

Kontext
○○○
○○○○○

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

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Visualisierung von Strukturveränderungen in Molekulardynamikdaten

Bachelorarbeit Verteidigung

Richard Hähne

Institut für Software- und Multimediatechnik

21. September 2015

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

Kontext

Motivation

Anforderungen

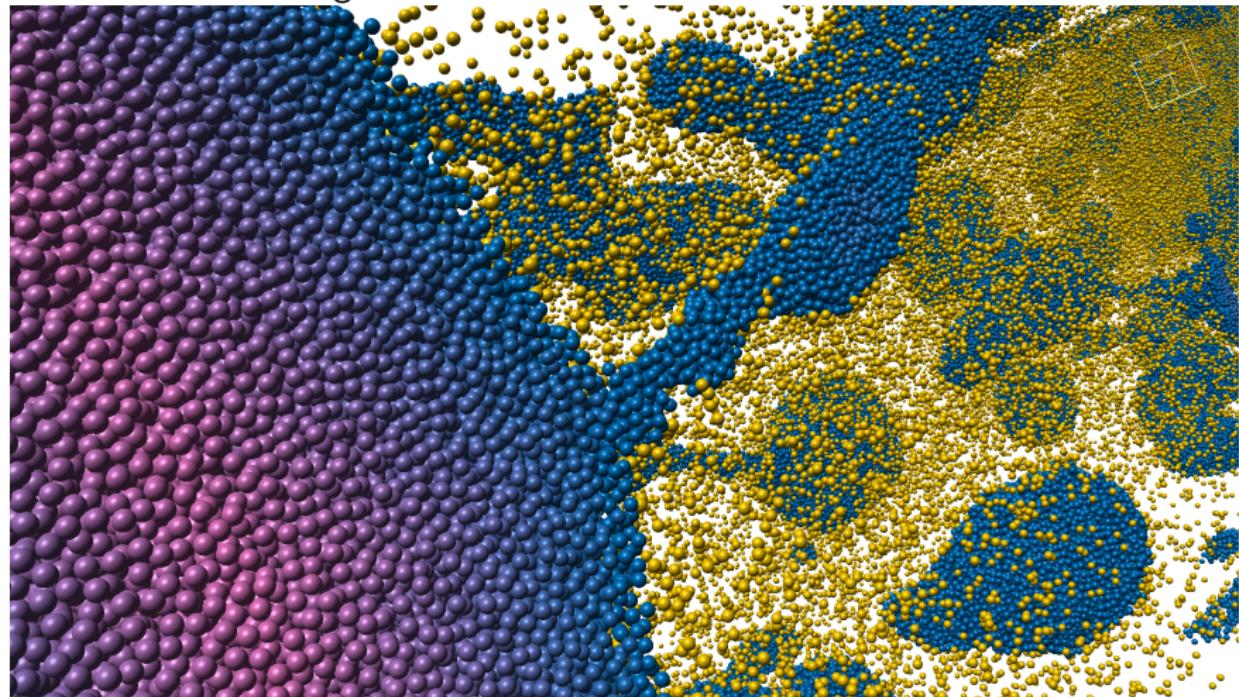
Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

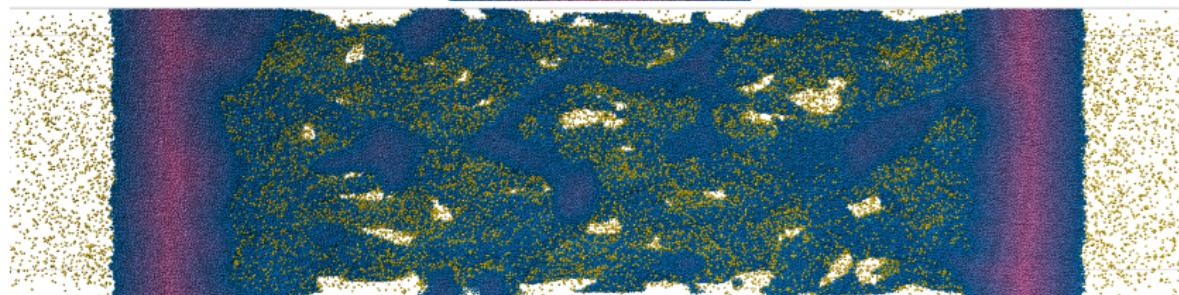
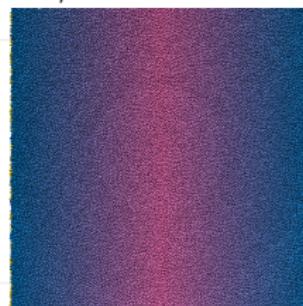
Visualisierung

