundens utbildning

Vid en demonstration kommer kunden få utbildning i den färdiga produkten. Dessutom ska en användarhandledning framställas.

8 Rapporteringsplan

All tidrapportering sker till projektledaren som i sin tur för in det i tidsplanen. Projektledaren rapporterar sedan till beställaren inför varje beslutspunkt. Statusrapportering sker kontinuerligt inom projektgruppen vid projektmöten. Statusrapport skickas till beställaren på begäran.

9 Mötesplan

Projektmöten bokas gemensamt av gruppen och hålls minst en gång i veckan. Sekreteraren väljs på plats och ser till att alla gruppmedlemmar tillhandahålls mötesprotokoll.

10 Resursplan

Detta avsnitt behandlar de resurser projektgruppen har att tillgå. Vilka personer som är inblandade, lokaler och utrustning samt hur ekonomin för projektet ser ut.

10.1 Personer

Rickard Armiento är beställare/expert i detta projekt med Johan Jönsson som handledare och Anders Rehult som projektledare. Övriga gruppmedlemmar är Viktor Bernholtz, Andreas Kempe och Marian Brännvall. Projektgruppen kommer i största möjliga mån arbeta under ordinarie kontorstid. Expert/beställare och/eller handledare kan nås via mail eller på deras kontor under ordinarie kontorstid.

10.2 Material

Projektet kräver tillgång till programvaran Inviwo. Två datorer med programvaran finns till projektgruppens förfogande.

10.3 Lokaler

Projektgruppen har dygnet runt tillgång till lokalen Saturnus, H 303 i Fysikhuset på Campus Valla vid Linköpings universitet. I lokalen finns två datorer som enbart får användas av projektgruppen.

10.4 Ekonomi

Projektgruppen har totalt 1 000 timmar för att slutföra projektet, dessa är fördelade jämnt över gruppens medlemmar.

11 Milstolpar och beslutspunkter

Detta kapitel specificerar projektets milstolpar och beslutspunkter. Milstolparna är delmål för projektet som ska vara mätbara.

11.1 Milstolpar

Milstolparna är numrerade, har en kort beskrivning samt datum då milstolpen ska vara nådd.

Nr	Beskrivning	Datum
1.	Designspecifikationen godkänd och klar.	2018-03-08
2.	Kunna konvertera kristallstrukturer i VASP-format till HDF5-format.	vecka 10
3.	Kunna konvertera elektrontäthet i VASP-format till HDF5-format.	vecka 16
4.	Kunna konvertera tillståndstäthet VASP-format till HDF5-format.	vecka 13
5.	Kunna konvertera Fermi-ylor i VASP-format till HDF5-format.	vecka 17
6.	Kunna konvertera data från Elk-beräkningar till HDF5-format	vecka 18
7.	Kunna visualisera en atom och justera färg- och transparensinställningar.	vecka 10
8.	Kunna visualisera kristallstrukturer.	vecka 13
9.	Kunna visualisera elektrontäthet.	vecka 17
10.	Kunna visualisera tillståndstäthet.	vecka 15
11.	Kunna justera färg- och transparensinställningar för kristallstrukturer.	vecka 16
12.	Kunna justera färg- och transparensinställningar för elektrontäthet.	vecka 16
13.	Kunna justera färginställningar för tillståndstäthet.	vecka 16
14.	Kunna visualisera Fermi-ylor.	vecka 20
15.	Kunna justera färg- och transparensinställningar för Fermi-ylor	vecka 20

11.2 Besluts punkter

Besluts punkterna är numrerade, har en kort beskrivning samt datum för beslutspunktsmöte.

Nr	Beskrivning	Datum
0.	Projektgruppen formad och projektuppgift vald.	2018-01-22
1.	Godkännande av kravspecifikation.	2018-01-30
2.	Godkännande av systemskiss, projektplan och tidsplan.	2018-02-16
3.	Godkännande av designspecifikation.	2018-03-08
4.	Presentation och godkännande av nuvarande design.	2018-04-11
5.	Verifiering av kraven.	2018-05-28

12 Aktiviteter

Detta avsnitt behandlar de aktiviteter som kommer genomföras under projektets gång. Aktiviteter utan angiven tidsåtgång har ägt rum innan BP2 och räknas därför inte med i de 1 000 timmar som projektet har att tillgå.

12.1 Dokumentation

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
1.	Designspecifikation	Designspecifikationen är ett dokument som beskriver den fullständiga designen av leveransen, produkten, programvaran och all teknisk dokumentation. Designspecifikationen är ett förtydligande av systemskissen och kravspecifikationen.	70	
2.	Slutrapport/kappa	Slutrapporten ska ge en komplett överblick över hela det genomförda arbetet och inkludera följande delar: <ul style="list-style-type: none"> • Problemformulering • Kunskapsbas • Genomförande • Resultat och slutsatser En färdig kappa för slutrapporten ska skickas till TEMA.	30	
3.	Teknisk dokumentation	Den tekniska dokumentationen ska innehålla en beskrivning av hur produkten är konstruerad.	60	
4.	Efterstudie	En efterstudie med projektmedlemmarnas samlade erfarenheter från projektet.	8	
5.	Renskrivning	Renskrivning av protokoll	8	
6.	Manual	En användarhandledning ska framställas.	12	

12.2 Möte

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
7.	Projektmöte	Projektgruppen har möte minst en gång i veckan.	32	
8.	BP3	Designspecifikationen ska vara godkänd av handledaren.	4	1
9.	BP4	Nuvarande design ska var presenterad och godkänd av handledaren.	4	
10.	BP5	Kraven ska vara verifierade.	8	

12.3 Utbildning

Kursens föreläsningar ingår inte i timmarna räknade till projektet.

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
11.	Föreläsning	Introduktionsföreläsning med utdelning av projektdirektiv och information om LIPS-projektmodellen.		
12.	Föreläsning	Föreläsningar om etik.		
13.	Föreläsning	Föreläsningar om etik.		
14.	Föreläsning	Föreläsningar om valt projekt.		
15.	Föreläsning	Föreläsningar om etik.		
16.	Föreläsning	Föreläsning om LIPS-modellen planering.		
17.	Föreläsning	Föreläsning om LIPS-modellens kravspecifikation.		
18.	Föreläsning	Föreläsning om simuleringsmjukvaran Inviwo.		
19.	Föreläsning	Föreläsning om materialfysik.		
20.	Föreläsning	Inspirationsföreläsning om solceller.		
21.	Föreläsning	Föreläsning om LIPS-modellens designspecifikation.		
22.	Föreläsning	Föreläsning om python.		
23.	Laboration	Laboration i python.		
24.	Föreläsning	Föreläsning om beräkningsfysik.		
25.	Laboration	Laboration i beräkningsfysik.		
26.	Föreläsning	Föreläsning om sluddokumentation enligt LIPS-modellen.		

12.4 Presentation

Etikseminarierna ingår inte i timmarna räknade till projektet.

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
27.	Seminarium	Seminarium om etik.		
28.	Seminarium	Seminarium om etik.		
29.	Seminarium	Seminarium om rapportgranskning.		
30.	Slutpresentation	En presentation av projektet ska förberedas och hållas för beställaren.	20	
31.	Opponering	Projektgruppen ska förbereda och utföra en opponering på en annan grups arbete.	20	2, 3

12.5 Delsystem datakonvertering

Detta dokument skiljer inte på att projektgruppen implementerar lösningar och att projektgruppen sätter sig in i redan tillgängliga lösningar från föregående års projektgrupp.

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
32.	Förstå utdata från VASP-beräkningar: kristallstruktur	Projektgruppen behöver förstå hur kristallstrukturer definieras i VASP.	8	
33.	Förstå utdata från VASP-beräkningar: elektrontäthet	Projektgruppen behöver förstå hur elektrontäthet presenteras i VASP.	8	
34.	Förstå utdata från VASP-beräkningar: tillståndstäthet	Projektgruppen behöver förstå hur tillståndstäthet presenteras i VASP.	8	
35.	Förstå utdata från VASP-beräkningar: Fermi-yltor	Projektgruppen behöver förstå hur energi-egenvärden presenteras i VASP.	8	
36.	Konvertera kristallstrukturdata från VASP-format till HDF5-format.	Kristallstrukturdata behöver läsas in och konverteras till HDF5-format så att systemet kan behandla dem.	16	32
37.	Konvertera elektrontäthetsdata från VASP-format till HDF5-format.	Elektrontäthetsdata behöver läsas in och konverteras till HDF5-format så att systemet kan behandla dem.	16	33
38.	Konvertera tillståndstäthetsdata från VASP-format till HDF5-format.	Tillståndstäthetsdata behöver läsas in och konverteras till HDF5-format så att systemet kan behandla dem.	16	34
39.	Konvertera data från VASP-beräkningar av Fermi-yltor till HDF5-format.	Data från beräkningar av Fermi-yltor behöver läsas in och konverteras till HDF5-format så att systemet kan behandla dem.	16	35
40.	Konvertera data från Elk-beräkningar till HDF5-format	Data behöver läsas in och konverteras till HDF5-format så att systemet kan behandla dem.	12	32, 33, 34, 35

12.6 Delsystem visualisering

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
41.	Grundläggande förståelse av Inviwo	Projektgruppen behöver förstå sig på hur Inviwo används, och till viss mån, fungerar.	16	
42.	Grundläggande visualisering av atom	Visualisera en atom genom att rita ut en sfär.	4	41
43.	Transparensinställning	Transparensen av allting som ritas ut i 3D-grafer ska kunna ändras med avseende på någon egenskap. I det första grundläggande fallet, utritande av en atom, behöver transparensen av atomen kunna ställas in godtyckligt, då inga andra egenskaper än dess form ritas ut.	2	42
44.	Färginställning för atom	Färgen av atomen ska kunna ställas in godtyckligt.	2	42
45.	Rotation	3D-grafer ska kunna roteras.	2	41
46.	Visualisering av kristallstruktur	Visualiseringsmodulen behöver kunna använda sig av data skickat från datakonverteringsmodulen för att rita upp kristallstrukturer, alltså illustrera hur atomerna i kristallens enhetscell är placerade i förhållande till varandra.	20	41, 36
47.	Val av elektrontäthetsvisualiserings-sätt	Projektgruppen behöver lära sig vad elektrontäthet är och komma överens om hur det ska visualiseras.	8	
48.	Visualisering av elektrontäthet	Sannolikheten att hitta elektroner i diverse områden i kristallens enhetscell ska kunna illustreras.	16	41, 37
49.	Transparensinställning, brytpunkt och intervall	En brytpunkt ska kunna väljas för vilken full transparens inträder för det grafiska objekt som representerar elektrontätheten. Full transparens ska även kunna fås inom ett intervall. Transparensnivån ska, utöver detta, kunna ändras för valfria värden.	4	48

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
50.	Färginställning, flera saker som ska färgläggas	Atomerna ska kunna ha en färg, de olika värdena på elektrontäthet en eller flera andra.	4	48
51.	Sätta sig in i tillståndstäthet	Projektgruppen behöver sätta sig in i tillståndstäthet.	8	
52.	Tillståndstäthet	Tillståndstäthet ska illustreras i en 2D-graf med energi på x-axeln och antal tillstånd på y-axeln.	32	38
53.	Val av visualiseringssätt för Fermi-yltor	Projektgruppen behöver komma överens om hur Fermi-yltor ska visualiseras.	8	
54.	Fermi-yltor	Fermi-ylta, eller ytan för godtycklig energinivå under Fermi-energin, ska ritas ut i k-rummet.	80	39

12.7 Tester

Testerna är inte automatiserade tester utan görs manuellt efter att en uppgift är slutförd.

