Virtuelle Moleküle sichtbar machen

Weitere Informationen unter:

http://vis-web.informatik.uni-stuttgart.de/trac/megamol/wiki/GirlsDay

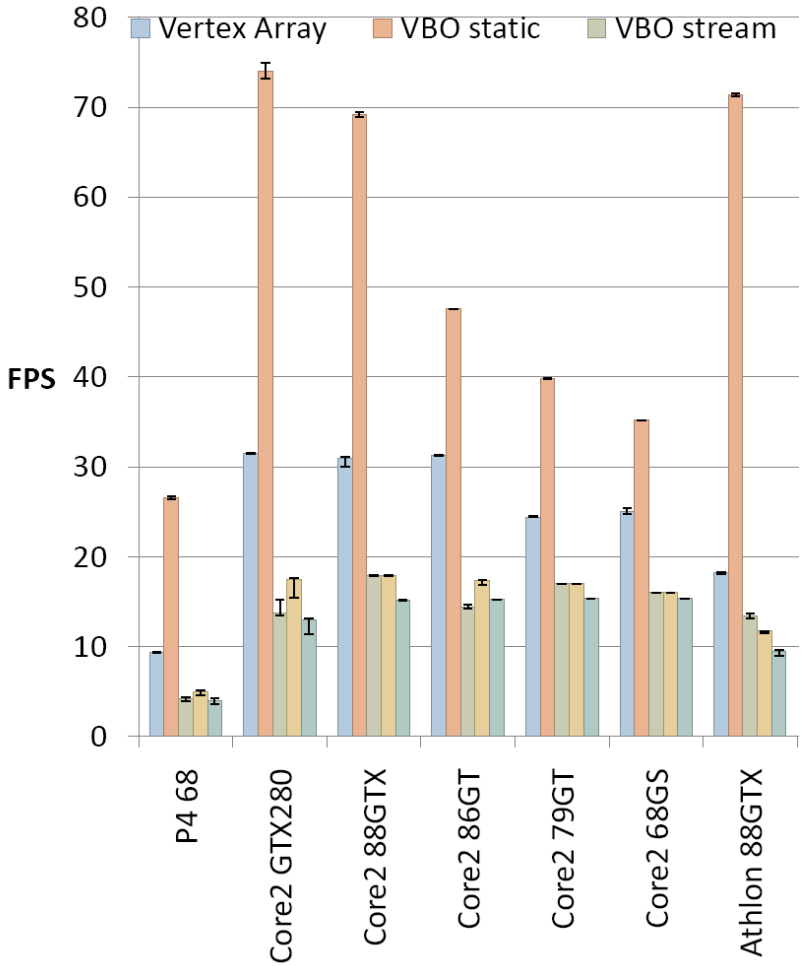
Was ist Visualisierung?

- Definitionen:
  - Nach „Oxford English Dictionary“:
    Visualisierungen: ein ***(mentales) Bild*** von etwas ***nicht Sichtbarem*** oder ***Abstraktem*** erzeugen.

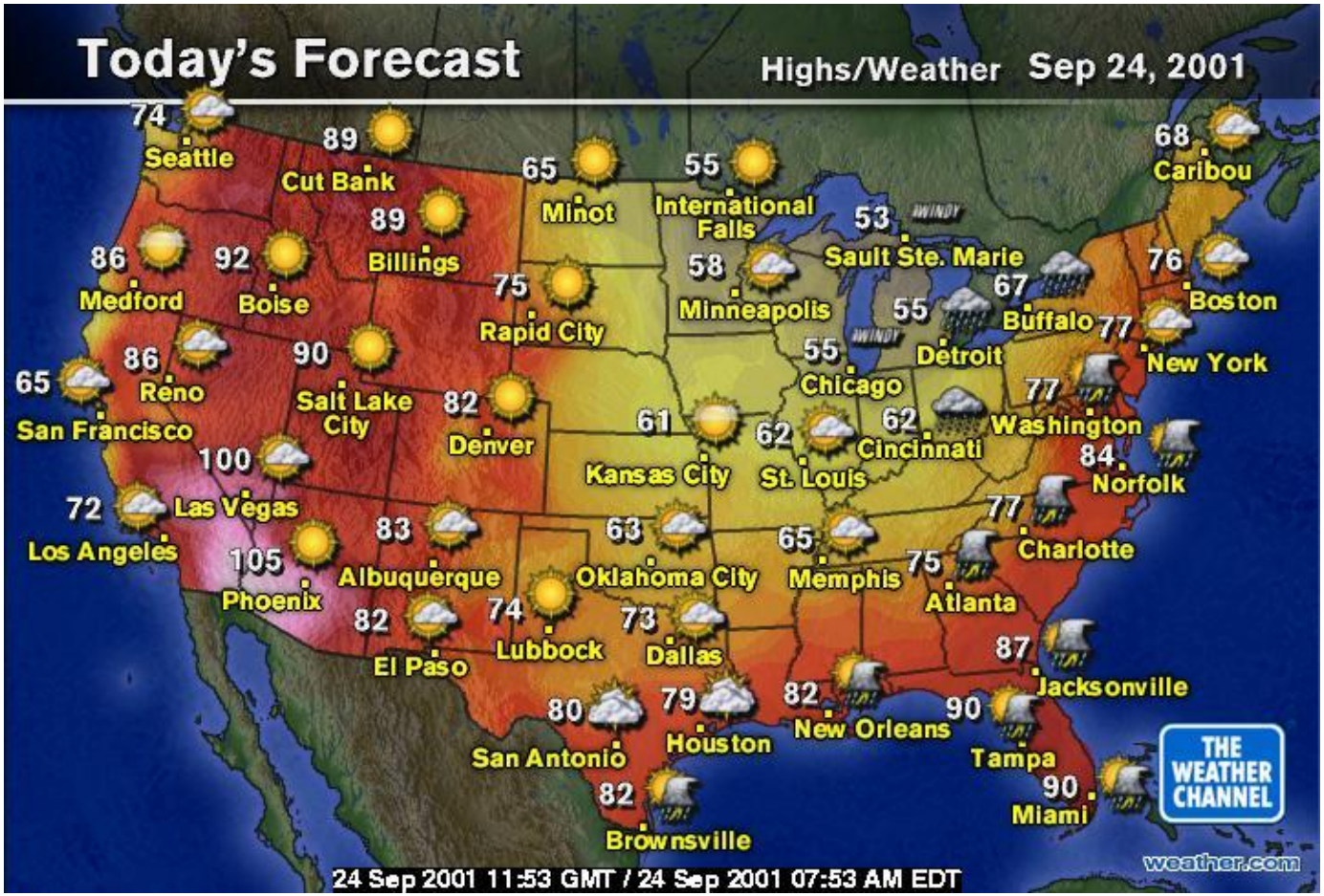
- Graphische Darstellungen
  - machen große Datenmengen leichter erfassbar
  - zeigen besser komplexe Zusammenhänge

Was ist Visualisierung?

