

Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○○○  
○○○○

Visualisierung  
○○○○○  
○○

Ergebnisse  
○○  
○○○○

# Visualisierung von Strukturveränderungen in Molekulardynamikdaten

Bachelorarbeit Verteidigung

Richard Hähne

Institut für Software- und Multimediatechnik  
Professur für Computergraphik und Visualisierung

5. Oktober 2015



# Motivation

- ▶ durch Molekulardynamik können Vorhersagen über Materialverhalten getroffen werden
- ▶ dazu werden meist Atome und Moleküle (*Partikel*) begrenzter Zahl über kurze Zeiträume betrachtet
- ▶ durch räumliche Nähe der *Partikel* bilden sich Strukturen
- ▶ hier: Phasenübergang zwischen **Gas** und **Flüssigkeit** begrenzt Strukturen
- ▶ Partikel bewegen sich, Strukturen werden verändert
- ▶ daher ist es sinnvoll, Strukturveränderungen zu erkennen

Strukturergebnisse während einer Molekulardynamiksimulation

# Motivation

- ▶ durch Molekulardynamik können Vorhersagen über Materialverhalten getroffen werden
- ▶ dazu werden meist Atome und Moleküle (*Partikel*) begrenzter Zahl über kurze Zeiträume betrachtet
- ▶ durch räumliche Nähe der *Partikel* bilden sich Strukturen
- ▶ hier: Phasenübergang zwischen **Gas** und **Flüssigkeit** begrenzt Strukturen
- ▶ Partikel bewegen sich, Strukturen werden verändert
- ▶ daher ist es sinnvoll, Strukturveränderungen zu erkennen

# Motivation

- ▶ durch Molekulardynamik können Vorhersagen über Materialverhalten getroffen werden
- ▶ dazu werden meist Atome und Moleküle (*Partikel*) begrenzter Zahl über kurze Zeiträume betrachtet
- ▶ durch räumliche Nähe der *Partikel* bilden sich Strukturen
- ▶ hier: Phasenübergang zwischen **Gas** und **Flüssigkeit** begrenzt Strukturen
- ▶ Partikel bewegen sich, Strukturen werden verändert
- ▶ daher ist es sinnvoll, Strukturveränderungen zu erkennen

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

# Motivation

- ▶ durch Molekulardynamik können Vorhersagen über Materialverhalten getroffen werden
- ▶ dazu werden meist Atome und Moleküle (*Partikel*) begrenzter Zahl über kurze Zeiträume betrachtet
- ▶ durch räumliche Nähe der *Partikel* bilden sich Strukturen
- ▶ hier: Phasenübergang zwischen **Gas** und **Flüssigkeit** begrenzt Strukturen
- ▶ Partikel bewegen sich, Strukturen werden verändert
- ▶ daher ist es sinnvoll, Strukturveränderungen zu erkennen

Strukturergebnisse während einer Molekulardynamiksimulation

# Motivation

- ▶ durch Molekulardynamik können Vorhersagen über Materialverhalten getroffen werden
- ▶ dazu werden meist Atome und Moleküle (*Partikel*) begrenzter Zahl über kurze Zeiträume betrachtet
- ▶ durch räumliche Nähe der *Partikel* bilden sich Strukturen
- ▶ hier: Phasenübergang zwischen **Gas** und **Flüssigkeit** begrenzt Strukturen
- ▶ Partikel bewegen sich, Strukturen werden verändert
- ▶ daher ist es sinnvoll, Strukturveränderungen zu erkennen

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

# Motivation

- ▶ durch Molekulardynamik können Vorhersagen über Materialverhalten getroffen werden
- ▶ dazu werden meist Atome und Moleküle (*Partikel*) begrenzter Zahl über kurze Zeiträume betrachtet
- ▶ durch räumliche Nähe der *Partikel* bilden sich Strukturen
- ▶ hier: Phasenübergang zwischen **Gas** und **Flüssigkeit** begrenzt Strukturen
- ▶ Partikel bewegen sich, Strukturen werden verändert
- ▶ daher ist es sinnvoll, Strukturveränderungen zu erkennen

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

## Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

$t_S = 0$



- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
  - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
  - ▶ Gasphase
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

### Datensatz

- ▶ zwei Millionen Partikel
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

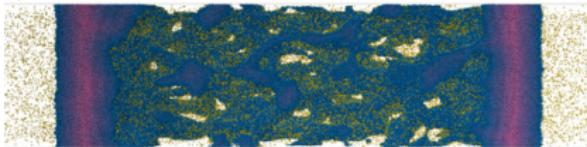
Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

## Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

$t_S = 0$



$t_S = 20$



- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
  - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
  - ▶ Gasphase

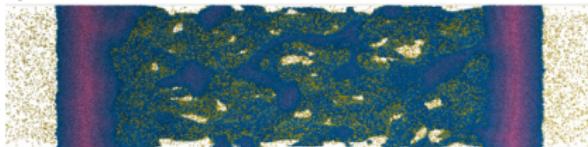
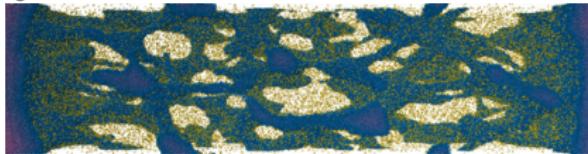
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

### Datensatz

- ▶ zwei Millionen Partikel
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

## Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

 $t_S = 0$  $t_S = 20$  $t_S = 30$ 

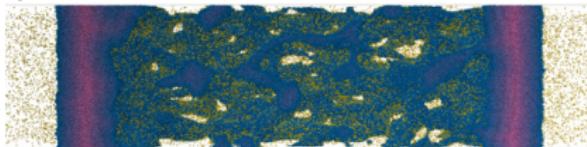
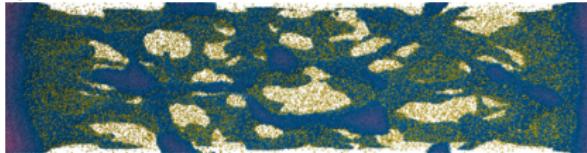
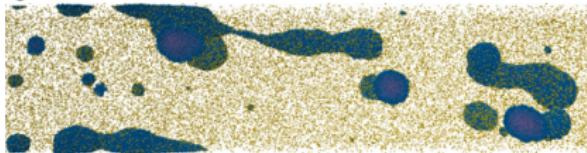
- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
  - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
  - ▶ Gasphase
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

### Datensatz

- ▶ zwei Millionen Partikel
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

## Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

 $t_S = 0$  $t_S = 20$  $t_S = 30$  $t_S = 100$ 

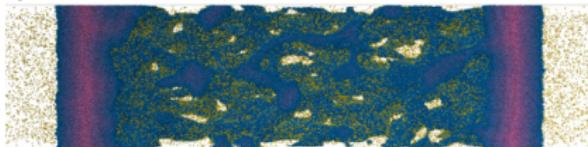
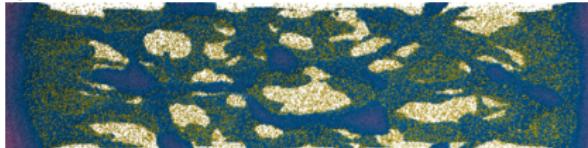
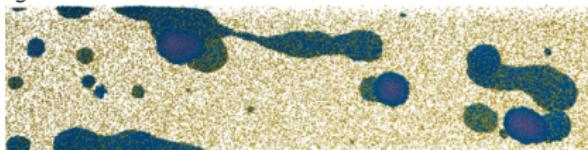
- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
  - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
  - ▶ Gasphase
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

## Datensatz

- ▶ zwei Millionen Partikel
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

## Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

 $t_S = 0$  $t_S = 20$  $t_S = 30$  $t_S = 100$ 

- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
  - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
  - ▶ Gasphase

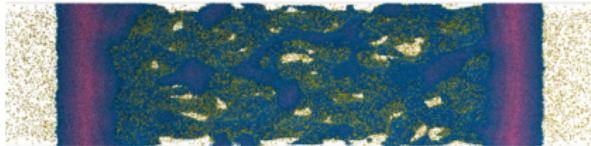
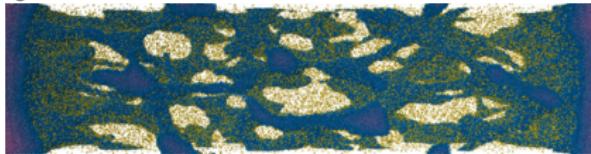
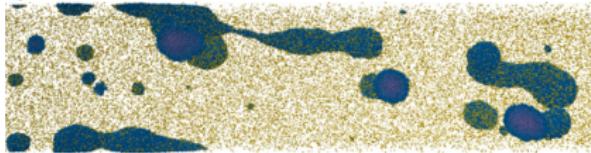
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

## Datensatz

- ▶ zwei Millionen Partikel
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

## Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

 $t_S = 0$  $t_S = 20$  $t_S = 30$  $t_S = 100$ Auftretende *Strukturereignisse*:

Birth



Death



Merge



Split



# Ziel

Wie verhält sich die Flüssigkeit, welche Strukturveränderungen treten auf?

