

Einleitung

oooo
oooo

Analyse der Partikelstruktur

ooo
ooo

Erkennung der Ereignisse

oooo
oooo

Visualisierung

ooooo
oo

Ergebnisse

oo
oooo

Visualisierung von Strukturveränderungen in Molekulardynamikdaten

Bachelorarbeit Verteidigung

Richard Hähne

Institut für Software- und Multimediatechnik
Professur für Computergraphik und Visualisierung

4. Oktober 2015



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DRESDEN



Computergraphik
und Visualisierung

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

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

Zerreiβender 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

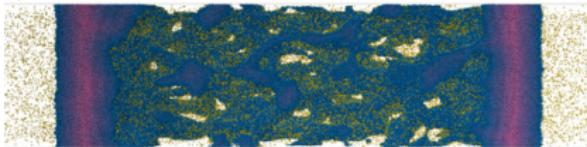
Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

$t_S = 0$



$t_S = 20$



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

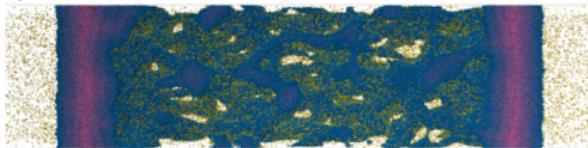
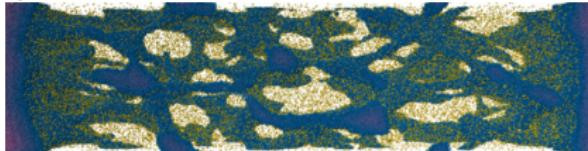
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

Datensatz

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

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

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

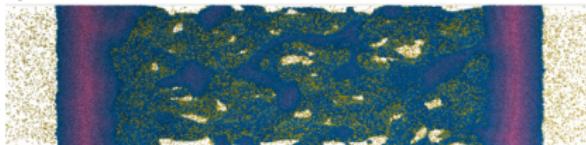
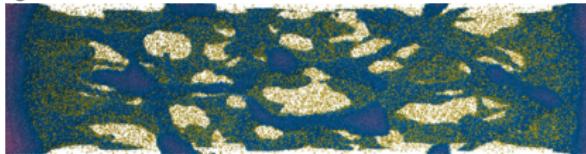
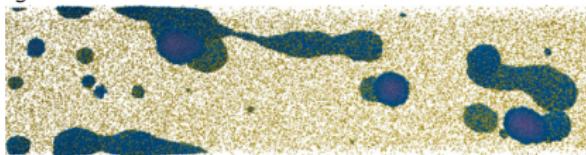
- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
 - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
 - ▶ Gasphase
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

Datensatz

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

Strukturereignisse während einer Molekulardynamiksimulation

Zerreißender Flüssigkeitsfilm:

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

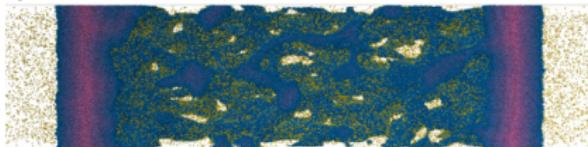
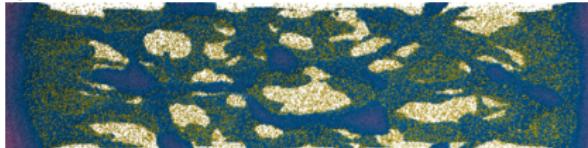
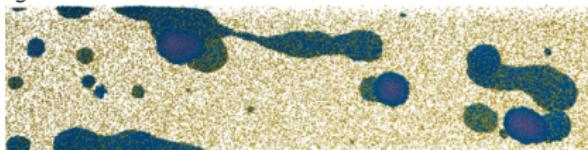
- ▶ Flüssigkeitsfilm umgeben von Vakuum
- ▶ zerreißt
- ▶ zwei Phasen
 - ▶ Flüssigphase (blau - lila)
 - ▶ Gasphase
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

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

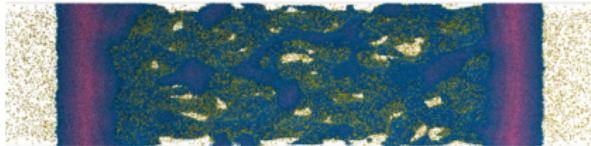
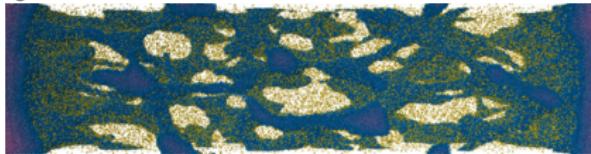
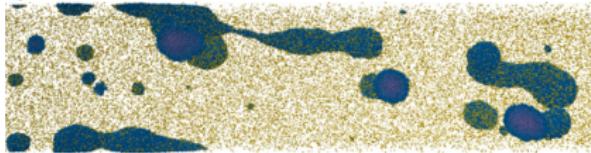
- ▶ Entstehung von Filamenten
- ▶ Entstehung von Tröpfchen

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



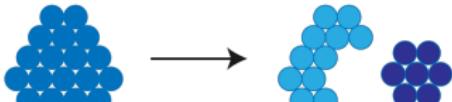
Death



Merge



Split



Ziel

Wie verhält sich die Flüssigkeit, welche Strukturveränderungen treten auf?

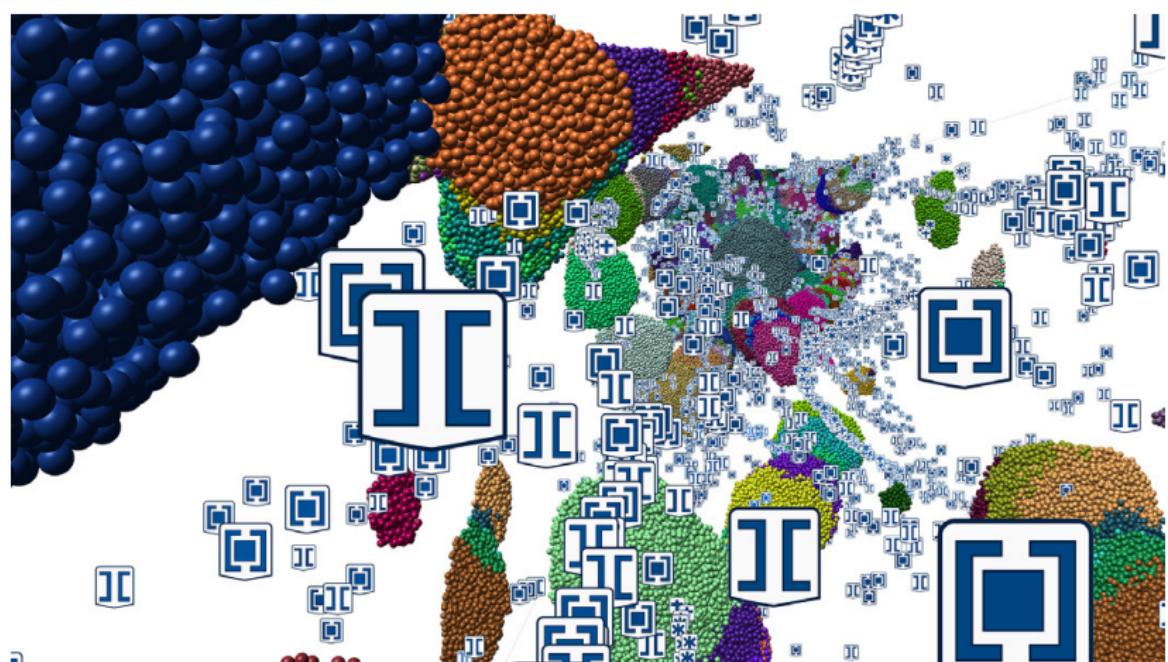
Die vorliegende Animation ist zur Analyse nur bedingt geeignet:

