

Kontext
○○○
○○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○○○○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Visualisierung von Strukturveränderungen in Molekulardynamikdaten

Bachelorarbeit Verteidigung

Richard Hähne

Institut für Software- und Multimediatechnik

22. September 2015

Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oooooo	ooooo oooo	o o

Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Visualisierung

Ergebnisse

Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oooooo	ooooo oooo	o o

Kontext

Motivation

Anforderungen

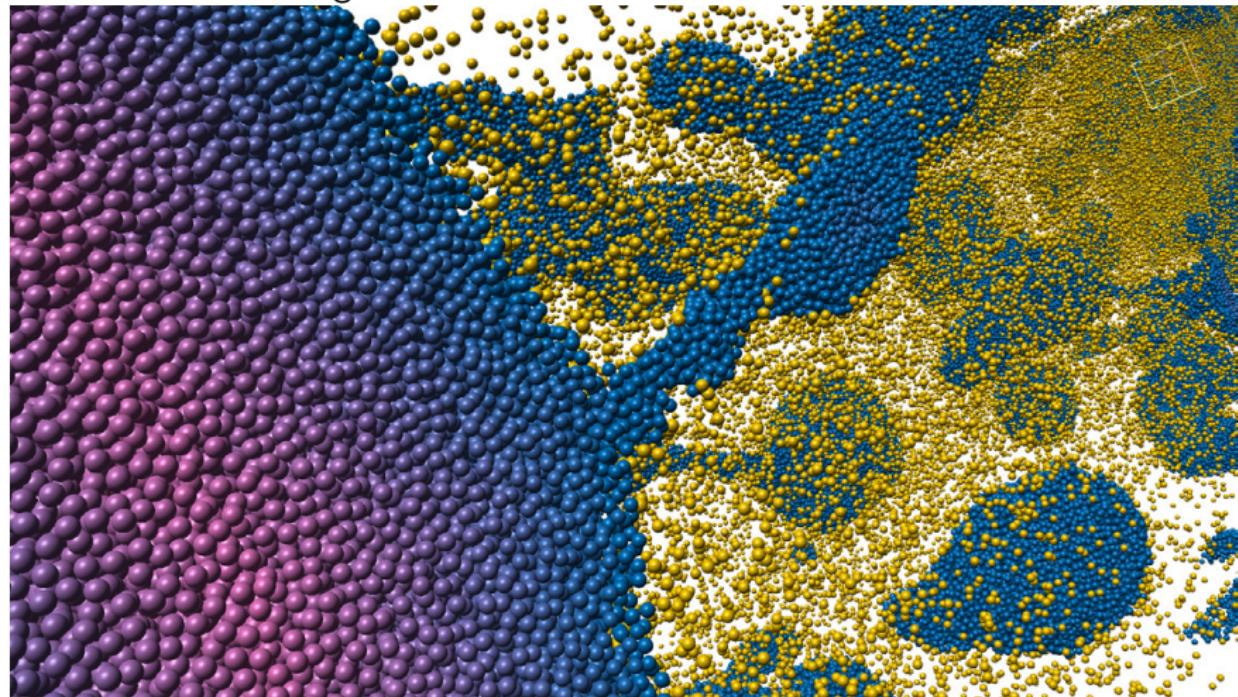
Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

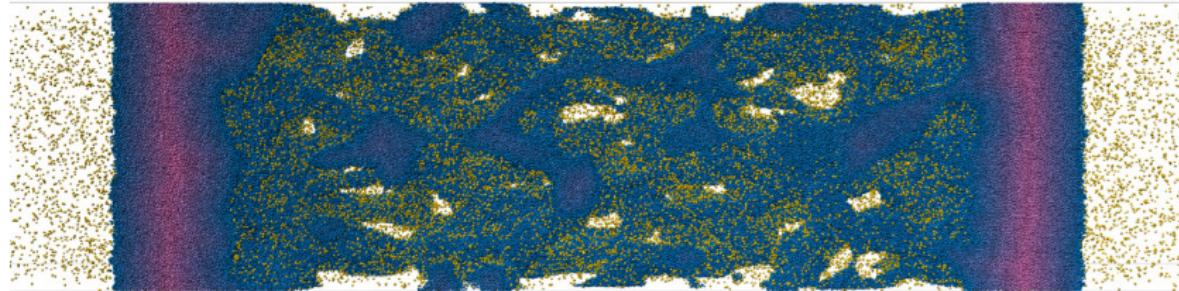
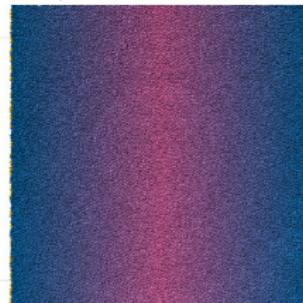
Visualisierung

