

Motivation

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

Motivation

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

Motivation

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

Motivation

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

Motivation

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

Motivation

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

Vorliegender Datensatz

- ▶ zerreißender Flüssigkeitsfilm
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ 2 Millionen Partikel
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Vorliegender Datensatz

- ▶ zerreißender Flüssigkeitsfilm
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ 2 Millionen Partikel
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

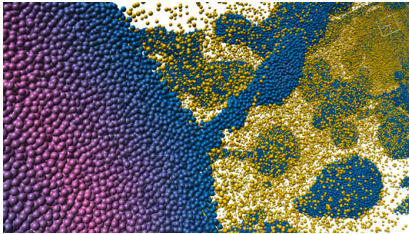
Vorliegender Datensatz

- ▶ zerreißender Flüssigkeitsfilm
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ 2 Millionen Partikel
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Vorliegender Datensatz

- ▶ zerreißender Flüssigkeitsfilm
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ 2 Millionen Partikel
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Vorliegender Datensatz

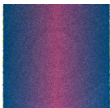
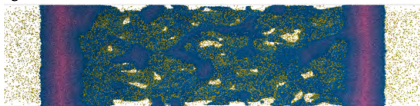


- ▶ zerreißender Flüssigkeitsfilm
- ▶ 150 Zeitschritte
- ▶ 2 Millionen Partikel
- ▶ Partikelposition je Zeitschritt
- ▶ Partikelabstand zur am nächsten gelegenen Phasengrenze

Expandierende Flüssigkeit:

 $t_s = 0$ 

Expandierende Flüssigkeit:

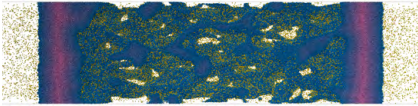
 $t_S = 0$  $t_S = 20$ 

Expandierende Flüssigkeit:

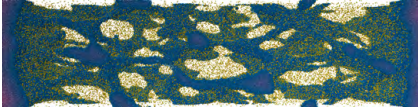
$t_S = 0$



$t_S = 20$



$t_S = 30$

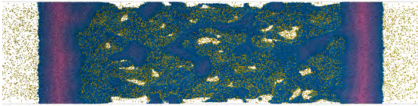


Expandierende Flüssigkeit:

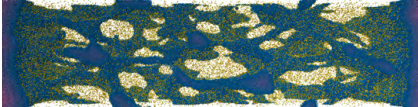
$t_S = 0$



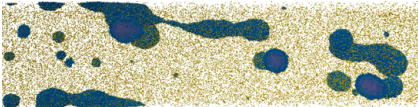
$t_S = 20$



$t_S = 30$



$t_S = 100$



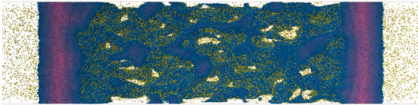
Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

Expandierende Flüssigkeit:

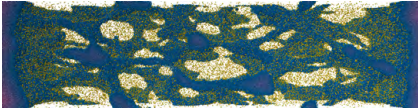
$t_S = 0$



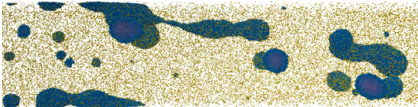
$t_S = 20$



$t_S = 30$

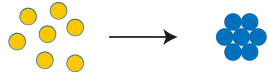


$t_S = 100$

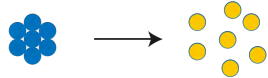


Auftretende *Strukturereignisse*:

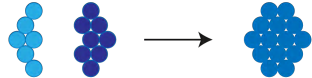
Birth



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

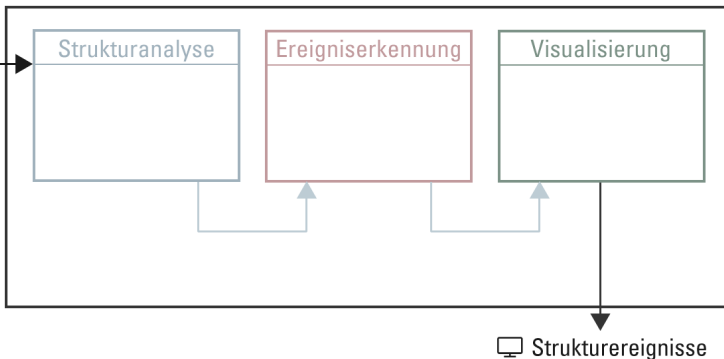
Lösung: Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Strukturveränderungen im geometrischen Kontext der Originaldaten.