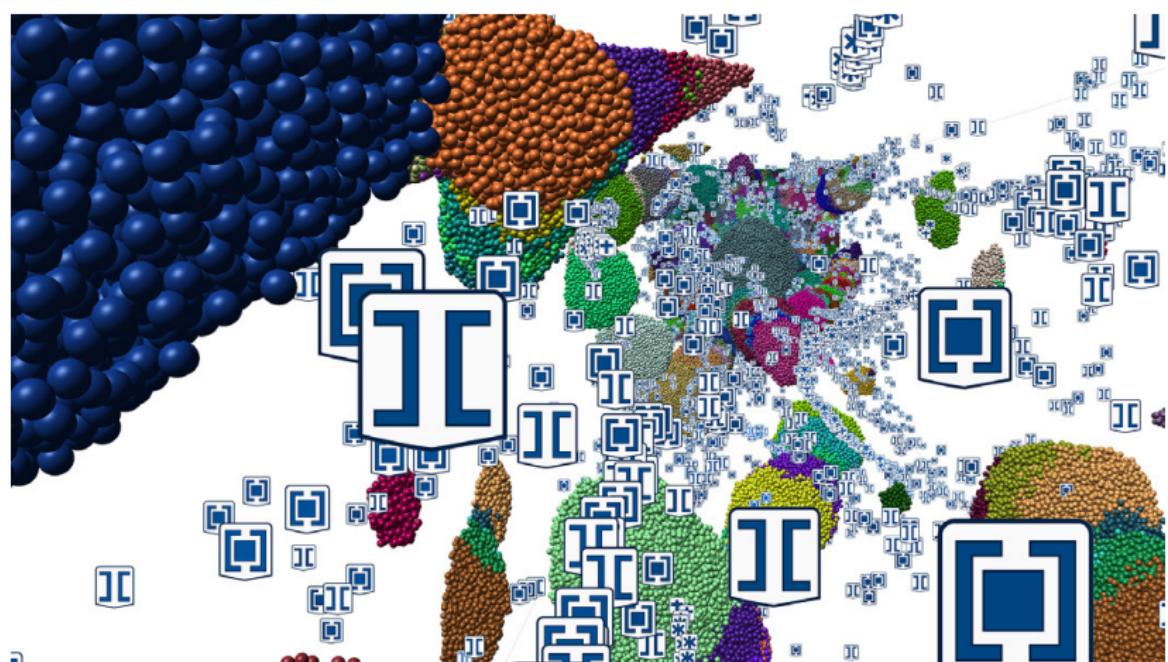
Die vorliegende Animation ist zur Analyse nur bedingt geeignet:

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

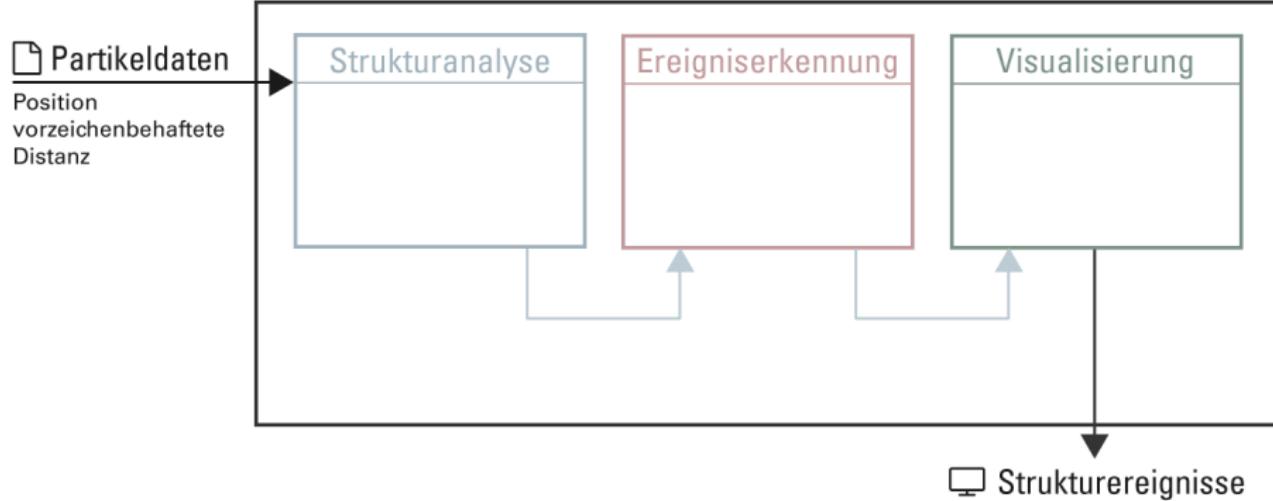
Lösung: Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Strukturveränderungen im geometrischen Kontext der Originaldaten.

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

# Ziel



## Erkennung und Visualisierung der Strukturereignisse



# Herausforderungen

- ▶ Sinnvolle Einteilung der Partikel in Strukturen, um Ereignisse erkennen zu können.
- ▶ Vorgehen, um Veränderungen der Struktur über die Zeit verfolgen zu können.
- ▶ Berechnungsdauer überschaubar halten (Überprüfung der Algorithmen).
- ▶ Darstellung der Ereignisse.

# Verwandte Arbeiten

- ▶ Strukturanalyse räumlicher Datensätze
  - ▶ Skelettextraktion
  - ▶ Konturbäume (**Funktionswert, Zusammenhangskomponenten**)
- ▶ Element- und Zeitdarstellung in Molekulardynamiksimulationen
  - ▶ Elemente sind meist dreidimensional, farbkodiert
  - ▶ Zeitdarstellung durch Animation oder Diagramme
- ▶ Visualisierung
  - ▶ Anordnung und Filterung von Datenobjekten
  - ▶ Glyphdesign

## Erkennung und Visualisierung der Strukturereignisse

# Verwandte Arbeiten

- ▶ Strukturanalyse räumlicher Datensätze
  - ▶ Skelettextraktion
  - ▶ Konturbäume (Funktionswert, Zusammenhangskomponenten)
- ▶ Element- und Zeitdarstellung in Molekulardynamiksimulationen
  - ▶ Elemente sind meist dreidimensional, farbkodiert
  - ▶ Zeitdarstellung durch Animation oder Diagramme
- ▶ Visualisierung
  - ▶ Anordnung und Filterung von Datenobjekten
  - ▶ Glyphdesign

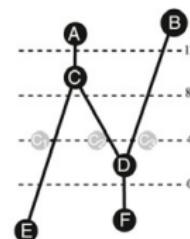
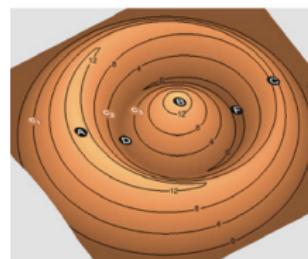
# Verwandte Arbeiten

- ▶ Strukturanalyse räumlicher Datensätze
  - ▶ Skelettextraktion
  - ▶ Konturbäume (Funktionswert, Zusammenhangskomponenten)
- ▶ Element- und Zeitdarstellung in Molekulardynamiksimulationen
  - ▶ Elemente sind meist dreidimensional, farbkodiert
  - ▶ Zeitdarstellung durch Animation oder Diagramme
- ▶ Visualisierung
  - ▶ Anordnung und Filterung von Datenobjekten
  - ▶ Glyphdesign

# Verwandte Arbeiten: Strukturanalyse: Konturbäume

H. Carr et al.: *Flexible isosurfaces: Simplifying and displaying scalar topology using the contour tree*. (2010)

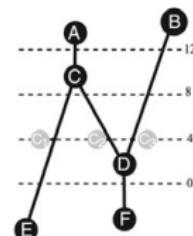
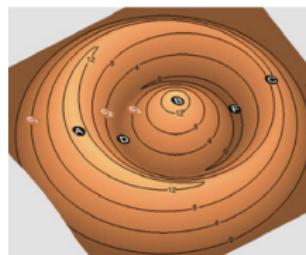
- ▶ ein Skalarfeld (links) wird in einen Baum überführt durch Beachtung kritischer Punkte (Konturbaum, rechts)
- ▶ Selektion von Zusammenhangskomponenten



# Verwandte Arbeiten: Strukturanalyse: Konturbäume

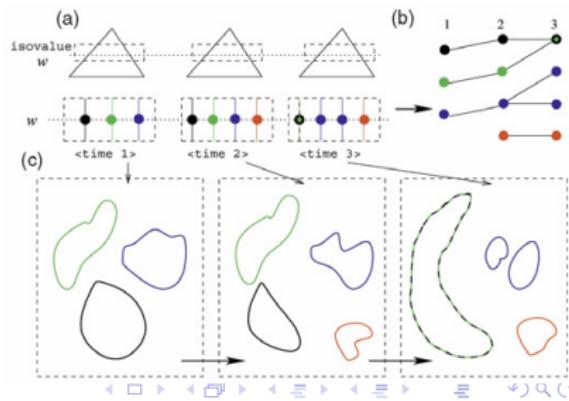
H. Carr et al.: *Flexible isosurfaces: Simplifying and displaying scalar topology using the contour tree*. (2010)

- ▶ ein Skalarfeld (links) wird in einen Baum überführt durch Beachtung kritischer Punkte (Konturbaum, rechts)
- ▶ Selektion von Zusammenhangskomponenten



B.-S. Sohn und C. Bajaj: *Time-Varying Contour Topology*. (2006)

- ▶ zeitliche Änderung wird in topologischem Änderungsgraph gespeichert (b)
- ▶ Nutzung von (b) in Verbindung mit Konturbaum - Veränderung von Zusammenhangskomponenten verfolgbar (c)
- ▶ zeitlicher Vergleich durch Prüfung der sich überschneidenden Volumen



## Partikeldaten

Position  
vorzeichenbehaftete  
Distanz

### Strukturanalyse

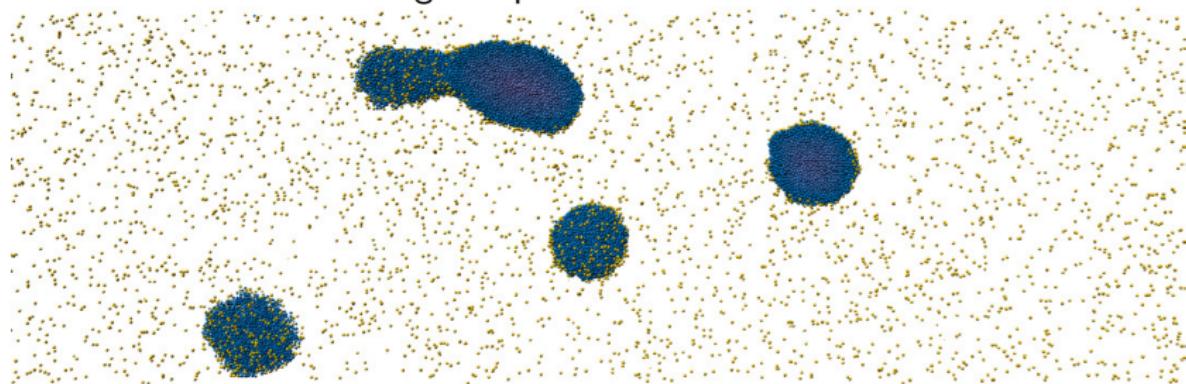
Nachbarschaftssuche  
CFD: Cluster Fast Depth  
Clusterreduktion

