

Systemskiss

Redaktör: Andreas Kempe

Version 1.0

Status

Granskad	Viktor Bernholtz	2018-02-16
Godkänd	Johan Jönsson	2018-02-20

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
1.0	2018-02-16	Godkänd version.	Projektgruppen	VB

1 Inledning

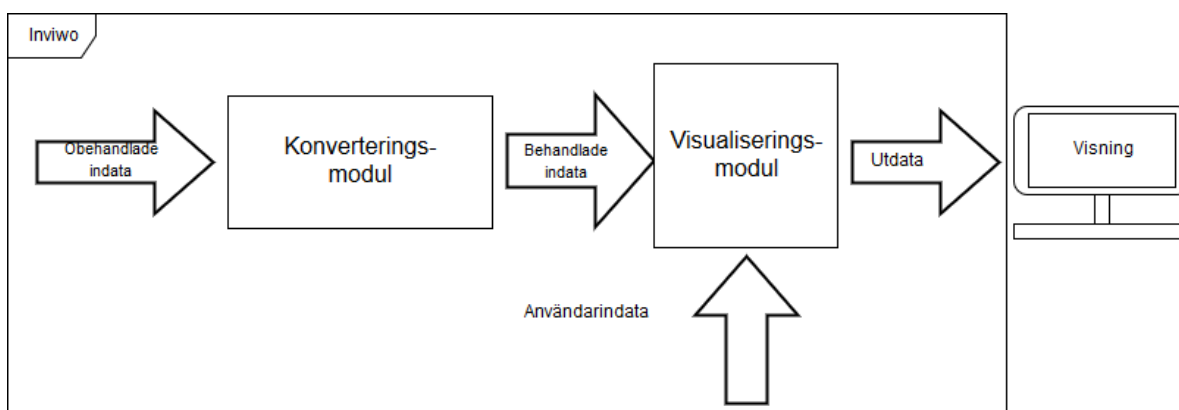
Detta dokument ämnar ge en bild av ett system för visualisering av elektronstrukturdata som erhålles från kvantmekaniska beräkningar. Systemet byggs kring mjukvaran Inviwo som utvecklas av forskargruppen Scientific Visualization vid Linköpings universitet för att underlätta visualisering av olika sorters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

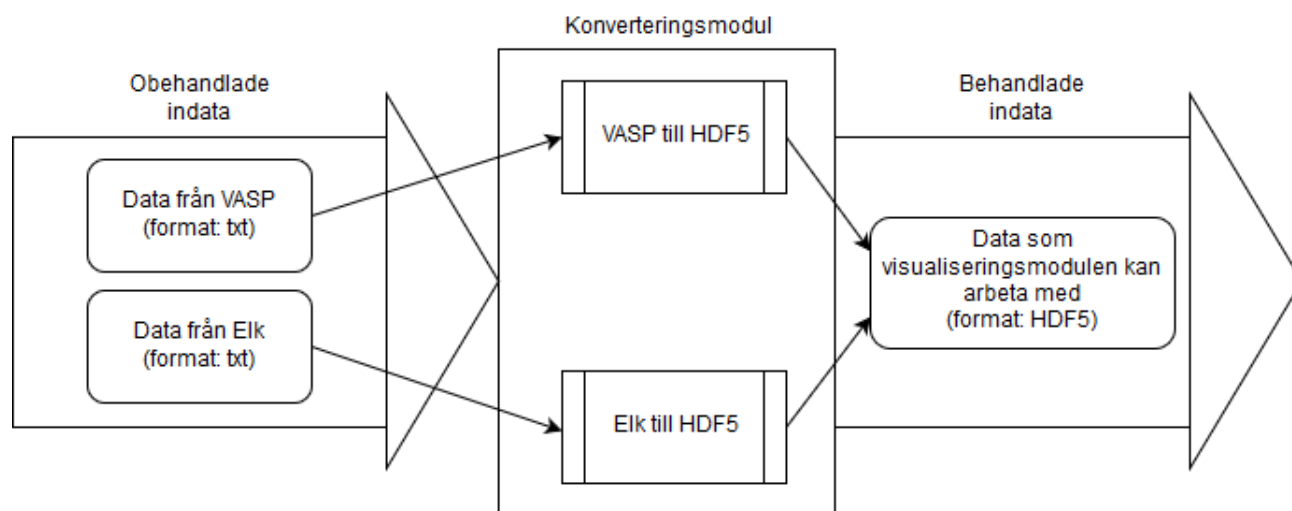
Datakonverteringen hanterar inkommande, obehandlad data och skickar ut data konverterad till HDF5-format. HDF5 är ett dataformat som lämpar sig bättre att hanteras av Inviwo än originaldatan som kommer i textfiler. Detta då det är designat att hantera stora datamängder på ett flexibelt sätt och tillhandahåller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