		Immediate			Vertex Array			VBO static			
P4 68	100k	107.0127335	17.39954376	6.638526917	283.0187988	42.71379089	34.32653809	764.3505249	181.8571167	83.36517334	
P4 68	1M	11.89274311	0.093565014	0.073665881	35.50256348	0.83657074	0.690255737	102.2607727	2.168037415	2.433769226	
Core2 GTX280	100k	141.1893	15.1343	1.1489	1323.83	131.383	40.415	2594.694	300.282	110.42	
Core2 GTX280	1M	13.66533	10.930705	0.73378	110.7546	0.9344	0.5872	292.5894	5.3774	3.5927	
Core2 88GTX	100k	143.1054688	17.3454895	3.014007568	1011.596083	561.1374512	69.90679932	1818.06897	1270.664856	112.2982178	
Core2 88GTX	1M	15.25114918	0.017551422	0.014664024	108.0412598	0.763557434	0.504920959	173.6080627	0.221298218	0.726089478	
Core2 86GT	100k	143.6971893	0.68270874	0.584320068	847.5713501	76.76999748	12.89367676	827.6635742	18.17358398	7.638916016	
Core2 86GT	1M	14.69859982	0.014576912	0.009812355	110.2404633	0.407791138	0.506362915	191.1688843	0.920623779	0.493301392	
Core2 79GT	100k	174.5475464	4.945602417	0.834350586	904.2947998	145.1519165	7.924987793	1604.810181	986.2229004	17.87426758	
Core2 79GT	1M	17.92132759	0.014183044	0.014249802	96.64505005	8.431785583	0.825714111	199.1061554	0.974822998	2.14402771	
Core2 68GS	100k	174.9068146	2.670211792	0.928436279	883.9362183	418.5374756	16.44403076	1128.893677	605.7062378	13.09484863	
Core2 68GS	1M	17.95273781	0.029296875	0.033248901	98.04817963	1.041313171	1.706199646	136.4751587	0.361099243	0.347259521	
Athlon 88GTX	100k	95.20166016	0.671333313	0.462364197	518.6360474	30.93313599	7.598815918	2188.072021	1609.122131	96.45751953	
Athlon 88GTX	1M	9.891880989	0.015626907	0.021305084	65.93260193	4.21282196	0.581031799	183.7980957	27.21421814	1.810974121	
Athlon 86GT	100k	95.27776337	0.777908325	0.517723083	516.9310913	59.5585022	11.2543335	808.0072632	416.723175	41.32855225	
Athlon 86GT	1M	9.952105522	0.012702942	0.012742996	66.40539551	0.573951721	0.323890686	191.2702484	28.68558337	3.737640381	
Athlon 79GT	100k	119.2501907	0.695678711	0.718597412	522.0359497	179.0794983	18.34729004	1592.897705	1125.628906	18.05725098	
Athlon 79GT	1M	12.62001133	0.029565811	0.025005341	70.19522858	0.581230164	0.387451172	200.7111206	1.580581665	1.892227173	
Athlon 68GS	100k	120.1082993	0.685829163	0.735412598	518.8594971	180.0401611	19.67926025	1135.750244	87.23278809	9.628540039	
Athlon 68GS	1M	12.60640717	0.035310745	0.031449318	70.30342102	0.636032104	0.263801575	136.2857666	15.20742035	1.911026001	
Phenom 88GTX	100k	109.0935974	0.275306702	0.269332886	952.3955688	94.30517578	28.91496658	2345.998291	109.1320801	7.463623047	
Phenom 88GTX	1M	11.18747044	0.018504143	0.021726608	101.0766525	0.156555176	1.050193787	188.1593933	0.240890503	0.203109741	
Phenom 86GT	100k	109.2146683	0.322525024	0.337875366	850.3742065	33.49389648	10.39337158	827.7155151	6.799926758	5.395568848	
Phenom 86GT	1M	11.16789818	0.002326012	0.003014565	101.7440338	0.266870227	0.296203613	191.2045898	0.442840576	0.546951294	
Phenom 79GT	100k	148.8930511	0.281280518	0.519424438	730.7223511	5.010437012	2.397338867	1608.554932	21.40576172	6.690307617	
Phenom 79GT	1M	15.45797253	0.00358963	0.003580093	78.02807617	0.071594238	0.047859192	199.2508545	0.611038208	0.180358887	
Phenom 68GS	100k	149.2119751	0.114151001	0.118041992	725.8261719	2.824523926	1.269958496	1132.264526	6.674560547	3.104125977	
Phenom 68GS	1M	15.47961712	0.007969856	0.005331993	79.76280212	0.078994751	0.064163208	136.5221405	0.10546875	0.053283691	
P4 68	100k	20.96971893	0.139217377	0.163816223	21.39032364	0.081579208	0.088861465	21.4492836	0.102373123	0.261798859	
P4 68	1M	3.842776537	2.78746593	1.419882536	4.314166546	3.192635298	1.292994976	4.25579071	3.128821015	1.392503738	
Core2 GTX280	100k	142.7026	0.6163	0.6164	355.5431	4.5308	4.745	356.3058	6.7528	5.2074	
Core2 GTX280	1M	13.79436	11.04823	0.72837	82.82033	0.2234	0.26307	82.91829	0.91896	0.97218	
Core2 88GTX	100k	143.2784576	0.745437622	0.525741577	179.5569916	1.029205322	1.506271362	179.9111786	0.724243164	1.261398315	
Core2 88GTX	1M	15.21675014	0.204034805	0.046434402	44.66644669	0.071994781	0.053001404	44.76779175	0.02866745	0.02942276	
Core2 86GT	100k	49.50312424	0.074935913	0.071968079	49.50643539	0.02722168	0.065769196	49.51096725	0.060600281	0.071063995	
Core2 86GT	1M	11.2057333	0.003941536	0.003186226	11.20431995	0.002590179	0.003520012	11.19706631	0.002882004	0.003343582	
Core2 79GT	100k	174.3184052	0.609329224	0.560028076	384.459198	14.26766968	3.537384033	422.7068481	10.36856079	4.666473389	
Core2 79GT	1M	17.91002083	0.014976501	0.015087128	39.02729416	1.269886017	0.2306633	43.67511749	0.026592255	0.018619537	
Core2 68GS	100k	27.95275116	0.078493118	0.072223663	28.1596336	0.516393661	0.123035324	28.62413406	0.019830704	0.021314621	
Core2 68GS	1M	6.687109947	4.402390862	0.67424736	7.011004448	4.638214111	0.499296188	7.321249008	4.658142614	0.528344154	
Athlon 88GTX	100k	95.08922577	1.00088501	0.428330566	199.7459106	31.54963521	2.715148926	200.6126862	1.151367188	1.208770752	
Athlon 88GTX	1M	9.901984215	0.018778801	0.017849922	46.62888336	0.086853027	0.093513489	46.60165024	0.045864105	0.035423279	
Athlon 86GT	100k	49.99121094	0.076705933	0.076713562	49.93434143	0.620651245	0.557502747	49.99696732	0.070453644	0.070606232	
Athlon 86GT	1M	9.946704865	0.009931564	0.008038521	11.29012966	0.112285614	0.113987923	11.28724861	0.002557755	0.002561569	
Athlon 79GT	100k	118.7377014	0.411705017	0.737518311	394.4191284	110.7012024	5.095275879	423.0960083	11.01379395	1.690795898	
Athlon 79GT	1M	12.6462431	0.034238815	0.02786541	39.24478149	1.471046448	0.362190247	43.70734024	0.092224121	0.092617035	
Athlon 68GS	100k	28.12142944	0.00872612	0.009756088	28.44216537	0.027318954	0.030094147	28.79154015	0.038757324	0.041902542	
Athlon 68GS	1M	6.671784401	4.669373274	0.606216908	7.00130558	4.947317362	0.523856163	7.298758507	5.181840181	0.546016216	
Phenom 88GTX	100k	109.0680389	0.361946106	0.339248657	195.2363281	0.227706909	0.194107056	195.3023376	0.210296631	0.096847534	
Phenom 88GTX	1M	11.17572403	0.011325836	0.022441864	45.66747284	0.023826599	0.026950836	45.6452446	0.023773193	0.021305084	
Phenom 86GT	100k	49.51482391	0.024864197	0.01739502	49.51950836	0.014263153	0.009643555	49.52172089	0.010826111	0.007957458	
Phenom 86GT	1M	11.21020031	0.017226219	0.01017189	11.20693874	0.002993584	0.003125191	11.20548534	0.003094673	0.113426208	
Phenom 79GT	100k	148.3753815	0.270950317	0.630462646	385.4549561	1.982269287	1.030273438	423.2054443	1.684295654	0.478546143	
Phenom 79GT	1M	15.44710255	0.007360458	0.006399155	39.24283218	1.293136597	0.204319	43.70129395	0.045043945	0.020011902	
Phenom 68GS	100k	27.96421623	0.009431839	0.009473801	28.27845955	0.01499176	0.015306473	28.6367569	0.007238388	0.005350113	
Phenom 68GS	1M	6.677033471	4.458552122	0.568185997	7.008765697	4.721139954	0.5001688	7.29907465	4.931446791	0.531327248	
P4 68	100k	17.19792366	0.059150696	0.06361579	17.39414406	0.057559967	0.062376404	17.06456864	0.148876534	0.22719574	
P4 68	1M	4.474778175	3.340159893	1.266991615	4.965192795	3.785350084	1.137992859	4.669418335	3.51395154	1.346683025	
Core2 GTX280	100k	142.7142	0.5582	0.611	286.6627	3.2828	0.9741	285.4116	4.9288	4.1797	
Core2 GTX280	1M	13.80997	11.086331	0.70828	90.3088	0.39937	0.29533	90.52131	0.99084	1.09358	
Core2 88GTX	100k	143.3625946	0.847305298	0.455429077	155.0483246	0.619232178	0.681564331	125.7974701	84.55105209	30.95622253	
Core2 88GTX	1M	15.15448666	0.129889488	0.066841125	49.87985992	0.211647034	0.148887634	50.07048416	0.151714325	0.165309906	
Core2 86GT	100k	40.68061829	0.13287735	0.322849274	40.68420029	0.009784698	0.008377075	40.66804169	0.014095306	0.007259369	
Core2 86GT	1M	12.20052719	0.004817009	0.004693985	12.2003231	0.004742622	0.00457859	12.19659519	0.004523277	0.004953384	
Core2 79GT	100k	174.3922577	1.366897583	0.628097534	383.3319702	104.5931396	4.177062988	422.8114929	8.993347168	4.592437744	
Core2 79GT	1M	17.89843369	0.013938904	0.014961243	38.97468567	1.246612549	0.234455109	43.6744194	0.03503418	0.020957947	
Core2 68GS	100k	22.77215385	0.008213043	0.006809235	22.91967392	0.3005867	0.092664719	23.13518524	0.240869522	0.295186996	
Core2 68GS	1M	7.577079773	5.087902069	0.363547325	7.994036865	5.412466288	0.251347542	8.323624475	5.63610816	0.27401638	
Athlon 88GTX	100k	95.19581604	0.521636963	0.321678162	166.97229	0.369186401	1.418685913	167.0320282	0.709381104	0.536743164	
Athlon 88GTX	1M	9.888445854	0.020965576	0.018994331	51.33982086	0.055614471	0.072750092	51.31845856	0.034389496	0.038956503	
Athlon 86GT	100k	40.62732697	0.01714325	0.022029877	40.62841415	0.079914093	0.07963562	40.6304245	0.074199677	0.073825836	
Athlon 86GT	1M	9.951127052	0.012452126	0.010929108	12.19665146	0.007400513	0.002122879	12.19749928	0.00553894	0.003048897	
Athlon 79GT	100k	118.8339539	0.587791443	0.5519104	391.203064	108.1834717	7.005737305	422.8570557	10.55227661	1.857574463	
Athlon 79GT	1M	12.66933537	0.055605749	0.033882114	39.44296265	0.18163681	0.148532867	43.7057991	0.054561615	0.055664063	
Athlon 68GS	100k	22.79382133	0.008747101	0.00815773	22.94180107	0.308883095	0.1009655	23.22275925	0.009717941	0.007198334	
Athlon 68GS	1M	7.578870773	5.429073334	0.362982273	7.964104176	5.741189766	0.28902914	8.290691376	5.987075329	0.225498199	
Phenom 88GTX	100k	109.1368332	0.238990784	0.276611328	166.5857544	0.189315796	0.131607056	166.6472778	0.13456252	0.066345215	
Phenom 88GTX	1M	11.16651344	0.006262779	0.005981445	51.18666458	0.038425446	0.045043945	51.18089676	0.03868103	0.049144745	
Phenom 86GT	100k	40.68899155	0.012241364	0.010623932	40.69566727	0.010433197	0.009231567	40.69910812	0.007102966	0.005882263	
Phenom 86GT	1M	11.2124815	0.007196426	0.010660172	12.20383358	0.003305435	0.003417969	12.20160675	0.003576279	0.121263504	