Ziel

TODO: Makrobild, Seitenansicht, mit überlagerter Darstellung



Partikeldaten

Position
vorzeichenbehaftete
Distanz

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).

Verwandte Arbeiten

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

Einordnung dieser Arbeit

- ▶ Strukturuntersuchung von Punktdaten
- ▶ Visualisierung (zeitabhängiger) Elemente im Ortsraum visualisierter Punktdaten

Einleitung
○○○
○○○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○
○○○○○

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○

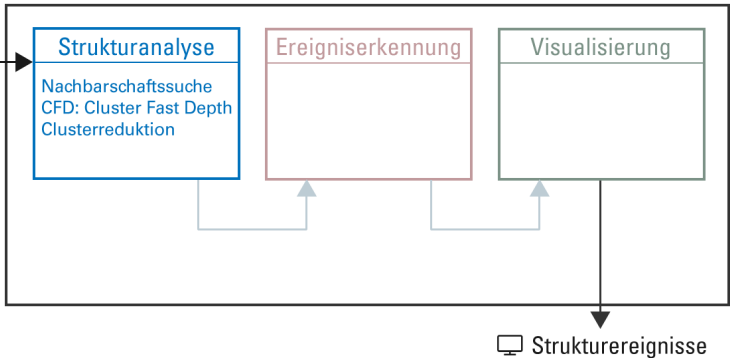
Visualisierung
○○○
○○○

Ergebnisse
○○○
○○

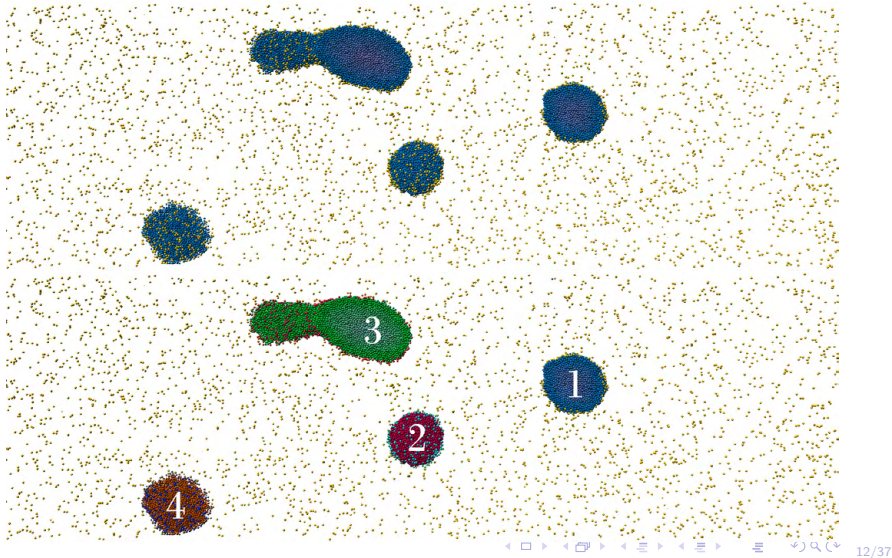


Partikeldaten

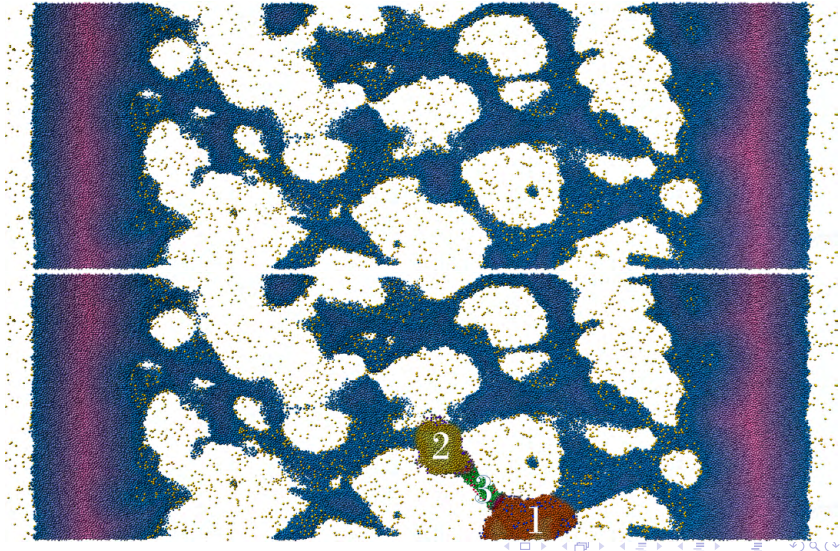
Position
vorzeichenbehaftete
Distanz



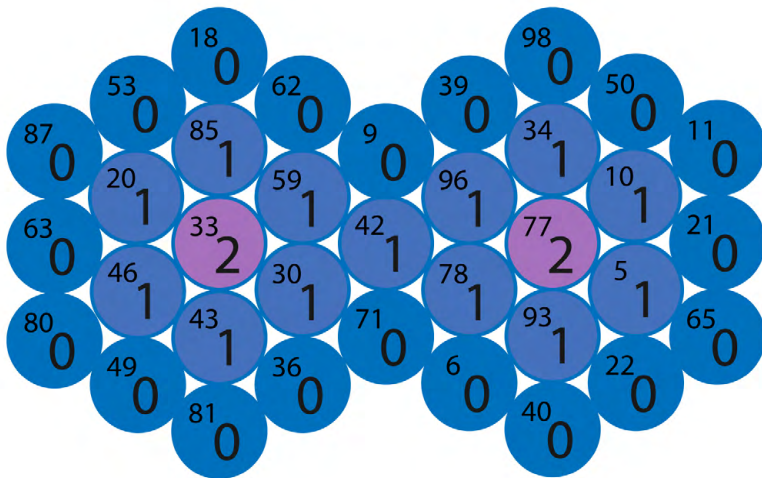
Cluster als Zusammenhangskomponenten



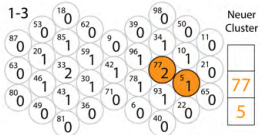
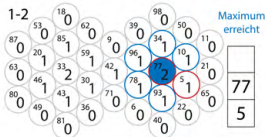
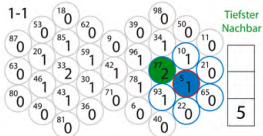
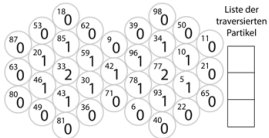
Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