Ergebnisse

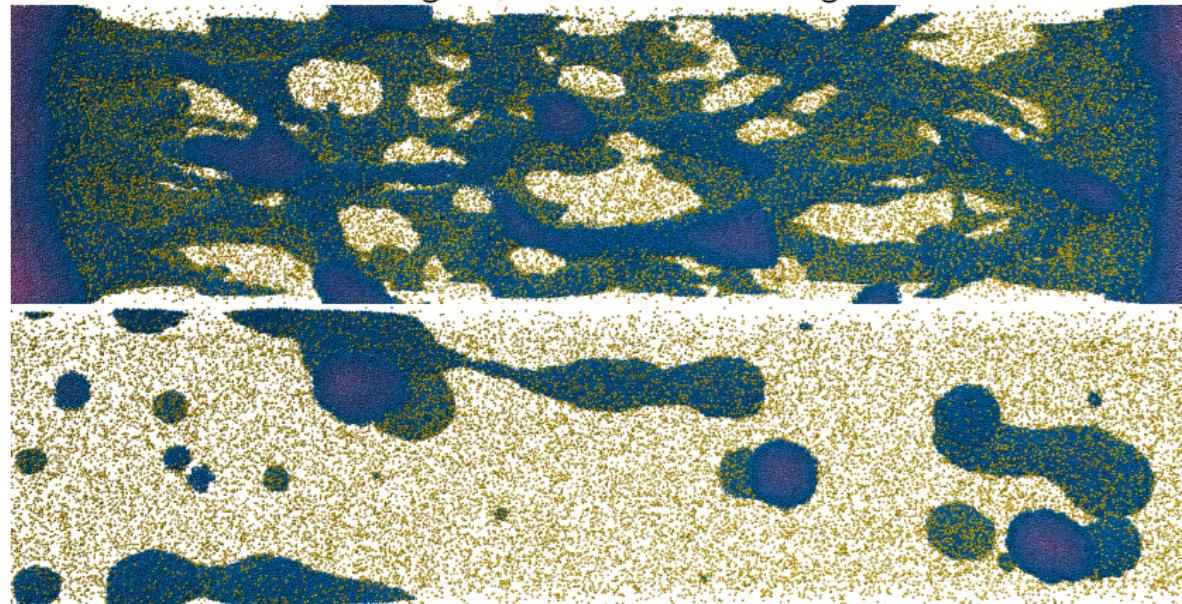
Visuelle Analyse für komplexe, partikelbasierte Daten mit der Darstellung zeitlicher Entwicklungen



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?

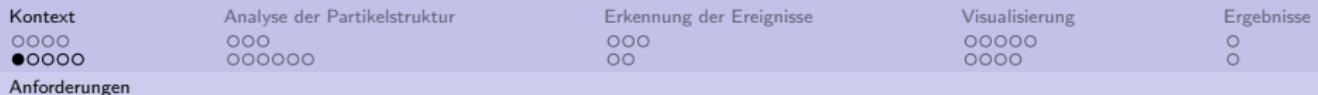


Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
○○○● ○○○○○	○○○ ○○○○○○	○○○ ○○	○○○○○ ○○○○	○ ○
Motivation				