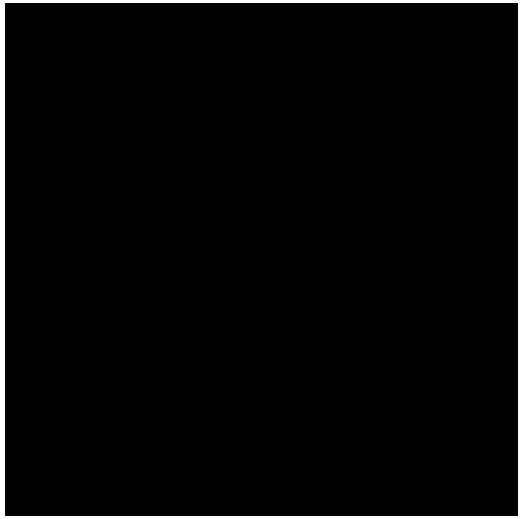


Was ist Visualisierung?



Was ist Molekulardynamik?

- Viele Prozesse (chemisch, physikalisch, biologisch) sind auf atomarem Level noch nicht verstanden.
  - z.B.: Verflüssigen von Gas

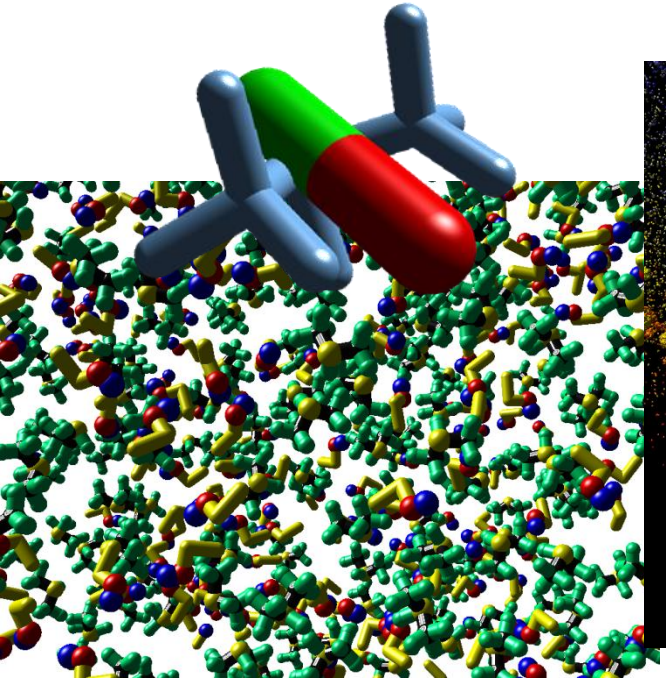


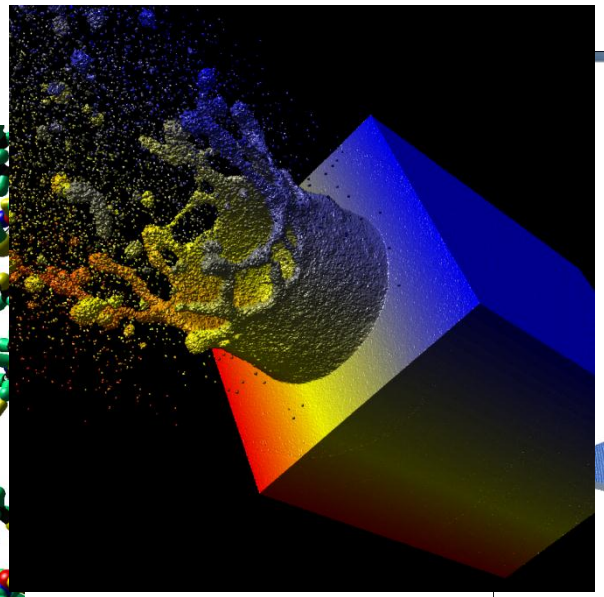
- Experimente oft nicht möglich/ zu teuer/zu gefährlich/etc.
  - Daher Computer-Simulation als Ersatz/Ergänzung
  - Basieren auf grundlegenden physikalischen Gesetzen (z.B.: Bewegungsgleichung nach Newton)