### Ereigniserkennung

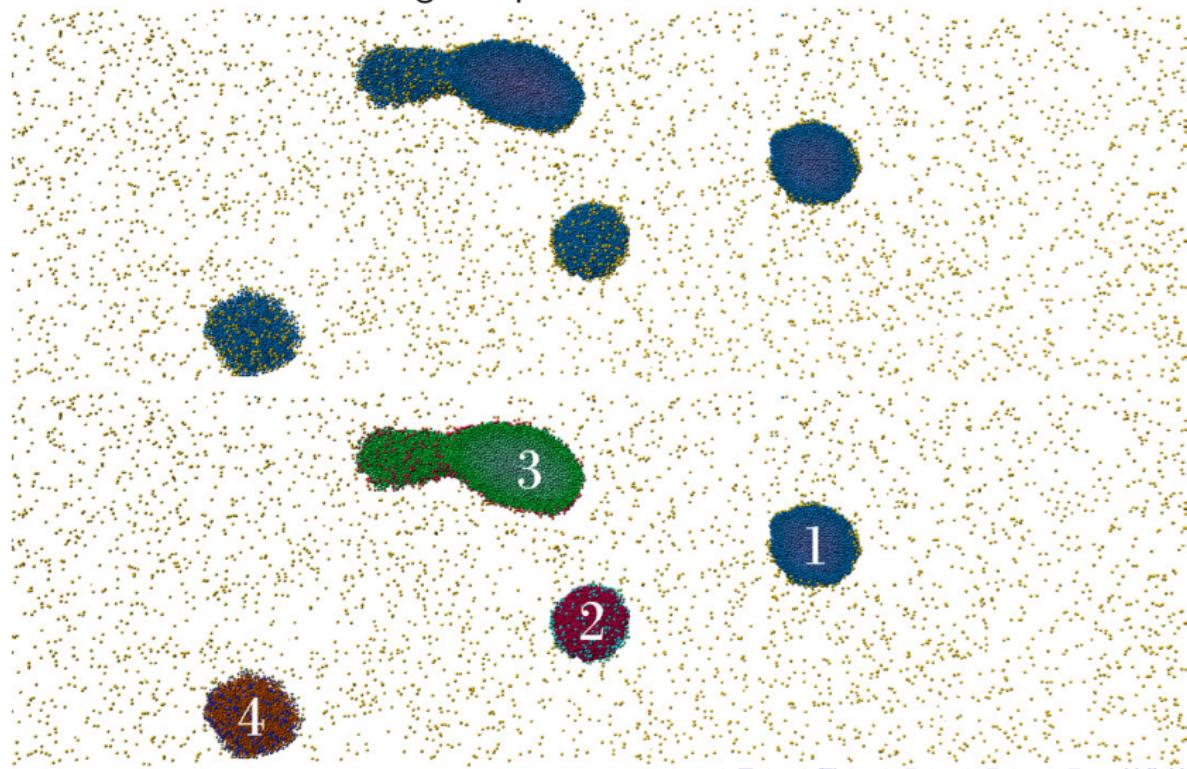
### Visualisierung

Strukturereignisse

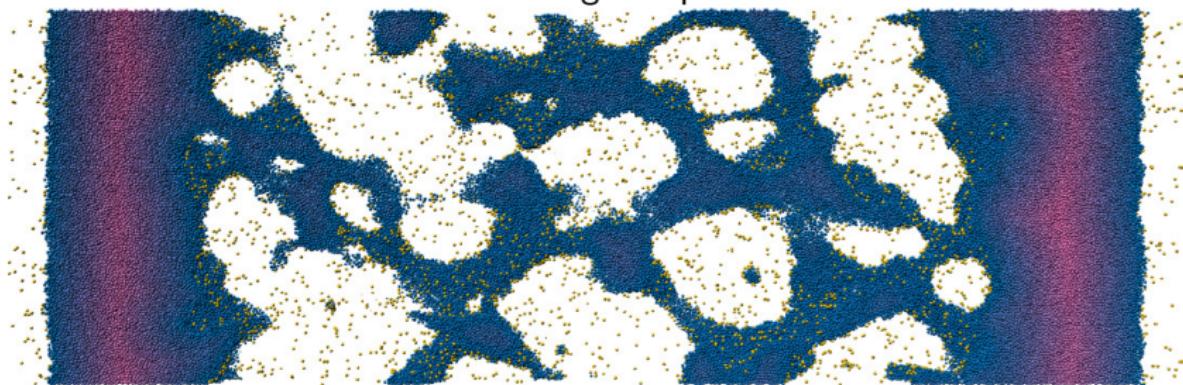
## Cluster als Zusammenhangskomponenten



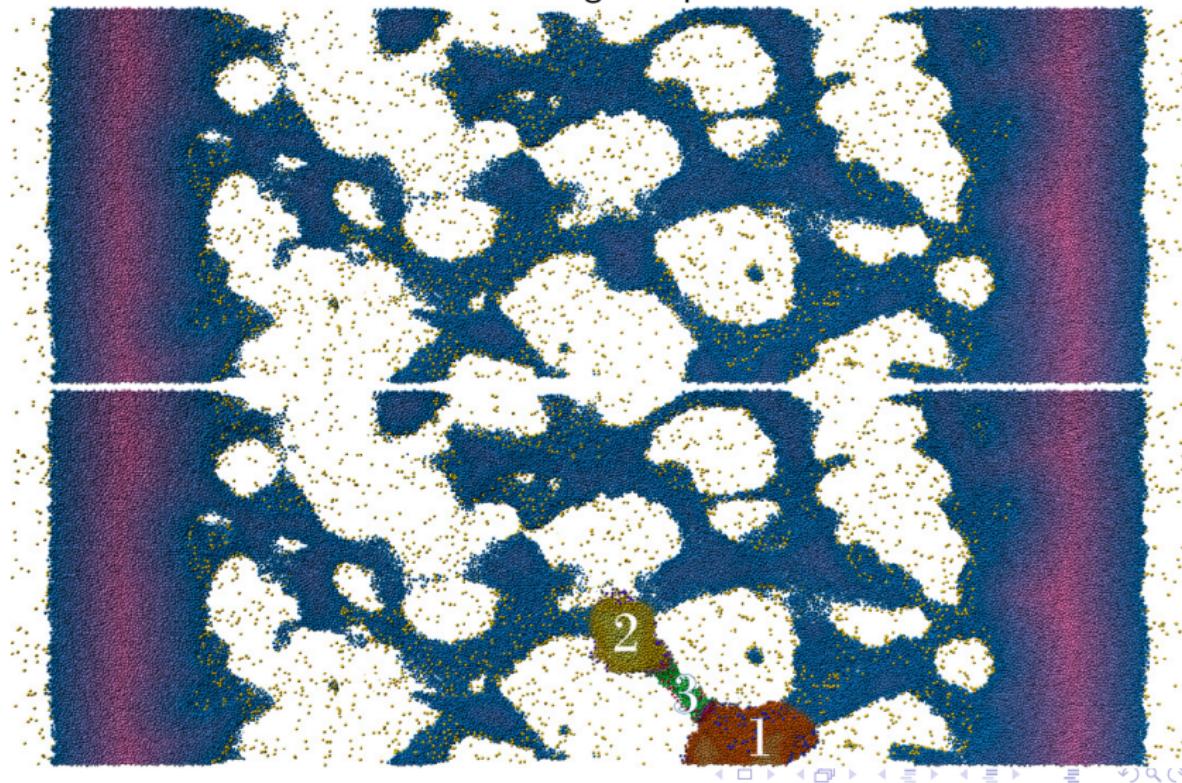
## Cluster als Zusammenhangskomponenten



## Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



## Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
●○○

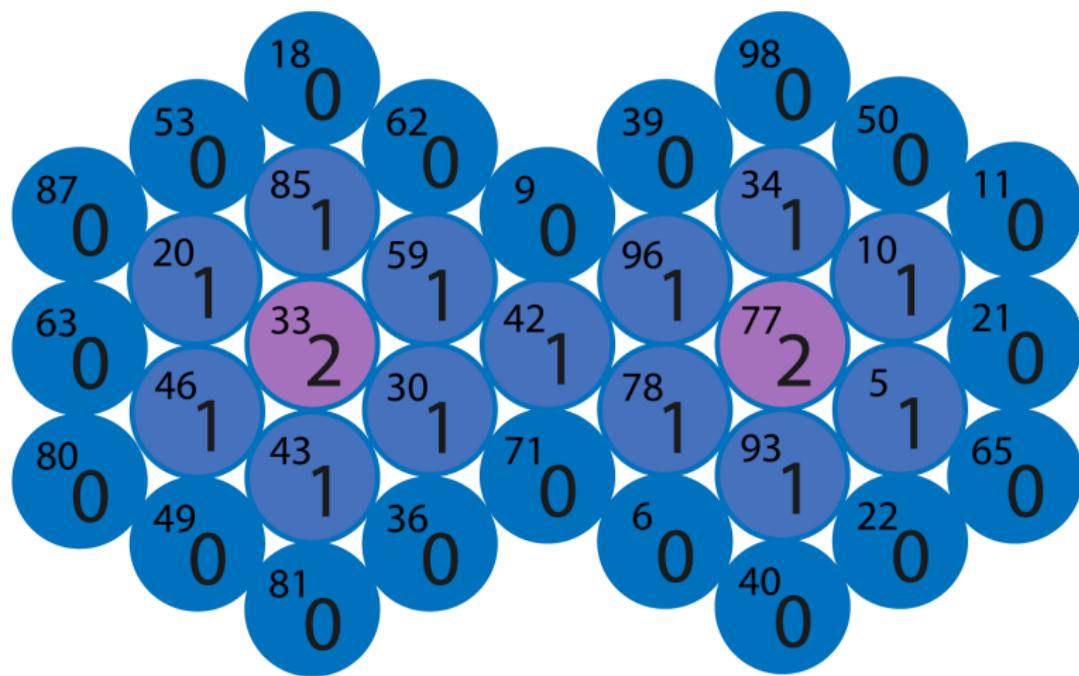
Erkennung der Ereignisse  
○○○○  
○○○○

Visualisierung  
○○○○○  
○○○○

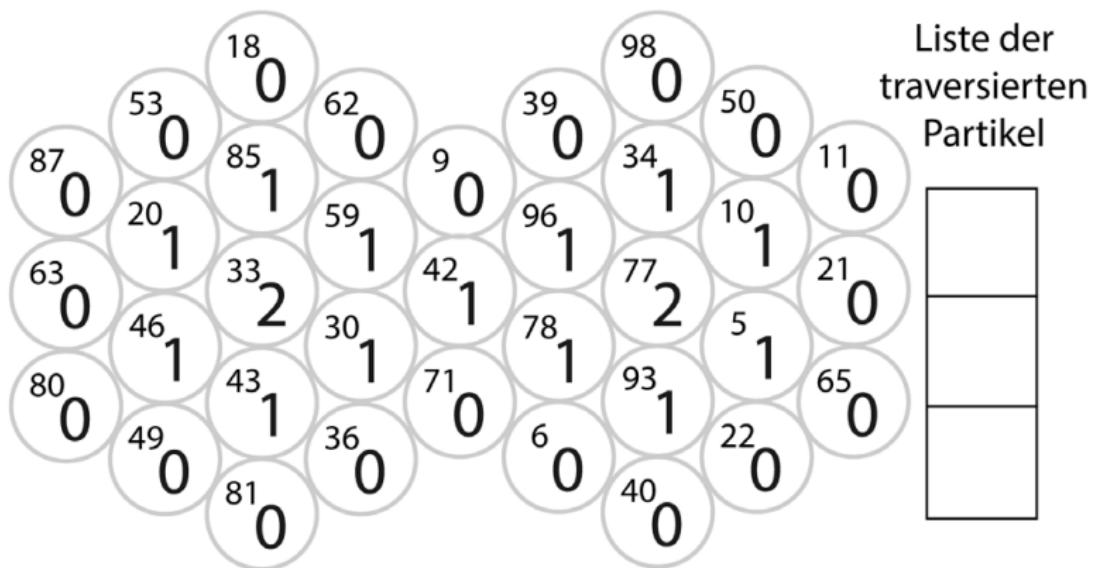
Ergebnisse  
○○  
○○○○

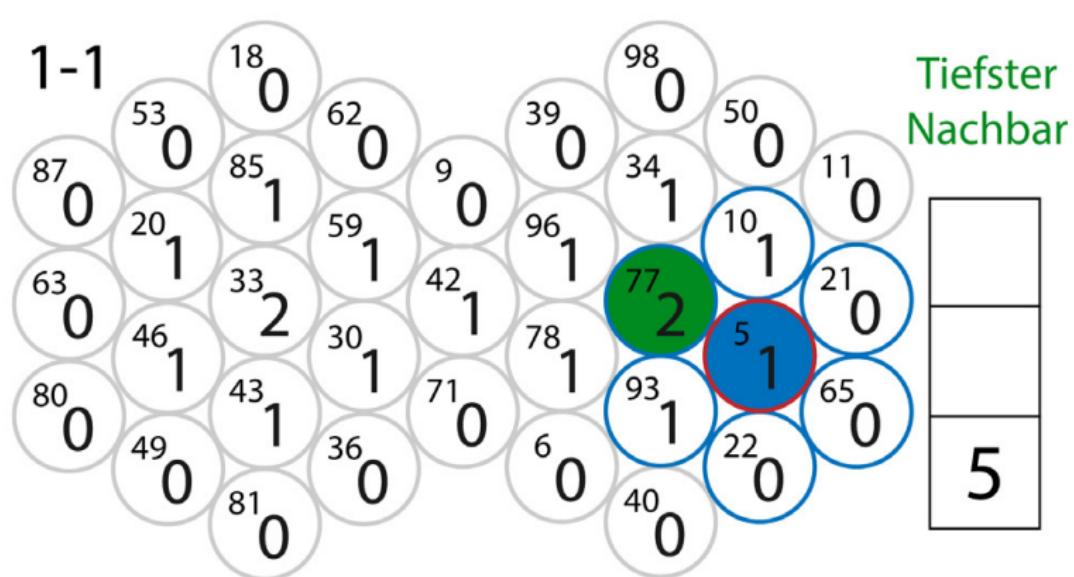
Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