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

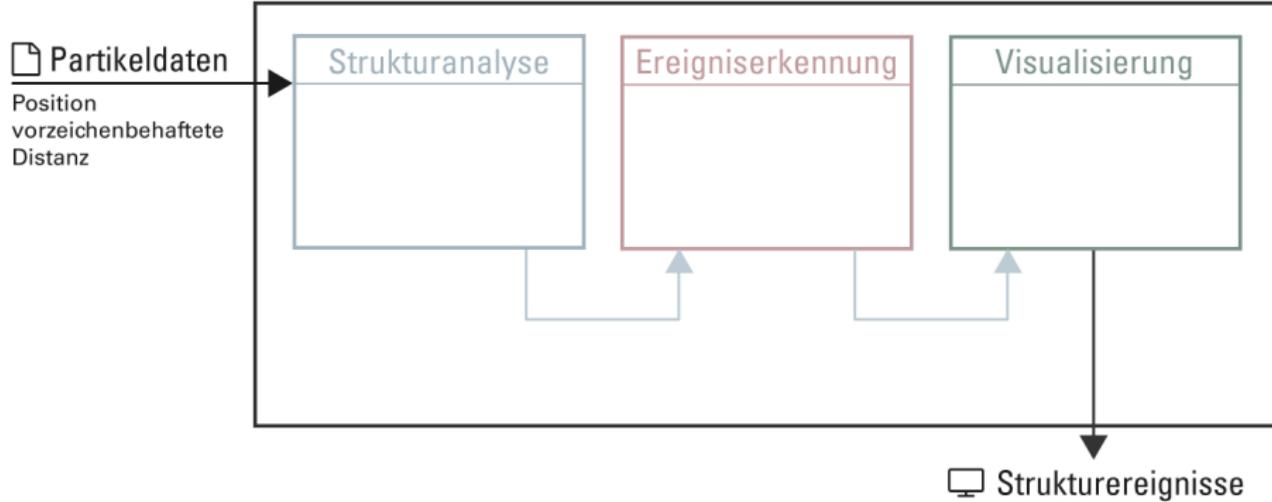
Lösung: Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Strukturveränderungen im geometrischen Kontext der Originaldaten.

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

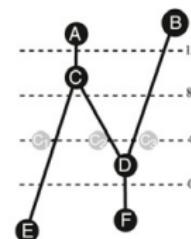
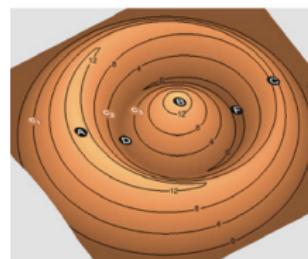
Verwandte Arbeiten

- ▶ 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)

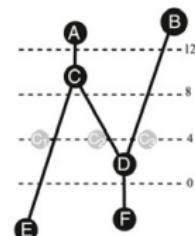
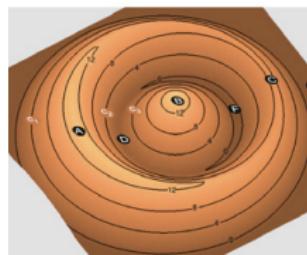
- ▶ ein Skalarfeld (links) wird in einen Baum überführt durch Beachtung kritischer Punkte (Konturbaum, rechts)
- ▶ Selektion von Zusammenhangskomponenten



Verwandte Arbeiten: Strukturanalyse: Konturbäume

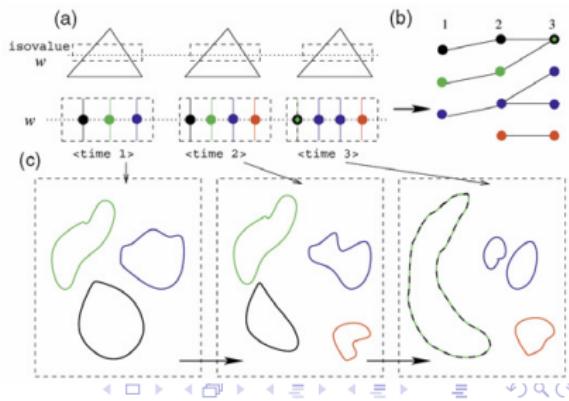
H. Carr et al.: *Flexible isosurfaces: Simplifying and displaying scalar topology using the contour tree*. (2010)

- ▶ 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

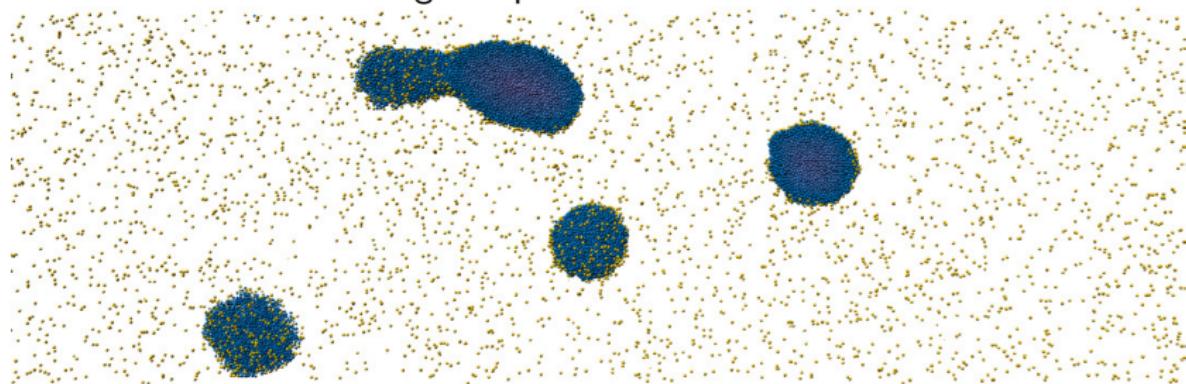
Nachbarschaftssuche
CFD: Cluster Fast Depth
Clusterreduktion