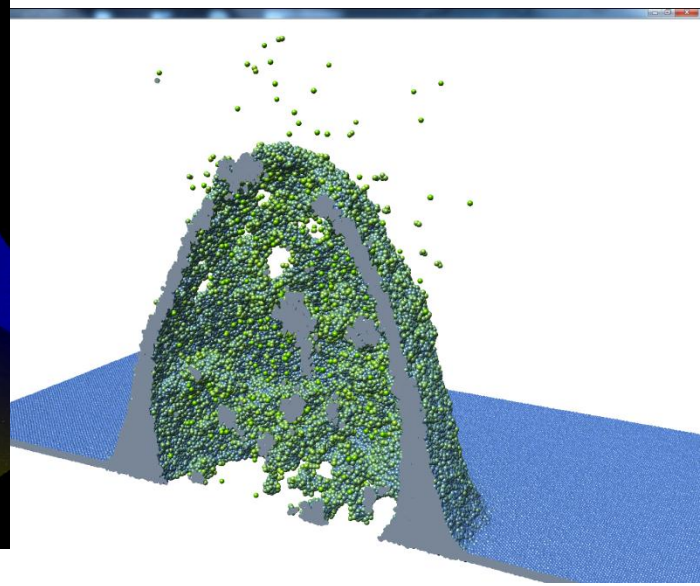
- Die Daten ohne Visualisierung zu analysieren ist mühsam und fehleranfällig

MegaMol™

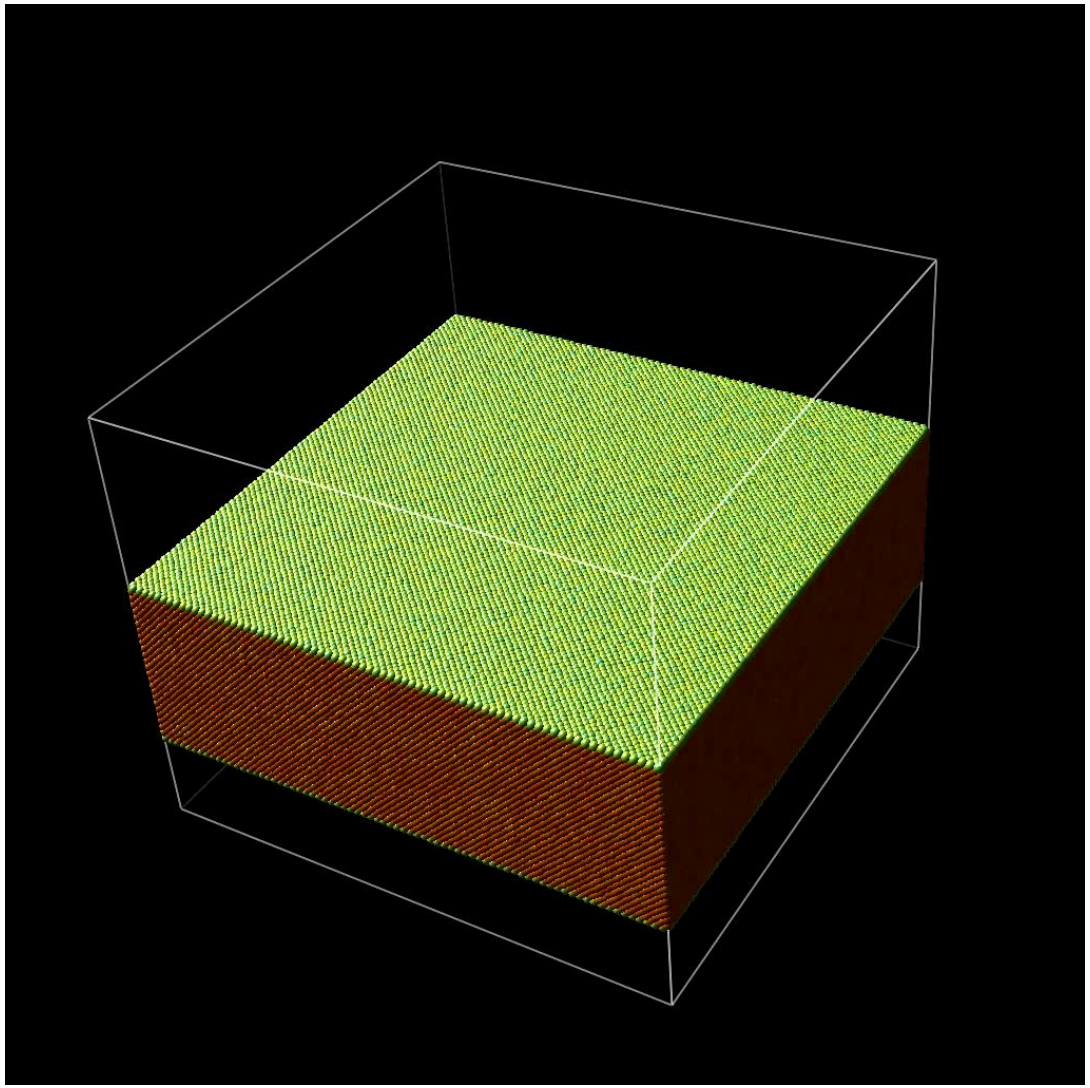
- MegaMol™ ist das speziell entwickelte Visualisierungsprogramm für Molekulardynamikdatensätze
  - Aktuelles Forschungsprojekt an der Universität Stuttgart
  - Sonderforschungsbereich 716 der Deutschen Forschungsgemeinschaft
  - Interaktive Visualisierung von über 100.000.000 Atomen