# Zusammenhangskomponente

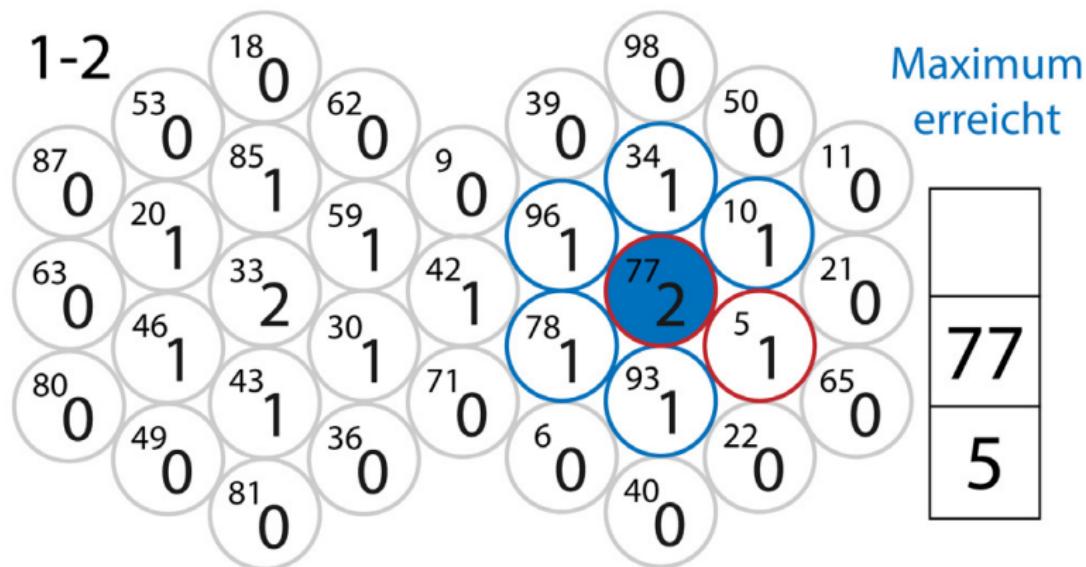


## Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

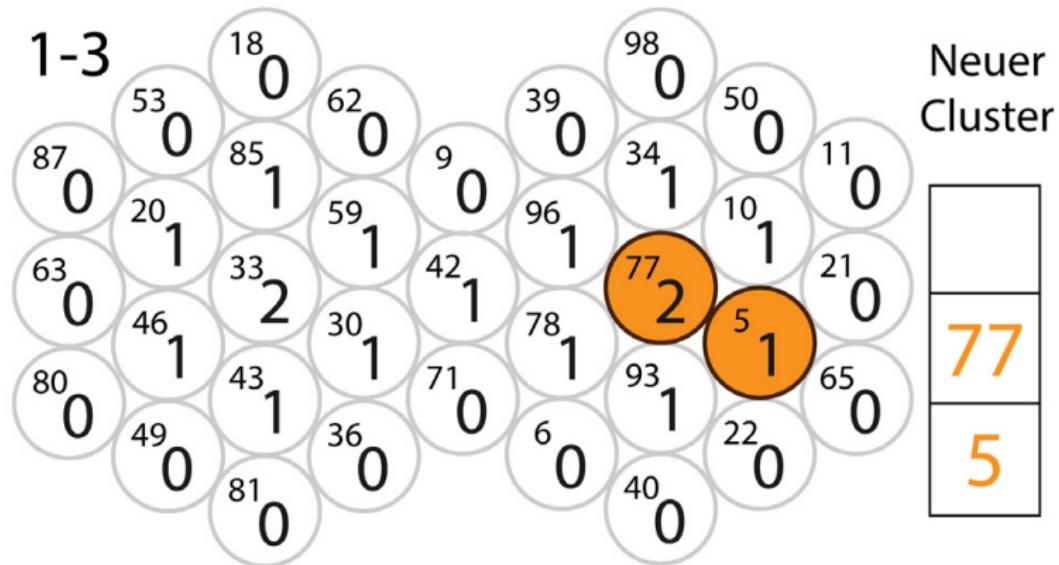




## Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



## Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



## Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



2-3

87 0

63 0

80 0

49 0

53 0

20 1

46 1

43 1

18 0

85 1

33 2

43 1

81 0

62 0

59 1

30 1

36 0

9 0

42 1

71 0

40 0

39 0

96 1

78 1

6 0

98 0

34 1

93 1

40 0

50 0

10 1

22 0

11 0

21 0

65 0

77

78

6

Maximum erreicht

Einleitung

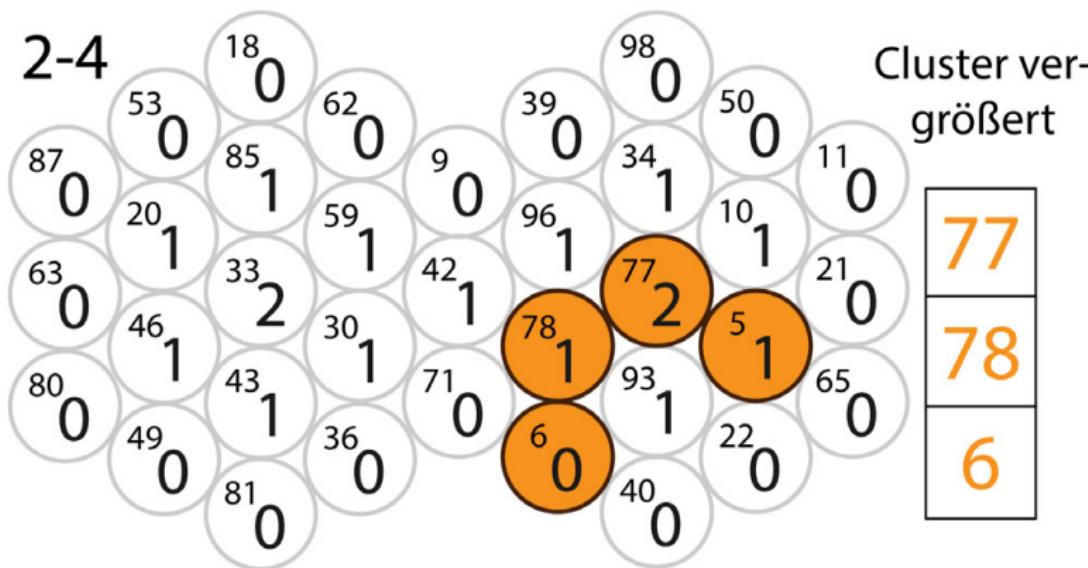
Analyse der Partikelstruktur

## Erkennung der Ereignisse

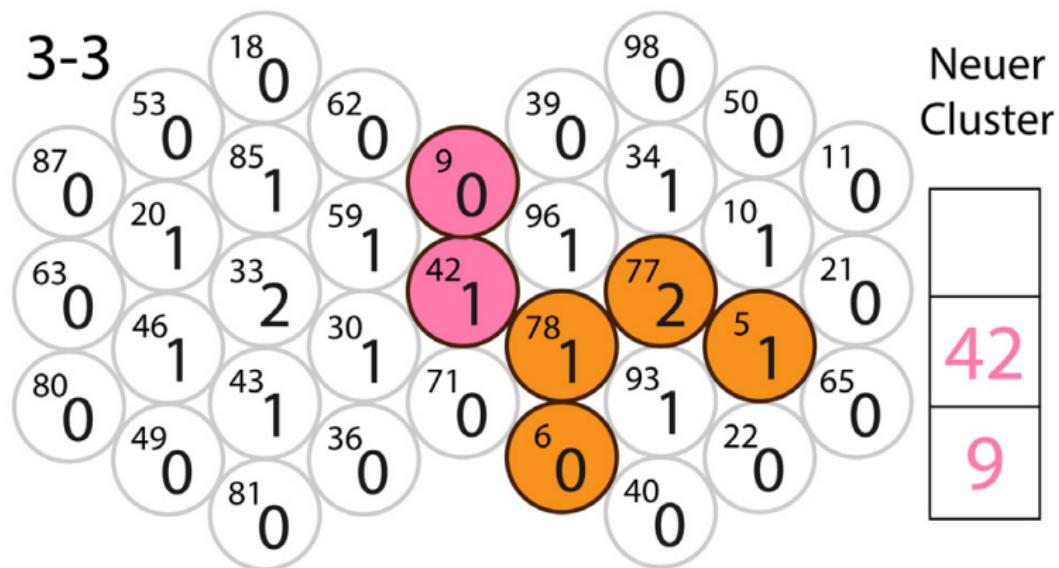
## Visualisierung

Ergebnisse

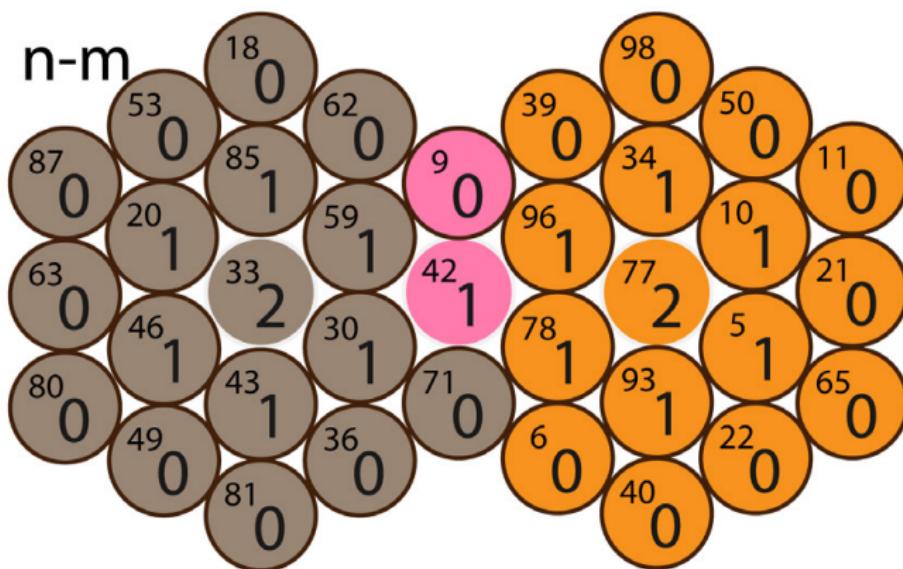
○○○○ ○○○



## Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



## Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



# Überprüfung der erzeugten Cluster

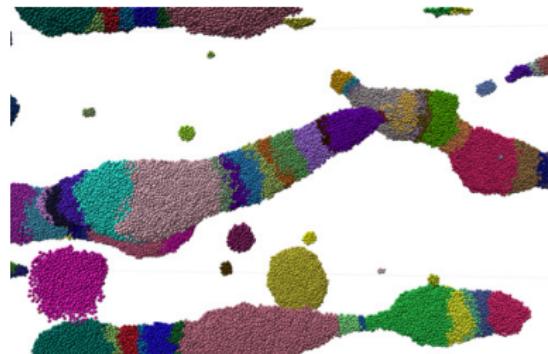
Einfärbung der Partikel zur Clusterüberprüfung:

- ▶ zufällige Färbung in jedem Zeitschritt
- ▶ es existieren keine Zusammenhänge zwischen den Zeitschritten

$t_S = 63$



$t_S = 64$



## Partikeldaten

Position  
vorzeichenbehaftete  
Distanz

### Strukturanalyse

Nachbarschaftssuche  
CFD: Cluster Fast Depth  
Clusterreduktion

### Ereigniserkennung

SECC: Clustervergleich  
Ereignisheuristik

### Visualisierung

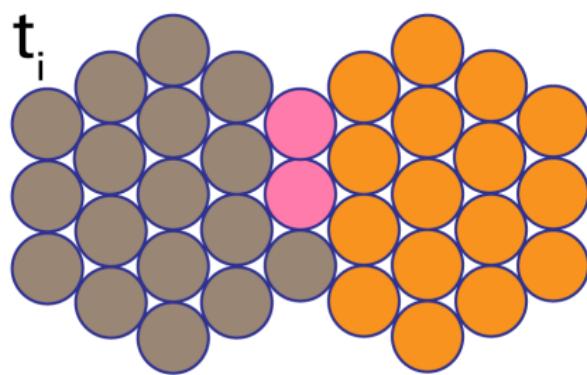
## Clusterkennzeichnung

Cluster  
Größe  
(Anzahl Partikel)

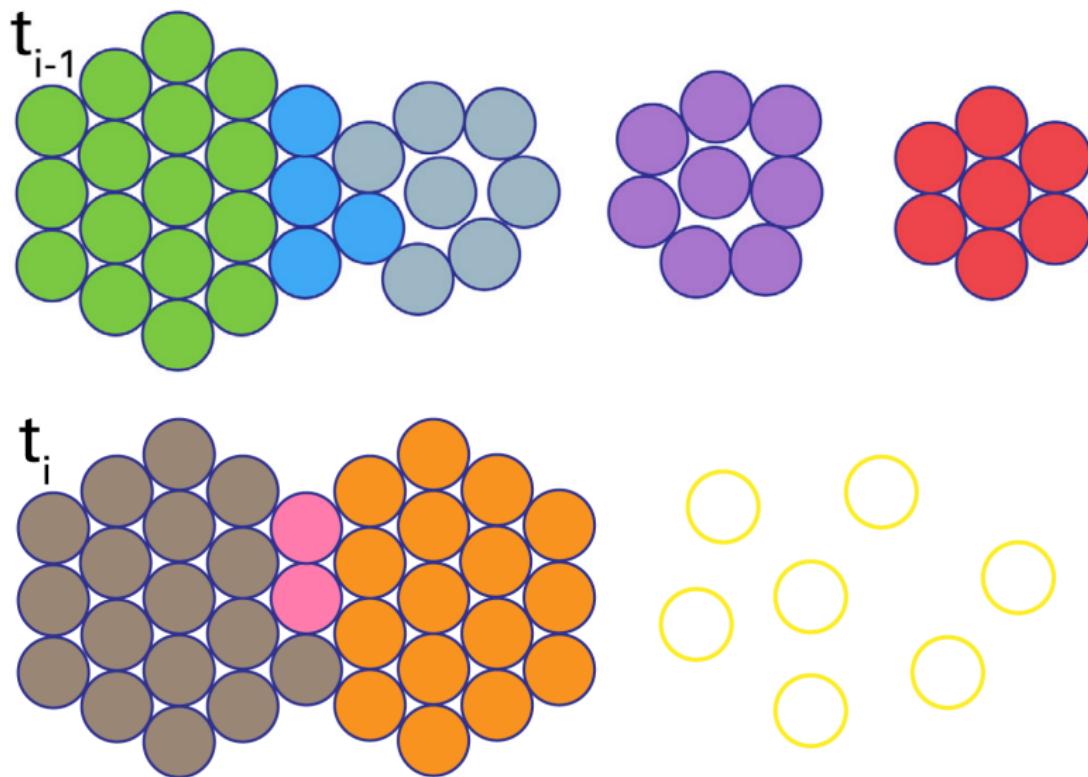
## Strukturereignisse

- Suchreichweite
- Mindestclustergröße

## Clustervergleich (SECC)



## Clustervergleich (SECC)



Einleitung  
○○○  
○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○●○  
○○○○