Ereigniserkennung

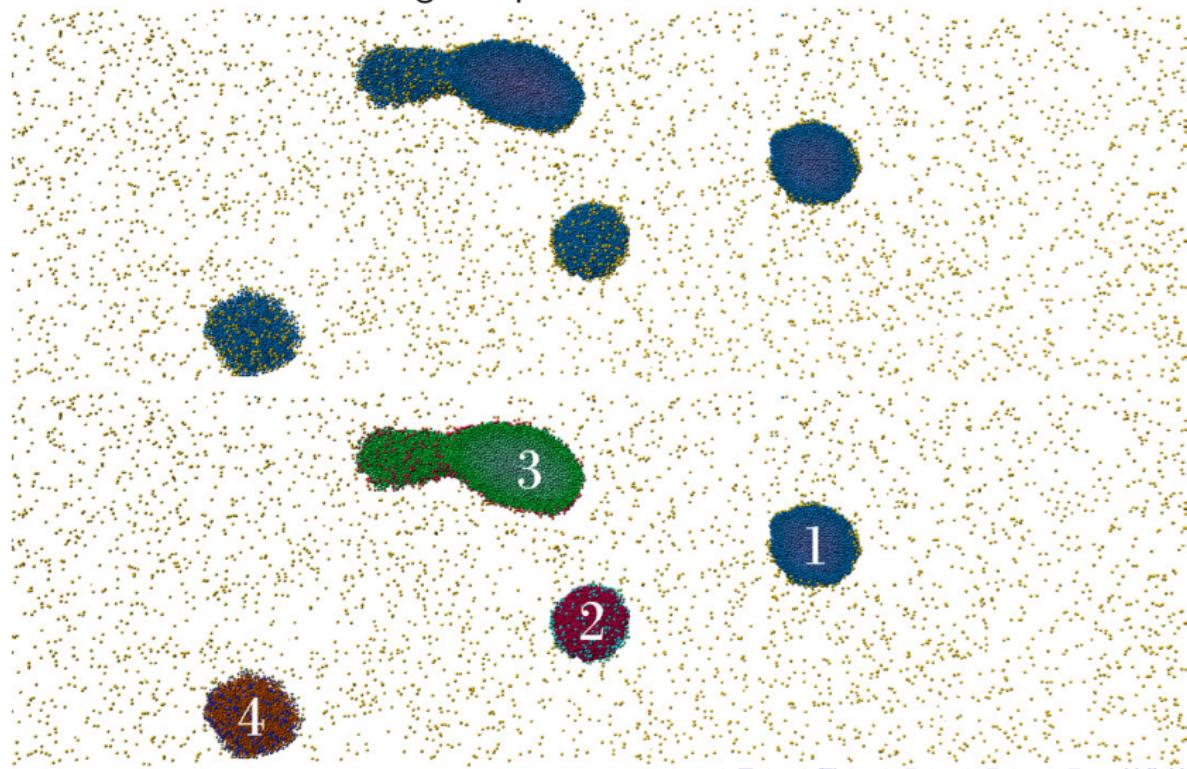
Visualisierung

Strukturereignisse

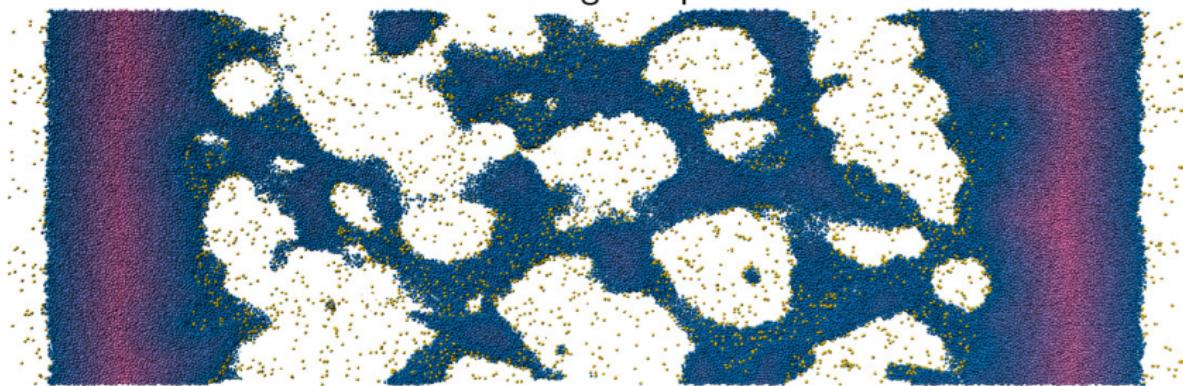
Cluster als Zusammenhangskomponenten



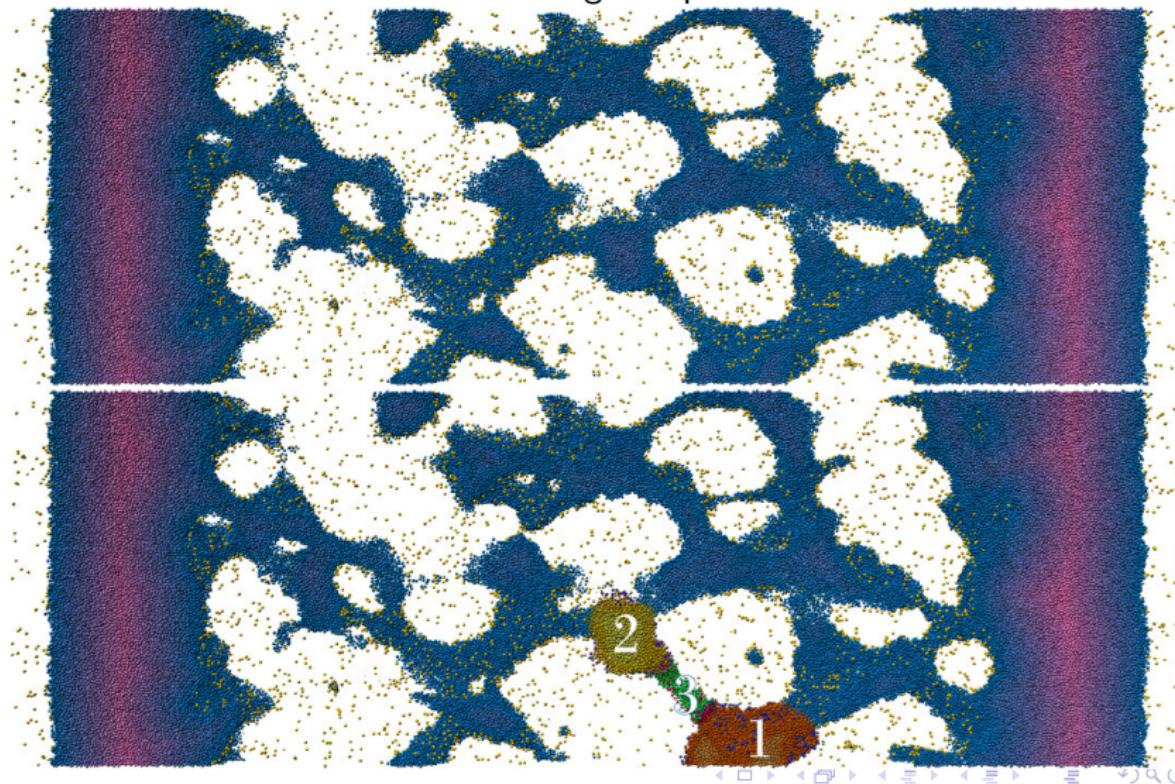
Cluster als Zusammenhangskomponenten



Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



Einleitung
○○○○
○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○○
●○○

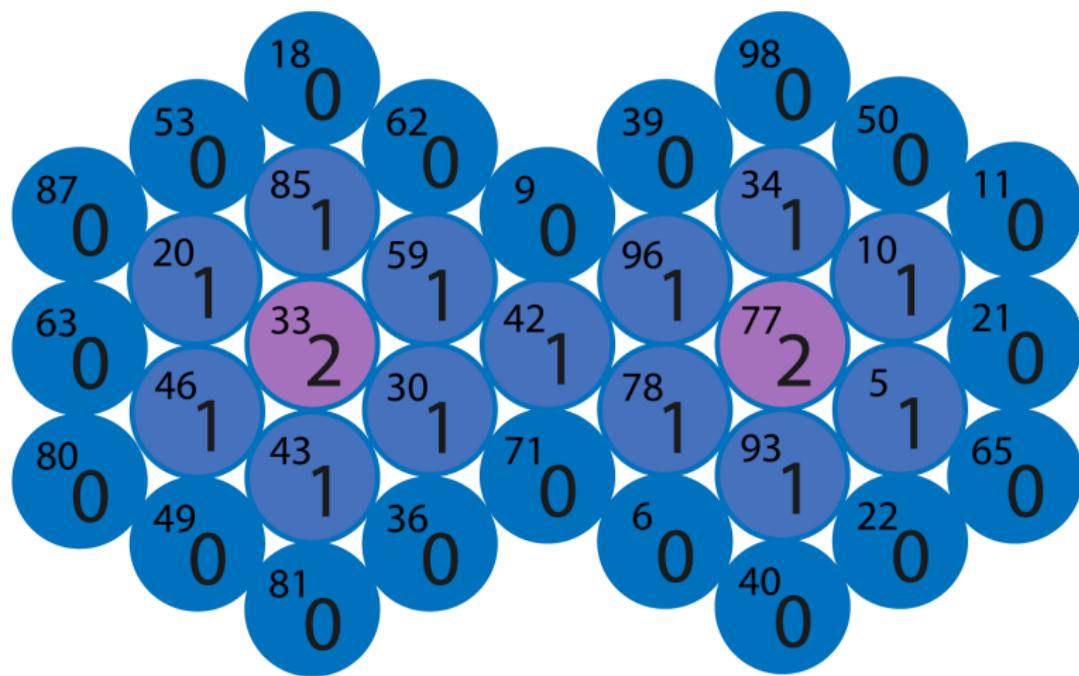
Erkennung der Ereignisse
○○○○
○○○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