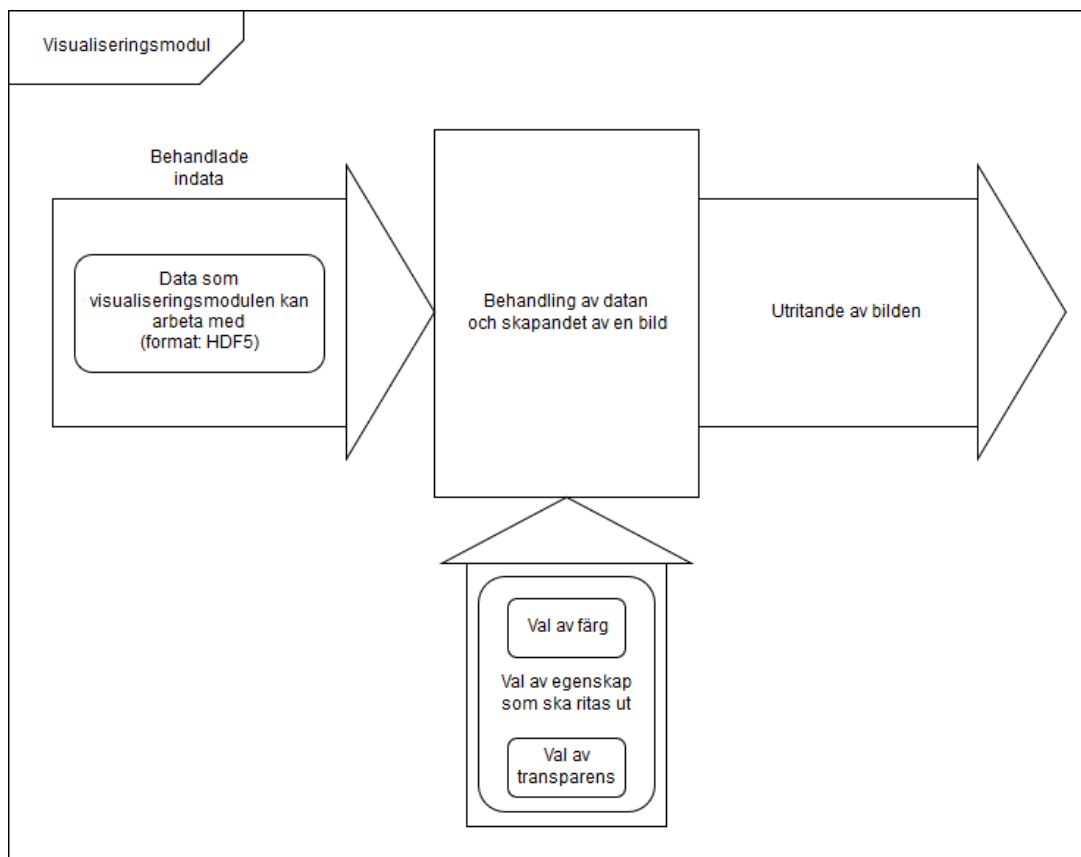
Filerna som läses in kan vara för stora för att rymmas i datorns primärminne. I sådana fall måste de hanteras genom att den relevanta datan strömmas från disk eller att ett subset av datan väljas ut och visualiseringen begränsas till att bara rita ut en del av modellen i taget.