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

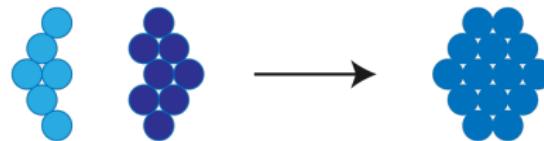
Birth



Death



Merge



Split



Kontext
○○○○
○○●○○

Anforderungen

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

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

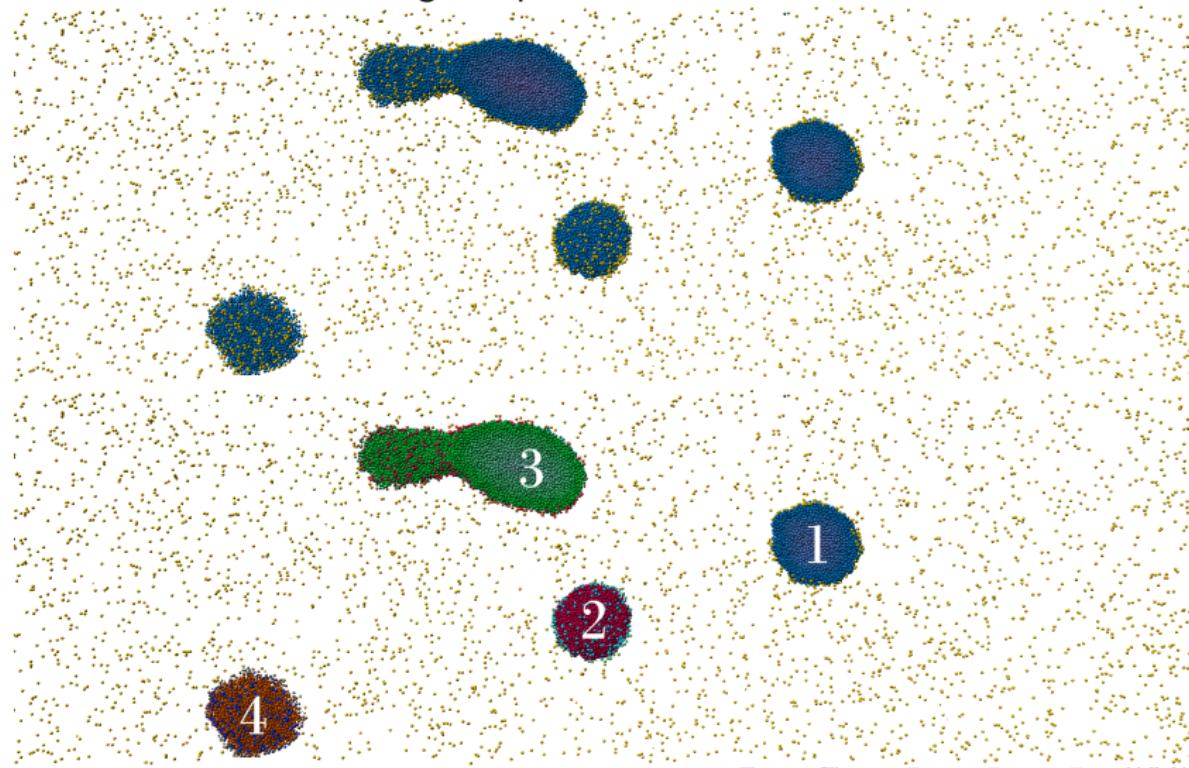
Ergebnisse
○
○

Bedingungen für die Erkennung von Strukturereignissen

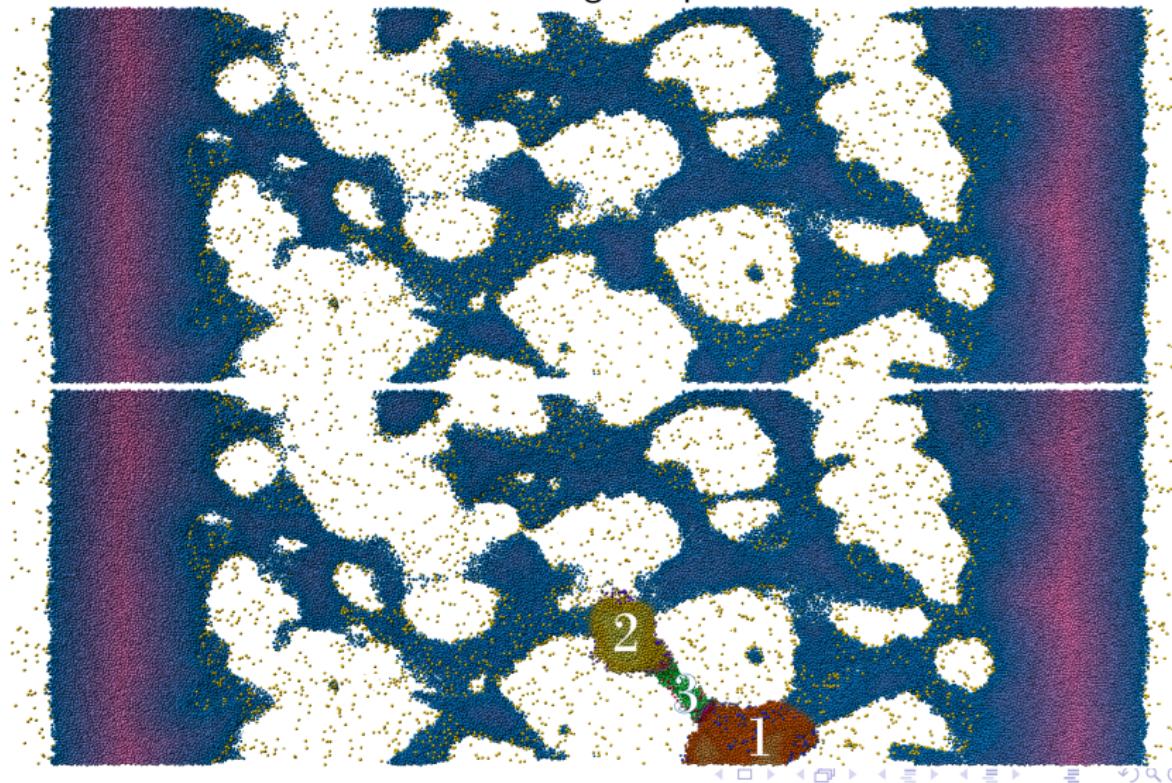
- ▶ Einteilung der Partikelmenge in eine Menge von Clustern
- ▶ die Partikel müssen Clustern zugeordnet werden können