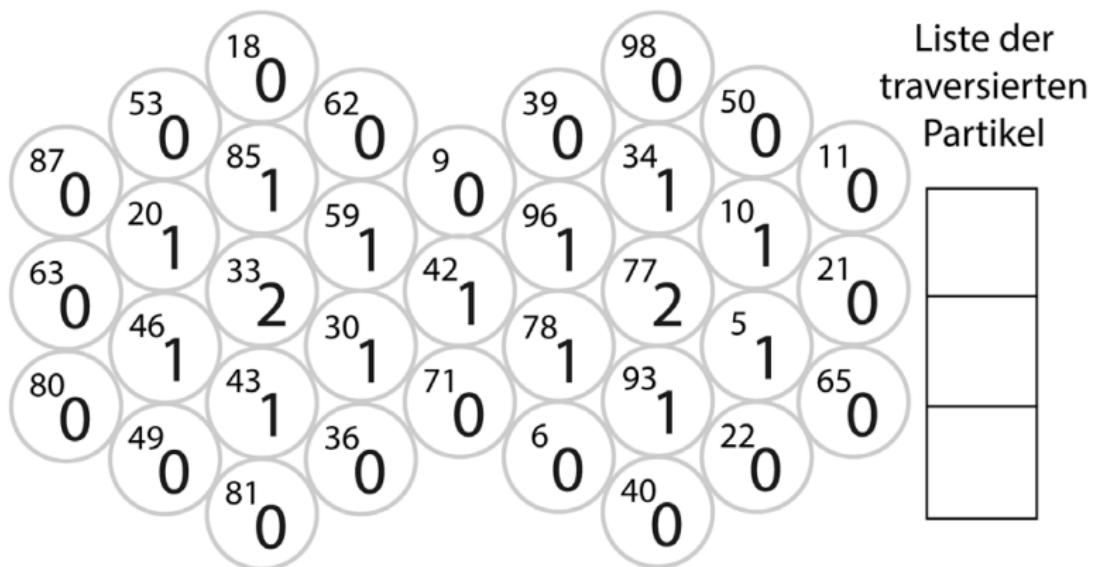
Ergebnisse
○○
○○○○

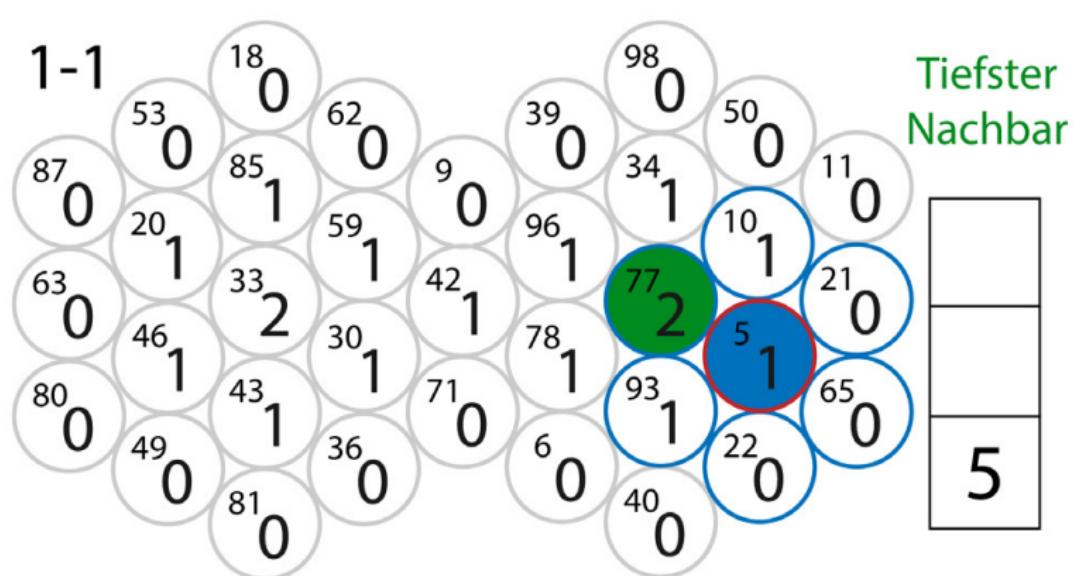
Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