Ergebnisse

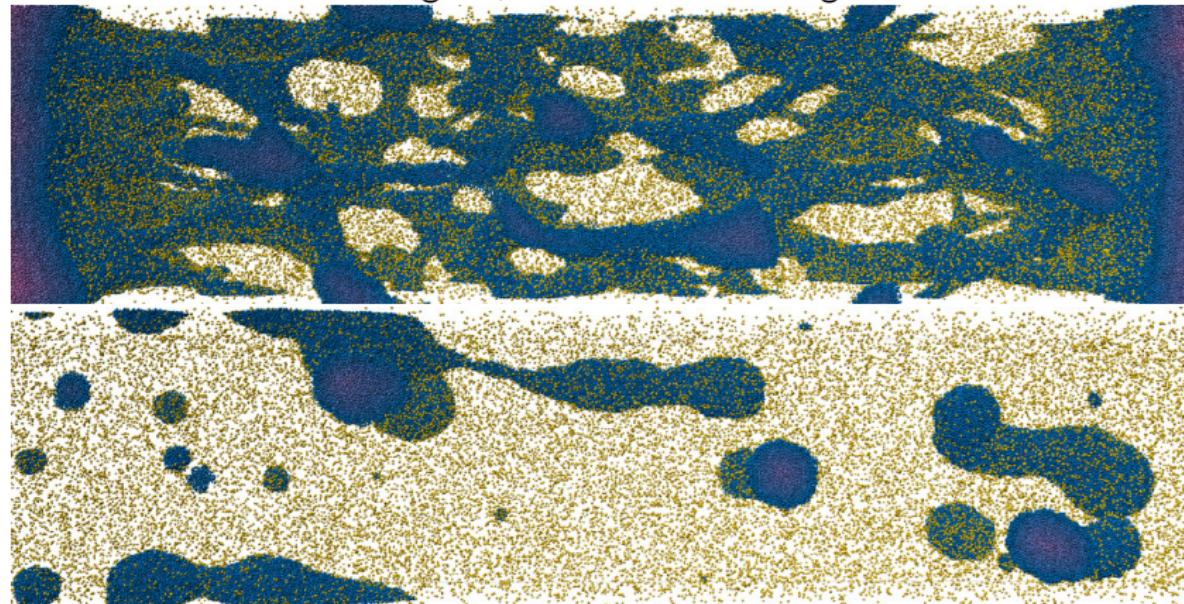
Visuelle Analyse für komplexe, partikelbasierte Daten mit der Darstellung zeitlicher Entwicklungen



Animation eines Flüssigkeitsfilms, der im Vakuum rasch expandiert. Wie verhält sich die Flüssigkeit, welche Strukturereignisse treten auf?



Animation eines Flüssigkeitsfilm, der im Vakuum rasch expandiert.
Wie verhält sich die Flüssigkeit, welche Strukturereignisse treten auf?

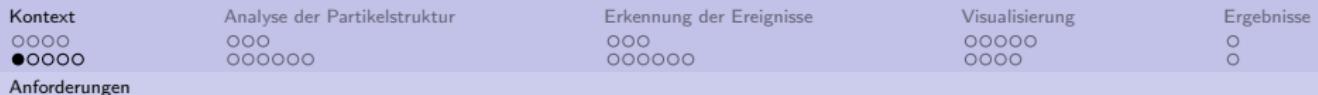


Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
○○○● ○○○○○	○○○ ○○○○○○	○○○ ○○○○○○	○○○○○ ○○○○	○ ○
Motivation				

Die vorliegende Animation ist zur Analyse nur bedingt geeignet:

- ▶ vieles geschieht gleichzeitig: Erfassung schwierig
- ▶ sequentieller Ablauf: quantitativer Vergleich schwierig

Lösung: Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Struktur der Partikel im geometrischen Kontext der Originaldaten.

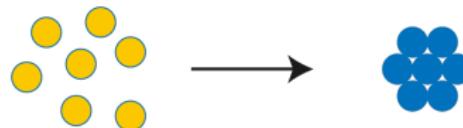


Folgende Schritte sind notwendig

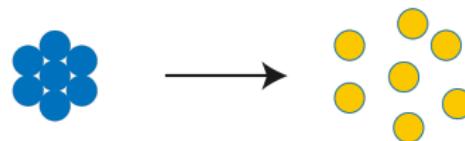
1. Analyse der Partikelstruktur für jeden Zeitschritt
2. Erkennung von Änderungen an der Struktur von einem zum nächsten Zeitschritt (Strukturereignisse)
3. Anzeige dieser Ereignisse im Ortsraum der Partikel

Arten von Strukturereignissen

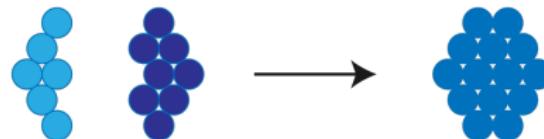
Birth



Death



Merge



Split



Kontext
○○○○
○○●○○

Anforderungen

Analyse der Partikelstruktur
○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○○○○○

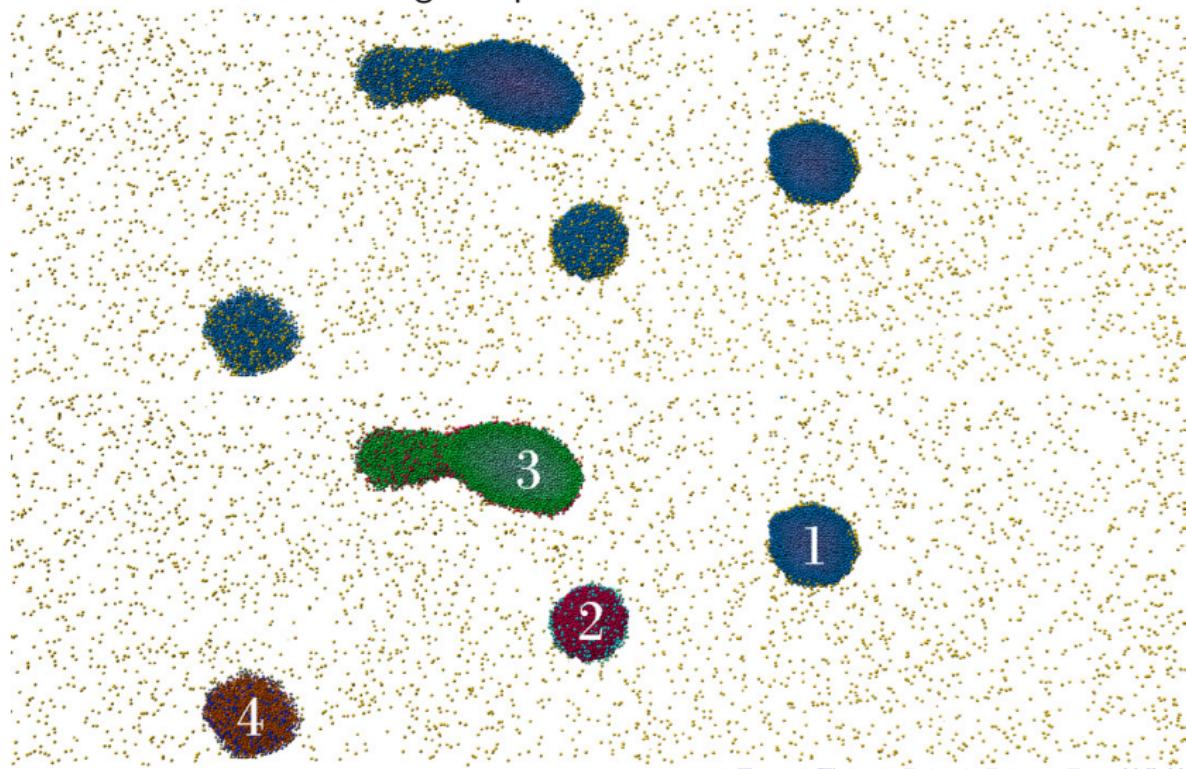
Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