Anforderungen

Cluster als Zusammenhangskomponenten



Cluster innerhalb von Zusammenhangskomponenten



Kontext	Analyse der Partikelstruktur	Erkennung der Ereignisse	Visualisierung	Ergebnisse
oooo oooooo	ooo oooooo	ooo oo	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

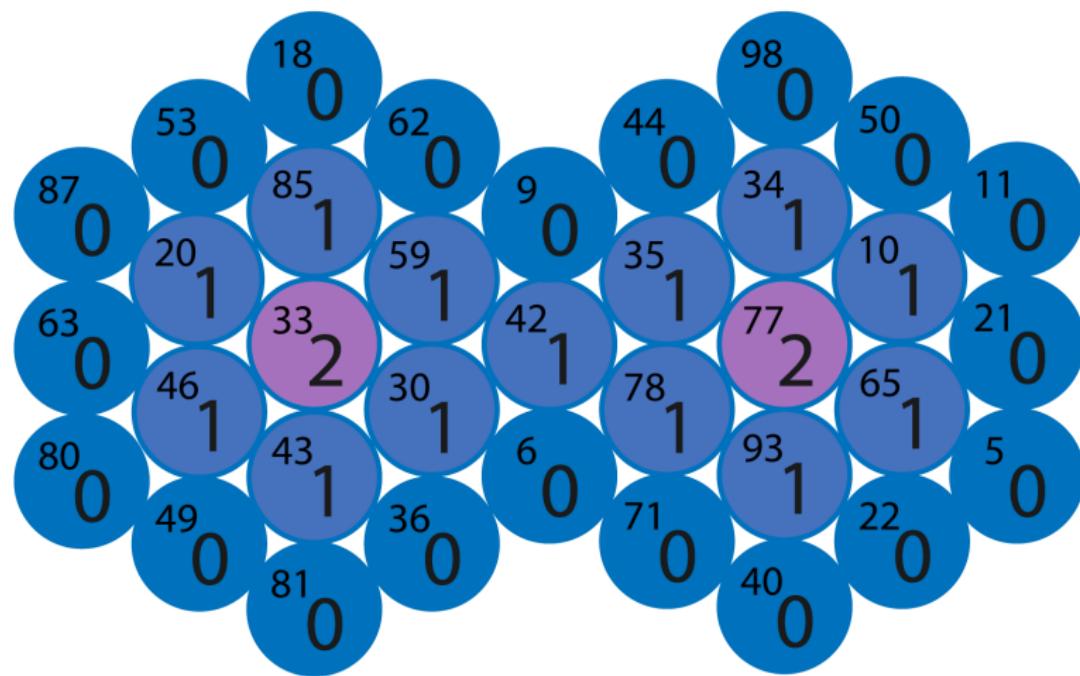
Für die weiteren Schritte ist eine Kenntnis über die Zusammenhänge der Partikel notwendig. Dies

- ▶ 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

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

- ▶ 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

Diagramm der Partikeltraversierung:

- 18 Partikel sind durch Kreise dargestellt, die Zahlen von 0 bis 98 enthalten.
- Ein vertikaler Pfeil auf der rechten Seite markiert die Reihenfolge der Partikeltraversierung.
- Die Liste der traversierten Partikel ist wie folgt aufgelistet:
 - Partikel 0
 - Partikel 1
 - Partikel 2
 - Partikel 3
 - Partikel 4
 - Partikel 5
 - Partikel 6
 - Partikel 7
 - Partikel 8
 - Partikel 9
 - Partikel 10
 - Partikel 11
 - Partikel 12
 - Partikel 13
 - Partikel 14
 - Partikel 15
 - Partikel 16
 - Partikel 17
 - Partikel 18