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
55.	Testa konvertera data från VASP-beräkningar	För att säkerställa att konvertering till HDF5-format från VASP-beräkningar fungerar görs tester av detta.	2	36, 37, 38, 39
56.	Testa konvertera data från Elk-beräkningar	För att säkerställa att konvertering till HDF5-format från Elk-beräkningar fungerar görs tester av detta.	2	40
57.	Testa visualisering av atom	Atomen ska kunna visualiseras och inställningar för färg och transparens ska vara möjliga.	2	42
58.	Testa visualisering av kristallstruktur	Kristallstrukturer ska kunna visualiseras och inställningar för färg och transparens ska vara möjligt samt rotation.	2	46
59.	Testa visualisering av elektrontäthet	Elektrontäthet ska kunna visualiseras och inställningar för färg och transparens ska vara möjligt samt rotation.	2	48
60.	Testa visualisering av tillståndstäthet	Tillståndstäthet ska kunna visualiseras och inställningar för färg ska vara möjlig.	2	52
61.	Testa visualisering av Fermi-ylor	Fermi-ylor ska kunna visualiseras och inställningar för färg och transparens ska vara möjligt samt rotation.	2	54

12.8 Övrigt

Nr	Aktivitet	Beskrivning	Beräknad tid (h)	Beroende aktivitet nr
62.	Kodstädning	Snygga till kod och kommentarer.	24	
63.	Beskrivningar	Skriv sammanfattande beskrivningar till alla processorer och python-moduler.	8	
64.	Förståelse av legacy-kod	Projektgruppen behöver förstå föregående års kod för att veta vad som kan återanvändas och byggas vidare på.	40	
65.	Uppdatering av legacy-kod	De delar av föregående års kod som ska användas i årets projekt behöver med största sannolikhet uppdateras för att bli kompatibel med aktuell version av Inviwo.	80	64
66.	Fördjupningsarbete	Projektgruppen ska i grupper om två skriva ett fördjupningsarbete relaterat till projektet.		
67.	Buffert	Antal timmar av de ursprungliga, 1 000 timmarna, projektgruppen har kvar att tillgå.	244	

13 Tidsplan

Se Bilaga E.

14 Förändringsplan

Vid eventuella förändringar i projektet kommer projektgruppen möjligtvis vara tvungen att ändra i tidsplan, milstolpslista, aktivitetslista eller kravspecifikation. Om krav behöver omförhandlas bokar gruppen ett möte med beställare.

15 Kvalitetsplan

I detta avsnitt beskrivs hur kvaliteten på leveranser ska kontrolleras med hjälp av granskningar och tester.

15.1 Granskningar

Samtliga dokument som framställs kommer att granskas av någon i projektgruppen och detta anges även på det granskade dokumentet.

15.2 Testplan

Tester av systemet kommer att skrivas parallellt med att kod skrivs och utföras kontinuerligt.

16 Riskanalys

Inga större risker har identifierats med projektet.

17 Prioriteringar

Kraven i kravspecifikationen är av typen ska-krav, bör-krav eller kanske-krav. Ska-kraven kommer att prioriteras vid förseningar och tidsbrist för att säkerställa att projektet slutförs vid slutdatum.

18 Projektavslut

I en efterstudie ska projektmedlemmarna samla erfarenheterna från projektarbetet. All utrustning och lånat material ska återlämnas. Dokumentationen förvaras i grupprummet på Lisam så att samtliga projektmedlemmar har åtkomst till den.

A Gruppkontrakt

Gruppkontrakt - Visualisering av elektronstrukturer

Om gruppen har beslutat att träffas skall alla deltagare vara på plats på förutbestämd tid. Vid sjukdom eller dylikt skall gruppmedlemmen meddela övriga om detta.

Tider som enbart är specificerade med timme medför att akademisk kvart tillämpas.

Varje möte skall inledas med en genomgång av vad varje person har gjort. Detta så att alla har koll på hur resten av gruppen ligger till.

I slutet av varje gruppmöte skall en genomgång av vad som skall göras inför nästa möte hållas.

Protokoll från mötet skall skickas ut av mötessekreteraren för att komma de andra i gruppen till handa.

Gruppen skall ses en gång i veckan under en lunch, om inte annat beslutas, för att stämma av hur arbetet fortskrider.

Arbetsbördan under projektets gång skall delas rättvist av gruppmedlemmarna.

Har någon medlem problem med gruppen bör detta tas upp på ett av de schemalagda gruppmötena, eller vid annat lämpligt tillfälle.

Gruppen strävar efter att göra ett så bra arbete som möjligt inom de 1 000 timmar som budgeterats åt projektet.

B Kravspecifikation

Kravspecifikation

Redaktör: Andreas Kempe

Version 1.0

Status

Granskad	Anders Rehult	2018-01-30
Godkänd	Rickard Armiento	2018-01-30

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2
Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz		073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Kontaktperson hos kund: Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se

Kursansvarig: Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se

Handledare: Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	iv
1 Inledning	1
1.1 Parter	1
1.2 Syfte och Mål	1
1.3 Användning	1
1.4 Bakgrundsinformation	1
1.5 Definitioner	2
2 Utförande	3
3 Översikt av systemet	4
3.1 Grov beskrivning av produkten	4
3.2 Produktkomponenter	4
3.3 Beroenden till andra system	4
3.4 Ingående delsystem	4
3.5 Avgränsningar	4
3.6 Designfilosofi	5
3.7 Generella krav på hela systemet	6
4 Delsystem - Datakonvertering	8
5 Delsystem - Datahantering	9
6 Delsystem - Visualisering	10
7 Krav på vidareutveckling	11
8 Ekonomi	12
9 Leveranskrav och delleranser	13
10 Dokumentation	14
11 Utbildning	15
Referenser	15

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-01-24	Första utkast.	Projektgruppen	Marian Brännvall
0.2	2018-01-26	Andra utkast.	Projektgruppen	Anders Rehult
0.3	2018-01-29	Tredje utkast.	PL och DOK	Anders Rehult
1.0	2018-01-30	Slutgiltig version.	PL	Anders Rehult

1 Inledning

I detta dokument beskrivs alla krav med en tabellrad enligt nedan. Kravnummer är löpande genom hela dokumentet. Kolumn 2 anger om kravet är ett originalkrav eller om kravet har reviderats. Vid revidering finns en hänvisning till beslut. I kolumn 3 finns själva lydelsen av kravtexten. I kolumn 4 finns dess prioritet beskriven.

Prioritet *Ska* betyder att kravet är ett av baskraven som projektet måste uppfylla. Prioritet *Bör* betyder att kravet inte är avgörande för projektets fullbordande, men att kravet bör uppfyllas. Prioritet *Kanske* är den lägsta prioriteten, och betyder att kravet inte är avgörande för projektets fullbordande och inte kommer arbetas med förrän alla *Bör*- och *Ska*-krav är uppfyllda.

Krav nr x	Förändring	Kravtext för krav nr x	Prioritet
-----------	------------	------------------------	-----------

1.1 Parter

Rickard Armiento är beställare av detta projekt med Johan Jönsson som handledare och Anders Rehult som projektledare. Övriga gruppmedlemmar är Viktor Bernholtz, Andreas Kempe och Marian Brännvall.

1.2 Syfte och Mål

Målet med projektet är att utveckla ett system för visualisering av resultatet av elektronstrukturberäkningar. Detta ska göras i visualiseringsverktyget Inwiwo och systemets funktionalitet ska demonstreras genom att använda det för att illustrera resultat från befintliga beräkningar. I och med att den framtagna mjukvaran ämnas användas i forskningssammanhang måste projektet hålla en hög vetenskaplig och teknisk kvalitet.

Utöver det konkreta målet med framtagandet av mjukvara för visualisering ska även projektet ge projektmedlemmarna erfarenhet av att arbeta i projekt och utöka deras förmåga till analytiskt och fysikaliskt tänkande för att ge värdefull erfarenhet inför arbetslivet.

1.3 Användning

Inom teoretisk fysik är elektronstrukturberäkningar ett viktigt verktyg för att förstå hur materials och molekylers egenskaper utifrån kvantmekaniska principer. Denna produkt kommer användas vid Linköpings universitet för att analysera data från sådana beräkningar.

1.4 Bakgrundsinformation

Detta projekt genomförs som en del i kursen TFYA75 vid Linköpings universitet. Visualisering av data från beräkningar kan i vissa fall förenkla, och ofta vara nödvändigt, för att kunna analysera datan och förstå materials och molekylers egenskaper.

Inwiwo gör det möjligt att styra visualisering programmatiskt och att konstruera användargränssnitt för interaktiv visualisering.

1.5 Definitioner

Python är ett programmeringsspråk som används i Inviwo för att knyta samman processorer.

C++ är ett programmeringsspråk som är baserat på programspråket C. I Inviwo används det för att skriva programkod till processorer.

Inviwo (Interactive Visualization Workshop) är programvara för visualisering som tillhandahåller en nätverksredigerare för designen av dataflödesnätverk. Noderna i dessa dataflödesnätverk kallas processorer. Indata till nätverket behandlas i dessa processorer och utdata genereras.

BSD 2 är en licens för öppen källkod.

Git är ett versionshanteringsprogram.

Lisam är en lärplattform som används i projektet för att dela och samla information.

HDF5 är ett binärt filformat.

