Goedemorgen en welkom iedereen, alvast bedankt om aanwezig te zijn en bedankt voor jullie interesse.

Er zijn veel mensen die, net als ik, de wens hebben enkele centimeters groter te zijn.  
Maar stel u eens voor dat je kleiner zou zijn, niet enkele centimeters, maar enkele tientallen miljarden keer.

Enkel dan zouden we pas echt de schoonheid van de wereld rondom ons kunnen appreciëren. En enkel dan zouden we kunnen ‘Wandelen door kristallen’.

Mijn naam is Jarrit Boons en vandaag geef ik een eerste inkijk in mijn masterproef ‘Wandelen door kristallen, Blender als kristallografische visualisatietool’.

Ik zal eerst een overzicht geven van wat ik hier zal bespreken.

Eerste deel   
Situering, nut en doelstellingen van dit onderzoek en mijn aanpak

Tweede deel  
Overlopen van theorie en technologieën waarop het gebaseerd is

Derde deel  
Vordering van het onderzoek

Laatste deel  
Dingen die me nog te wachten staan het komende semester en mijn planning hiervoor

Met dit overzicht in het achterhoofd kunnen we overgaan naar het eerste deel van de presentatie: de situering

Dit onderzoek valt in feite onder 2 wetenschappelijke takken, De wetenschap van de kristallografie enerzijds en anderzijds ICT. Dit plusje stel ik voor die pocahontasgewijs de twee tracht te verzoenen.

Er bestaan natuurlijk al softwarepakketten die de mogelijkheid bieden om kristallen te visualiseren, hiervan is VESTA het bekendste voorbeeld. Deze software laat volgende toepassingen toe, andere softwarepakketten bieden, meer, minder maar over het algemeen gelijkaardige features aan.

Blender is een open source, en dus gratis, 3D software met een groot aantal features en toepassingen.   
Het visualiseren van kristallen in dit programma zouden onderzoekers een berg aan nieuwe mogelijkheden geven, waaronder volgende:  
Een duidelijke interface die “on-the-fly” aanpassingen toelaat en naar eigen smaak kan worden aangepast.   
De mogelijkheid van het schrijven van add-ons die meer specifieke functies kunnen hebben.  
De kristallen weergeven in VR om het een meer interactief te maken  
Het komt erop neer dat als je het kan dromen, en programmeren, het mogelijk is in Blender.

Dit groot aanbod aan features brengt echter een groot nadeel met zich mee: voor een onervaren gebruiker is Blender enorm overweldigend en zeer complex. Het werken in blender alleen is al ingewikkeld, maar omdat we natuurlijk niet elk atoom van een kristal met de hand willen tekenen zullen we dus moeten gebruikmaken met de scripting functies van Blender, wat vele malen meer complex is.

Dit leidt tot volgende onderzoeksvragen

…

Met volgende deelvragen

…

Nu we een algemeen idee hebben van wat er moet gebeuren kunnen we kijken naar hoe ik deze doelen ga proberen te bereiken.

Om dit proces te visualiseren heb ik een klassendiagram gemaakt die hopelijk in de loop van deze presentatie meer duidelijk wordt.

We kunnen dit diagram zien als een heel eenvoudige puzzel bestaande uit 3 stukken: de inputdata verkregen vanuit een CIF-file welke ik zo dadelijk bespreek, deze worden vervolgens omgezet in datastructuren welke ten slotte kunnen worden gevisualiseerd in Blender met behulp van de Blender API.

Dit alles is natuurlijk onmogelijk zonder enige voorkennis. De allereerste stap was dan ook te gaan zoeken naar bestaande programma’s en technologieën die me mogelijk kunnen helpen.

Eerst ben ik me meer bekend gaan maken met de wereld van Kristallografie, en herinnerde me al snel waarom ik geen chemie ben gaan studeren. Kristallografie is een erg ingewikkelde wetenschap die onmogelijk op 1 jaar volledig te begrijpen is.

Ik ben dan ook enkel gaan kijken naar de dingen die ik nodig heb voor dit onderzoek.  
Eerst naar hoe kristallen zijn opgebouwd en hoe ze eruit kunnen zien, en dan naar hoe we deze kristallen kunnen beschrijven aan de hand van een tekst, met name het CIF standaardformaat. In dit formaat kan de volledige opbouw van een kristal beschreven worden en is leesbaar voor zowel mens als computer. Het CIF formaat speelt dan ook een cruciale rol in dit onderzoek.

Vervolgens gaan ben ik gaan zoeken naar parsers die vorig besproken CIF- bestanden kan omzetten naar bruikbare data. Hiervoor heb ik twee mogelijke kandidaten gevonden pycifrw die het toelaat CIF bestanden in te lezen, schrijven en aan te passen en cctbx die naast vorige nog een hoop mee functionaliteiten heeft. Deze is echter minder eenvoudig om mee te werken en ben dus voor de eerste gegaan.

Het laatste stuk van onze puzzel, is ook het meest ingewikkelde. Zoals eerder gezegd is blender een open source software, dit maakt dat het constant wordt aangepast en features worden toegevoegd.   
Het schrijven van scripts in Blender doen we met Python3. Gelukkig kunnen we gebruikmaken van de Blender API die een hoop modules en submodules aanbiedt die we nodig zullen hebben om vormen te tekenen en te bewerken. Door het grote aantal aan functies zal ik nuttige functies moeten onderscheiden van diegene die niet van toepassing zijn.

In dit voorlaatste deel bespreek ik snel wat ik reeds heb kunnen verwezenlijken van deze ‘puzzel’.

Hiervoor breng ik weer even onze klassendiagram boven.  
Tot nu toe ben ik staat geweest de eerste twee stukken van de puzzel uit te voeren. Ik kan dus informatie vanuit een CIF file inlezen en deze opdelen in voorgemelde datastructuren.

Dit laat dus nog 1 stuk over wat dan ook mijn doel is voor volgend semester. Indien dit goed verloopt kan ik mij nog meer verdiepen in Blender om te zien welke functionaliteiten kunnen gebruikt worden in het kader van kristallografie.

Ten slotte kan u hier mijn planning zien voor volgend semester, zoals u kan zien is het deel van litteratuurstudie afgerond en dient er enkel nog worden gescript.

Dan wil ik jullie alvast bedanken voor jullie aandacht en mag u vragen te stellen.