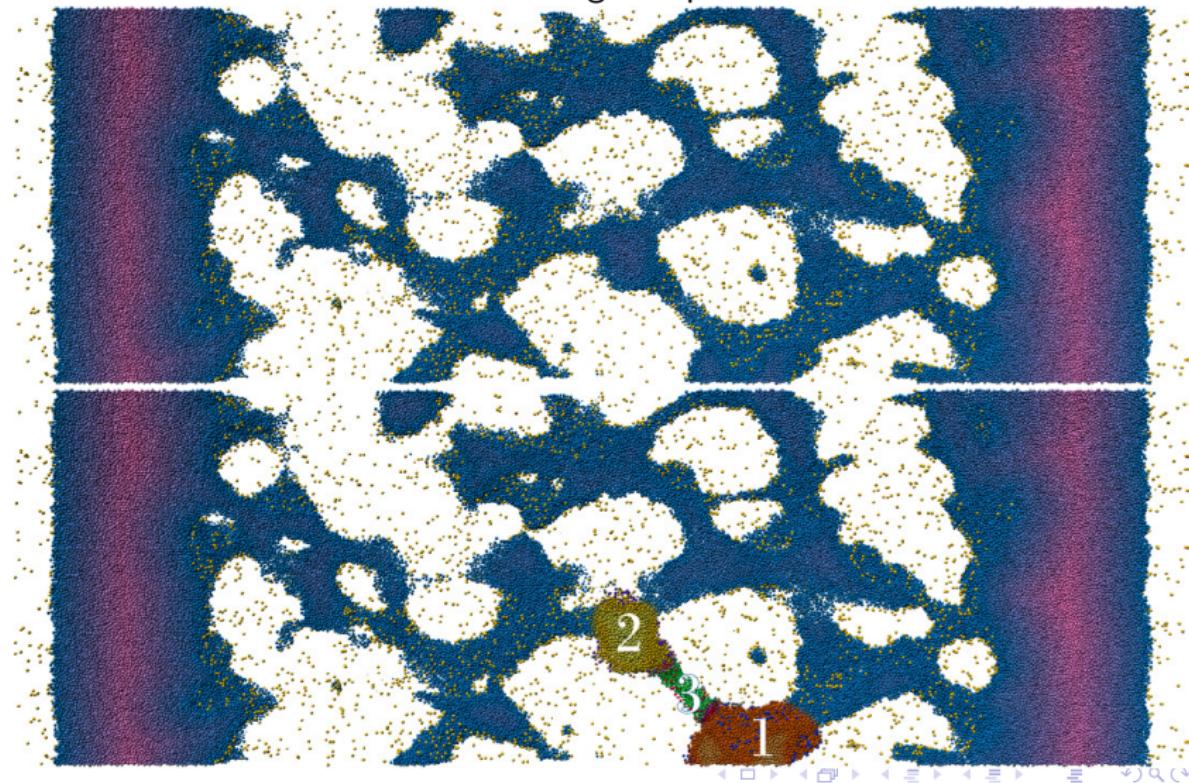
Bedingungen für die Erkennung von Strukturereignissen

- ▶ Einteilung der Partikelmenge in eine Menge von Clustern
- ▶ die Partikel müssen Clustern zugeordnet werden können

Cluster als Zusammenhangskomponenten



Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oooooo	ooooo oooo	o o

Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Datengrundlage

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

Erkennung der Ereignisse

Visualisierung

Ergebnisse

Vorliegende Daten

- ▶ die Partikel sind eine Menge von Elementen mit diskreten Positionen
- ▶ es gibt eine Grenzfläche zwischen Flüssig- und Gasphase, die auf einem Grenzwert in der lokalen Dichte basiert
- ▶ gegeben für jeden Partikel ist der Abstand zur nächsten Grenzfläche (vorzeichenbehaftete Distanzfunktion)

Vorliegende Daten - Tiefenwert

- ▶ jeder Partikel hat einen bestimmten Abstand zum nächsten Randpartikel: Skalarfeld über der Menge von Partikeln (*Tiefenwert*)
- ▶ Partikel mit **negativem** Abstand liegen in der Gasphase
- ▶ Partikel mit **positivem** Abstand liegen in der flüssigen Phase