Tiefster Nachbar
65



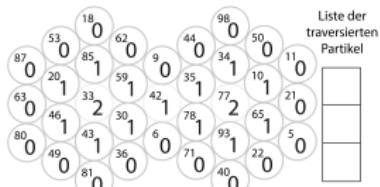
Kontext

Analyse der Partikelstruktur

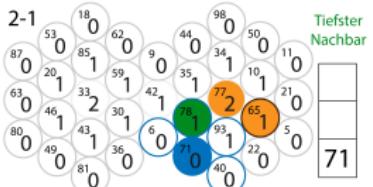
○○○○
○○○○

100

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

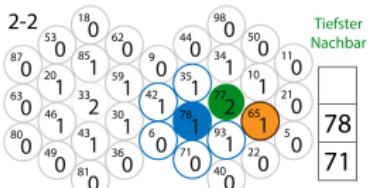


Liste der transversierten Partikel



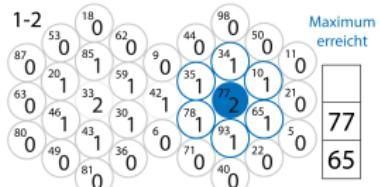
Tiefster Nachbar

Tiefster
Nachbar



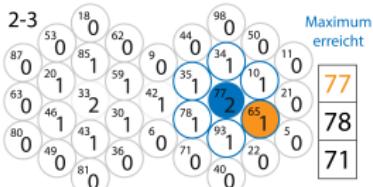
Tiefster
Nachbar

78
71



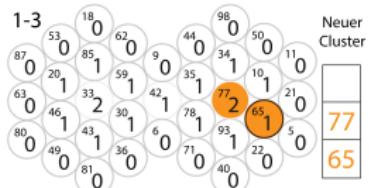
Maximum
erreicht

77
65



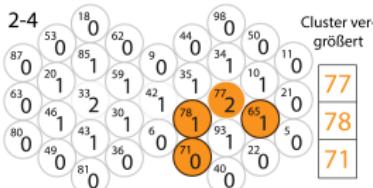
maximum
erreicht

77
78
71



Neuer
Cluster

77
65



größert

A set of small, light-blue navigation icons typically found in presentation software like Beamer. They include symbols for back, forward, search, and other document-related functions.

Richard Hähne

Visualisierung von Strukturveränderungen in Molekulardynamikdaten

Institut für Software- und Multimediatechnik

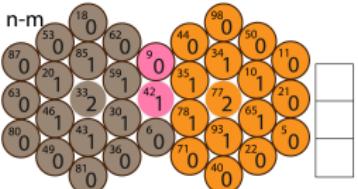
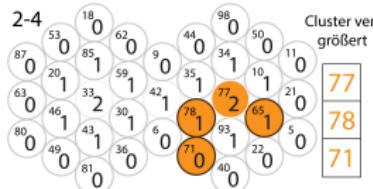
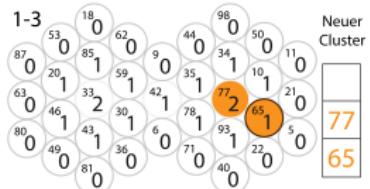
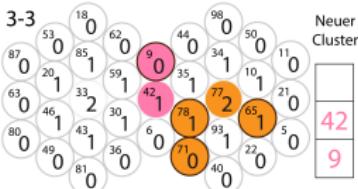
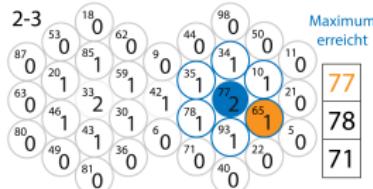
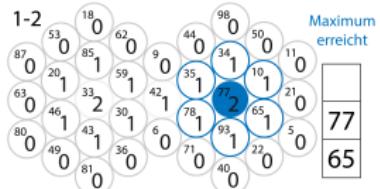
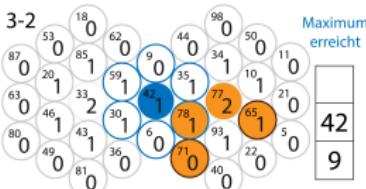
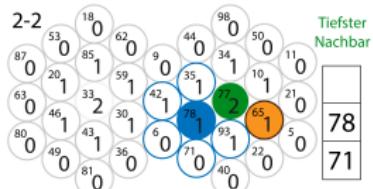
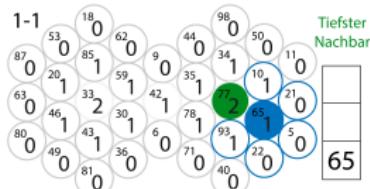
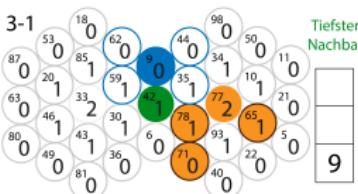
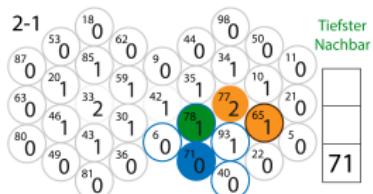
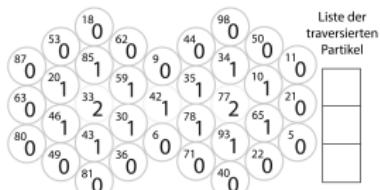
Kontext