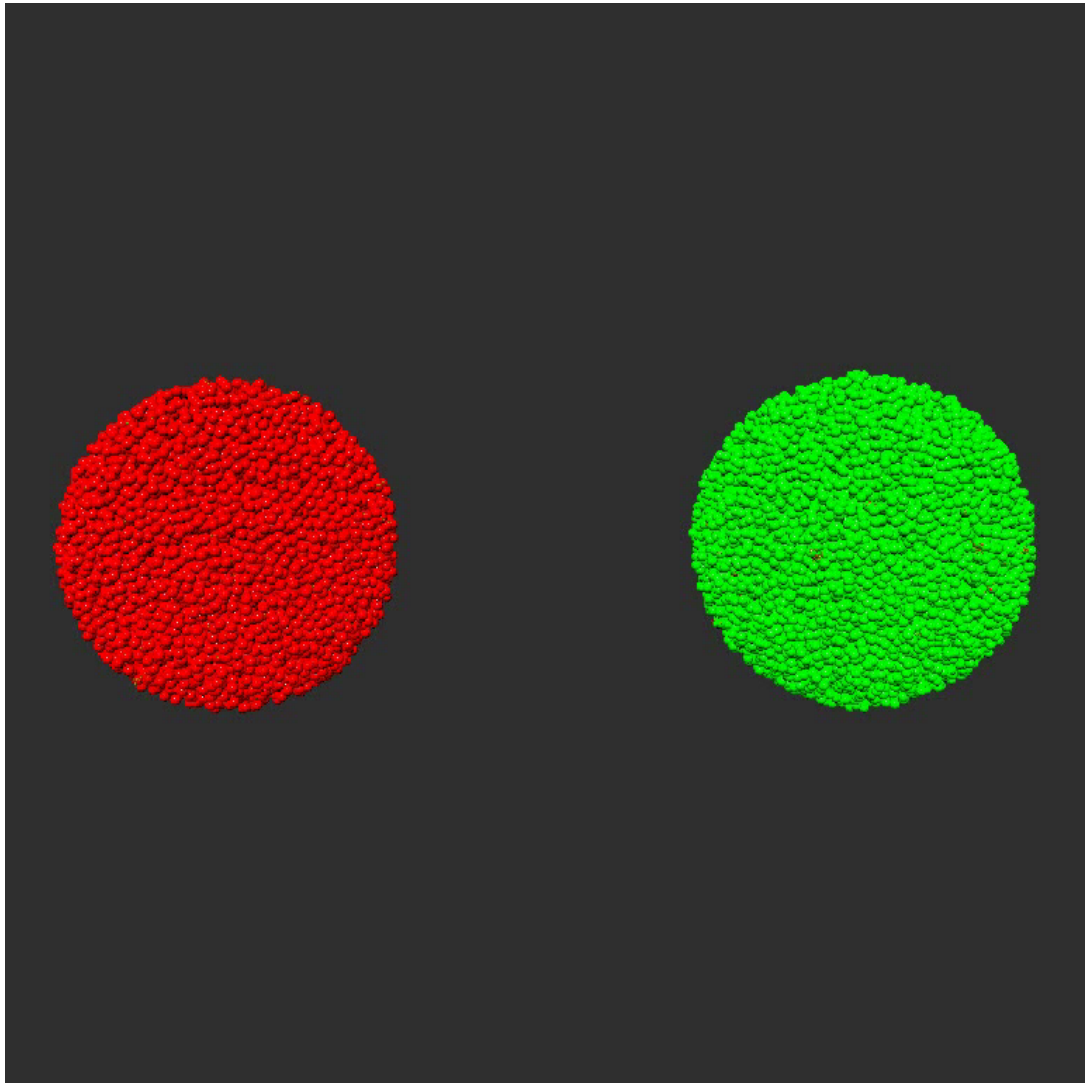




Laser-Ablation: 2 Laser schießen auf einen Alu-Block

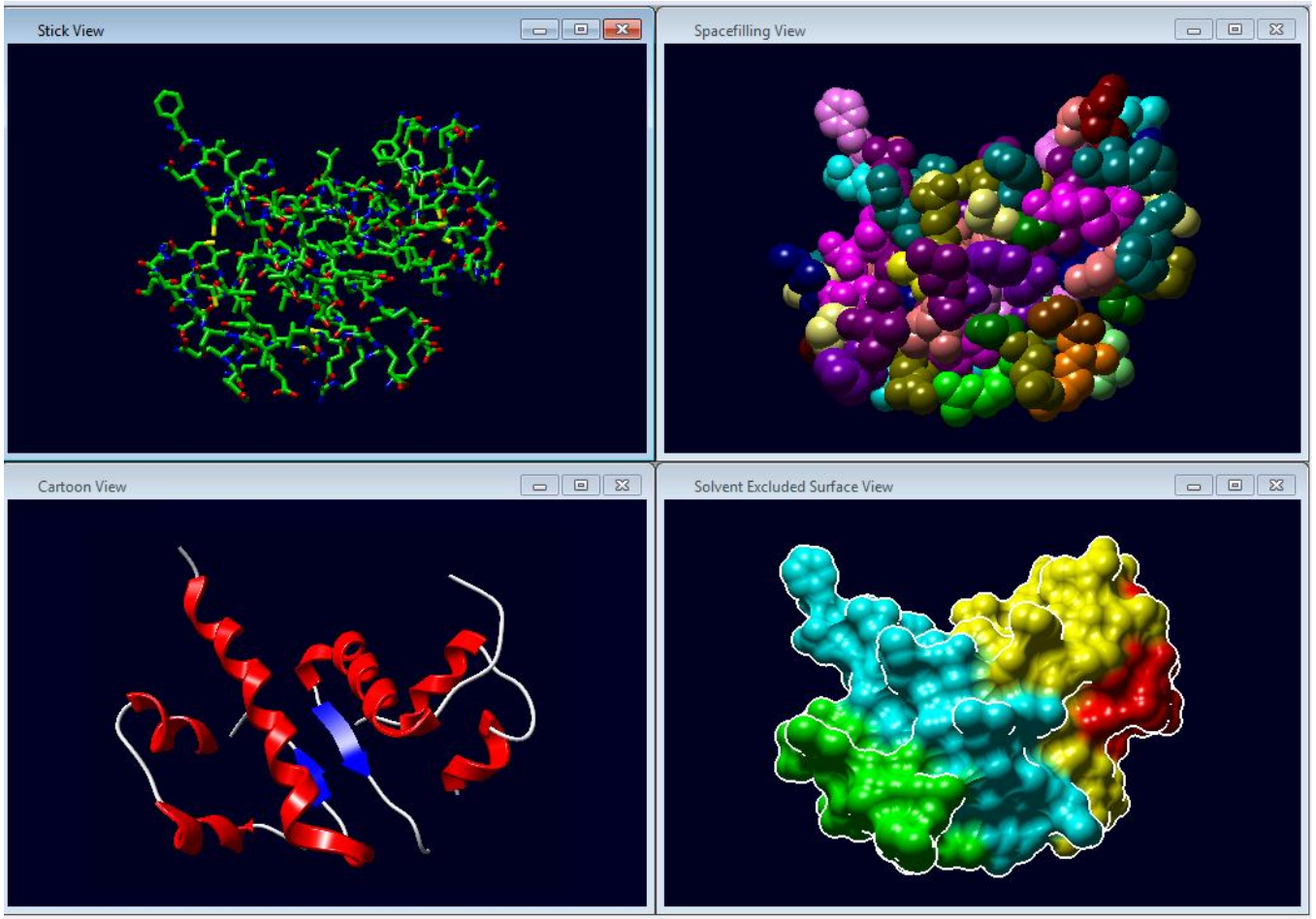


Kollision von Methan- und Ethan-Tröpfchen

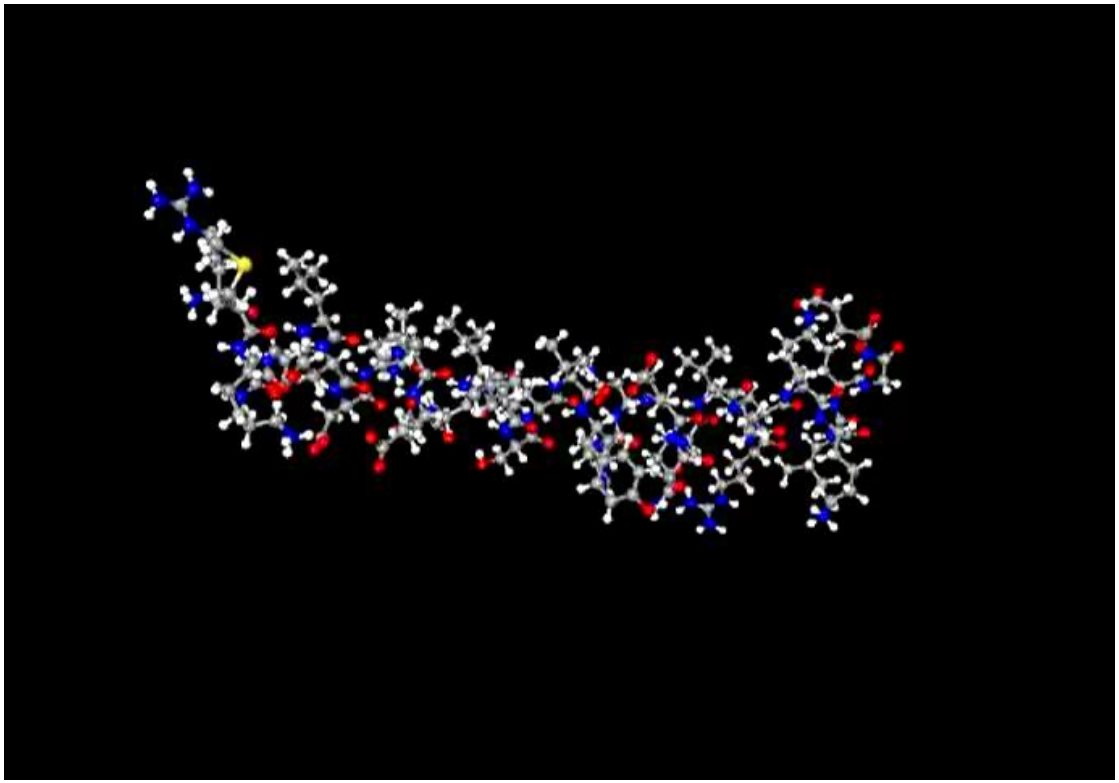


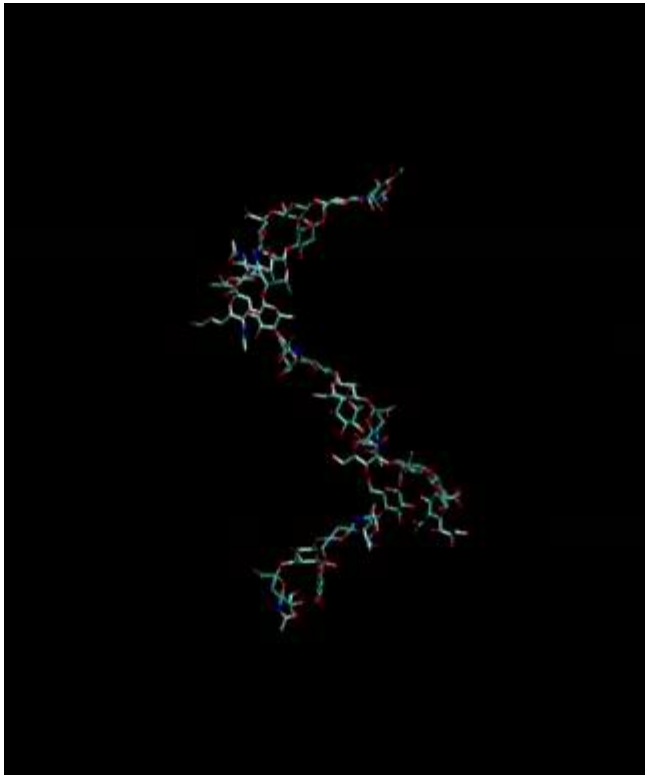
MegaMol™ für die Biochemie

- Speziell für Proteine gibt es besondere Darstellungen:



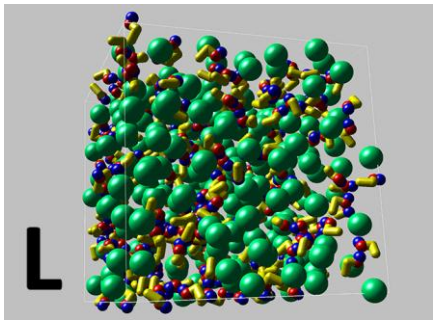
Biochemie: Aminosäureketten





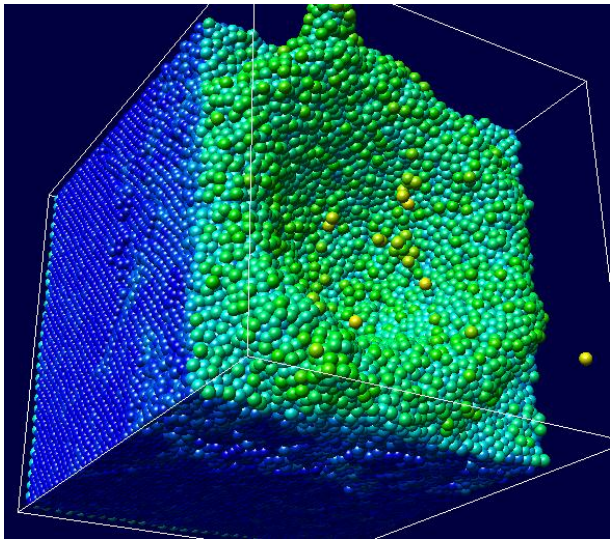
3D-Monitor-Demo

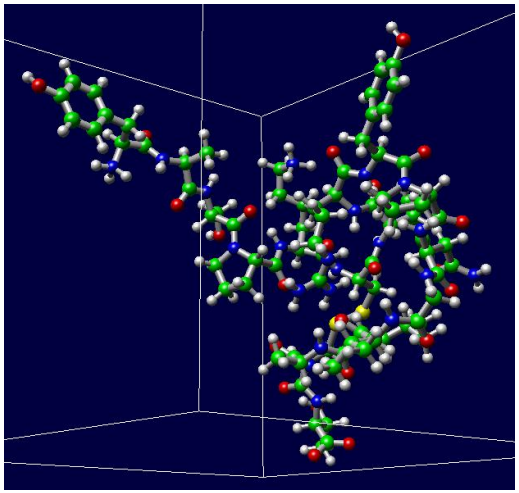
- Räumliche Strukturen der Daten lassen sich am besten in 3D erkennen.
  - Der Computer rechnet zwei Bilder aus: Eins für jedes Auge
  - Die Bilder werden durch den Spezialbildschirm und die Spezialbrille an das jeweilige Auge geschickt.
  - Das Gehirn setzt die beiden Bilder wieder zusammen.
  - Uns wird also nur „vorgetäuscht“ es sei 3D In Wirklichkeit sind es einfach 2 flache Bilder.