GUI (Graphical Use Interface) är ett grafiskt användargränssnitt.

LIPs är en modell med regler, instruktioner och mallar för att bedriva projekt. Detta projekt utformas utifrån LIPsmodellen.

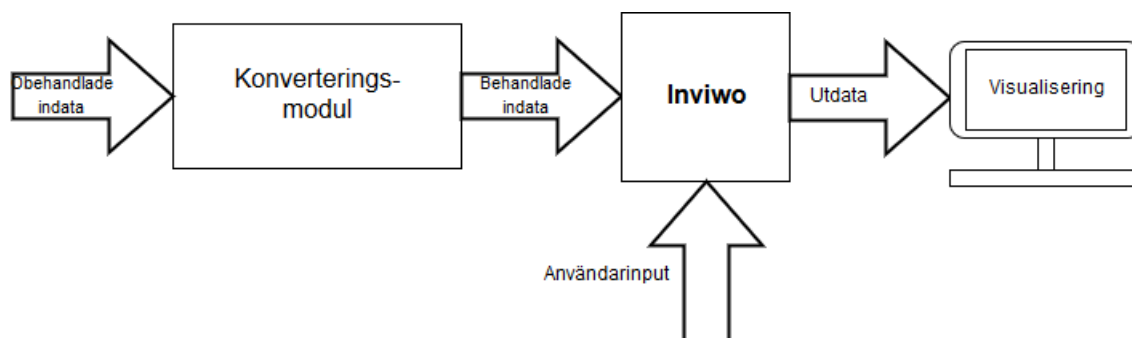
API (Application Programming Interface) är en specifikation av hur olika applikationer kan använda och kommunicera med en specifik programvara. Detta utgörs oftast av ett dynamiskt länkat bibliotek.

2 Utförande

Här listas krav för utförandet av projektet.

Krav nr 1	Original	Projektet ska drivas enligt LIPS-modellen.	Ska
Krav nr 2	Original	Vid begäran ska projektgruppen skicka en statusrapport till beställaren.	Ska

3 Översikt av systemet



Figur 1: Grov skiss av systemet

Systemet tar in data från elektronstrukturberäkningar och visualiserar egenskaper valda av användaren. Detta illustreras i figur 1.

3.1 Grov beskrivning av produkten

Produkten är ett verktyg för att visualisera viktiga egenskaper från elektronstrukturberäkningar.

3.2 Produktkomponenter

Produkten ska bestå av API:er för att programmatiskt utföra visualisering samt, eventuellt, ett grafiskt användargränssnitt. En demonstration av funktionalitet och en teknisk dokumentation ingår även i slutleveransen, se sektion 8.

3.3 Beroenden till andra system

Projektet använder sig av Inviwo för att behandla indata i form av resultat från elektronstrukturberäkningar och visualisera relevant data på ett interaktivt sätt.

3.4 Ingående delsystem

Systemet består av tre delsystem, ett som hanterar konvertering av data till format som resten av systemet kan arbeta med, ett som hanterar den konverterade datan och ett som hanterar visualiseringen av denna data. Datat som ska visualiseras kommer att kunna väljas av användaren.

3.5 Avgränsningar

Projektet innefattar att visualisera två egenskaper från listan i krav 5, varav den ena som väljs ska vara en som redan påbörjats av 2017 års projektgrupp och den andra ska göras från grunden.

3.6 Designfilosofi

Systemet kommer utvecklas som en påbyggnad av 2017 års projektgrupp. Kod som inte fungerar med den aktuella versionen av Inviwo kommer att uppdateras.

Projektet kommer att drivas med hjälp av versionshanteringssystemet Git och koden kommer vara licensierad med BSD 2, men även utvecklas under Inviwos utvecklaravtal för att, om önskvärt, kunna officiellt integreras i programvaran.

All design av systemet kommer att utgå från en designspecifikation som löpande kommer att uppdateras under projektets gång. I slutändan kommer detta att resultera i teknisk dokumentation som beskriver systemet.

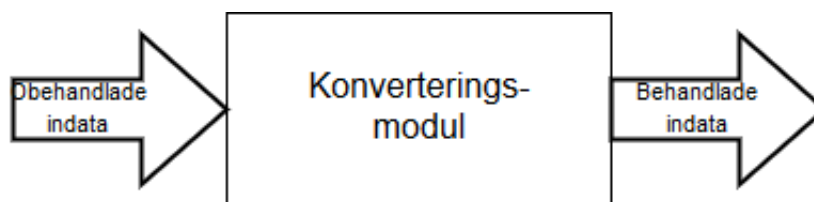
3.7 Generella krav på hela systemet

Här listas krav för det generella systemet.

Krav nr 3	Original	Källkoden i systemet ska vara BSD 2-clauselicensierad.	Ska
Krav nr 4	Original	Kod som integreras med Inviwo ska tillgängliggöras under Inviwos utvecklaravtal.	Ska
Krav nr 5	Original	Systemet ska implementera, alternativt utöka befintlig implementation, med visualisering av minst två av följande egenskaper: <ul style="list-style-type: none"> • Elastiska konstanter • Fermi-ytor • ELF (Electron Localization Function) • Krafter på atomer • Bandstruktur • Total DOS (Density Of States) • Parkorrelationsfunktionen • Illustration av partiell elektrondensitet 	Ska
Krav nr 6	Original	Projektgruppen ska undersöka och lära sig om samtliga egenskaper ur listan i kravet ovan.	Ska
Krav nr 7	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna anropas med enkla funktionsanrop.	Ska
Krav nr 8	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna hantera indata.	Ska
Krav nr 9	Original	En beskrivning av vilka indata en tillhandahållen python-modul kräver ska kunna erhållas.	Ska
Krav nr 10	Original	En beskrivning av vilka utdata en tillhandahållen python-modul producerar ska kunna erhållas.	Ska
Krav nr 11	Original	En beskrivning av vad en tillhandahållen python-modul gör ska kunna erhållas.	Ska
Krav nr 12	Original	Användaren ska kunna ändra indata till python-moduler.	Ska
Krav nr 13	Original	Användaren ska kunna välja vilken typ av visualisering som ska visas.	Ska

Krav nr 14	Original	Användaren ska kunna länka samman olika python-moduler.	Ska
Krav nr 15	Original	Systemet ska implementeras i Inviwo.	Ska
Krav nr 16	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna ta emot en eller flera typer av indata.	Ska
Krav nr 17	Original	Tillhandahållna python-moduler ska kunna ge utdata.	Ska
Krav nr 18	Original	Tillhandahållna python-moduler ska inte fortskrida som vanligt vid indata av fel typ.	Ska
Krav nr 19	Original	Tillhandahållna python-moduler ska vid felaktiga indata varna användaren.	Ska
Krav nr 20	Original	Tillhandahållna python-modulers egenskaper bör kunna ändras.	Bör
Krav nr 21	Original	Systemet bör tillhandhålla ett grafiskt gränssnitt (GUI) för vanligt förekommande visualiseringsuppgifter.	Bör
Krav nr 22	Original	Uppstart av systemet bör vara enkelt för användaren.	Bör
Krav nr 23	Original	Installation av systemet bör vara enkelt för användaren.	Bör

4 Delsystem - Datakonvertering



Figur 2: Skiss av hur systemet hanterar indata

Här listas krav för hur systemet ska hantera indata och konvertera de till format som resten av systemet kan arbeta med. Datakonverteringsmodulen tar in obehandlade indata från något beräkningsprogram, behandlar dem så att resten av systemet kan hantera dem, och skickar sedan vidare dem. Processen illustreras i figur 2.

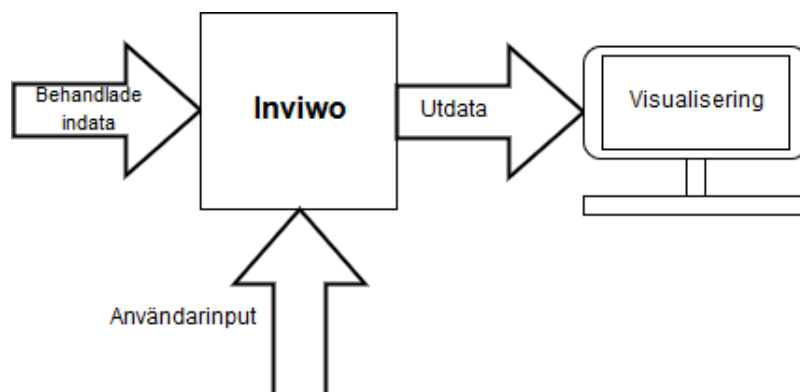
Krav nr 24	Original	Systemet ska kunna läsa in resultat från VASP.	Ska
Krav nr 25	Original	Systemet ska kunna konvertera data från kristallstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 26	Original	Systemet ska kunna konvertera data från elektronstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 27	Original	Systemet ska kunna konvertera data från tillståndstäthetsberäkningar.	Ska
Krav nr 28	Original	Systemet ska översätta input-filer i textformat till det binära filformatet HDF5.	Ska
Krav nr 29	Original	Systemet bör kunna läsa in resultat från något annat beräkningsprogram, t.ex. Elk.	Bör
Krav nr 30	Original	Systemet bör utnyttja befintlig kod för hantering av inläsning av datafiler.	Bör

5 Delsystem - Datahantering

Här listas krav för hur systemet ska kunna hantera data.

Krav nr 31	Original	Systemet ska kunna hantera data från kristallstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 32	Original	Systemet ska kunna hantera data från elektronstrukturberäkningar.	Ska
Krav nr 33	Original	Systemet ska kunna hantera data från tillståndstäthetsberäkningar.	Ska
Krav nr 34	Original	Systemet bör utnyttja befintlig kod för hantering av bland annat kristallstrukturer.	Bör
Krav nr 35	Original	Systemet bör effektivt kunna hantera stora filer.	Bör

6 Delsystem - Visualisering



Figur 3: Skiss av hur visualiseringen sker

Här listas krav för hur systemet ska visualisera data. Visualiseringsmodulen tar in indata behandlade av datakonverteringsmodulen, behandlar dem, och ritar sedan upp utdata på skärmen, se figur 3.