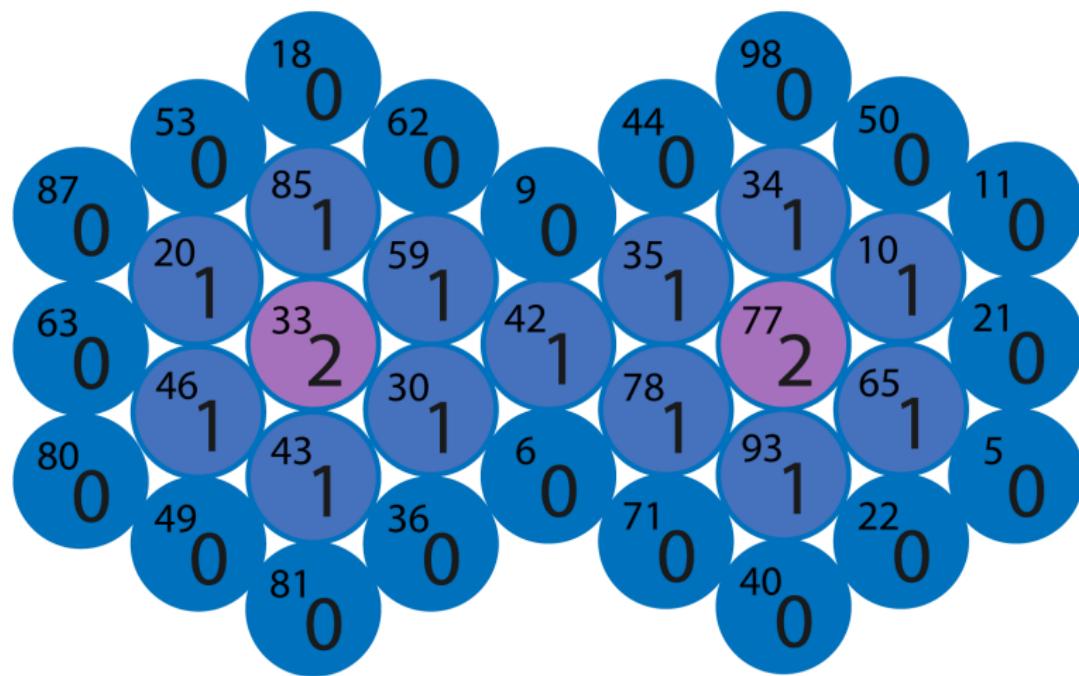
Zusammenhänge zwischen den Partikeln

Für die weiteren Schritte ist eine Kenntnis über die räumliche Nähe der Partikel zueinander notwendig. Zur Bestimmung dieser wird ein *kD-Baum* angewandt mit $k = 3$ für die drei Raumrichtungen.

Die Bestimmung der Nachbarn mit Hilfe dieses Baumes berücksichtigt periodische Randbedingungen.

- ▶ alle Partikel werden sequentiell durchlaufen
- ▶ dabei werden **Gaspartikel** ignoriert und nur Partikel der **Flüssigkeitsphase** betrachtet, die noch keinem Cluster zugeordnet sind
- ▶ ausgehend von einem solchen Partikel werden seine Nachbarn auf ihren *Tiefenwert* hin untersucht
- ▶ der Nachbar mit dem höchsten Wert wird selektiert und es wird wiederum der *Tiefenwert* von dessen Nachbarn betrachtet
- ▶ diese Schleife läuft so lang, bis alle Nachbarn denselben oder einen geringeren *Tiefenwert* aufweisen (**lokales Maximum** erreicht)
- ▶ alle auf dem Weg selektierten Partikel werden anschließend einem (neuen oder vorhandenen) Cluster zugeordnet

Zusammenhangskomponente



Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Visualisierung

Ergebnisse

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

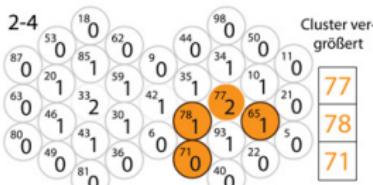
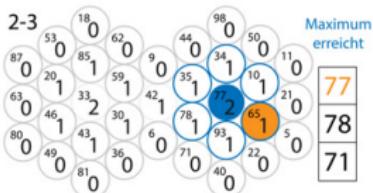
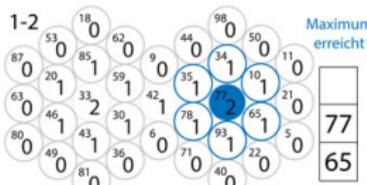
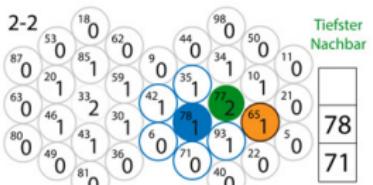
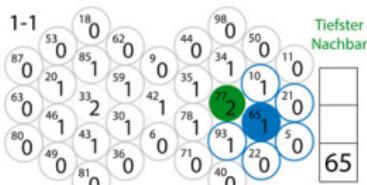
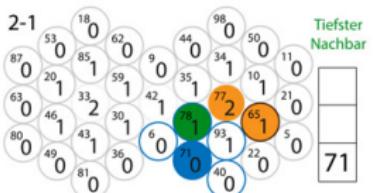
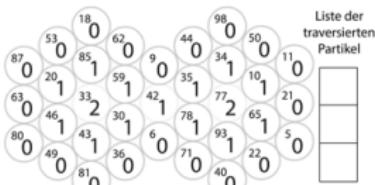
The screenshot shows a 9x9 grid of numbers and symbols. The grid contains the following values:

- Row 1: 1-2, 18, 0, 62, 0, 44, 0, 34, 1
- Row 2: 53, 0, 0, 87, 0, 20, 85, 1
- Row 3: 0, 1, 33, 63, 0, 1, 33, 1
- Row 4: 63, 0, 1, 33, 1, 30, 42, 1
- Row 5: 0, 1, 46, 80, 0, 43, 1, 36, 1
- Row 6: 46, 1, 80, 0, 43, 1, 36, 1, 36, 0
- Row 7: 80, 0, 49, 0, 81, 0, 0, 71, 0
- Row 8: 0, 49, 1, 81, 0, 0, 71, 0, 40, 0
- Row 9: 0, 1, 5, 0, 0, 22, 0, 0, 0, 65

Empty cells are represented by circles. A blue circle highlights the cell at row 5, column 5 (value 1). A red circle highlights the cell at row 6, column 6 (value 1). A green circle highlights the cell at row 7, column 7 (value 0). A yellow circle highlights the cell at row 8, column 8 (value 0). A purple circle highlights the cell at row 9, column 9 (value 0).