○○○○
○○○○○○

Analyse der Partikelstruktur

○○○○
○○○○●○

Cluster Fast Depth (CFD) Algorithmus

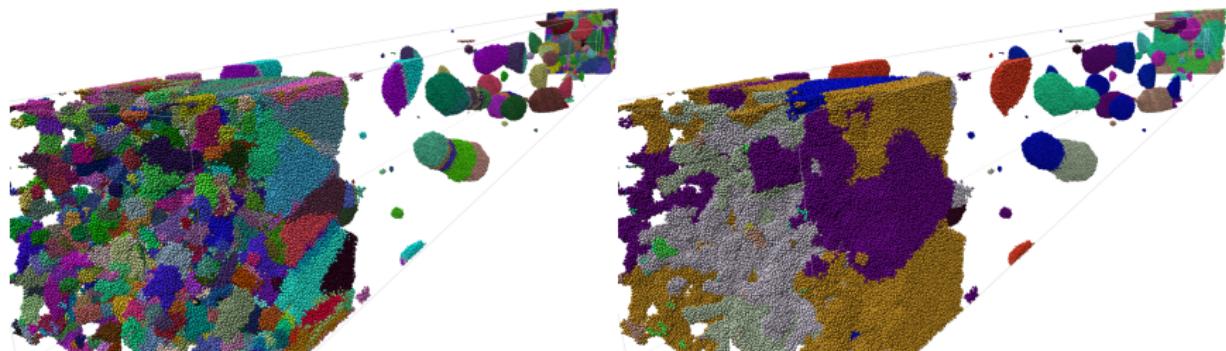


Ergebnisse

○
○

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 oo	ooooo oooo	o o

Kontext

Analyse der Partikelstruktur

Erkennung der Ereignisse

Clustervergleich

Ereignisheuristik

Visualisierung

Ergebnisse

Kontext
○○○
○○○○○

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

Erkennung der Ereignisse
●○○
○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Clustervergleich

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.

Kontext
○○○
○○○○○

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

Erkennung der Ereignisse
○●○
○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Clustervergleich

Clustervergleichsmatrix

- ▶ Partikel sind Clustern zugeordnet
- ▶ diese Zuordnung wird für zwei aufeinanderfolgende Zeitschritte betrachtet (aktueller und vorheriger Zeitschritt)
- ▶ in einer $n \times m$ -Matrix, wobei n für die Cluster des aktuellen und m für die Cluster des vorhergehenden Zeitschritts steht, wird die Anzahl der Partikel beider Zeitschritte festgehalten

Kontext

○○○
○○○○○

Analyse der Partikelstruktur

○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse

○○●
○○

Visualisierung

○○○○○
○○○○

Ergebnisse

○
○

Clustervergleich

Partnercluster

TODO

Kontext
○○○○
○○○○○

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

Erkennung der Ereignisse
○○○
●○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Ereignisheuristik

TODO

Cluster- und Ereigniserkennungsschritte

1.
 - 1.1 Aufbau der Partikelliste mit den Daten des MultiParticleDataCalls.
 - 1.2 Erstellung von *kD-Bäumen* für die Nachbarschaftserkennung.
 - 1.3 Nutzung des *kD-Baum Suchalgorithmus* der *ANN-Bibliothek*, um Nachbarn jedes Partikels, unter Berücksichtigung des *Partikelradiusmultiplikator*, zu diesem hinzuzufügen.
2.
 - 2.1 Cluster erstellen unter Nutzung der Nachbarn.
 - 2.2 Reduktion der *Mindestgrößencluster* innerhalb von Zusammenhangskomponenten, die weniger Partikel besitzen als für die benutzerdefinierte minimale *Clustergröße* erlaubt.
3. Clustervergleich (*SECC*) durch Nutzung der *Clustervergleichsmatrix* und Erstellung von zwei Listen mit *Partnerclustern* in Vorwärtsrichtung beziehungsweise rückwärtiger Richtung.
4. 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 oo	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)