Programm

1. Einleitung
   1. Eine Kugel in 3D-Koordinaten
   2. Drei weitere Kugeln
   3. Einfärben
   4. Animation
2. Daten aus der Physik
   1. Datensatz laden
   2. Einfärben (diesmal richtig)
3. Daten aus der Biochemie
   1. Datensatz laden & Verbindungen anzeigen
   2. Einfärben nach B-Faktor
   3. Animierte Daten
4. Zeitabhängige Daten aus der Physik





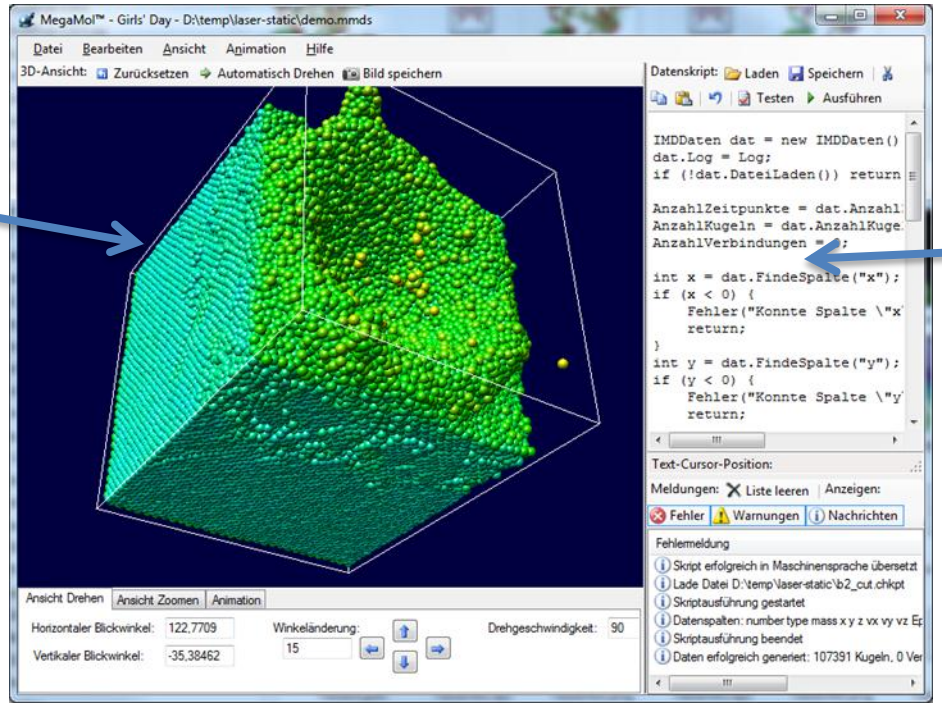
Übung vorbereiten

- Am Rechner anmelden:
  - Benutzername: prob10
  - Passwort: Day2011 (Großkleinschreibung)
- Datei-Explorer starten und GirlsDay-Verzeichnis kopieren:
  - Netzwerklaufwerk „H:“
  - Verzeichnis „girlsday“ kopieren (copy)
  - Auf Festplatte „C:“ einfügen (paste)
- Inhalt:
  - „MegaMolGD“ – Visualisierungsprogramm
  - Aufgabenblatt & Präsentationsfolien
  - Unterverzeichnis „Datensätze“ – Forschungsdaten (Physik & Biochemie)
  - Unterverzeichnis „Skripte“ – Lösungen und Beispielskripte