Maximum erreicht

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



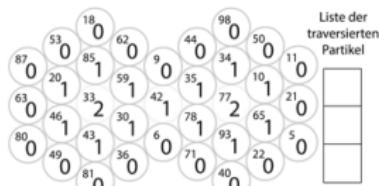
Kontext

○○○○
○○○○○○

Analyse der Partikelstruktur

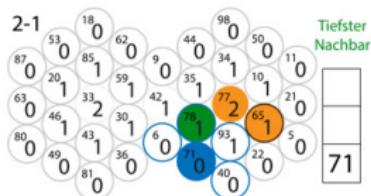
○○○○
○○○○○●○

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



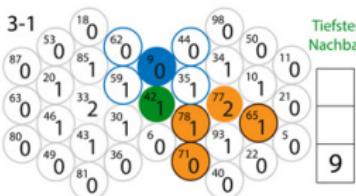
Erkennung der Ereignisse

○○○○
○○○○○○



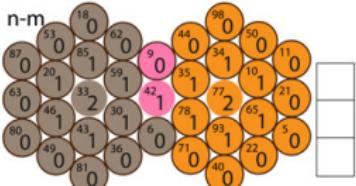
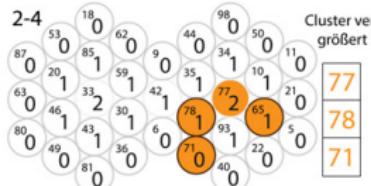
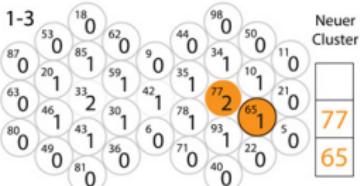
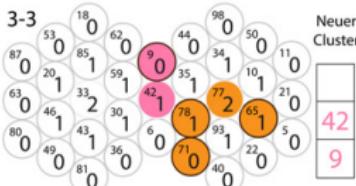
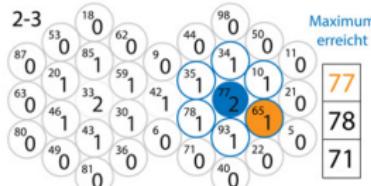
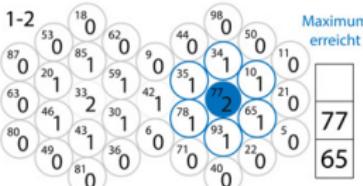
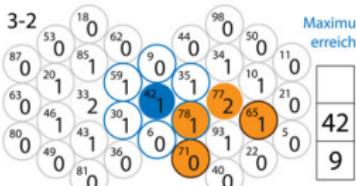
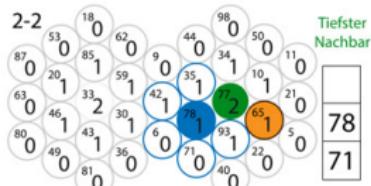
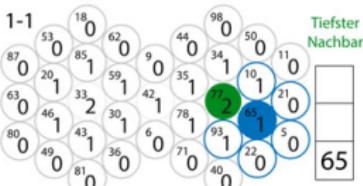
Visualisierung

○○○○○
○○○○○



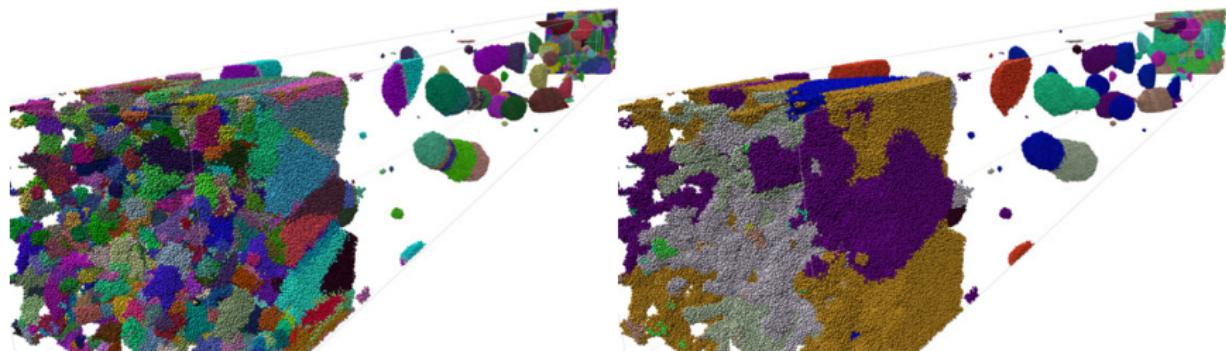
Ergebnisse

○○



Visualisierung der erzeugten Strukturen

Einfärbung der Partikel, um die Clusterzugehörigkeit zu visualisieren.
Dabei können Farben zufällig vergeben (links) oder von Clustern des vorangegangenen Zeitschritts vererbt werden (rechts).



Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oooooo	ooooo oooo	o o

Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Clustervergleich (SECC)

Ereignisheuristik

Visualisierung

Ergebnisse

Kontext

○○○
○○○○○

Analyse der Partikelstruktur

○○○
○○○○○○

Clustervergleich (SECC)

Erkennung der Ereignisse

●○○
○○○○○○

Visualisierung

○○○○○
○○○○

Ergebnisse

○
○

Um Strukturereignisse zu erkennen, werden zwei aufeinanderfolgende Zeitschritte betrachtet und die Veränderung der Cluster zwischen diesen verfolgt. Anschließend werden daraus mit einer Heuristik Ereignisse abgeleitet.