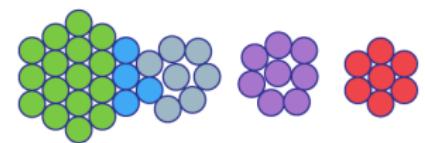
Visualisierung  
○○○○  
○○

Ergebnisse  
○○  
○○○○

## Clustervergleich (SECC)

### Clustervergleichsmatrix

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
$t_i$					



Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○●○  
○○○○

Visualisierung  
○○○○○  
○○

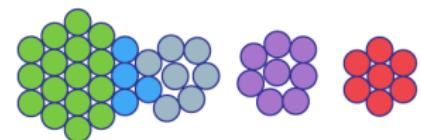
Ergebnisse  
○○  
○○○○

## Clustervergleich (SECC)

### Clustervergleichsmatrix

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
$t_i$					



Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○●○  
○○○○

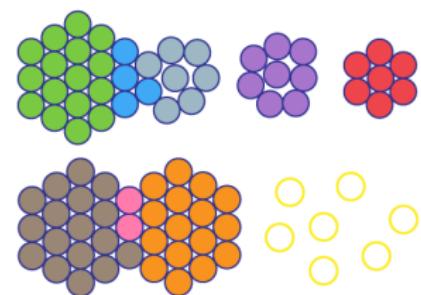
Visualisierung  
○○○○○  
○○

Ergebnisse  
○○  
○○○○

## Clustervergleich (SECC)

### Clustervergleichsmatrix

	7	7	4	16	8
$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
$t_i$	1				
1					
2					
3					



Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○●○  
○○○○

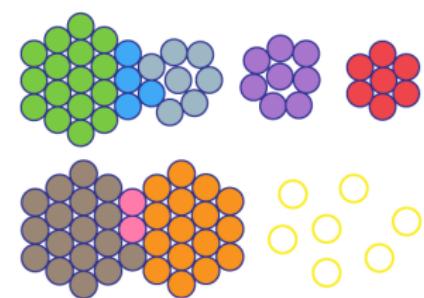
Visualisierung  
○○○○○  
○○

Ergebnisse  
○○  
○○○○

## Clustervergleich (SECC)

### Clustervergleichsmatrix

	7	7	4	16	8
$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	1				
2	2				
16	3				

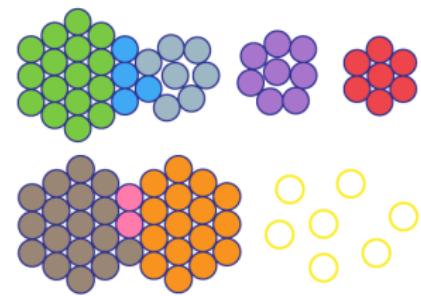


## Clustervergleich (SECC)

## Partnercluster

7      7      4      16      8

	$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	1	0	0	1	16	0
2	2	0	0	2	0	0
16	3	7	0	1	0	8

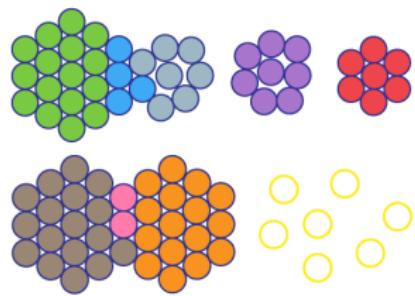


## Clustervergleich (SECC)

## Partnercluster

7      7      4      16      8

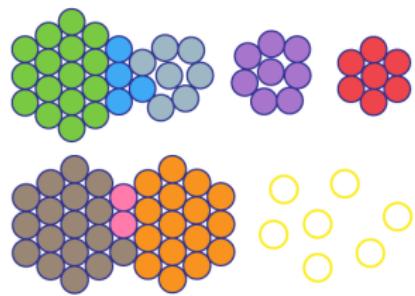
$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	1	0	0	$\frac{1}{17}$	$\frac{16}{17}$
2	2	0	0	$\frac{2}{4}$	0
16	3	$\frac{7}{16}$	0	$\frac{1}{16}$	$\frac{8}{16}$



## Clustervergleich (SECC)

## Partnercluster

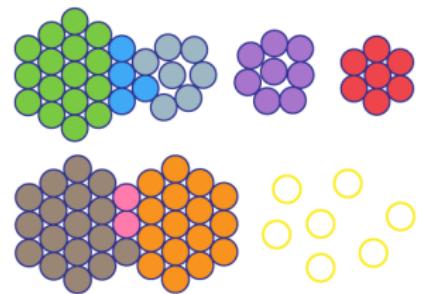
	7	7	4	16	8
$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	0	0	25	100	0
2	0	0	6	94	0
2	0	0	50	0	0
16	44	0	25	0	100
3	100	0	6	50	0



## Ereigniserkennung: Death

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	0	0	25 6	100 94	0
2	0	0	50 100	0	0
16	100 44	0	25 6	0	100 50



Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○○○  
●○○○

Visualisierung  
○○○○○  
○○

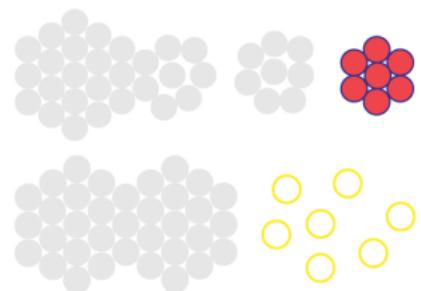
Ergebnisse  
○○  
○○○○

## Ereignisheuristik

### Ereigniserkennung: Death

7      7      4      16      8

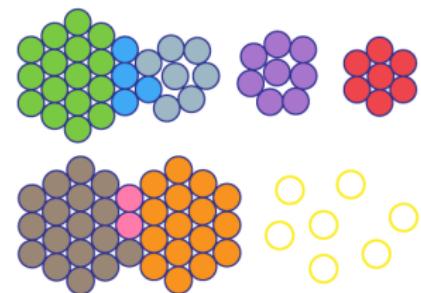
$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
1	0	0	25	100	0
2	0	0	50	0	0
16	100	44	25	0	100



## Ereigniserkennung: Merge

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	0	0	25 6	100 94	0
2	0	0	50 100	0	0
16	44	0	25 6	0	50

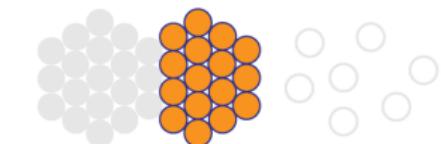
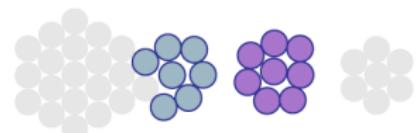




## Ereigniserkennung: Merge

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	0	0	25 6	100 94	0
2	0	0	50 100	0	0
16	100 3 44	0	25 6	0	100 50



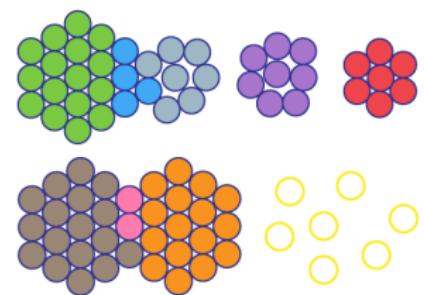
Mindestverhältnis  
gem. Partikel: 30  
Mindestpartner: 2

„Große Partner“

## Ereigniserkennung: Fehldetektion (Split)

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	0	0	25	100	0
2	0	0	50	0	0
16	44	0	6	25	50



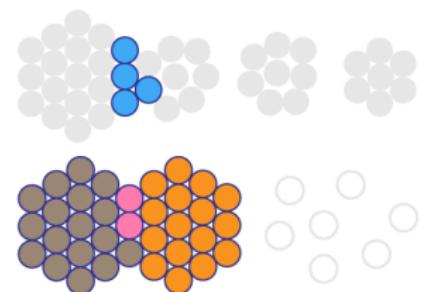
## Ereigniserkennung: Fehldetektion (Split)

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	0	0	25	100	0
2	0	0	50	0	0
16	3	44	0	25	0



Mindestverhältnis  
gem. Partikel: 25  
Mindestpartner: 2



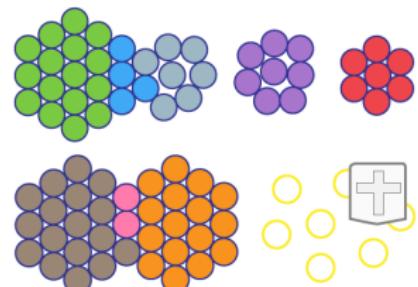
→ „Große Partner“

## Ereigniserkennung: Zusammenfassung

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	1				
2	2				
16	3				

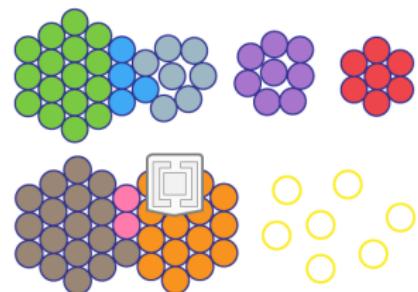
$t_{i-1} \rightarrow t_i$

## Ereigniserkennung: Zusammenfassung

7      7      4      16      8

$t_{i-1}$	1	2	3	4	5
17	1				
2	2	$t_i \rightarrow t_{i-1}$			
16	3				



rückwärtsgerichtet

Suchreichweite  
Mindestclustergröße

Mindestverh. f. große Partner  
Mindestanzahl großer Partner

### Partikeldaten

Position  
vorzeichenbehaftete  
Distanz

### Strukturanalyse

Nachbarschaftssuche  
CFD: Cluster Fast Depth  
Clusterreduktion

### Ereigniserkennung

SECC: Clustervergleich  
Ereignisheuristik  
Clustervergleichsmatrix  
Partnercluster

### Visualisierung

Ereignisglyphen

Cluster  
Größe  
(Anzahl Partikel)