MegaMol™ Girls‘ Day Edition

- MegaMol™ Girls‘ Day Edition
  - „Kleine“ Version von MegaMol™ zum rumspielen, lehren und lernen

3D-Ansicht „wie im Original“

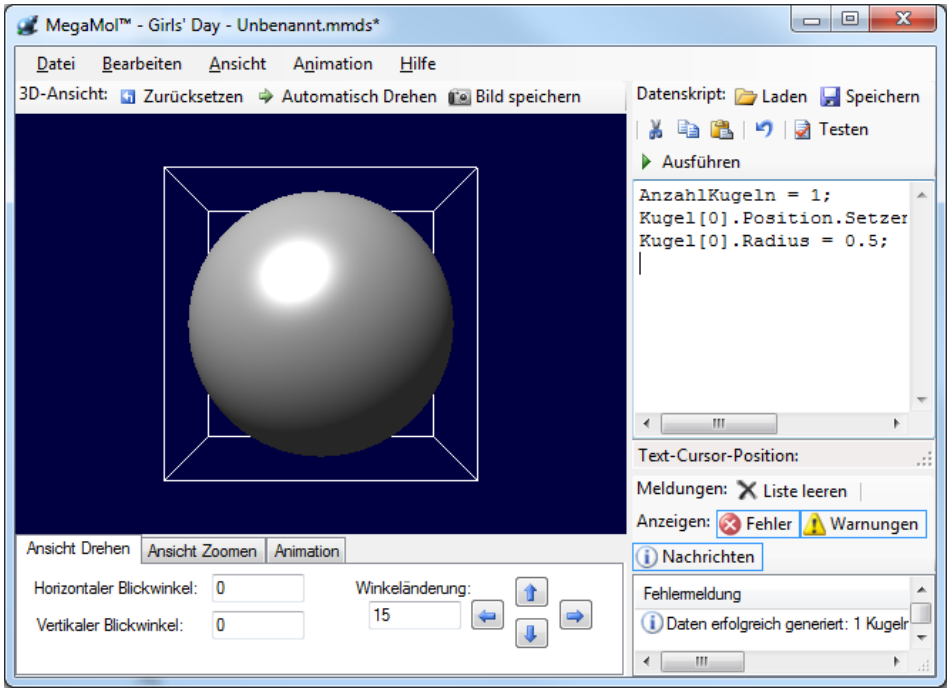


Programmtext: Zum Steuern der dargestellten Daten

1.1. Kugel in 3D-Koordinaten

```
AnzahlKugeln = 1;
Kugel[0].Position.Setzen(
   0.0, 0.0, 0.0);
Kugel[0].Radius = 0.5;
```

- Wie viele Kugeln?
- Für (jede) Kugel
  - Position
  - Radius



- Nach Eingabe Testen
- … dann Ausführen

1.2. Drei weitere Kugeln

```
AnzahlKugeln = 4;
Kugel[0].Position.Setzen(
   0.0, 0.0, 0.0);
Kugel[0].Radius = 0.5;
Kugel[1].Position.Setzen(
   1.0, 0.0, 0.0);
Kugel[1].Radius = 0.3;

...
```

- Wie viele Kugeln?
- Für jede Kugel
  - Position
  - Radius

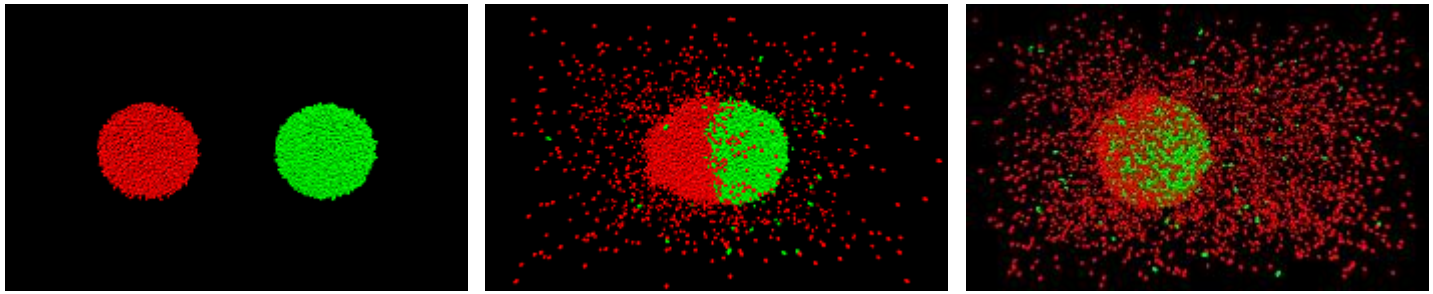
1.3. Einfärben der Kugeln

```
AnzahlKugeln = 4;
Kugel[0].Position.Setzen(
   0.0, 0.0, 0.0);
Kugel[0].Radius = 0.5;
Kugel[0].Farbe = Farbe.Schwarz;
Kugel[1].Position.Setzen(
   1.0, 0.0, 0.0);
Kugel[1].Radius = 0.3;
Kugel[1].Farbe = Farbe.Rot;

...
```

- Wie viele Kugeln?
- Für jede Kugel
  - Position
  - Radius
  - Farbe
- Farben:
  - Rot, Grün, Blau, Gelb, Türkis, Magenta, Weiß, Schwarz

1.4. Animation – Kugeln in Bewegung

- Animation der Kugeln
  - Definition mehrerer Zeitpunkt
  - Kugel-Positionen (Radien, Farben) für jeden Zeitpunkt setzen
  - Computer „bewegt“ die Kugel zwischen den Zeitpunkten.



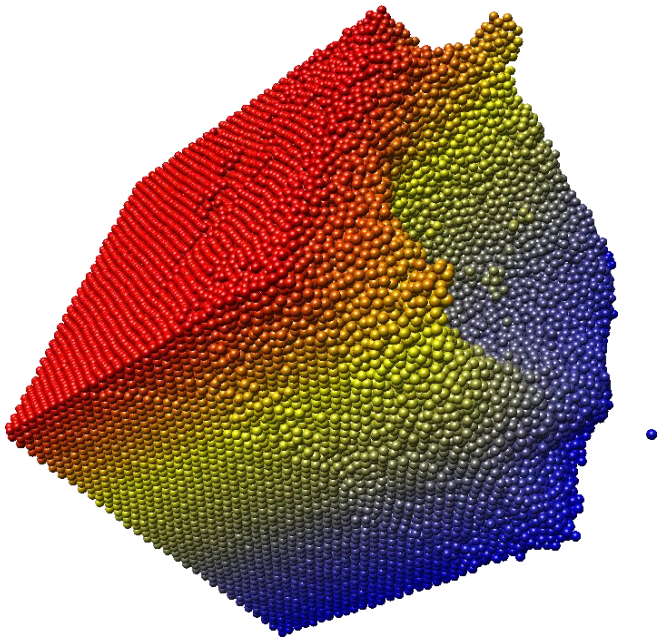
1.4. Animation

```
AnzahlKugeln = 1;
AnzahlZeitpunkt = 3;
AktuellerZeitpunkt = 0;
Kugel[0].Position.Setzen(
   0.0, 0.0, 0.0);
Kugel[0].Farbe = Farbe.Grün;
AktuellerZeitpunkt = 1;
Kugel[0].Position.Setzen(
   1.0, 1.0, 1.0);
AktuellerZeitpunkt = 2;
Kugel[0].Position.Setzen(
   0.0, 0.0, 0.0);
```

- Jetzt auch Anzahl der Zeitpunkt festlegen
- Immer einen Zeitpunkt zum aktuellen Zeitpunkt definieren
  - Für diesen Zeitpunkt Kugelwerte (z.B. Position) setzen.
  - Nicht gesetzte Werte (z.B. Radius, Farbe) wird von den letzten Zeitpunkten übernommen.