Krav nr 36	Original	Systemet ska visualisera projicerad tillståndstäthet härrörande till varje separat atom i en kristalls enhets-cell.	Ska
Krav nr 37	Original	Systemet ska visualisera kristallstruktur som atompositioner i enhetscellen.	Ska
Krav nr 38	Original	Systemet ska kunna visualisera den elektrontäthet som resulterar från en beräkning.	Ska
Krav nr 39	Original	Användaren ska, vid volymsrendering, kunna reglera en brytpunkt, i form av något specifikt värde av någon egenskap, för vilken full transparens inträder.	Ska
Krav nr 40	Original	Användaren ska, vid volymsrendering, kunna reglera ett intervall av värden av någon egenskap, där full transparens fås för alla värden inom intervallet.	Ska
Krav nr 41	Original	Användaren ska, vid volymsrendering, kunna ändra opaciteten/transparensnivån för valfria värden av någon egenskap.	Ska
Krav nr 42	Original	Systemet bör tillåta dynamisk visualisering baserad på en serie atompositioner från utdatafiler.	Bör
Krav nr 43	Original	Systemet bör tillåta att visualisering av egenskaper tillhörande atomer bara visas på vissa atomer, som kan väljas dynamiskt med musklick.	Bör

7 Krav på vidareutveckling

Här listas krav för hur systemet ska kunna vidareutvecklas.

Krav nr 44	Original	All kod ska vara välkommenterad alternativt självförklarande.	Ska
Krav nr 45	Original	Koden ska fungera för Inviwo 0.9.9 eller någon efterkommande version.	Ska
Krav nr 46	Original	Den tekniska dokumentationen ska vara tydlig så att det är möjligt att bygga vidare på systemet utifrån denna.	Ska

8 Ekonomi

Projektgruppen har total 1000 timmar för att slutföra projektet, dessa är fördelade jämnt över gruppens medlemmar.

Krav nr 47	Original	Efter godkänd projektplan (BP2) ska projektet maximalt ta 1000 arbetstimmar att slutföra.	Ska
Krav nr 48	Original	Projektgruppen ska utföra kontinuerlig tidsredovisning.	Ska
Krav nr 49	Original	Tidsredovisning ska skickas till beställaren inför varje beslutspunkt.	Ska

9 Leveranskrav och delleveranser

Tisdag 30/1 Kravspecifikationen ska vara klar och godkänd (BP1).

Tisdag 13/2 Första version av projektplan, tidplan och systemskiss ska vara inlämnad till beställaren.

Fredag 16/2 Slutgiltig version av projektplan, tidplan och systemskiss ska vara inlämnad till beställaren, efter detta hålls beslutmöte BP2.

Fredag 2/3 Första version av designspecifikationen ska vara inlämnad till handledaren.

Senast 8/3 Designspecifikationen ska vara godkänd av handledaren vid beslutmöte BP3.

Senast 11/4 Nuvarande design ska vara presenterad för och godkänd av handledaren vid ett beslutmöte BP4.

Senast 14/5 Färdig kapp för slutrapport ska vara inskickad till TEMA.

Senast 23/5 Kraven ska vara verifierade (BP5).

Senast 28/5 Teknisk dokumentation, resultat av teknisk/naturvetenskaplig undersökning, användarhandledning och slutrapport för kandidatarbetet ska vara godkända.

Tisdag 5/6 Efterstudien ska vara inlämnad och inkluderad i slutrapporten. Gruppens källkod ska ha lagrats i ett system för källkodshantering och lämnats in i denna form.

Fredag 8/6 All utrustning och lånat material ska vara återlämnat.

En uppdaterad tidrapport ska lämnas till beställare inför varje beslutspunkt.

Här listas krav för leveranser och delleveranser.

Krav nr 50	Original	Vid slutleverans ska det finnas ett fungerande interaktivt visualiseringssystem.	Ska
Krav nr 51	Original	Vid slutleverans ska det finnas en teknisk/naturvetenskaplig rapport.	Ska
Krav nr 52	Original	Projektets delleveranser ska ske senast vid de datum som specificeras på kursens hemsida.	Ska

10 Dokumentation

Dokumentation av projektet ska utgå från LIPS-mallar. Syftet med dokumentationen är att ha en grund som utgås ifrån när arbetet sätter igång. Krav på systemet specificeras, designen specificeras och en projektplan, tidplan och systemskiss görs. Se tabell nedan för information om vilka dokument som ska skrivas.

Krav nr 53	Original	Projektgruppen ska ta fram en tidsplan.	Ska
Krav nr 54	Original	Dokumentationen ska sparas på kursens hemsida.	Ska
Krav nr 55	Original	Projektets slutleverans ska ske senast vid det datum som finns specificerat på kursens hemsida.	Ska
Krav nr 56	Original	Vid slutleverans ska det finnas en slutrapport.	Ska
Krav nr 57	Original	Vid slutleverans ska det finnas teknisk dokumentation med användaranvisning.	Ska
Krav nr 58	Original	Samtliga dokument som projektgruppen tar fram ska godkännas enligt listan med leveranser, se avsnitt 9.	Ska
Krav nr 59	Original	Designspecifikationen ska godkännas av handledaren.	Ska
Krav nr 60	Original	Projektgruppen ska ta fram en kravspecifikation.	Ska
Krav nr 61	Original	Projektgruppen ska ta fram en systemskiss.	Ska
Krav nr 62	Original	Projektgruppen ska ta fram en projektplan.	Ska
Krav nr 63	Original	Projektets dokument ska utgå ifrån LIPS-mallar.	Ska

11 Utbildning

Gruppens medlemmar kommer att utbildas i visualiseringsverktyget Inviwo och programmeringsspråket Python. Föreläsningar om relevanta fysikaliska fenomen kommer dessutom att hållas.

Referenser

- [1] *LIPS – nivå 1. Version 1.0.* Tomas Svensson och Christian Krysander. Kompendium, LiTH, 2002.

C Projektdirektiv

Projektdirektiv

Visualisering av elektronstruktur

Personer

- Beställare: Rickard Armiento
- Handledare: Johan Jönsson
- Expert: Peter Steneteg

Bakgrund

Elektronstrukturberäkningar är ett viktigt verktyg inom teoretisk fysik för att förstå hur materials och molekylers egenskaper kan härledas från kvantmekaniska effekter. För att förstå dessa egenskaper är det viktigt att kunna analysera data från sina beräkningar, något som i vissa fall förenklas genom visualisering och ofta helt och hållet kräver att man kan visualisera sin data. Inviwo är ett kraftfullt forskningsverktyg som utvecklas av Visualiseringscenter i Norrköping. Inviwo gör det möjligt att styra visualisering med programmering och att konstruera användargränssnitt för interaktiv visualisering.

Projektidé

Projektet går ut på att skapa ett verktyg för att visualisera viktiga egenskaper från elektronstrukturberäkningar. Verktöget ska bestå av APlar för att programmatiskt utföra visualisering samt eventuellt ett grafiskt användargränssnitt för dessa APlar.

Mjukvara ifrån tidigare projektomgång finns tillgänglig för projektgruppen och får användas för att underlätta uppfyllandet av kraven.

Syfte

Projektet syftar till att utveckla kreativiteten samt att ge färdigheter i fysikaliskt tänkande och analys av teoretiska resultat. Projektet bedrivs så realistiskt som möjligt för att vara en träning inför det kommande yrkeslivet. Resultatet av projektarbetet ska hålla hög vetenskaplig och teknisk kvalitet och

baseras på moderna kunskaper, dokumenteras i form av projekt-och tidsplan, krav-och designspecification samt i en teknisk/vetenskaplig rapport, presenteras muntligt, demonstreras och följas upp i en efterstudie.

Mål

Att i visualiseringsverktyget Inviwo utveckla ett system för visualisering av resultatet av elektronstrukturberäkningar. Att demonstrera systemets funktionalitet genom att använda det till att illustrera några befintliga beräkningsresultat.

Krav på systemet

- Systemet ska implementeras i Inviwo.
- Källkoden i systemet bör licensieras med BSD 2-clause "simplified" licence.
- Kod som integreras med Inviwo ska tillgängliggöras under Inviwos utvecklaravtal.
- Tillhandahållna python-moduler ska vara användarvänliga och möjliggöra visualisering med kommandon på hög nivå.
- Systemet bör effektivt kunna hantera stora filer.
- Systemet bör översätta input-filer i textformat till det binära filformatet HDF5.
- Systemet bör tillhandahålla ett grafiskt gränssnitt (GUI) för vanligt förekommande visualiseringsuppgifter.
- Installation och uppstart av systemet bör vara enkel för användaren.
- Systemet bör utnyttja befintlig kod för hantering av inläsning av datafiler och hantering av bl.a. kristallstrukturer.
- Ska kunna läsa in resultat skapade med beräkningsprogrammet VASP.
- Bör kunna läsa in resultat från något annat beräkningsprogram, t.ex. Elk.
- Systemet ska kunna läsa indata direkt ifrån utdatafiler ifrån beräkningsprogram och visualisera detta.
- Ska visualisera kristallstruktur som atompositioner i enhetscellen.
- Systemet ska kunna visualisera den elektrontäthet som resulterat ifrån en beräkning.
- Visualiseringen ska utnyttja Inviwos funktionalitet för volymsrendering för partiell transparens.
- Visualiseringen ska tillåta interaktion i form av rotering, skalning, etc.
- Användaren ska kunna reglera en brytpunkt för vilken full transparens inträder för att kunna tydliggöra strukturer bättre.
- Systemet bör tillåta dynamisk visualisering baserad på en serie av atompositioner i utdatafiler.
- Ska visualisera projicerad tillståndstäthet härrörande till varje separat atom i en kristalls enhets-cell.

- Tillåta att visualisering tillhörande atomer bara visas på vissa atomer, som kan väljas dynamiskt med t.ex. musklick.
- Ska implementera (alternativt utöka befintlig implementation med) visualisering av minst två av följande egenskaper:
 - Elastiska konstanter.
 - Fermi-ypor.
 - ELF.
 - Krafter på atomer.
 - Bandstruktur.
 - Total DOS.
 - Parkorrelationsfunktionen.
 - Illustration av partiell elektrondensitet.

Slutgodkännande

För systemets godkännande krävs en interaktiv demonstration av systemets färdigheter som utförs i samband med leverans.

Leveranser

Se kursens Lisamsida.

Övriga krav

Projektet ska bedrivas enligt LIPS-modellen och samtliga dokument ska utgå från LIPS-mallar.

I förefasen ingår att projektgruppen ska ta fram en kravspecifikation, en systemskiss och en projektplan med tidplan. Samtliga dessa dokument ska godkännas av beställaren. Efter godkänd projektplan (BP2) får projektet ta maximalt 1500 arbetstimmar att slutföra.