Zusammenhangskomponente

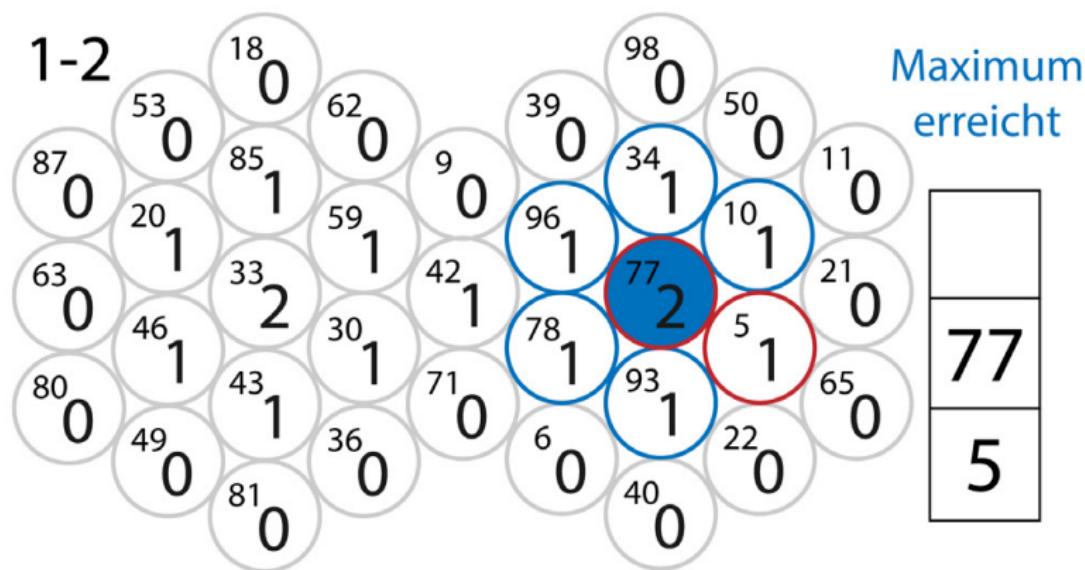


Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

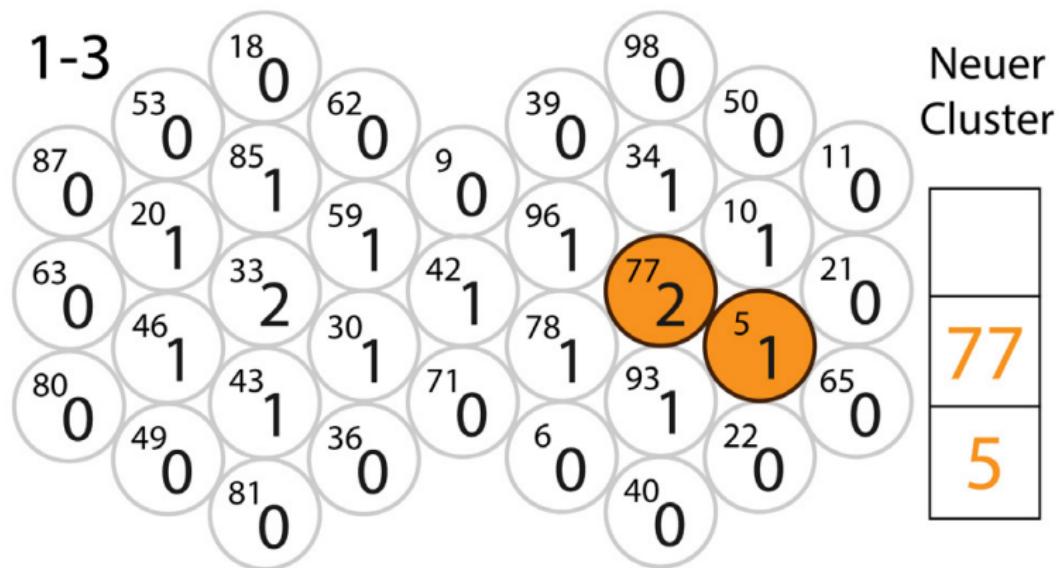




Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



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

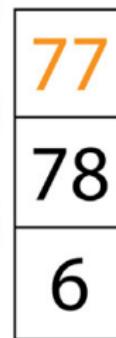
22 0

11 0

21 0

65 0

Maximum erreicht



Einleitung

○○○○
○○○○

Analyse der Partikelstruktur

○○○
○●○

Erkennung der Ereignisse

○○○○
○○○○

Visualisierung

○○○○○
○○○○

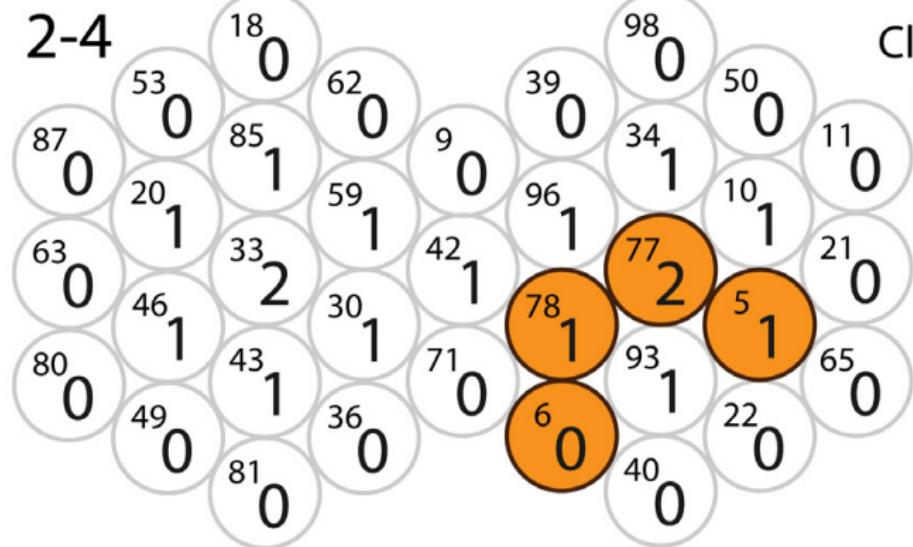
Ergebnisse

○○
○○○○

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



2-4



Einleitung
○○○○
○○○○

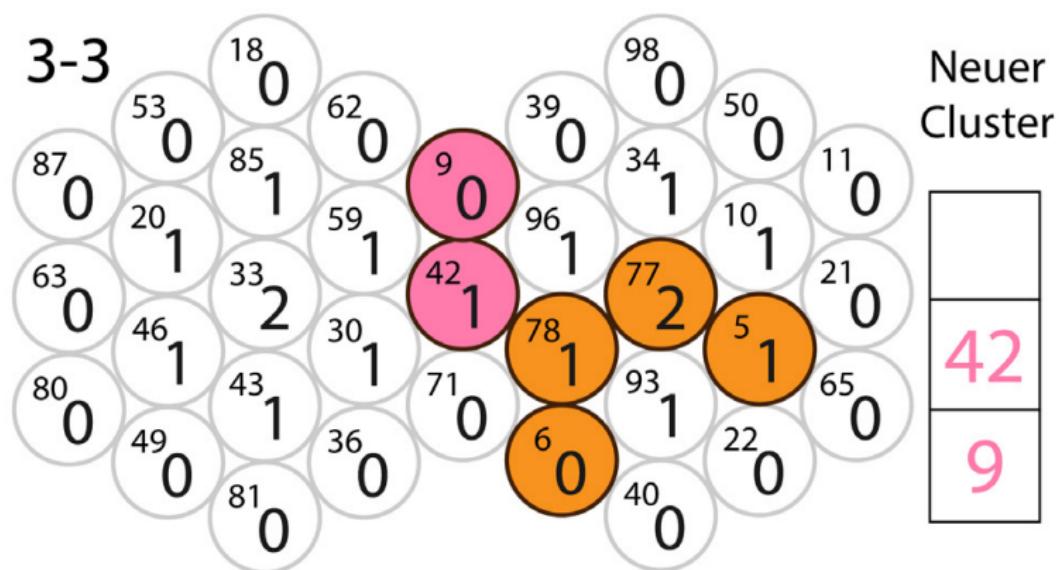
Analyse der Partikelstruktur
○○○
○●○

Erkennung der Ereignisse
○○○○
○○○○

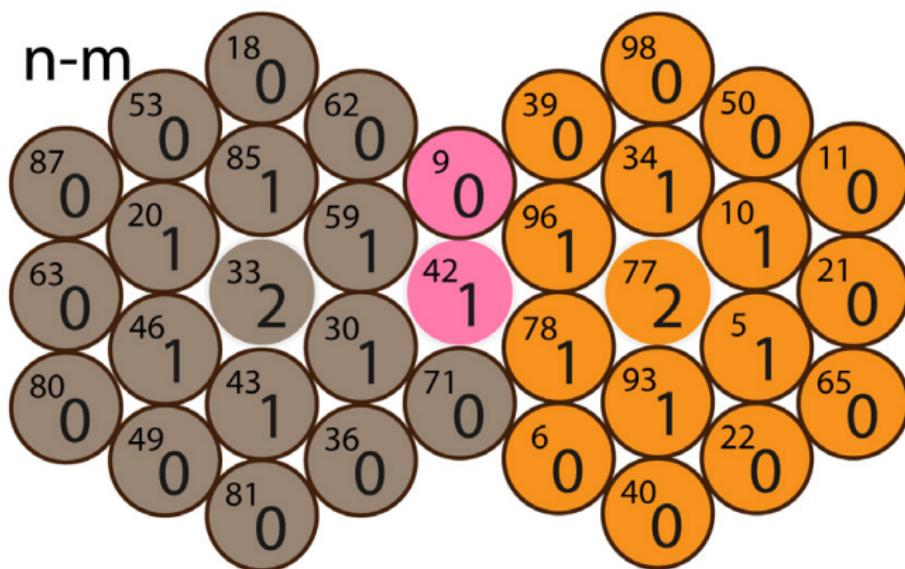
Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○○
○○○○

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus



Überprüfung der erzeugten Cluster

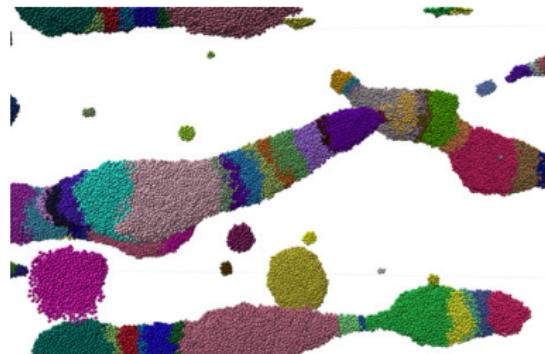
Einfärbung der Partikel zur Clusterüberprüfung:

- ▶ 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

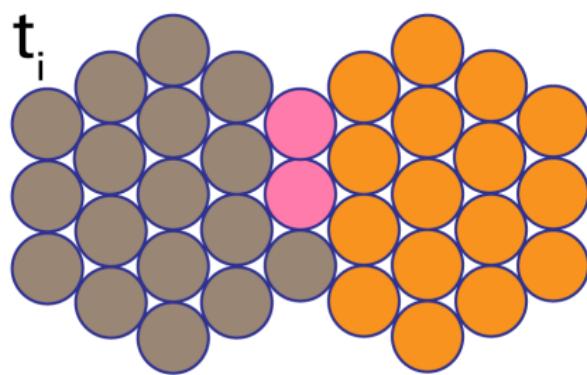
Clusterkennzeichnung

Cluster
Größe
(Anzahl Partikel)

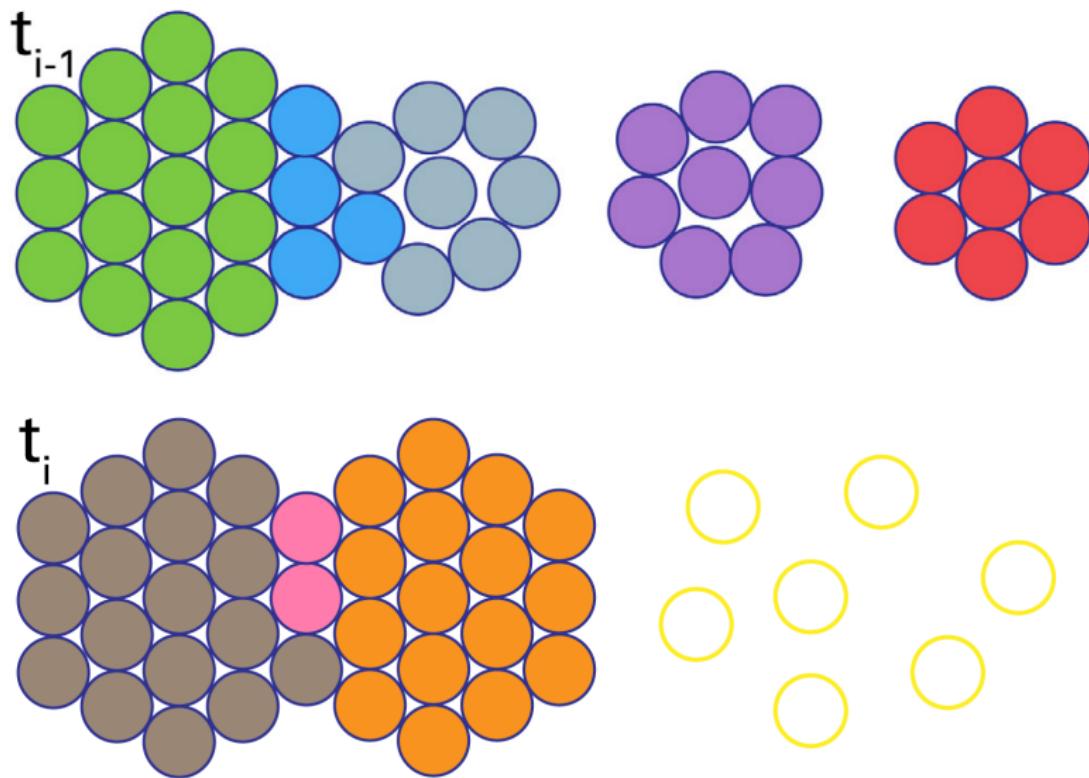
Strukturereignisse

- Suchreichweite
- Mindestclustergröße

Clustervergleich (SECC)



Clustervergleich (SECC)