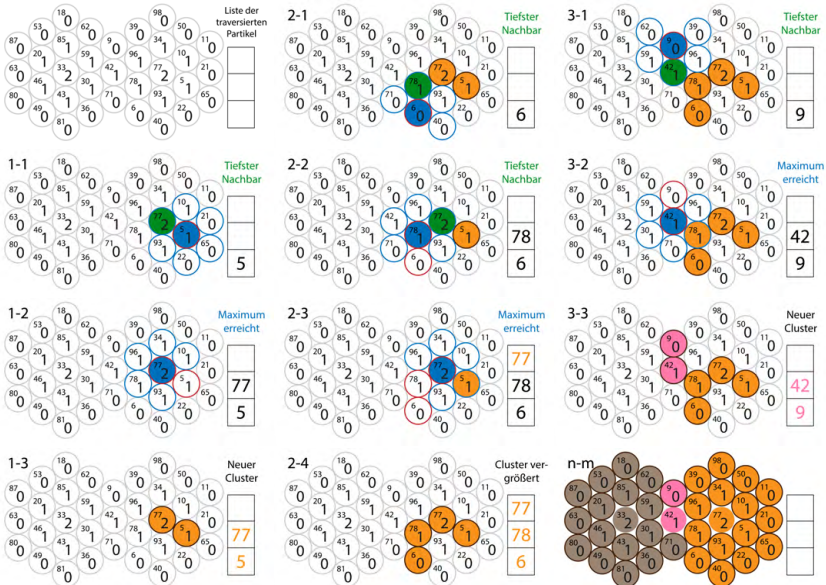
Zusammenhangskomponente



Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



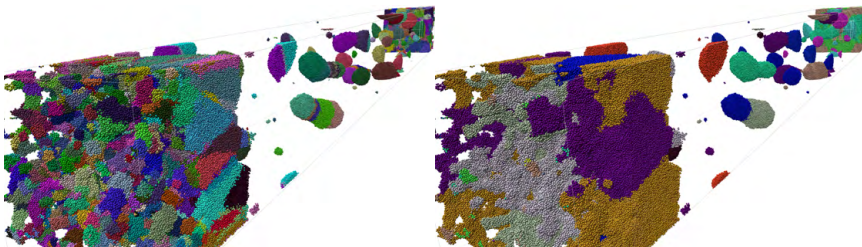
Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



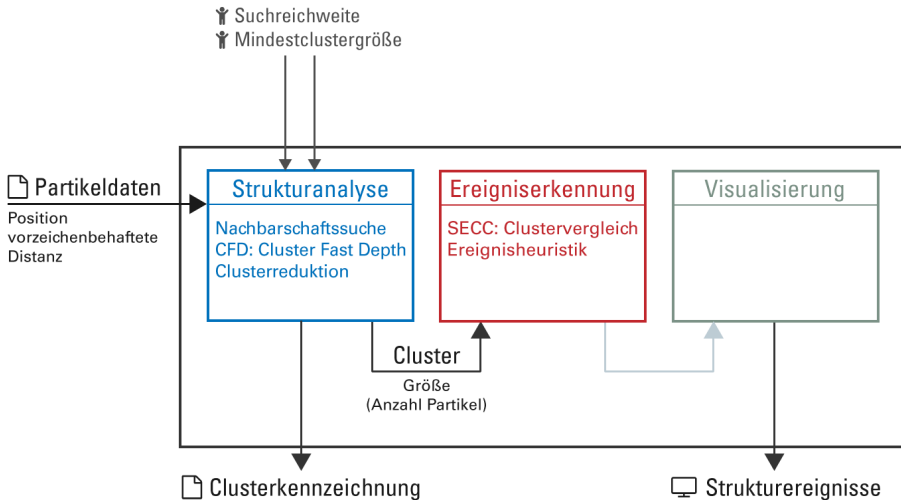
Überprüfung der erzeugten Cluster

Einfärbung der Partikel zur Clusterüberprüfung:

- ▶ zufällige Färbung in jedem Zeitschritt (links)
- ▶ Färbung anhand von Clusterparametern und
- ▶ Vererbung vom vorhergehenden Zeitschritt (rechts)



Vererbung geschieht unter Nutzung des Clustervergleichs.



Clustervergleichsmatrix

TODO: Bild Clustervergleichsmatrix vorauss. 5x5 nötig:
mit ClusterIDs und Kennzeichnung aktueller/vorhergehender Zeitschritt,
mit Clustergröße,
mit Partikelmengen

Partnercluster

TODO: Bild Clustervergleichsmatrix:
Spalten und Zeileneinfärbung (Rückwärts-/Vorwärtsgerichteter Vergleich)

Einleitung	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
○○○ ○○○○○○	○○ ○○○○○	○○● ○○	○○○ ○○○	○○○ ○○
Clustervergleich (SECC)				

Relevante Werte

TODO: Bild Clustervergleichsmatrix:

Summen und Anteile in Extrazeile/Spalte außen dran

Große Partner eventuell erst bei Split/Merge hervorheben (dort erst gebraucht!)

Kann u.U. mit vorhergehender Folie verschmelzen (hängt von der Komplexität der Grafik ab).