Projektgruppen ska utföra kontinuerlig tidsredovisning som skickas till beställaren en gång per vecka. Vid begäran ska gruppen även skicka in en statusrapport. Vid slutleveransen ska det finnas ett fungerande interaktivt visualiseringssystem, teknisk dokumentation med användaranvisning, en teknisk/naturvetenskaplig rapport samt slutrapport. Projektets delleveranser

och slutleverans ska senast ske vid de datum som finns specificerade på kursens Lisamsida.

Även

formen för slutleveransen beskrivs på denna sida. Dokumentationen sparas på kursens Lisamsida.

D Systemskiss

Systemskiss

Redaktör: Andreas Kempe

Version 0.3

Status

Granskad	Viktor Bernholtz	2018-02-09
Godkänd		

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2
Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz	Viktor Bernholtz (VB)	073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Kontaktperson hos kund: Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se

Kursansvarig: Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se

Handledare: Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	iv
1 Inledning	1
1.1 Syfte och Mål	1
2 Översikt av systemet	1
2.1 Ingående delsystem	2
3 Delsystem datakonvertering	3
3.1 Inläsning	3
3.2 Konvertering	3
4 Delsystem visualisering	4
4.1 HDF5-inläsning	4
4.2 Användarindata	5
4.3 Utritning	6
4.4 Interaktivitet	6
Referenser	6

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-02-07	Första utkast.	Projektgruppen	VB
0.2	2018-02-08	Andra utkast.	Projektgruppen	AK
0.3	2018-02-09	Tredje utkast.	Projektgruppen	VB

1 Inledning

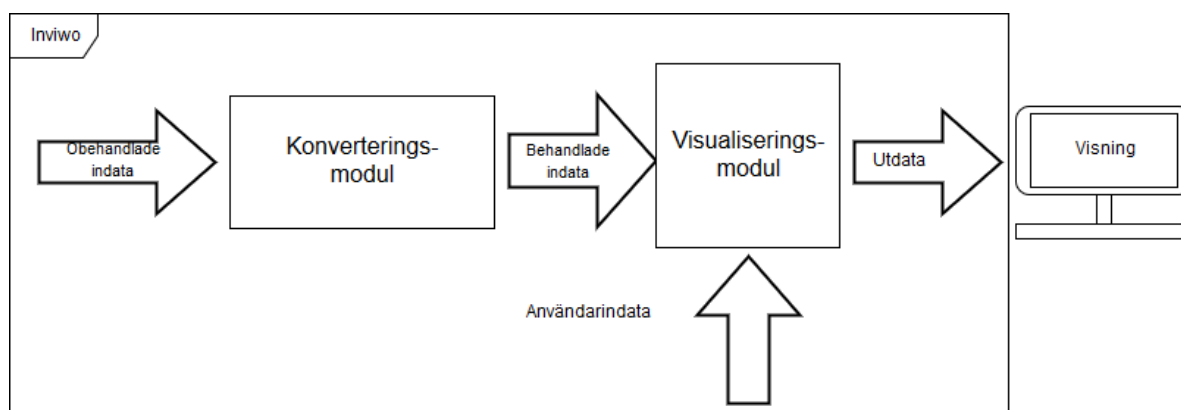
Detta dokument ämnar ge en bild av ett system för visualisering av elektronstrukturdata som erhålles från kvantmekaniska beräkningar. Systemet byggs kring mjukvaran Inviwo som utvecklas av forskargruppen Scientific Visualization vid Linköpings universitet för att underlätta visualisering av olika sorters data.

Projektet utförs för IFM (Institutionen för Fysik, Kemi och Biologi) vid Linköpings universitet som ett kandidatprojekt.

1.1 Syfte och Mål

Projektet skall ta fram mjukvara för visualisering av data från kvantmekaniska kristallstrukturberäkningar. Detta då det är svårt att dra slutsatser utifrån rådata utan verktyg som underlättar i analysen av densamma.

2 Översikt av systemet



Figur 1: Grov skiss av systemet

Systemet som helhet ska ta in data från VASP- och Elk-beräkningar, konvertera detta till HDF5-format och sedan visualisera dessa resultat med hjälp av visualiseringsverktyget Inviwo. Användaren ska kunna välja vad som ska visualiseras och, när bilden renderats, även kunna modifiera den utritade bilden. I Figur 1 visas detta flöde och rutorna representerar en aktivitet i systemet, medan pilarna representerar dataflödet genom systemet.

Systemet ska kunna:

- Läs in data från elektronstrukturberäkningar gjorda i VASP och Elk.
- Konvertera inkommande obehandlad data från textfil till HDF5-format.
- Ta in användarindata som avgör vad som ska visualiseras.
- Visualisera behandlad data utifrån inskickad användarindata.
- Hantera interaktivitet dvs. användaren ska kunna modifiera den renderade bilden i efterhand.

2.1 Ingående delsystem

Systemet består av två övergripande delsystem. Dessa är datakonvertering och visualisering.

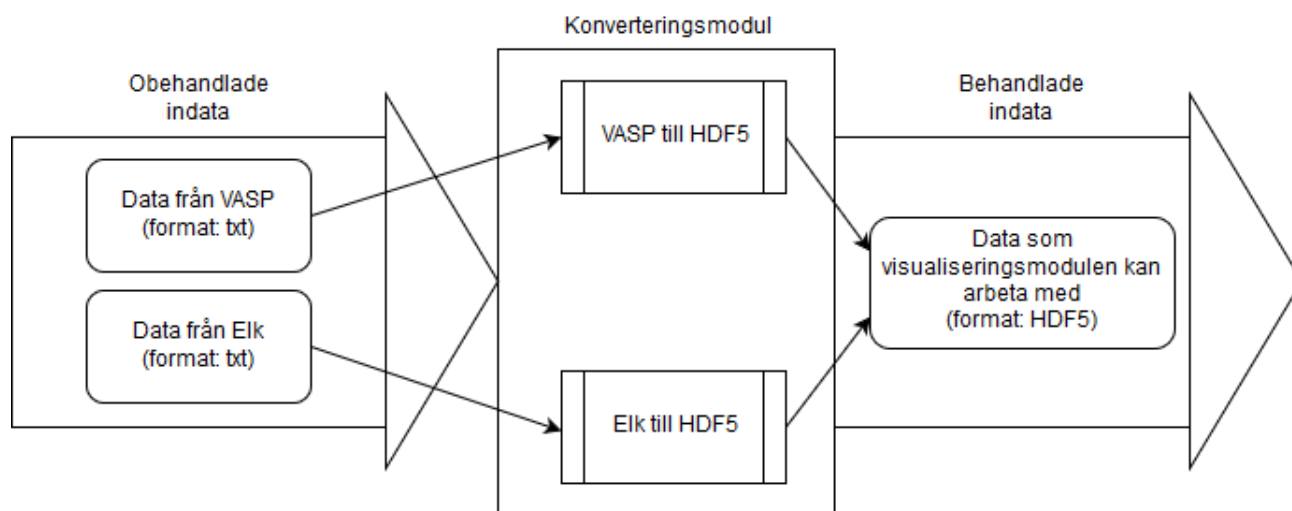
Datakonverteringen hanterar inkommande, obehandlad data och skickar ut data konverterad till HDF5-format. HDF5 är ett dataformat som lämpar sig bättre att hanteras av Inviwo än originaldatan som kommer i textfiler. Detta då det är designat att hantera stora datamängder på ett flexibelt sätt och tillhandahåller programmatiska gränssnitt för interaktion med datan [1].

Visualiseringen skapar en grafisk representation av indatan i form av 3D- eller 2D-grafer som sedan visas för användaren. Modulen tillåter sedan manipulation av bilden i form av rotation, skalning, ändrande av färgläggning och så vidare.

I avsnitten för datakonvertering och visualisering beskrivs delsystemen och deras funktioner mer ingående.

3 Delsystem datakonvertering

Figur 2 beskriver hur delsystemet för datakonvertering är uppbyggt. Obehandlad indata representeras av en stor pil och rutorna inuti pilen representerar textfiler med data från beräkningar gjorda i beräkningsprogrammen VASP och Elk. Konverteringsmodulen representeras av en ruta i mitten och rutorna inuti är konverteringen för data från respektive beräkningsprogram. Slutligen skickas konverterad data ut vilket representeras av en stor pil.



Figur 2: Skiss av datakonverteringsmodulen

I detta delsystem läses resultat från VASP- eller Elk-beräkningar in, i form av textfiler, och konverteras till det binära filformatet HDF5. Dessa data kan komma från beräkningar på kristallstrukturer, elektronstrukturer eller tillståndstäthet.

3.1 Inläsning

Modulen ska kunna läsa in textfiler som innehåller resultatet av beräkningar gjorda i VASP eller Elk. Denna data ska sedan konverteras för att ytterligare kunna behandlas i Inviwo.

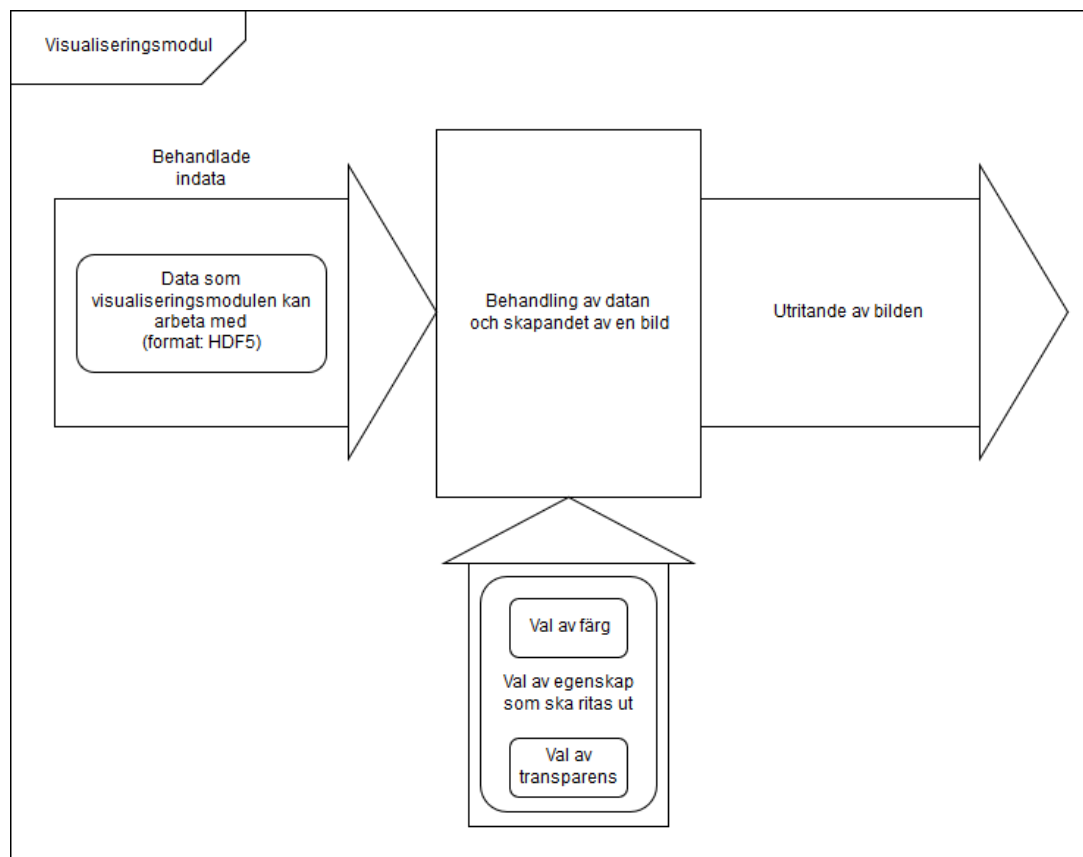
Filerna som läses in kan vara för stora för att rymmas i datorns primärminne. I sådana fall måste de hanteras genom att den relevanta datan strömmas från disk eller att ett subset av datan väljas ut och visualiseringen begränsas till att bara rita ut en del av modellen i taget.