Einleitung
○○○○
○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○○
○○○

Erkennung der Ereignisse
○○●○
○○○○

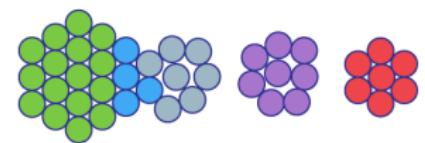
Visualisierung
○○○○○
○○

Ergebnisse
○○
○○○○

Clustervergleich (SECC)

Clustervergleichsmatrix

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



Einleitung
○○○○
○○○○

Analyse der Partikelstruktur
○○○
○○○

Erkennung der Ereignisse
○○●○
○○○○

Visualisierung
○○○○○
○○

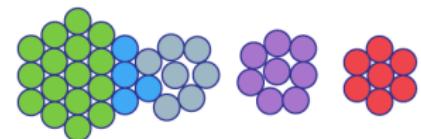
Ergebnisse
○○
○○○○

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
○○●○
○○○○

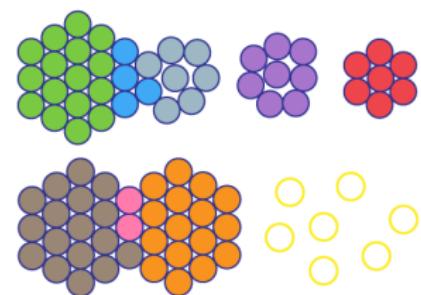
Visualisierung
○○○○○
○○

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
○○●○
○○○○

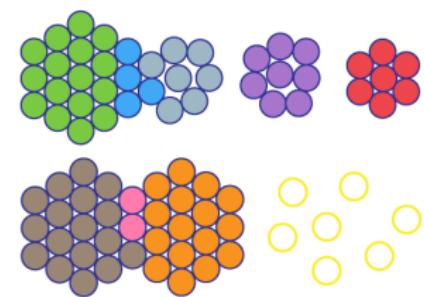
Visualisierung
○○○○○
○○

Ergebnisse
○○
○○○○

Clustervergleich (SECC)

Clustervergleichsmatrix

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

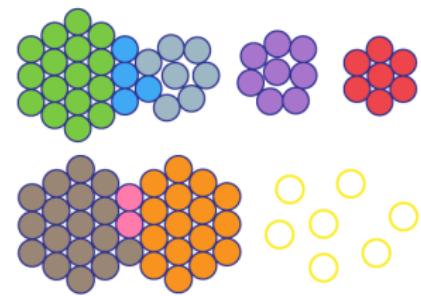


Clustervergleich (SECC)

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

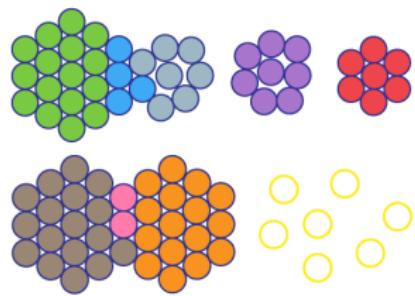


Clustervergleich (SECC)

Partnercluster

7 7 4 16 8

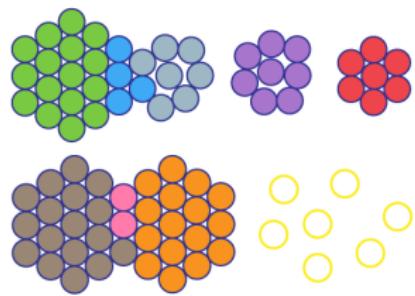
t_{i-1}	1	2	3	4	5
17	1	0	0	$\frac{1}{17}$	$\frac{16}{17}$
2	2	0	0	$\frac{2}{4}$	0
16	3	$\frac{7}{16}$	0	$\frac{1}{16}$	$\frac{8}{16}$



Clustervergleich (SECC)

Partnercluster

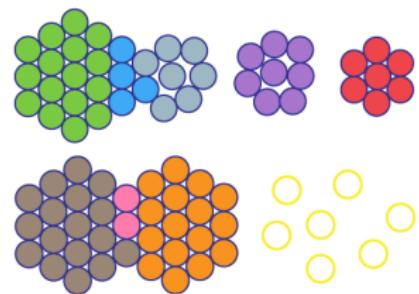
	7	7	4	16	8
t_{i-1}	1	2	3	4	5
17	0	0	25	100	0
2	0	0	6	94	0
2	0	0	50	0	0
16	44	0	25	0	100
3	100	0	6	50	0



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
○○○○○
○○

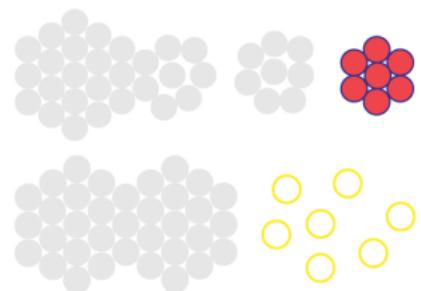
Ergebnisse
○○
○○○○

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

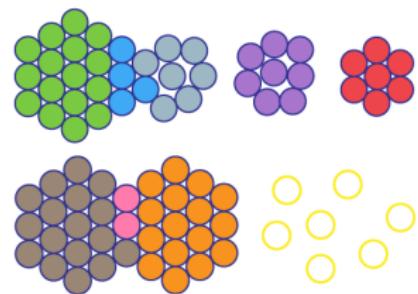




Ereigniserkennung: Merge

7 7 4 16 8

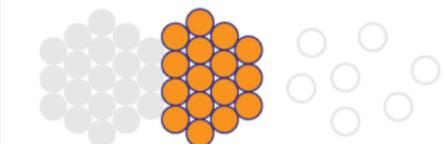
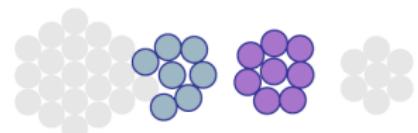
t_{i-1}	1	2	3	4	5
17	0	0	25 6	100 94	0
2	0	0	50 100	0	0
16	44	0	25 6	0	50



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



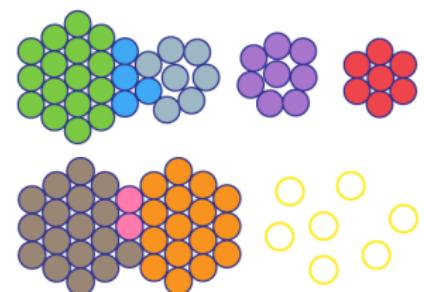
Mindestverhältnis
gem. Partikel: 30
Mindestpartner: 2

„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



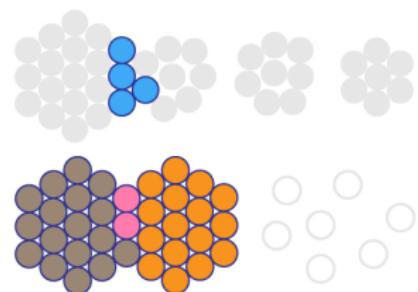
Ereigniserkennung: Fehldetektion (Split)