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-yltor

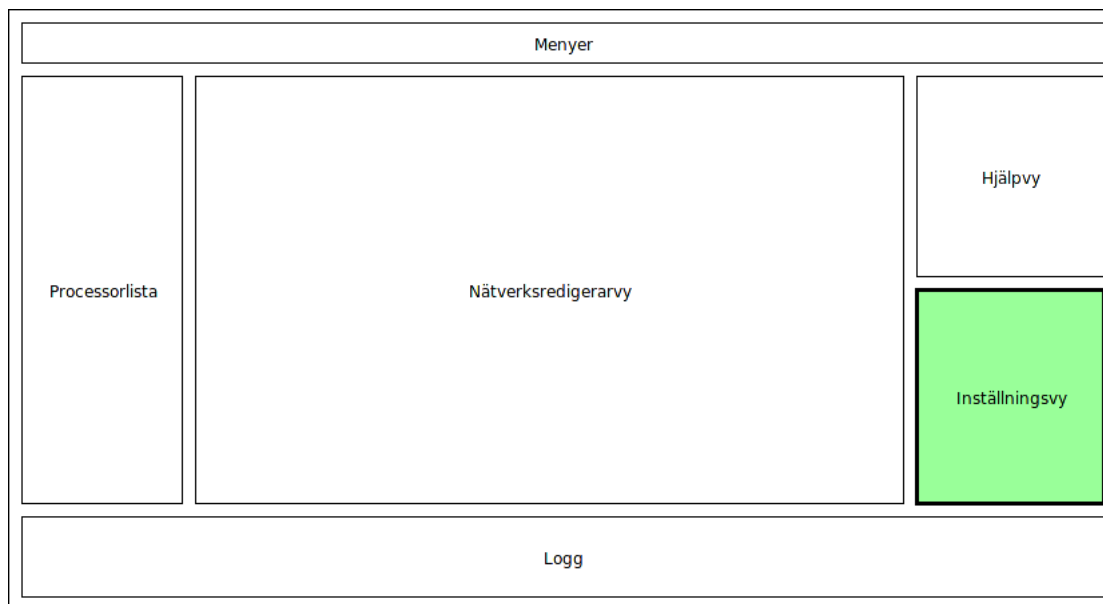
För att visualisera vissa typer av egenskaper kommer kristallstrukturer behöva visualiseras. Kristallerna ritas upp genom att de enskilda atomerna i en enhetscell visualiseras som en liten sfär. Samtliga visualiseringsmoduler implementeras i Inviwo.

4.1 HDF5-inläsning

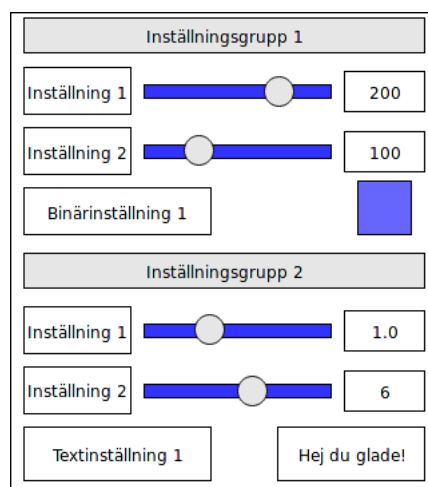
Systemet ska läsa in data på HDF5-format som skickats ut av datakonverteringsmodulen. I Inviwo version 0.9.9 finns en modul som kan importera data i HDF5-format [2], detta kan vara ett möjligt sätt att utföra HDF5-inläsning.

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].