Clustervergleichsmatrix

- ▶ Partikel sind Clustern zugeordnet
- ▶ diese Zuordnung wird für zwei aufeinanderfolgende Zeitschritte betrachtet (aktueller und vorheriger Zeitschritt)
- ▶ die Anzahl der Partikel pro Cluster wird in einer n-m-Matrix festgehalten, wobei n für die Anzahl an Clustern des aktuellen und m für die Clusteranzahl des vorhergehenden Zeitschritts steht
- ▶ der Zeilenindex steht für die Cluster ID des aktuellen und der Spaltenindex für die Cluster ID des vorhergehenden Zeitschritts
- ▶ die Zellen enthalten die zugehörige Partikelanzahl; semantisch ist dies die Anzahl gemeinsamer Partikel der Cluster zweier Zeitschritte

```

1  for (auto particleID : currentParticleList)
2      clusterComparisonMatrix
3          [currentParticleList[particleID].clusterID] // Aktueller Zeitschritt.
4          [previousParticleList[particleID].clusterID] // Vorhergehender.
5      ++; // Anzahl der Partikel inkrementieren.

```

Partnercluster

- ▶ die *Clustervergleichsmatrix* wird sowohl Zeilen- als auch Spaltenweise betrachtet
- ▶ dadurch kann das Verhältnis hinsichtlich der Partikelanzahl eines Clusters des aktuellen Zeitschrittes zu allen Clustern des vorhergehenden Zeitschrittes ermittelt werden (und umgekehrt)
- ▶ diese zwei Richtungen werden vorwärtsgerichteter Vergleich (alter Zeitpunkt zu aktuellem) und rückwärtsgerichteter Vergleich (aktueller zu altem Zeitpunkt) genannt
- ▶ Cluster mit gemeinsamen Partikeln werden als Partner bezeichnet

Relevante Werte

- ▶ Gesamtanzahl der Partner
- ▶ Anzahl an großen Partnern. Große Partner sind solche Partnercluster mit vielen gemeinsamen Partikeln.
- ▶ Grenzwert, ab wann ein Partner ein großer Partner ist. Der Grenzwert ist das Verhältnis der gemeinsamen Partikel des Partners im Vergleich zu der Gesamtzahl gemeinsamer Partikel des Clusters.

Kontext
○○○○
○○○○○

Ereignisheuristik

Analyse der Partikelstruktur
○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse
○○○
○●○○○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Birth und Death

- ▶ Gesamtanzahl der Partner ist Null
- ▶ Birth im rückwärtsgerichteten Vergleich: kein Partner des vorangegangenen Zeitschrittes enthält Partikel des derzeitigen Clusters
- ▶ Death im vorwärtsgerichteten Vergleich: kein Partner des aktuellen Zeitschrittes enthält Partikel des vorangegangenen Clusters

Birth und Death

$p_{\text{gesamt}_r}, p_{\text{gesamt}_v} \dots$ Gesamtzahl an Partnern (rückwärts- und vorwärtsgerichtet)

$a_{\text{gesamt}_r}, a_{\text{gesamt}_v} \dots$ Gesamtanteil gemeinsamer Partikel aller Partner

$e_{bd} \dots$ benutzerdefinierter Anteil an gemeinsamen Partikeln

$$\begin{aligned} p_{\text{gesamt}_r} &= 0 & (B) \\ e_{bd} &\leq a_{\text{gesamt}_r} & (C) \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} p_{\text{gesamt}_v} &= 0 & (D) \\ e_{bd} &\leq a_{\text{gesamt}_v} & (E) \end{aligned} \tag{2}$$

$\{B, C, D, E\}$ sind aussagenlogische Ausdrücke. Sie stehen für die mathematischen Ausdrücke. *Birth* wird erkannt, wenn $(B \vee C) = \top$ und *Death* wird erkannt, wenn $(D \vee E) = \top$.

Merge und Split

- ▶ Mindestanzahl großer Partner
- ▶ Grenzwert für diese Partner (ein Grenzwert für alle)
- ▶ Merge im rückwärtsgerichteten Vergleich: mehrere große Partner des vorangegangenen Zeitschrittes sind zum derzeitigen Cluster verschmolzen
- ▶ Split im vorwärtsgerichteten Vergleich: mehrere große Partner des aktuellen Zeitschrittes sind aus einem vorangegangenen Cluster hervorgegangen

Merge und Split

$p_{\text{groß}_r}, p_{\text{groß}_v} \dots$ Anzahl großer Partner (rückwärts- und vorwärtsgerichtet)

$a_{\text{partner}_r}, a_{\text{partner}_v} \dots$ Anteil gemeinsamer Partikel eines Partners

$e_{msA} \dots$ benutzerdefinierter Anteil gemeinsamer Partikel

$e_{msP} \dots$ benutzerdefinierte Anzahl großer Partner

Inkrementierung von $p_{\text{groß}}$, wenn $a_{\text{partner}} \geq e_{msA}$.

$$p_{\text{groß}_r} \geq e_{msP} \quad (M) \tag{3}$$

$$p_{\text{groß}_v} \geq e_{msP} \quad (S) \tag{4}$$

$\{M, S\}$ sind aussagenlogische Ausdrücke. Sie stehen für die mathematischen Ausdrücke. *Merge* wird erkannt, wenn $M = \top$ und *Split* wird erkannt, wenn $S = \top$.

Zusammenfassung (wichtigste Schritte)

1. Finden der Partikelnachbarn mittels *kD-Baum*, Berücksichtigung periodischer Randbedingungen
2. Cluster erstellen unter Nutzung der Nachbarn (*CFD*)
3. Clustervergleich (*SECC*) durch Nutzung der *Clustervergleichsmatrix* und Erstellung von zwei Listen mit *Partnerclustern* in Vorwärtsrichtung beziehungsweise rückwärtiger Richtung.
4. Bestimmung der Ereignisse durch Anwendung von Verhältnisberechnungen auf diese Listen und Nutzung von benutzerdefinierten Grenzwerten für die *Ereignisheuristik*.

Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oooooo	ooooo oooo	o o

Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Visualisierung

Strukturereignistaxonomie

Glyphdarstellung

Ergebnisse

Strukturereignistaxonomie

Ereignisparameter

Ein Ereignis hat folgende Parameter

- ▶ Ort: kontinuierlich
- ▶ Zeitpunkt: kontinuierlich
- ▶ Art: diskret (Birth, Death, Merge, Split)

Visuelle Variablen

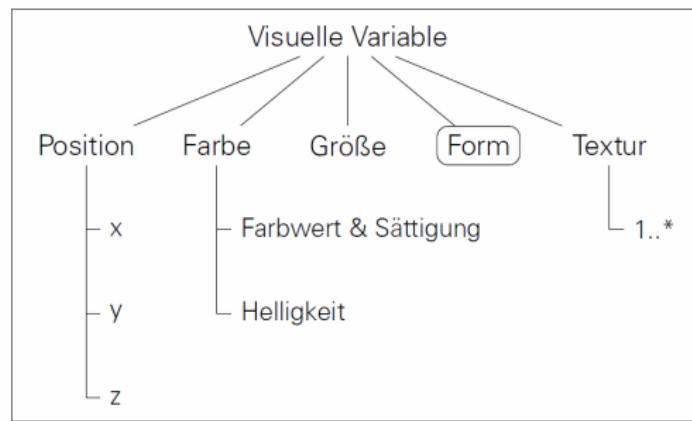
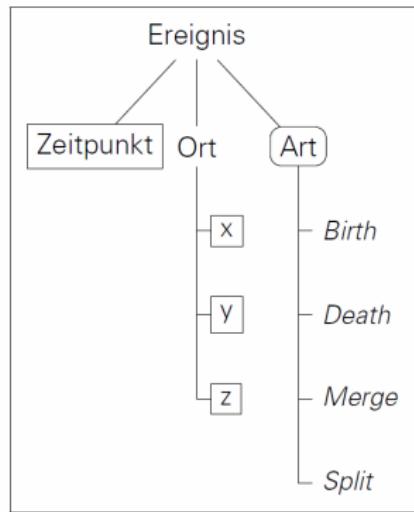
Einteilung visueller Variablen

- ▶ Position (x, y, z): diskret und kontinuierlich
- ▶ Farbe (Farbwert/Sättigung, Helligkeit): diskret und kontinuierlich
- ▶ Größe: diskret und kontinuierlich
- ▶ Form: diskret
- ▶ Textur: diskret und kontinuierlich (endlich)

Strukturereignistaxonomie

Strukturereignistaxonomie

Die Einteilung der Ereignisparameter zusammen mit der Einteilung der visuellen Variablen bildet die Strukturereignistaxonomie. Die Prüfung der Variablenzuweisung erfolgt durch ein interaktives Mockup.



Kontext

○○○
○○○○○

Analysen der Partikelstruktur

○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse

○○○
○○○○○○

Visualisierung

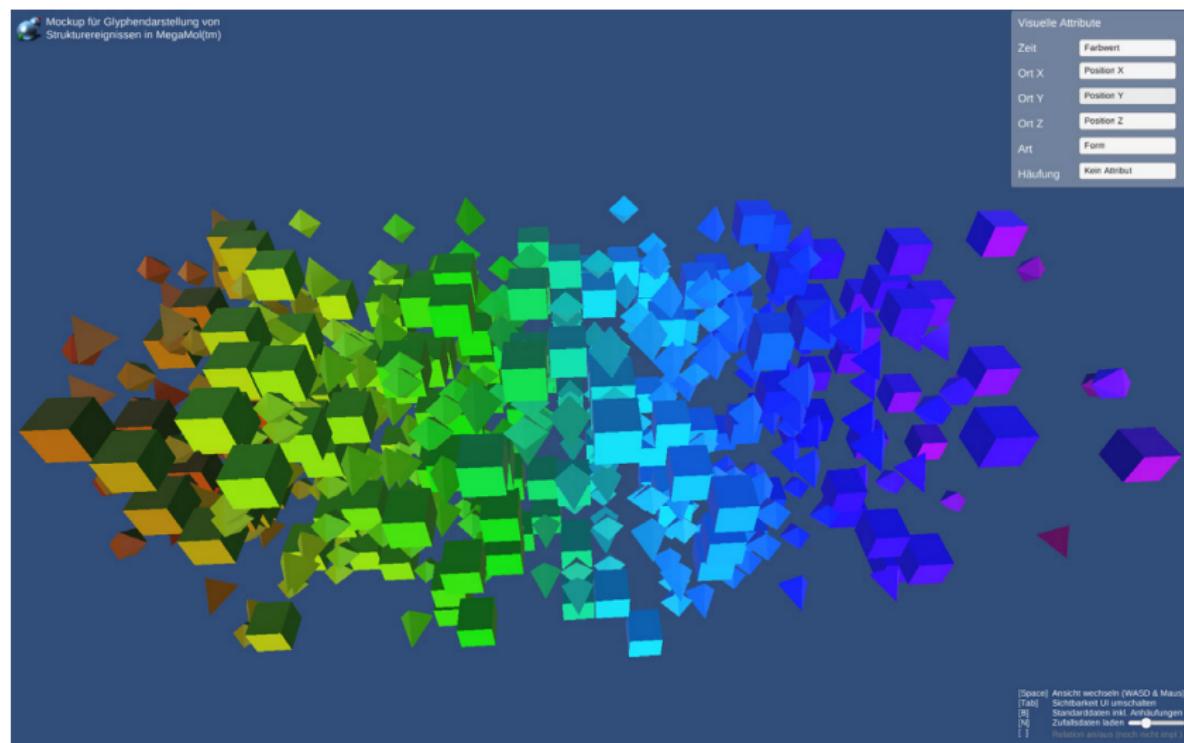
○○○●○
○○○○

Ergebnisse

○
○

Strukturereignistaxonomie

Mockup mit beispielhafter Variablenzuweisung (WebGL)