Kontext
○○○
○○○○○

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

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○

Visualisierung
○●○○○
○○○○

Ergebnisse
○
○

Struktureignistaxonomie

Visuelle Variablen

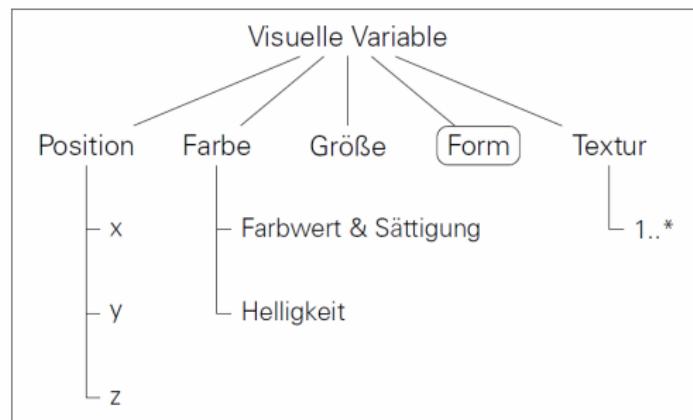
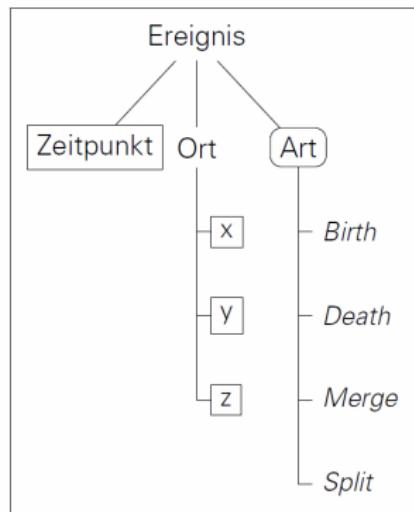
Einteilung visueller Variablen