3.2 Konvertering

Data ska läsas in och konverteras till HDF5-datastrukturer som tack vare tidigare års arbete redan finns tillgängliga.

4 Delsystem visualisering

Figur 3 beskriver hur delsystemet för visualisering är uppbyggt. Behandlad data skickas in, vilket i figur 3 representeras av en stor pil. Dessutom skickas användarindata in vilket också beskrivs med en stor pil, användarindata består av val av färg, val av egenskap som ska ritas ut, val av transparens etc. Dessa behandlas sedan i visualiseringsmodulen som skapar en bild utifrån dem. Den utritade bilden skickas sedan ut från modulen.



Figur 3: Skiss av visualiseringsmodulen

I detta delsystem visualiseras den behandlade datan. Visualiseringsdelsystemet består av flera moduler för olika typer av visualisering, exempelvis visualisering av:

- total tillståndstäthet
- Fermi-ytor

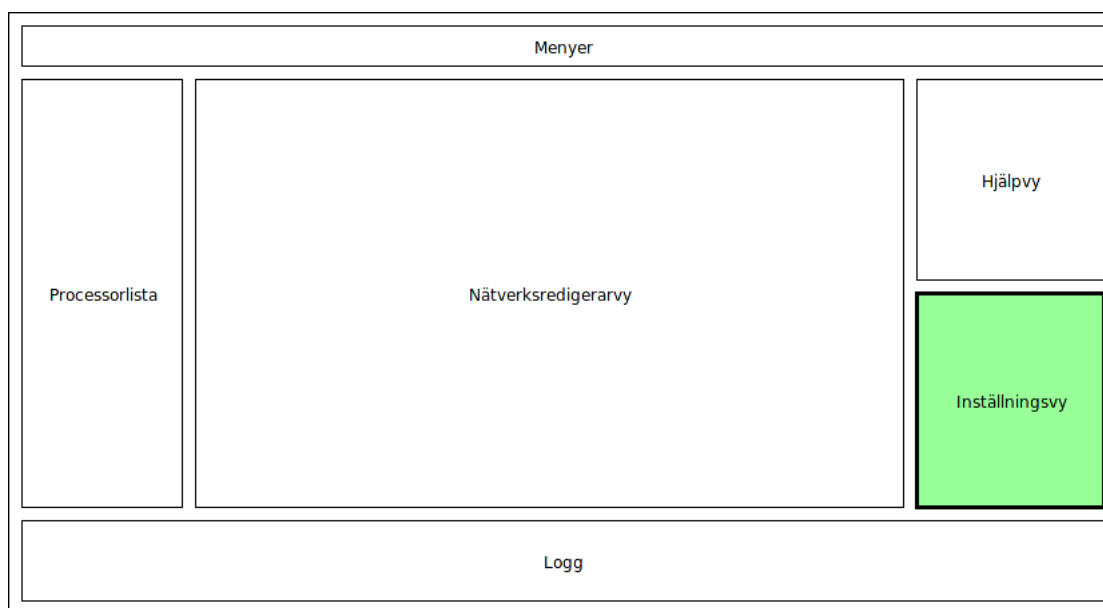
För att visualisera vissa typer av egenskaper kommer kristallstrukturer behöva visualiseras. Kristallerna ritas upp genom att de enskilda atomerna i en enhetscell visualiseras som en liten sfär. Samtliga visualiseringsmoduler implementeras i Inviwo.

4.1 HDF5-inläsning

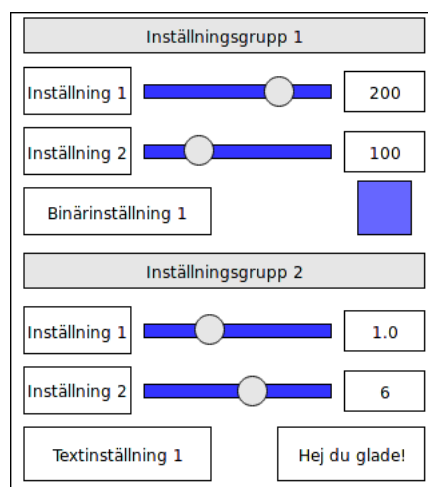
Systemet ska läsa in data på HDF5-format som skickats ut av datakonverteringsmodulen. I Inviwo version 0.9.9 finns en modul som kan importera data i HDF5-format [2], detta kan vara ett möjligt sätt att utföra HDF5-inläsning.

4.2 Användarindata

Användaren ska kunna bestämma vilka egenskaper som ska visualiseras. Detta görs genom enkla funktionsanrop eller genom val i ett användargränssnitt.



Figur 4: Skiss av användargränssnittet i Inviwo.



Figur 5: Skiss av inställningsvyn i Inviwo.

Figur 4 är en skiss över användargränssnittet för Inviwo. Den fetmarkerade rutan med grön bakgrund är vyn där inställningar görs. I Figur 5 är inställningsvyn skissad mer detaljerat. Numeriska värden kan ställas in genom direkt inmatning i värderutorna till höger, eller genom dragreglagen. En binär inställning ställs in genom att rutan för inställningen antingen klickas så att den är ifylld, inställningen på, eller så att den är tom, inställningen av. Slutligen har vi textinställningar som ställs in genom att texten skrivs in direkt i värderutan.

4.3 Utritning

Systemet ska rita ut bilder utefter den behandlade datan. Utritningen skall ge en visualisering av den egenskap som modulen behandlar och kan till exempel vara en volymrendering eller en vanlig 2D-graf, beroende på vilket som är mest lättolkat.

Utritningen görs via Inviwos inbyggda funktionalitet för att rendera via OpenGL. Grafisk behandling görs också med Inviwo och OpenGL, där möjligheten finns att både använda färdig funktionalitet och att utveckla nya renderingsfunktioner.

4.4 Interaktivitet

Användaren ska kunna modifiera visualiseringen genom att reglera ett intervall av värden för någon egenskap, där full transparens fås för alla värden inom intervallet, rotera 3D-bilder etc.

Ny användarindata, som skickas in efter att den första bilden har ritats upp, skickas tillbaka till visualiseringsmodulen för att utföra en ny rendering.

Referenser

- [1] The HDF Group, (2017). *What is HDF5?* [online] Tillgänglig på: <https://support.hdfgroup.org/HDF5/whatishdf5.html> [Hämtad 2018-02-08].
- [2] Inviwo, (2017). *Inviwo 0.9.9 Released* [online] Tillgänglig på: <http://www.inviwo.org/2017/10/04/inviwo-0-9-9-released/> [Hämtad 2018-02-07].

E Tidsplan

[illegible]

I Systemskiss

Systemskiss

Redaktör: Andreas Kempe

Version 0.3

Status

Granskad	Viktor Bernholtz	2018-02-09
Godkänd		

PROJEKTIDENTITET

2018/VT, Grupp 2
Linköpings Tekniska Högskola, IFM

Gruppdeltagare

Namn	Ansvar	Telefon	E-post
Anders Rehult	Projektledare (PL)	076-3161206	andre449@student.liu.se
Marian Brännvall	Dokumentansvarig (DOK)	070-7280044	marbr639@student.liu.se
Andreas Kempe	Sekreterare (SE)	073-9796689	andke133@student.liu.se
Viktor Bernholtz	Viktor Bernholtz (VB)	073-0386030	vikbe253@student.liu.se

Kund: IFM, Linköpings universitet, 581 83 Linköping

Kontaktperson hos kund: Rickard Armiento, 013-281249, rickard.armiento@liu.se

Kursansvarig: Per Sandström, 013-282902, persa@ifm.liu.se

Handledare: Johan Jönsson, 013-281176, johan.jonsson@liu.se

Innehåll

Dokumenthistorik	iv
1 Inledning	1
1.1 Syfte och Mål	1
2 Översikt av systemet	1
2.1 Ingående delsystem	2
3 Delsystem datakonvertering	3
3.1 Inläsning	3
3.2 Konvertering	3
4 Delsystem visualisering	4
4.1 HDF5-inläsning	4
4.2 Användarindata	5
4.3 Utritning	6
4.4 Interaktivitet	6
Referenser	6

Dokumenthistorik

Version	Datum	Utförda förändringar	Utförda av	Granskad
0.1	2018-02-07	Första utkast.	Projektgruppen	VB
0.2	2018-02-08	Andra utkast.	Projektgruppen	AK
0.3	2018-02-09	Tredje utkast.	Projektgruppen	VB

1 Inledning

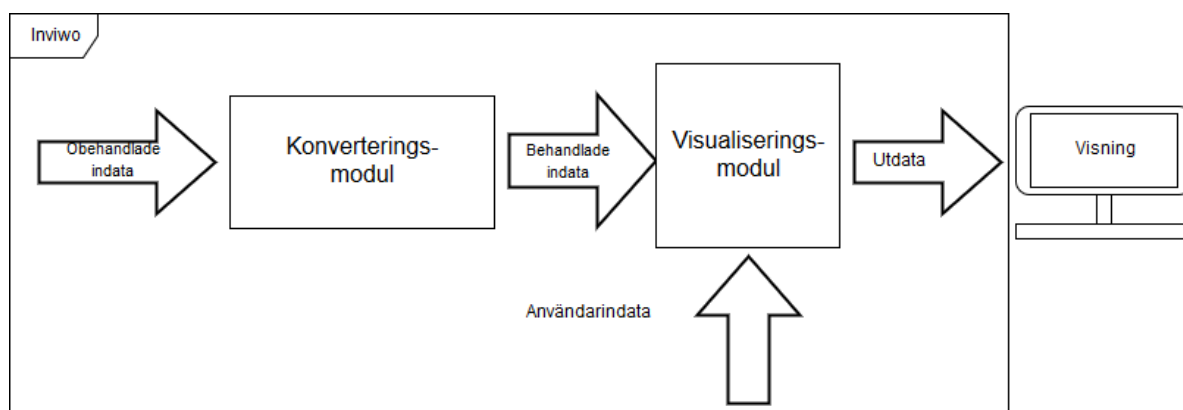
Detta dokument ämnar ge en bild av ett system för visualisering av elektronstrukturdata som erhålles från kvantmekaniska beräkningar. Systemet byggs kring mjukvaran Inviwo som utvecklas av forskargruppen Scientific Visualization vid Linköpings universitet för att underlätta visualisering av olika sorters data.