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				

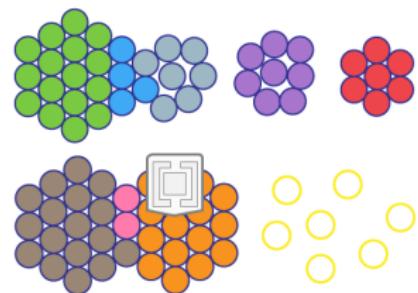
$t_{i-1} \rightarrow t_i$



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

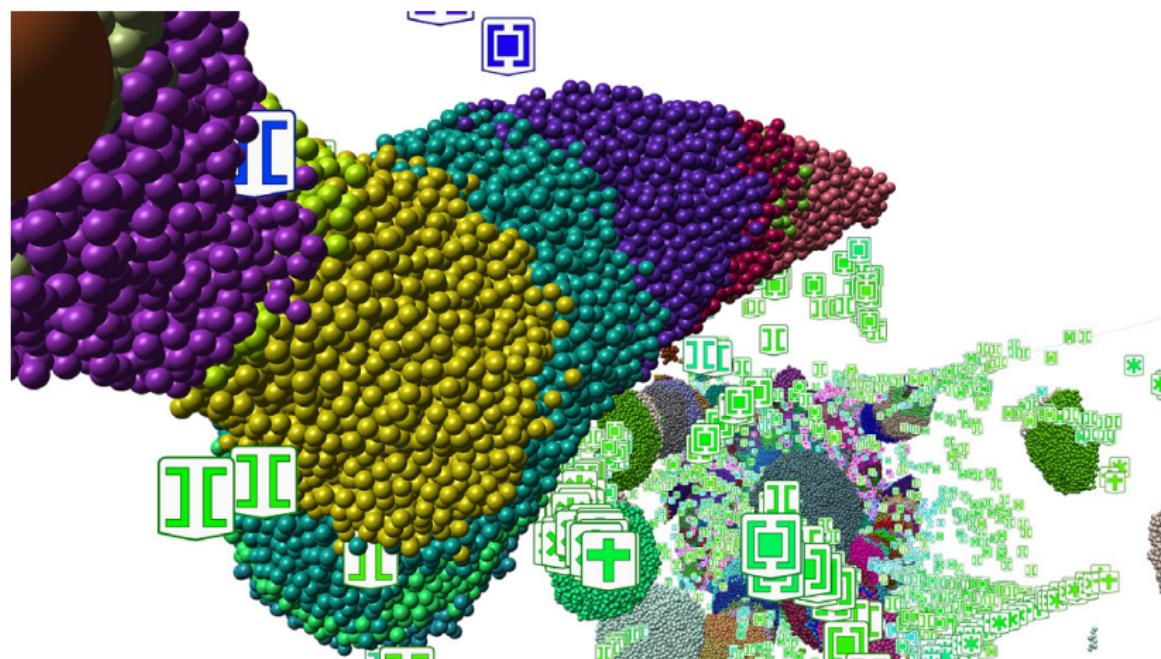
Position
Zeitpunkt
Art

Clusterkennzeichnung

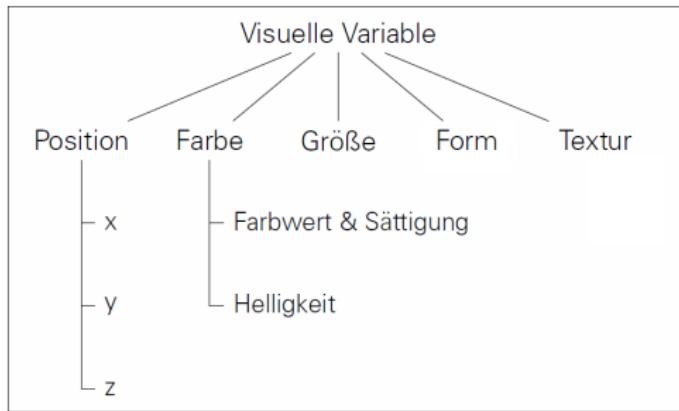
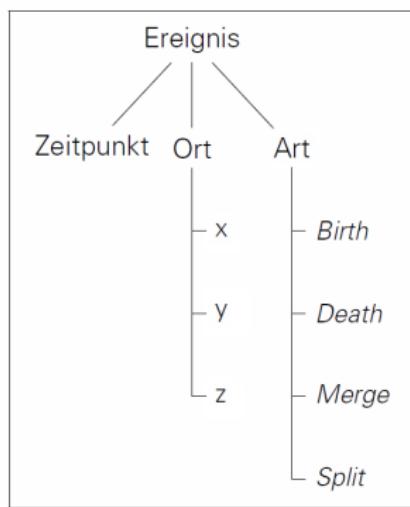
Ereignisdaten

Strukturereignisse

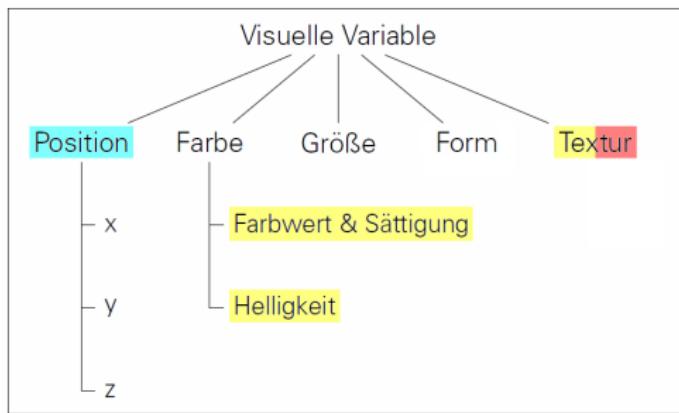
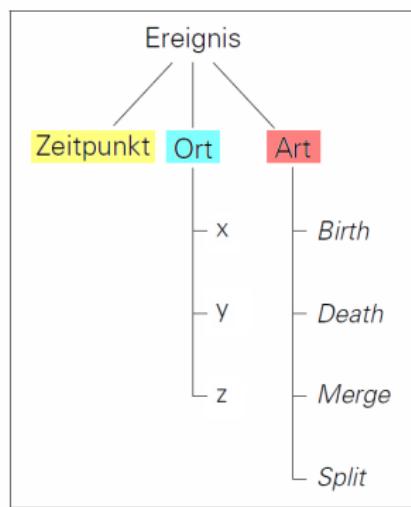
Glyphen in situ



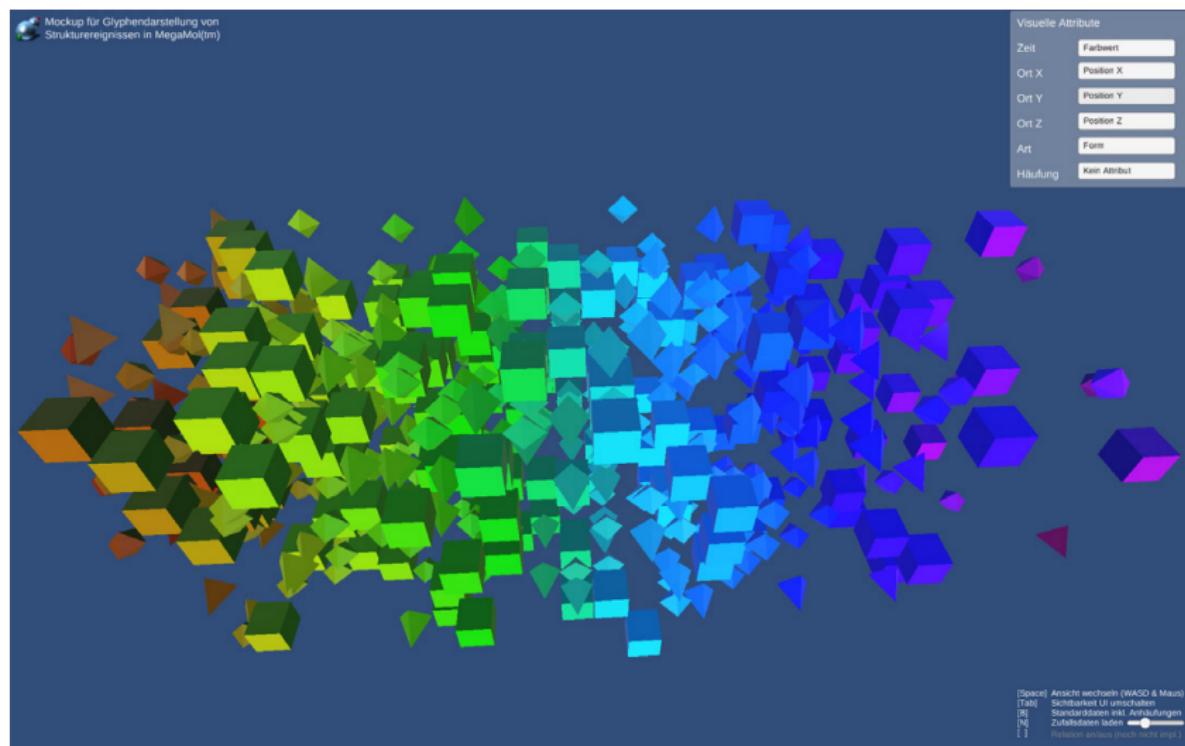
Ereignisparameter und visuelle Variablen



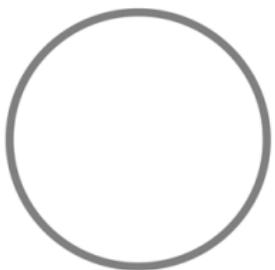
Zuweisung der visuellen Variablen



Mockup mit beispielhafter Variablenzuweisung (WebGL)



Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



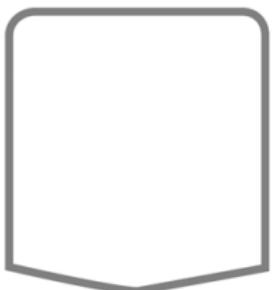
- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