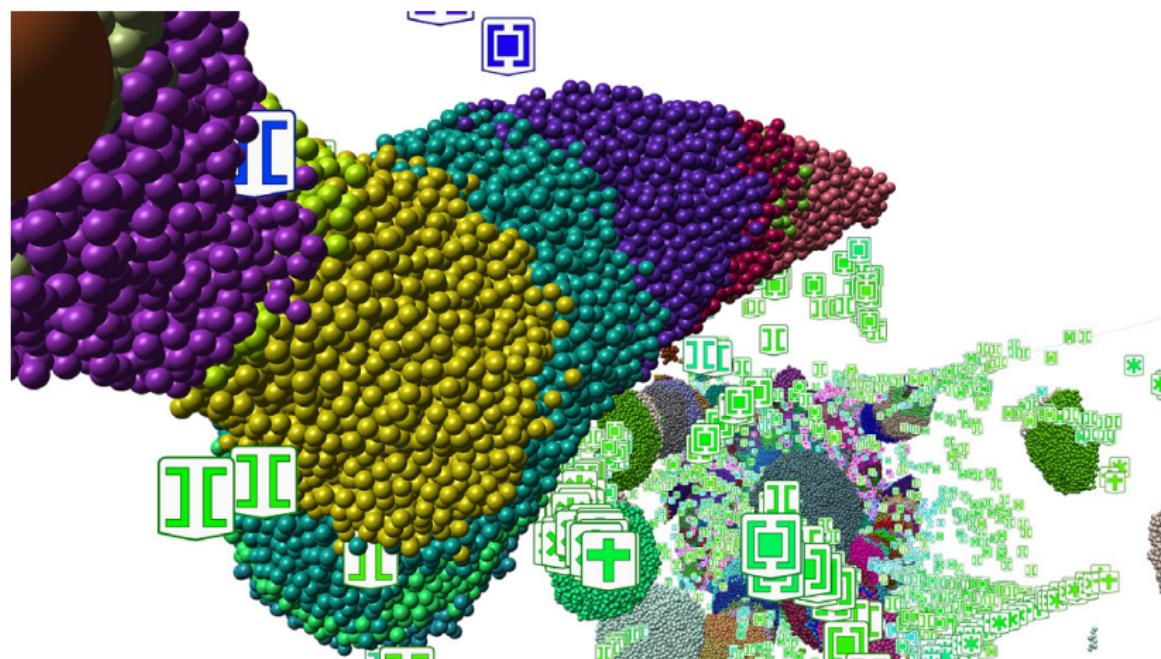
Ereignis  
Position  
Zeitpunkt  
Art

### Clusterkennzeichnung

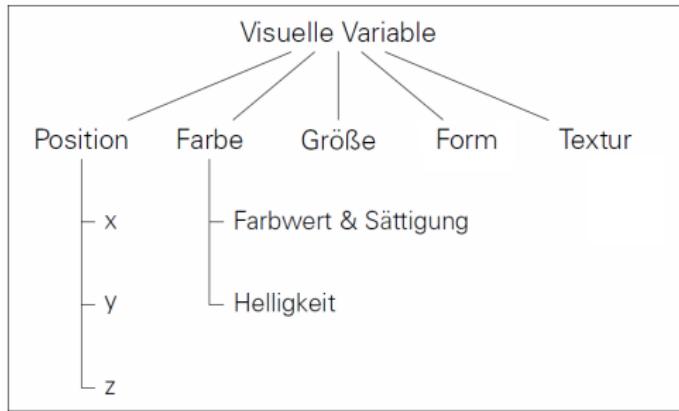
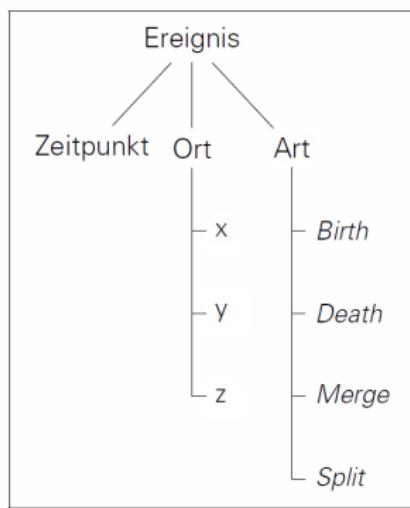
### Ereignisdaten

### Strukturereignisse

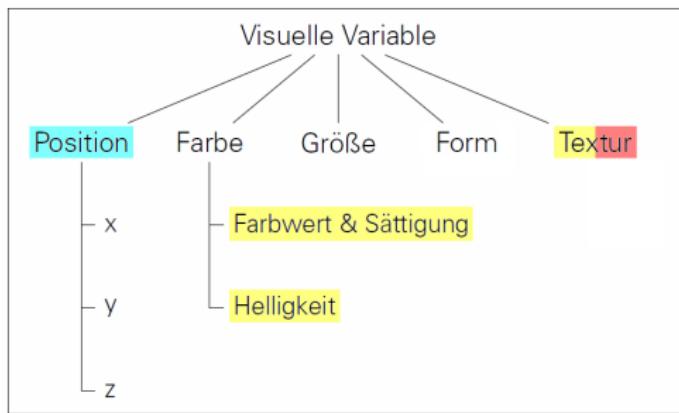
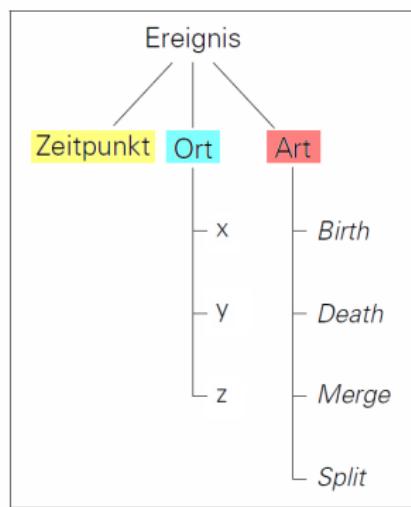
# Glyphen in situ



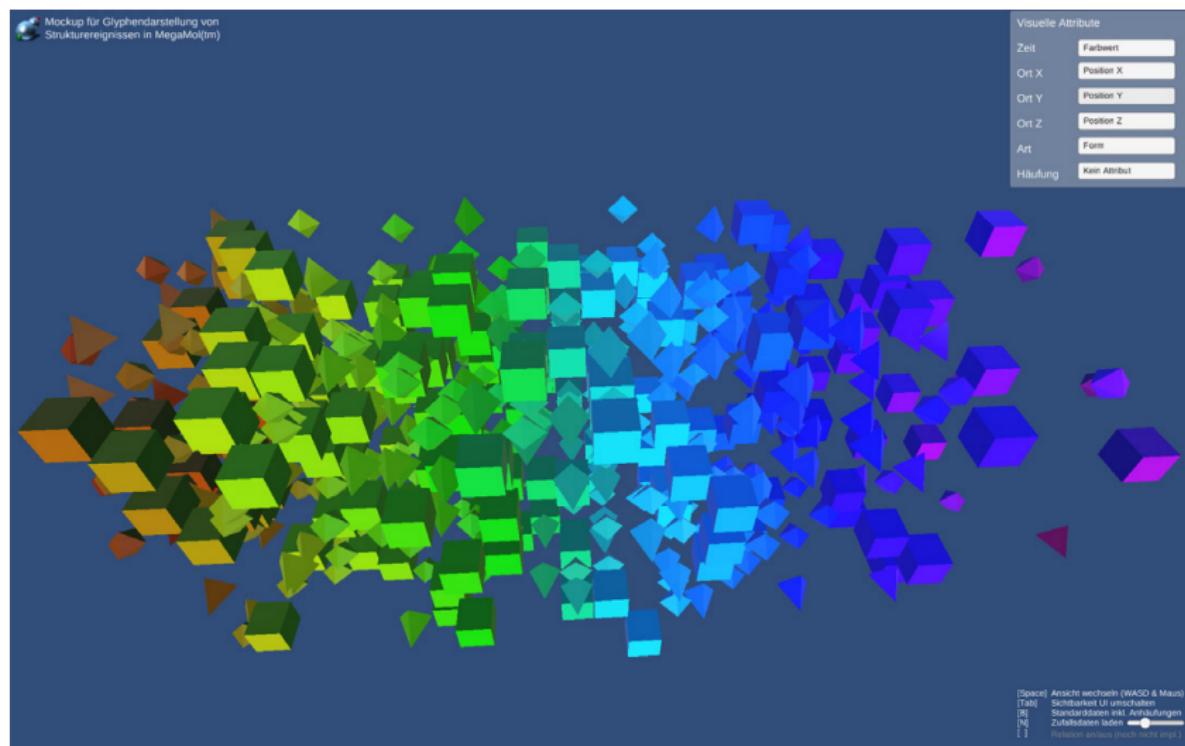
# Ereignisparameter und visuelle Variablen



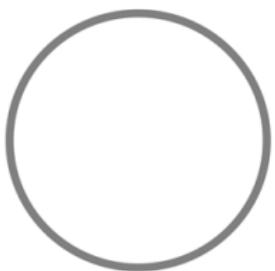
# Zuweisung der visuellen Variablen



# Mockup mit beispielhafter Variablenzuweisung (WebGL)



# Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



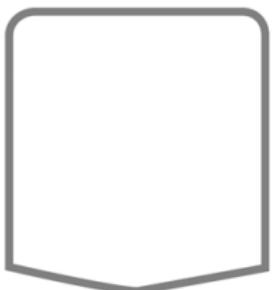
- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

# Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



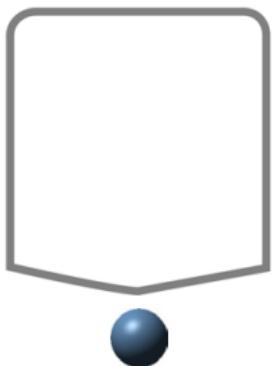
- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

# Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

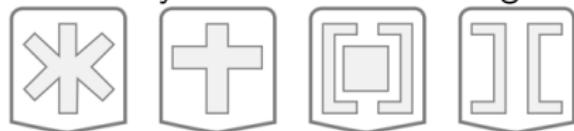
# Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

# Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart

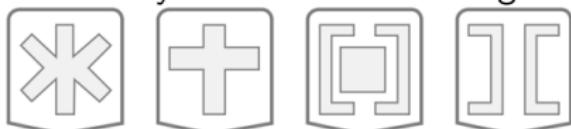
Narrativ symbolische Darstellung



- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

# Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart

Narrativ symbolische Darstellung



Abstrakt symbolische Darstellung



- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

# Glyphdarstellung Strukturereignis: Zeitdarstellung

Füllstand (Textur)

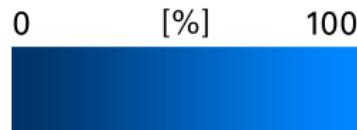


# Glyphdarstellung Strukturereignis: Zeitdarstellung

Füllstand (Textur)