Birth und Death

TODO: Bild Clustervergleichsmatrix:
Spalte ohne gemeinsame Anteile
Zeile ohne gemeinsame Anteile

Merge und Split

TODO: Bild Clustervergleichsmatrix:
Spalte mit großen Partnern und Grenzwert
Spalte mit großen Partnern und Grenzwert

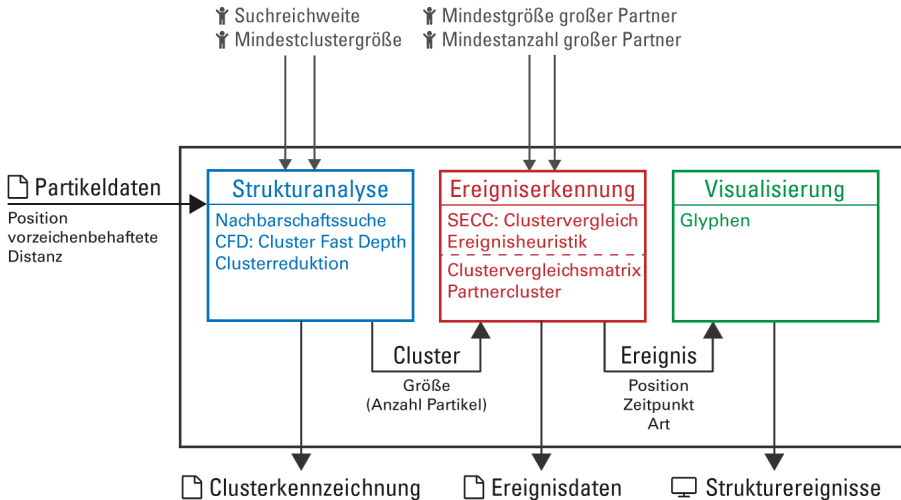
Einleitung
○○○
○○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○
○○○○○

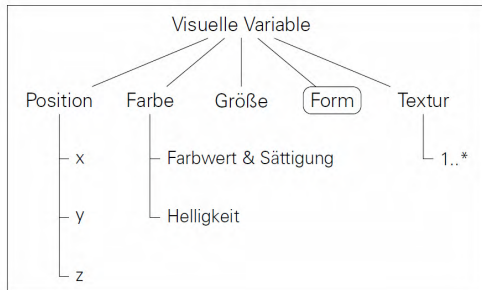
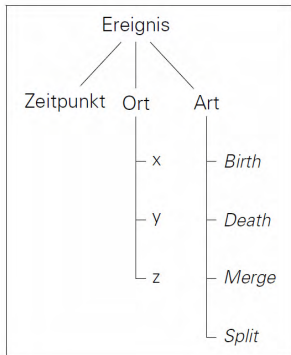
Erkennung der Ereignisse
○○○
○○

Visualisierung
○○○
○○○

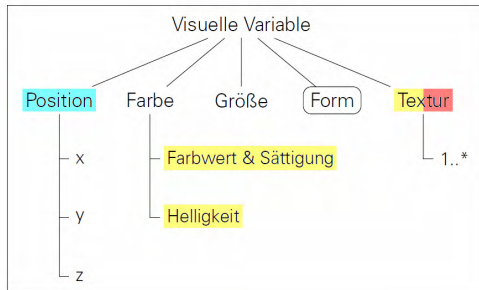
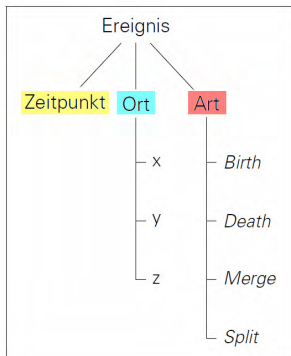
Ergebnisse
○○○
○○