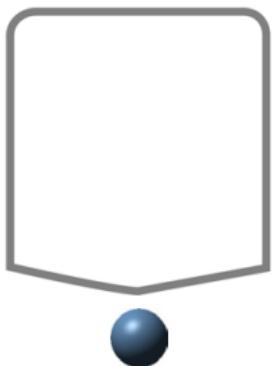
- ▶ Rahmen ist geschlossen
- ▶ gutes Rand-Flächen-Verhältnis (Platz für Symbolik)
- ▶ Abheben von der Kugeldarstellung der Partikel
- ▶ Hinweis auf exakte Ereignisposition
- ▶ Ereignisart ohne Legende erkennbar

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

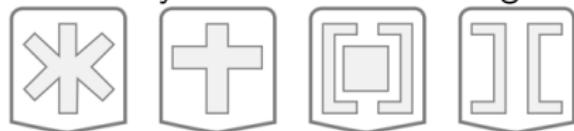
Glyphdarstellung Strukturereignis: Kodierung Ereignisart



- ▶ 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

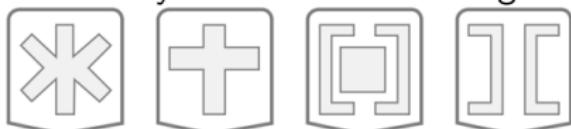
Narrativ symbolische Darstellung



- ▶ 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

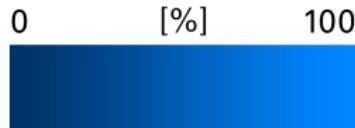


Glyphdarstellung Strukturereignis: Zeitdarstellung

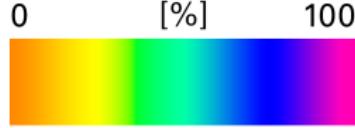
Füllstand (Textur)



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

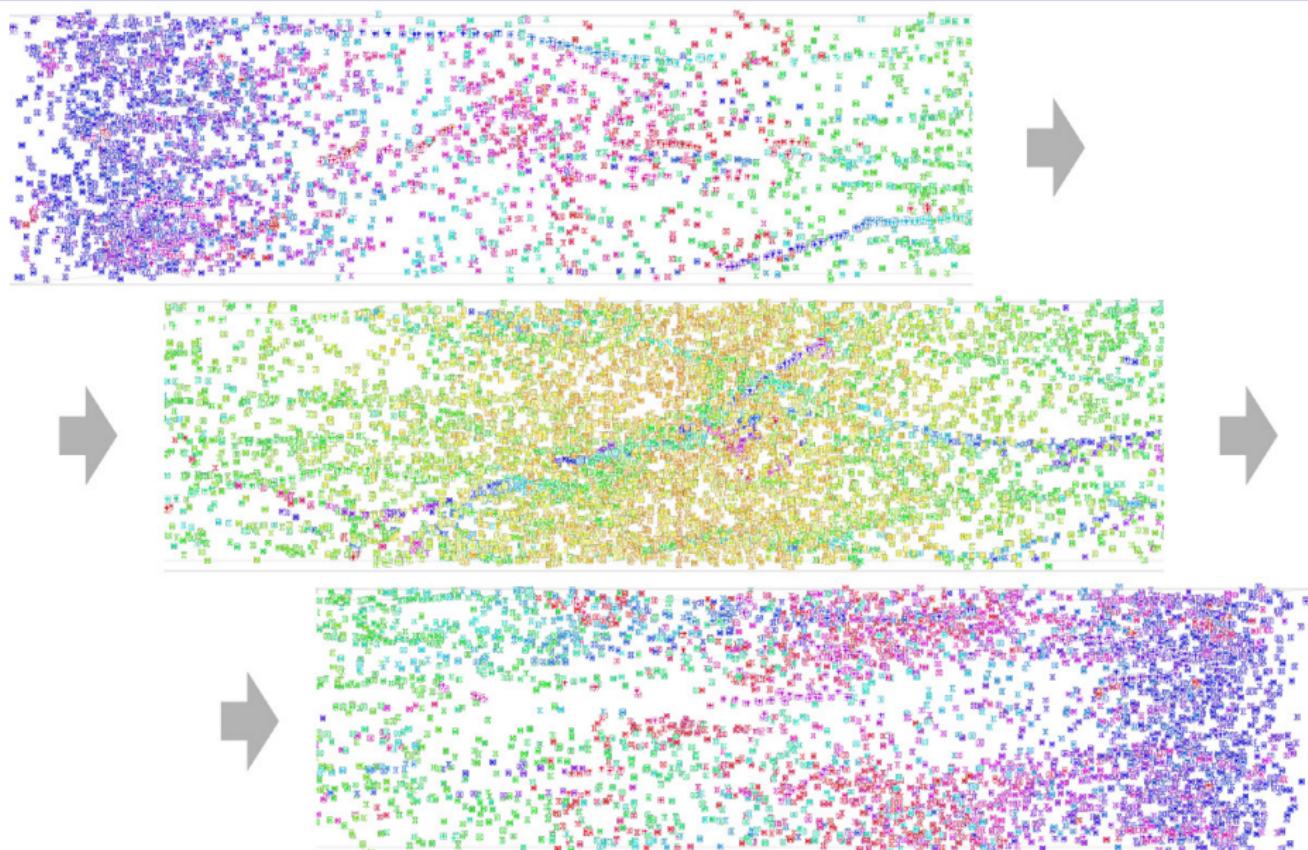
○○○○
○○○○

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

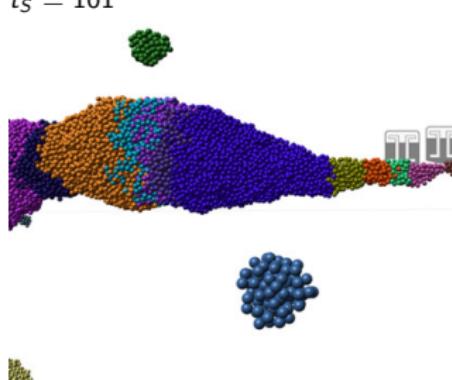
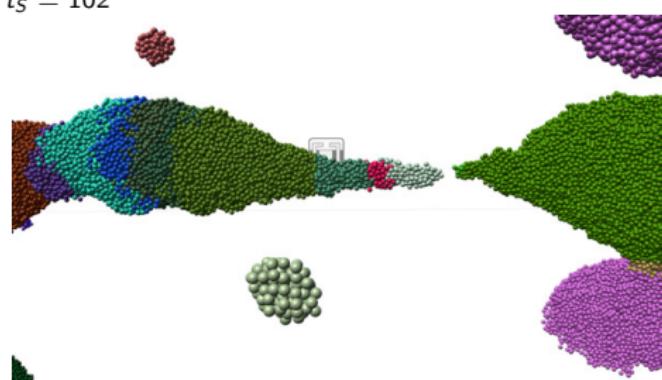
Strukturereignistaxonomie
Darstellungsvarianten

Cluster
Größe
(Anzahl Partikel)

Ereignis
Position
Zeitpunkt
Art

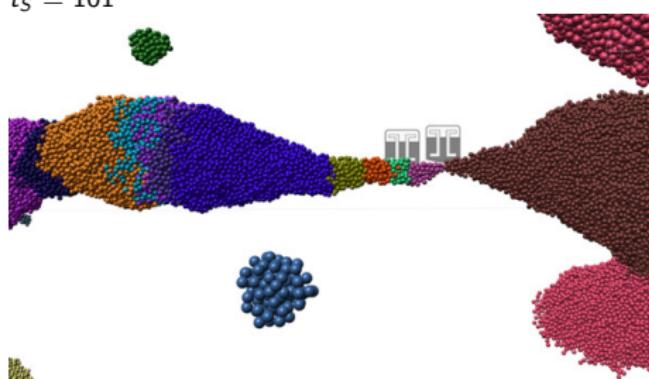
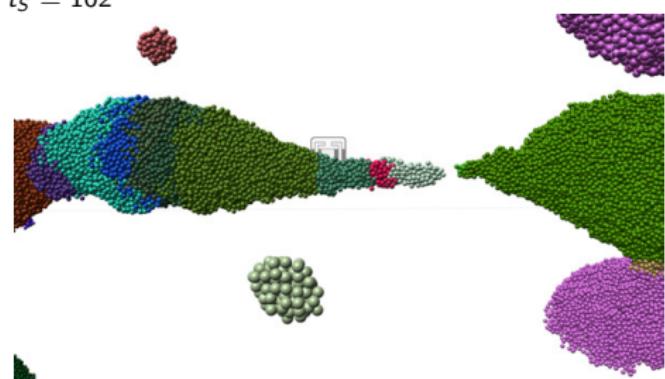
 Clusterkennzeichnung Ereignisdaten Strukturereignisse

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?