Helligkeit

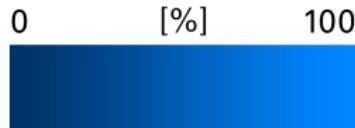


# Glyphdarstellung Strukturereignis: Zeitdarstellung

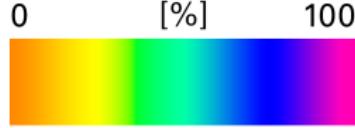
Füllstand (Textur)



Helligkeit

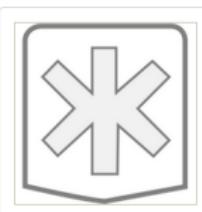


Farbwert

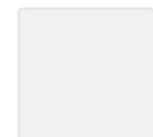


# Zuordbarkeit der Kodierung

Es sind vier Glyphen zu sehen. Jeder Glyph steht für ein Strukturereignis.  
Bitte ordne die zufällig angeordneten Bilder nach ihrer Bedeutung:

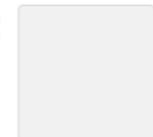


1



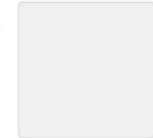
Geburt

2



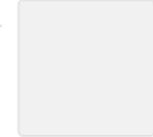
Tod

3



Verschmelzung

4



Trennung

Einleitung

○○○○  
○○○○

Umfrage

Analyse der Partikelstruktur

○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse

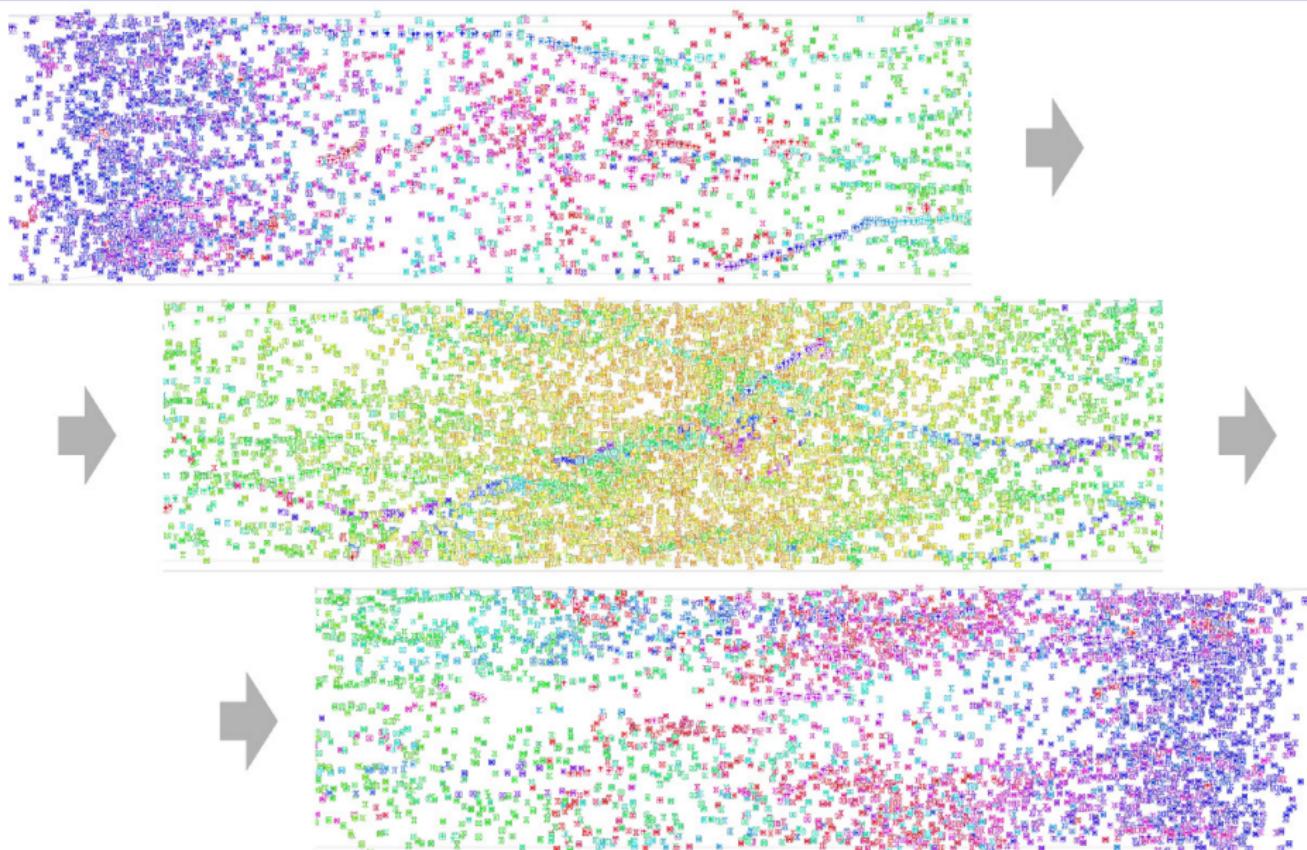
○○○○  
○○○○

Visualisierung

○○○○○  
○○

Ergebnisse

○●  
○○○○



## Zusammenfassung, Bewertung und Ausblick

Suchreichweite  
Mindestclustergröße

Mindestverh. f. große Partner  
Mindestanzahl großer Partner

Glyphgröße  
Filter Ereignisart  
Filter Zeitpunkt  
Art d. Zeitdarstellung

 Partikeldaten

Position  
vorzeichenbehaftete  
Distanz

## Strukturanalyse

Nachbarschaftssuche  
CFD: Cluster Fast Depth  
Clusterreduktion

## Ereigniserkennung

SECC: Clustervergleich  
Ereignisheuristik  
Clustervergleichsmatrix  
Partnercluster

## Visualisierung

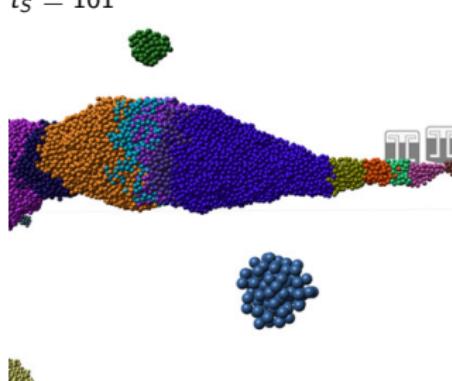
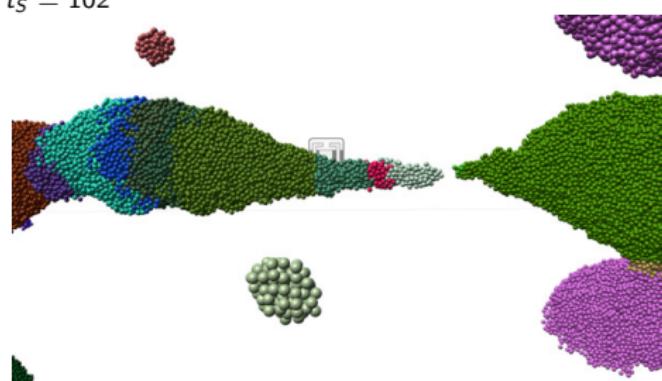
Ereignisglyphen  
-----  
Strukturereignistaxonomie  
Darstellungsvarianten

Cluster  
Größe  
(Anzahl Partikel)

Ereignis  
Position  
Zeitpunkt  
Art

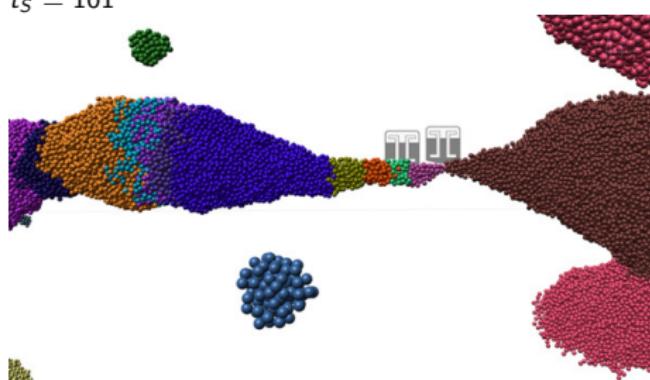
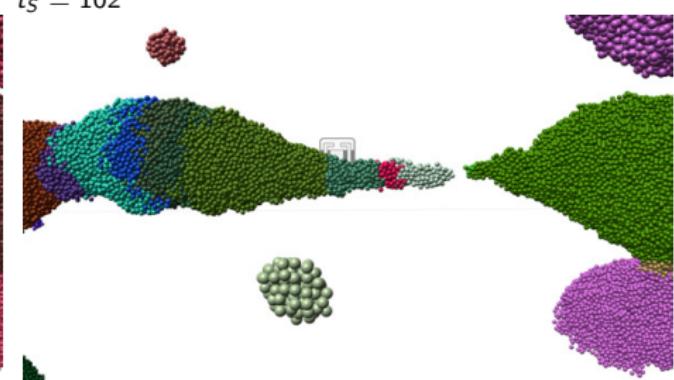
 Clusterkennzeichnung Ereignisdaten Strukturereignisse

## Zusammenfassung, Bewertung und Ausblick

 $t_S = 101$  $t_S = 102$ 

- ▶ stattfindende Ereignisse können detektiert und visualisiert werden
- ▶ Unterscheidung von Fehldetektionen und tatsächlichen Ereignissen schwierig

## Zusammenfassung, Bewertung und Ausblick

 $t_S = 101$  $t_S = 102$ 

- ▶ stattfindende Ereignisse können detektiert und visualisiert werden
- ▶ Unterscheidung von Fehldetektionen und tatsächlichen Ereignissen schwierig

# Ausblick

- ▶ Betrachtung über mehrere Zeitschritte → Ereignisse können miteinander in Beziehung gesetzt werden
- ▶ Clusternachbarschaftsgraph ergänzend zur Heuristik
- ▶ Nutzung von *Konturbäumen* anstatt des *CFD*

Einleitung  
○○○○  
○○○○

Analyse der Partikelstruktur  
○○○  
○○○

Erkennung der Ereignisse  
○○○○  
○○○○

Visualisierung  
○○○○○  
○○

Ergebnisse  
○○  
○○○●

Zusammenfassung, Bewertung und Ausblick

# Fragen

Fragen?