Projektet utförs för IFM (Institutionen för Fysik, Kemi och Biologi) vid Linköpings universitet som ett kandidatprojekt.

1.1 Syfte och Mål

Projektet skall ta fram mjukvara för visualisering av data från kvantmekaniska kristallstrukturberäkningar. Detta då det är svårt att dra slutsatser utifrån rådata utan verktyg som underlättar i analysen av densamma.

2 Översikt av systemet



Figur 1: Grov skiss av systemet

Systemet som helhet ska ta in data från VASP- och Elk-beräkningar, konvertera detta till HDF5-format och sedan visualisera dessa resultat med hjälp av visualiseringsverktyget Inviwo. Användaren ska kunna välja vad som ska visualiseras och, när bilden renderats, även kunna modifiera den utritade bilden. I Figur 1 visas detta flöde och rutorna representerar en aktivitet i systemet, medan pilarna representerar dataflödet genom systemet.

Systemet ska kunna:

- Läs in data från elektronstrukturberäkningar gjorda i VASP och Elk.
- Konvertera inkommande obehandlad data från textfil till HDF5-format.
- Ta in användarindata som avgör vad som ska visualiseras.
- Visualisera behandlad data utifrån inskickad användarindata.
- Hantera interaktivitet dvs. användaren ska kunna modifiera den renderade bilden i efterhand.

2.1 Ingående delsystem

Systemet består av två övergripande delsystem. Dessa är datakonvertering och visualisering.

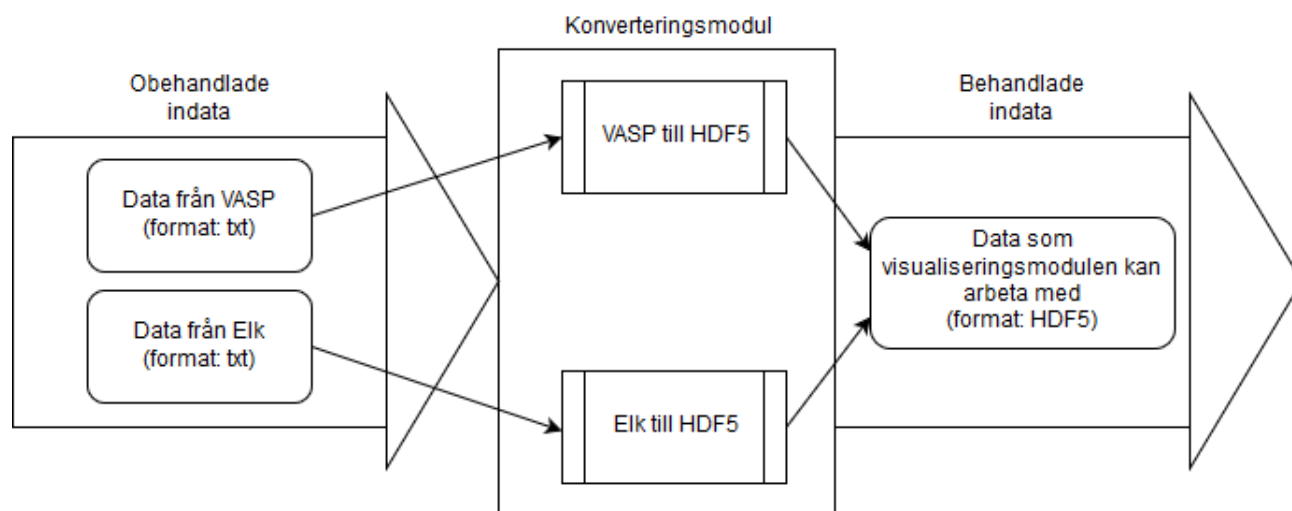
Datakonverteringen hanterar inkommande, obehandlad data och skickar ut data konverterad till HDF5-format. HDF5 är ett dataformat som lämpar sig bättre att hanteras av Inviwo än originaldatan som kommer i textfiler. Detta då det är designat att hantera stora datamängder på ett flexibelt sätt och tillhandahåller programmatiska gränssnitt för interaktion med datan [1].

Visualiseringen skapar en grafisk representation av indatan i form av 3D- eller 2D-grafer som sedan visas för användaren. Modulen tillåter sedan manipulation av bilden i form av rotation, skalning, ändrande av färgläggning och så vidare.

I avsnitten för datakonvertering och visualisering beskrivs delsystemen och deras funktioner mer ingående.

3 Delsystem datakonvertering

Figur 2 beskriver hur delsystemet för datakonvertering är uppbyggt. Obehandlad indata representeras av en stor pil och rutorna inuti pilen representerar textfiler med data från beräkningar gjorda i beräkningsprogrammen VASP och Elk. Konverteringsmodulen representeras av en ruta i mitten och rutorna inuti är konverteringen för data från respektive beräkningsprogram. Slutligen skickas konverterad data ut vilket representeras av en stor pil.



Figur 2: Skiss av datakonverteringsmodulen

I detta delsystem läses resultat från VASP- eller Elk-beräkningar in, i form av textfiler, och konverteras till det binära filformatet HDF5. Dessa data kan komma från beräkningar på kristallstrukturer, elektronstrukturer eller tillståndstäthet.

3.1 Inläsning

Modulen ska kunna läsa in textfiler som innehåller resultatet av beräkningar gjorda i VASP eller Elk. Denna data ska sedan konverteras för att ytterligare kunna behandlas i Inviwo.

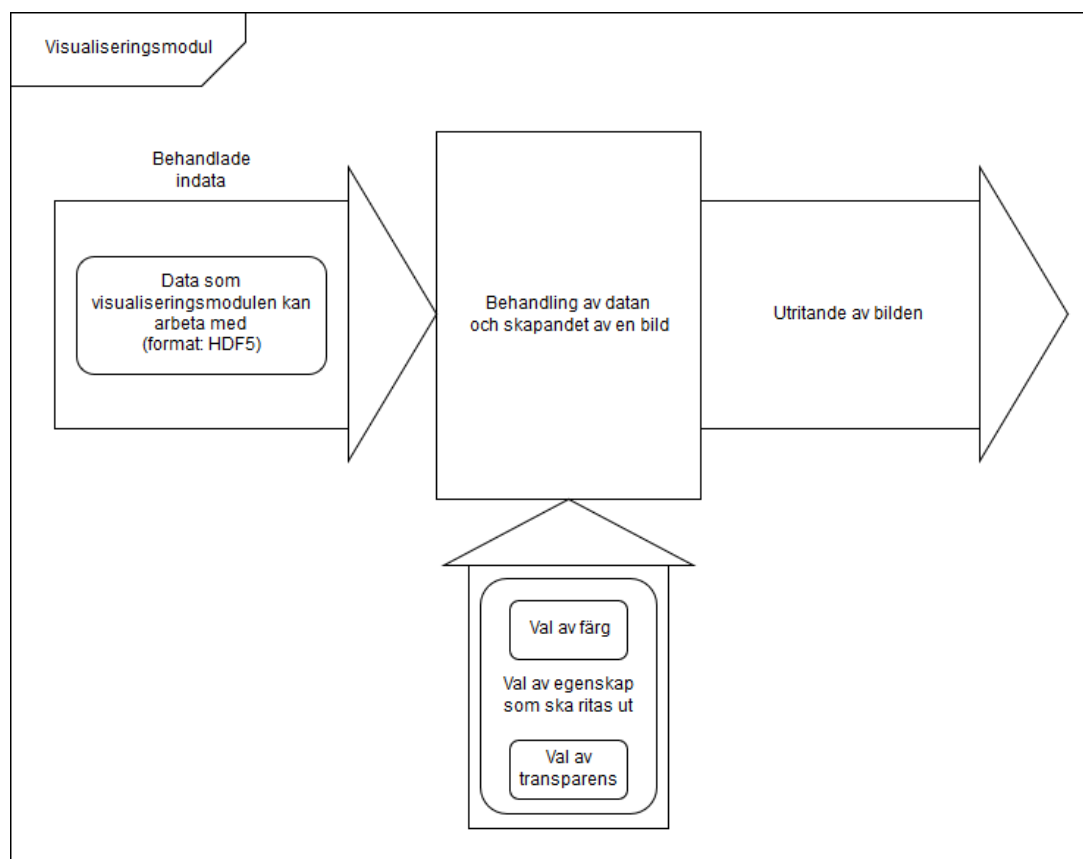
Filerna som läses in kan vara för stora för att rymmas i datorns primärminne. I sådana fall måste de hanteras genom att den relevanta datan strömmas från disk eller att ett subset av datan väljas ut och visualiseringen begränsas till att bara rita ut en del av modellen i taget.

3.2 Konvertering

Data ska läsas in och konverteras till HDF5-datastrukturer som tack vare tidigare års arbete redan finns tillgängliga.

4 Delsystem visualisering

Figur 3 beskriver hur delsystemet för visualisering är uppbyggt. Behandlad data skickas in, vilket i figur 3 representeras av en stor pil. Dessutom skickas användarindata in vilket också beskrivs med en stor pil, användarindata består av val av färg, val av egenskap som ska ritas ut, val av transparens etc. Dessa behandlas sedan i visualiseringsmodulen som skapar en bild utifrån dem. Den utritade bilden skickas sedan ut från modulen.



