

# 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

<b>Dokumenthistorik</b>	<b>iv</b>
<b>1 Inledning</b>	<b>1</b>
1.1 Parter . . . . .	1
1.2 Syfte och Mål . . . . .	1
1.3 Användning . . . . .	1
1.4 Bakgrundsinformation . . . . .	1
1.5 Definitioner . . . . .	2
<b>2 Utförande</b>	<b>3</b>
<b>3 Översikt av systemet</b>	<b>4</b>
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
<b>4 Delsystem - Datakonvertering</b>	<b>8</b>
<b>5 Delsystem - Datahantering</b>	<b>9</b>
<b>6 Delsystem - Visualisering</b>	<b>10</b>
<b>7 Krav på vidareutveckling</b>	<b>11</b>
<b>8 Ekonomi</b>	<b>12</b>
<b>9 Leveranskrav och delleranser</b>	<b>13</b>
<b>10 Dokumentation</b>	<b>14</b>
<b>11 Utbildning</b>	<b>15</b>
<b>Referenser</b>	<b>15</b>

## 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.

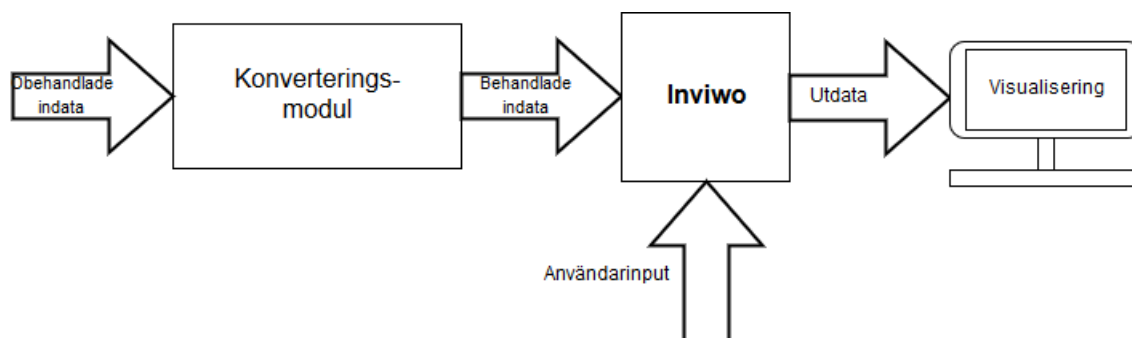
**API** (Application Programming Interface) är en specifikation av hur olika applikationer kan använda och kommunicera med en specifik programvara. Detta utgörs oftast av ett dynamiskt länkat bibliotek.

## 2 Utförande

Här listas krav för utförandet av projektet.

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

### 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.

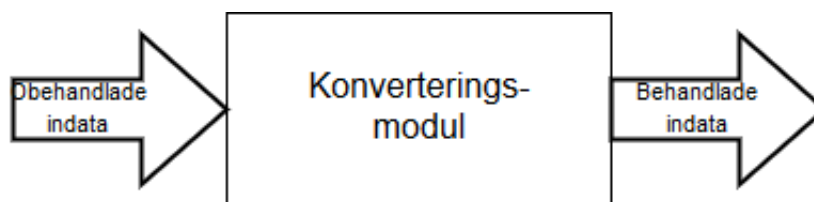
### 3.7 Generella krav på hela systemet

Här listas krav för det generella systemet.

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

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

## 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.

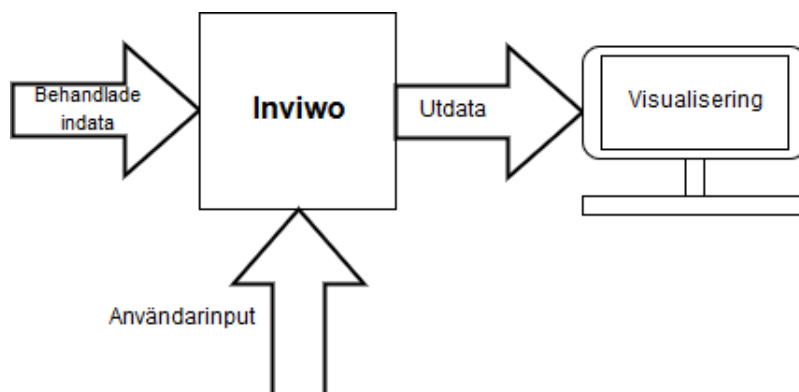
<b>Krav nr 24</b>	<b>Original</b>	Systemet ska kunna läsa in resultat från VASP.	<b>Ska</b>
<b>Krav nr 25</b>	<b>Original</b>	Systemet ska kunna konvertera data från kristallstrukturberäkningar.	<b>Ska</b>
<b>Krav nr 26</b>	<b>Original</b>	Systemet ska kunna konvertera data från elektronstrukturberäkningar.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

## 5 Delsystem - Datahantering

Här listas krav för hur systemet ska kunna hantera data.

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

## 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.

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

## 7 Krav på vidareutveckling

Här listas krav för hur systemet ska kunna vidareutvecklas.

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

## 8 Ekonomi

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

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



## 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.

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

## 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.

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

## 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.