- ▶ 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

○○○
○○○○○

Analyse der Partikelstruktur

○○○
○○○○○○

Erkennung der Ereignisse

○○○
○○

Visualisierung

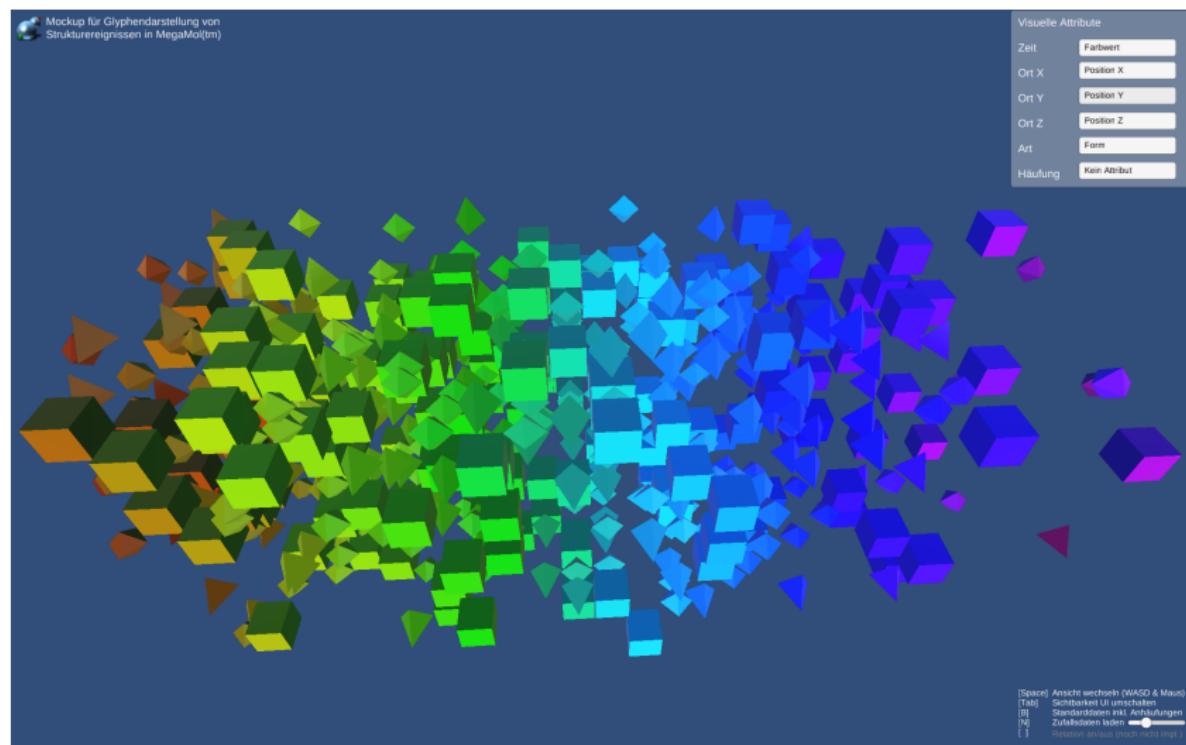
○○○●○
○○○○

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

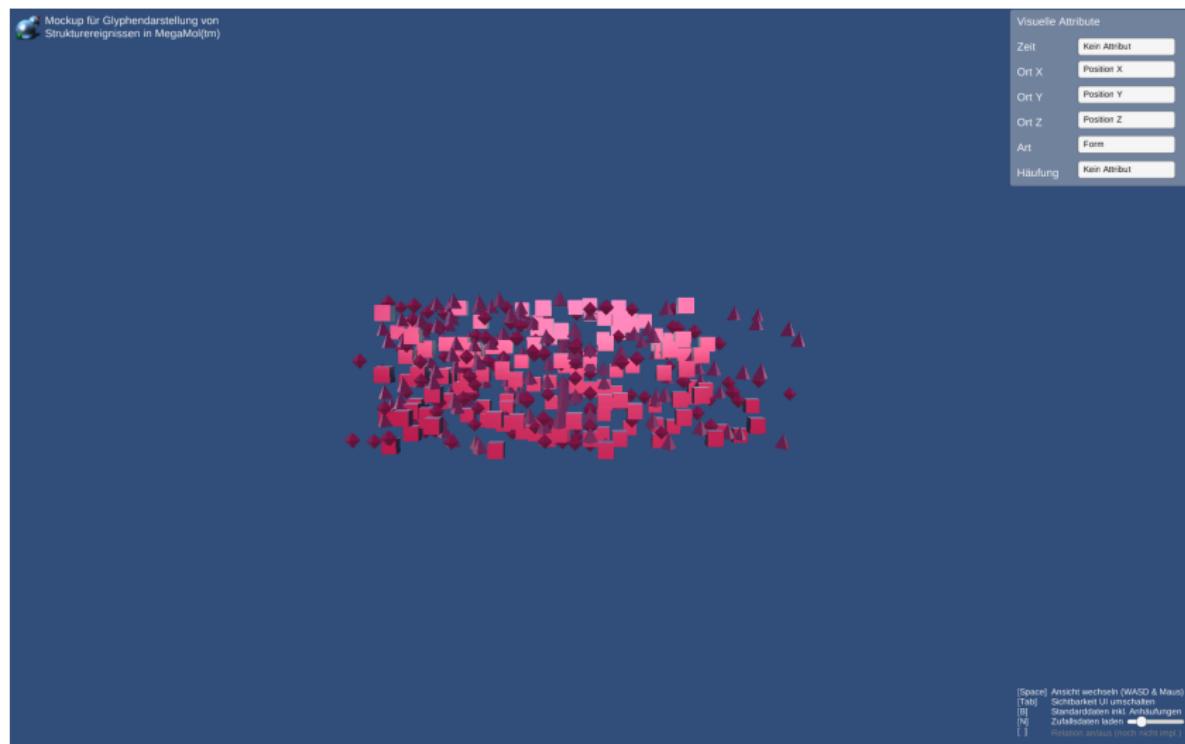
○○○○○
●○○○

Ergebnisse

○
○

Glyphdarstellung

3D-Glyphen - Beleuchtung



3D-Darstellung

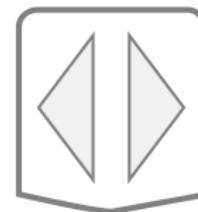
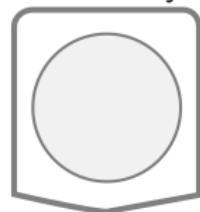
Ergebnis durch die Nutzung des interaktiven Mockups: Die Erscheinung von Glyphen als Polygone ist blickwinkelabhängig (Form) und beleuchtungsabhängig (unterschiedliche Helligkeiten je nach Winkel der Flächen).

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 oo	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!

Kontext
○○○○
○○○○○

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

Erkennung der Ereignisse
○○○
○○

Visualisierung
○○○○○
○○○○

Ergebnisse
○
●

Visualisierung

Umfrageergebnisse, v.a. in situ