Strukturereignistaxonomie

Zuweisung visueller Attribute

Zuweisung von visuellen Attributen zu den Parametern

- ▶ Ort: Position im Raum (Aufgabenstellung)
- ▶ Zeitpunkt: Farbwert, Helligkeit, Füllstand (Textur)
- ▶ Art: abstrakt und narrativ symbolische Darstellung (Textur)

Kontext

○○○○
○○○○○○

Analyse der Partikelstruktur

○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse

○○○
○○○○○○

Visualisierung

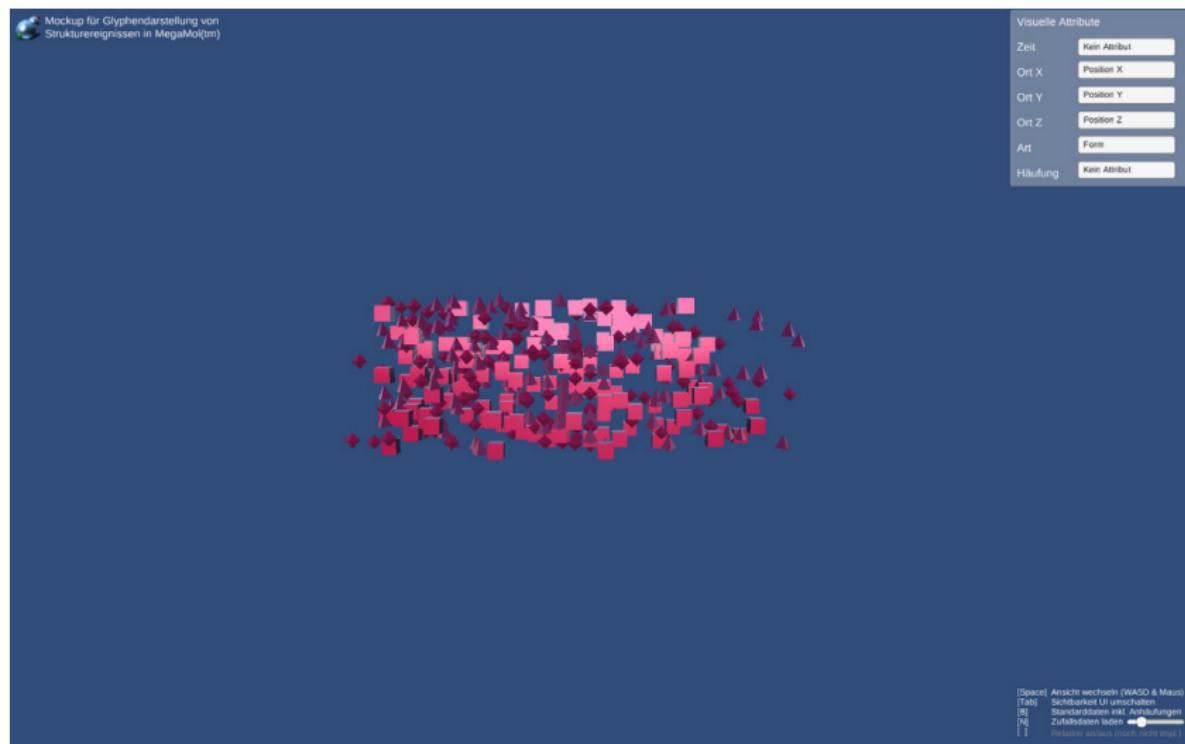
○○○○○
●○○○

Ergebnisse

○
○

Glyphdarstellung

3D-Glyphen - Beleuchtung



Glyphdarstellung

3D-Darstellung

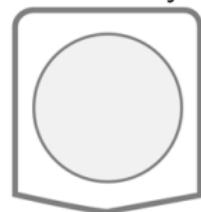
Ergebnis durch die Nutzung des interaktiven Mockups: Die Erscheinung von Glyphen als Polygone ist blickwinkelabhängig (Form) und beleuchtungsabhängig (unterschiedliche Helligkeiten je nach Winkel der Flächen).

Bewirkt Senkung der präattentiven Wirkung (kognitiver Aufwand).

Erschwert Identifizierung bei Überlagerung mit der Partikeldarstellung (einzelne Polygone zwischen sehr vielen Kugeln) ⇒ Wechsel zu 2D-Glyphen (Billboards).

Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart

Abstrakt symbolische Darstellung



Narrativ symbolische Darstellung



Der Rahmen erfüllt das Gesetz der Geschlossenheit. Seine Form hebt sich von der Kreisform ab (Kontrast zur Kugeldarstellung der Partikel) und gibt Hinweis auf exakte Ereignisposition.

Glyphdarstellung Strukturereignis: Zeitdarstellung

Füllstand (Textur)



Helligkeit



Farbwert



Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oooooo	ooooo oooo	o o

Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Visualisierung

Ergebnisse

Cluster- und Ereigniserkennung

Visualisierung

Kontext
○○○○
○○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○○
○○○○○○

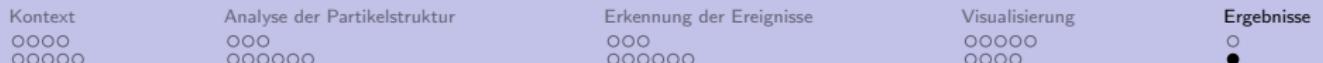
Erkennung der Ereignisse
○○○
○○○○○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
●
○

Cluster- und Ereigniserkennung

Umfrage mit reinbringen, quantitatives nur kurz!



Visualisierung

Umfrageergebnisse, v.a. in situ