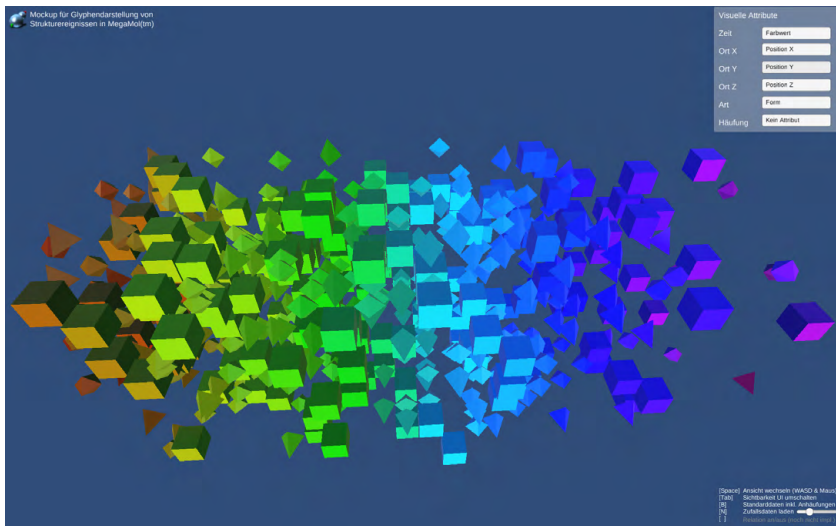
Ereignisparameter und visuelle Variablen



Zuweisung der visuellen Variablen



Mockup mit beispielhafter Variablenzuweisung (WebGL)

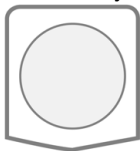


Glyphen in situ

TODO: Abbildung Glyphen im Partikelraum (identisch zur Eingangsfolie
i-¿ Wiedererkennung!)

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



Einleitung

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Visualisierung

Ergebnisse

Umfrage

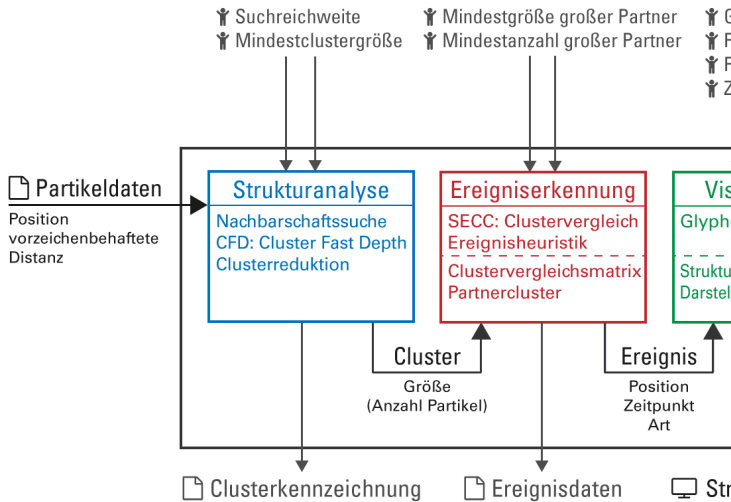
Bewertung

- ▶ Ziel: Bewertung der Visualisierung
- ▶ Zielgruppe: Laien und Professionelle
- ▶ Glyphdesign: intuitive Erkennung der Ereignisart, Zeitkodierung (Helligkeit: Erkennung ohne Farbskala) in Makrosicht, Positionierung, ...
- ▶ fachliche Interpretation Visualisierung

Einleitung ○○○ ○○○○○○	Analyse der Partikelstruktur ○○ ○○○○○	Erkennung der Ereignisse ○○○ ○○	Visualisierung ○○○ ○○○	Ergebnisse ○●○ ○○
Umfrage				

Bilder der Fragestellung: Auswertungsbilder nur nennen oder maximal als Zahl





Zusammenfassung

Bewertung und Ausblick

- ganz wenige Stichpunkte: was funktioniert gut (als Überleitung zur Zusammenfassung), was funktioniert nicht (als Überleitung zum Ausblick)

- Ausblick

Erweiterung der Algos kann bei Ergebnisse kurz genannt werden
Nutzung des Programms kann in Demo gezeigt werden

Einleitung	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
○○○	○○	○○○	○○○	○○○
○○○○○○	○○○○○	○○	○○○	○●
Bewertung				

Fragen

Fragen?