Figur 3: Skiss av visualiseringsmodulen

I detta delsystem visualiseras den behandlade datan. Visualiseringsdelsystemet består av flera moduler för olika typer av visualisering, exempelvis visualisering av:

- total tillståndstäthet
- Fermi-ytor

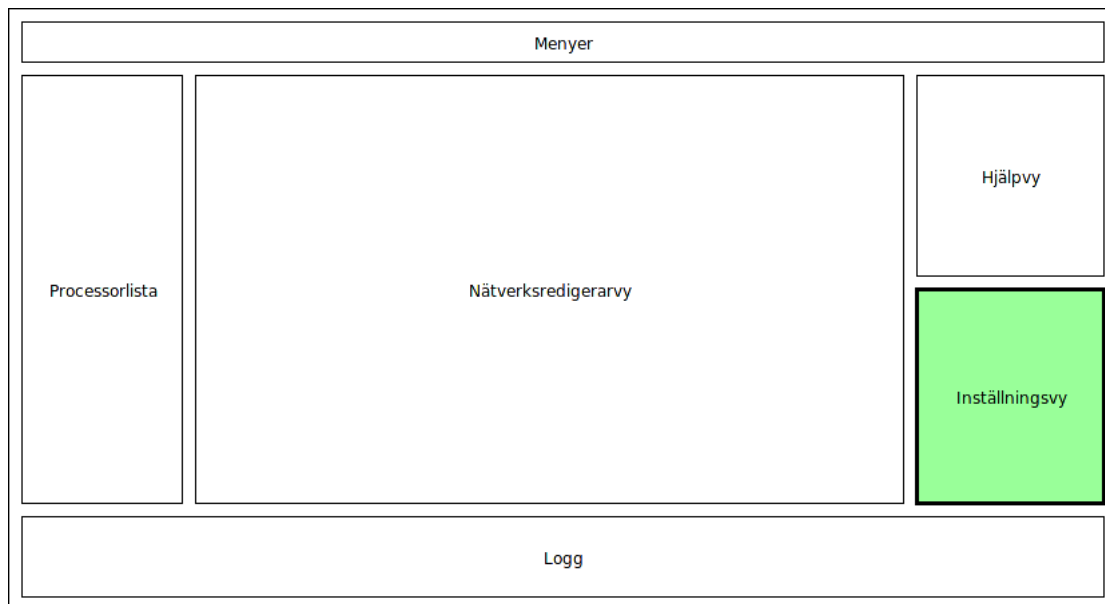
För att visualisera vissa typer av egenskaper kommer kristallstrukturer behöva visualiseras. Kristallerna ritas upp genom att de enskilda atomerna i en enhetscell visualiseras som en liten sfär. Samtliga visualiseringsmoduler implementeras i Inviwo.

4.1 HDF5-inläsning

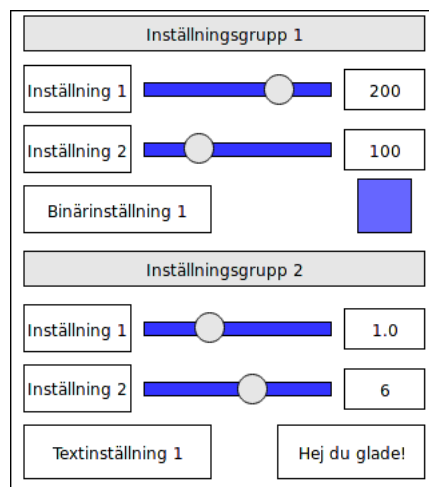
Systemet ska läsa in data på HDF5-format som skickats ut av datakonverteringsmodulen. I Inviwo version 0.9.9 finns en modul som kan importera data i HDF5-format [2], detta kan vara ett möjligt sätt att utföra HDF5-inläsning.

4.2 Användarindata

Användaren ska kunna bestämma vilka egenskaper som ska visualiseras. Detta görs genom enkla funktionsanrop eller genom val i ett användargränssnitt.



Figur 4: Skiss av användargränssnittet i Inviwo.



Figur 5: Skiss av inställningsvyn i Inviwo.

Figur 4 är en skiss över användargränssnittet för Inviwo. Den fetmarkerade rutan med grön bakgrund är vyn där inställningar görs. I Figur 5 är inställningsvyn skissad mer detaljerat. Numeriska värden kan ställas in genom direkt inmatning i värderutorna till höger, eller genom dragreglagen. En binär inställning ställs in genom att rutan för inställningen antingen klickas så att den är ifylld, inställningen på, eller så att den är tom, inställningen av. Slutligen har vi textinställningar som ställs in genom att texten skrivs in direkt i värderutan.

4.3 Utritning

Systemet ska rita ut bilder utefter den behandlade datan. Utritningen skall ge en visualisering av den egenskap som modulen behandlar och kan till exempel vara en volymrendering eller en vanlig 2D-graf, beroende på vilket som är mest lättolkat.

Utritningen görs via Inviwos inbyggda funktionalitet för att rendera via OpenGL. Grafisk behandling görs också med Inviwo och OpenGL, där möjligheten finns att både använda färdig funktionalitet och att utveckla nya renderingsfunktioner.

4.4 Interaktivitet

Användaren ska kunna modifiera visualiseringen genom att reglera ett intervall av värden för någon egenskap, där full transparens fås för alla värden inom intervallet, rotera 3D-bilder etc.

Ny användarindata, som skickas in efter att den första bilden har ritats upp, skickas tillbaka till visualiseringsmodulen för att utföra en ny rendering.

Referenser

- [1] The HDF Group, (2017). *What is HDF5?* [online] Tillgänglig på: <https://support.hdfgroup.org/HDF5/whatishdf5.html> [Hämtad 2018-02-08].
- [2] Inviwo, (2017). *Inviwo 0.9.9 Released* [online] Tillgänglig på: <http://www.inviwo.org/2017/10/04/inviwo-0-9-9-released/> [Hämtad 2018-02-07].

Basplan

Projekt:

Projektgrupp:	Visualisering av elektronstrukturer
Beställare:	Rickard Armiento
Kurs:	TEYA75

Datum: 2018-01-16
Version: 0.3
Utfärdare: PG

Granskad:
Marian Brännvall

AKTIVITETER		TID	VEM	TIDPLAN (när), veckonummer																													
Nr	Beskrivning	timmar	Initialer	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30							
1	Skriva designspecifikation.	70		50	20																												
2	Skriva slutrapport/kappa.	30													30																		
3	Skriva teknisk dokumentation.	60									12	6	20	18	4																		
4	Göra en efterstudie.	8															8																
5	Renskrivning av protokoll.	8			1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1														
6	Skriva en användarmanual.	12														12																	
7	Projektmöten	32		2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2														
8	Beslutspunkt 3.	4				4																											
9	Beslutspunkt 4.	4									4																						
10	Beslutspunkt 5.	8																8															
11																																	
12																																	
13																																	
14																																	
15																																	
16																																	
17																																	
18																																	
19																																	
20																																	
21																																	
22																																	
23																																	
24																																	
25																																	
26																																	
27																																	
28																																	
29																																	
30	Slutpresentation	20															20																
31	Oppnering	20															20																
32	Förstå utdata från VASP-beräkningar: kristallstruktur	8			8																												
33	Förstå utdata från VASP-beräkningar: elektrontäthet	8									8																						
34	Förstå utdata från VASP-beräkningar: tillståndstäthet	8					8																										
35	Förstå utdata från VASP-beräkningar: Fermi-ylor	8										8																					
36	Konvertera VASP-data, kristallstruktur	16			8	8																											
37	Konvertera VASP-data, elektrontäthet	16									8	8																					
38	Konvertera VASP-data, tillståndstäthet	16						8	8																								
39	Konvertera VASP-data, Fermi-ylor	16											8	8																			
40	Konvertera data från Elk-beräkningar till HDF5-format	12													12																		
41	Grundläggande förståelse för Inviwo	16			8	8																											
42	Grundläggande visualisering av väteatom	4				4																											
43	Transparensinställning för väteatom	2				2																											
44	Färginställning för väteatom	2				2																											
45	Rotera 3D-grafer	2				2																											
46	Visualisera kristallstrukturer	20					10	10																									
47	Välja elektrontäthetsvisualiseringsätt	8									8																						
48	Visualisera elektrontäthet	16										8	8																				
49	Transparensinställning, brytpunkt och intervall	4										4																					
50	Fler färginställningar	4											4																				
51	Sätta sig in i tillståndstäthet	8						8					4																				
52	Visualisera tillståndstäthet	32						16			16																						
53	Välja visualiseringsätt för Fermi-ylor	8											8																				
54	Visualisera Fermi-ylor	80											14	32	10	24																	
55	Manuellt test av konvertering från VASP-data till HDF5	2														2																	
56	Manuellt test av konvertering från Elk-data till HDF5	2															2																
57	Manuellt test av visualisering av väteatomkärna	2				2																											
58	Manuellt test av visualisering av kristallstruktur	2						2																									
59	Manuellt test av visualisering av elektrontäthet	2												2																			
60	Manuellt test av visualisering av tillståndstäthet	2									2																						
61	Manuellt test av visualisering av Fermi-ylor	2																2															
62	Kodstädning	24														8	16																
63	Skriva beskrivningar av processorer och python-moduler	8														8																	
64	Förståelse av legacy-kod	40			20	20																											
65	Uppdatering av legacy-kod	80						16	16		16	16	16																				
66	Skriva fördjupningsarbete																																
MILSTÖLPAR																																	
1	Designspecifikation klar																																
2	Konvertera VASP-data kristallstrukturer																																
3	Konvertera VASP-data elektrontäthet																																
4	Konvertera VASP-data tillståndstäthet																																
5	Konvertera VASP-data Fermi-ylor																																
6	Konvertera Elk-data																																
7	Visualisera väteatomkärna																																
8	Visualisera kristallstrukturer																																
9	Visualisera tillståndstäthet																																
10	Färg-och transparensinställningar, kristallstrukturer																																
11	Färg-och transparensinställningar, elektrontäthet																																
12	Färg-och transparensinställningar, tillståndstäthet																																
13	Färg-och transparensinställningar, Fermi-ylor																																
14	Visualisera elektrontäthet																																
15	Visualiera Fermi-ylor																																
Summa antal timmar:			756			53	67	55	2,5	53	55	2,5	77	65	81	67	63	57	51	11	2,5	0	0	0	0	0	0						

Tidsbuffert:

244

K Teknisk dokumentation