2.1. Physik-Datensatz laden

- Datensatz: physikalische Simulation
  - Block solides Aluminium
  - Ein Laser-Strahl schießt einen Krater hinein
  - 100 000 Kugeln!
- Datei speichert Liste von Atomen
  - Unterschiedliche Attribute pro Atom
  - Nummer, Typ, Position, Energie, …
- Lesen und übernehmen der Daten
  - Erst einmal einfach „nur“ Position



2.1. Physik-Datensatz laden

```
IMDDaten dat = new IMDDaten();
if (!dat.DateiLaden()) return;

AnzahlKugeln = dat.AnzahlKugeln;
```

- IMDDaten lädt und verwaltet eine Datei:
  - Daten aus `dat` übernehmen …
- For-Schleife:
  - Zählt `i` hoch
  - Für alle Kugeln …

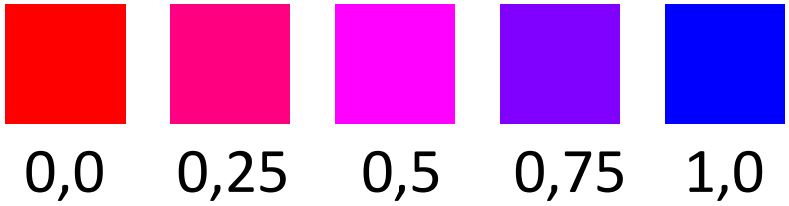
```
int x = dat.FindeSpalte("x");
int y = dat.FindeSpalte("y");
int z = dat.FindeSpalte("z");
for (int i = 0; i < AnzahlKugeln; i++) {
  Kugel[i].Position.Setzen(
   dat.Zeitpunkt[0].AtomDaten[i, x],
   dat.Zeitpunkt[0].AtomDaten[i, y],
   dat.Zeitpunkt[0].AtomDaten[i, z]);
  Kugel[i].Radius = 2.0;
}
```

2.2. Einfärben (diesmal richtig)

```
Kugel[i].Farbe = Farbe.Mischen(
    Farbe.Rot, Farbe.Blau, 0.3);
```

- Farben mischen
  - 1. Farbe (Rot)
  - 2. Farbe (Blau)
  - Mischfaktor zwischen Null und Eins
  - 0.3 mischt die Farben im Verhältnis: 70 % (Rot) und 30% (Blau)

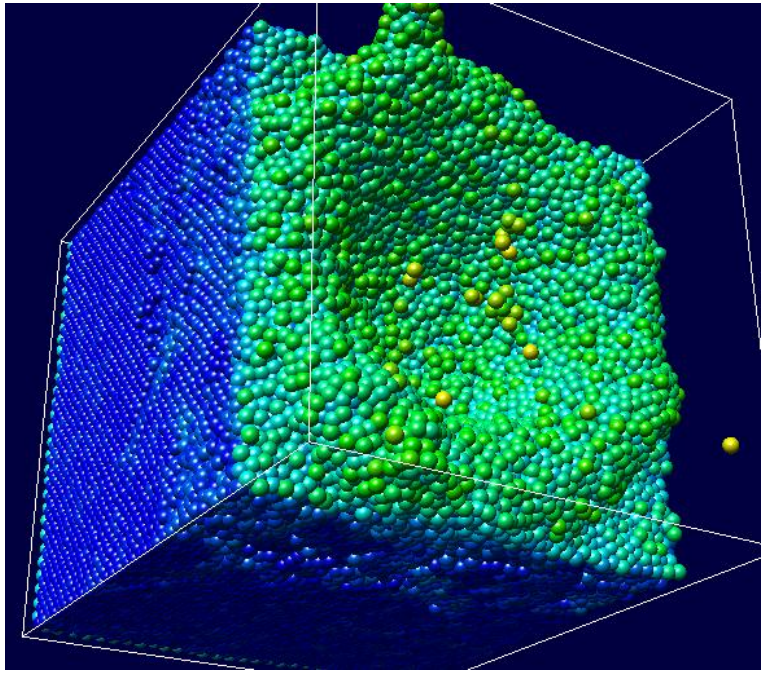
- Farben mischen:
  - 0 => 1. Farbe (Rot)
  - 1 => 2. Farbe (Blau)
  - 0,5 => Mischt zu gleichen Teilen



2.2. Einfärben (diesmal richtig)

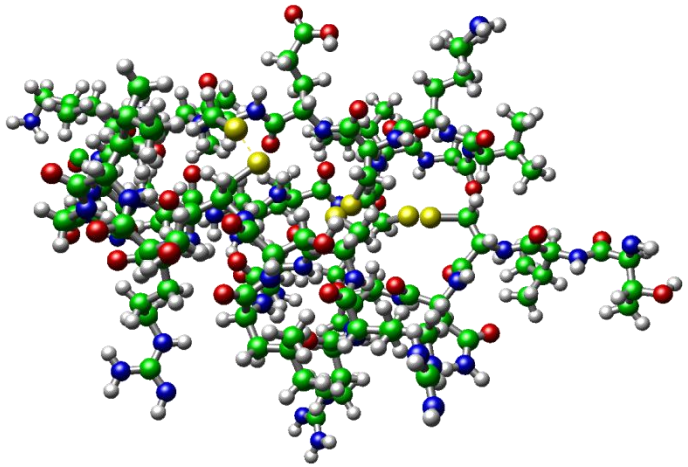
```
int eam = dat.FindeSpalte("eam_rho");
…
for (int i = 0; i < AnzahlKugeln; i++) {
  …
  Kugel[i].Farbe = Farbe.Mischen(
    Farbe.Gelb, Farbe.Blau,
    dat.Zeitpunkt[0].AtomDaten[i, eam]);
  …
}
```

- Datenspalte „eam_rho“
  - Energie des Atoms
  - Werte ungefähr zwischen Null und Eins daher ideal zum Einfärben.



3.1. Proteindatensatz laden & Verbindungen anzeigen

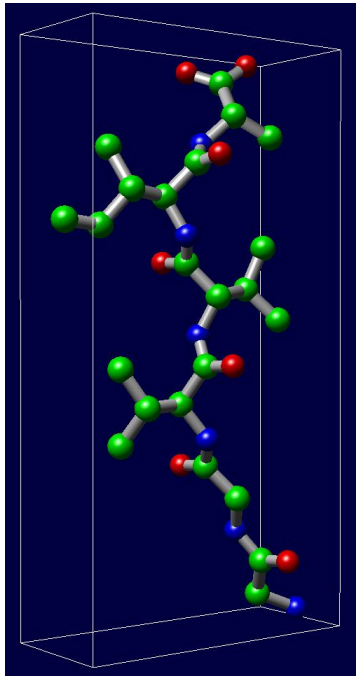
- Proteine werden als Kugeln und Stäbchen dargestellt
  - Wie im Molekül-Baukasten
  - „Kugel-Stäbchen-Modell“
  - Einfärben nach Atom-Typ (Element)
    - Kohlenstoff (C) = schwarz / grün
    - Sauerstoff (O) = rot
    - Stickstoff (N) = blau
    - Schwefel (S) = gelb
    - Wasserstoff (H) = weiß
- Proteindaten aus PDB-Datei laden
  - PDB = Protein-Datenbank (www.pdb.org)



```
PDBDaten dat = new PDBDaten();
if (!dat.DateiLaden()) return;
```

3.1. Proteindatensatz laden & Verbindungen anzeigen

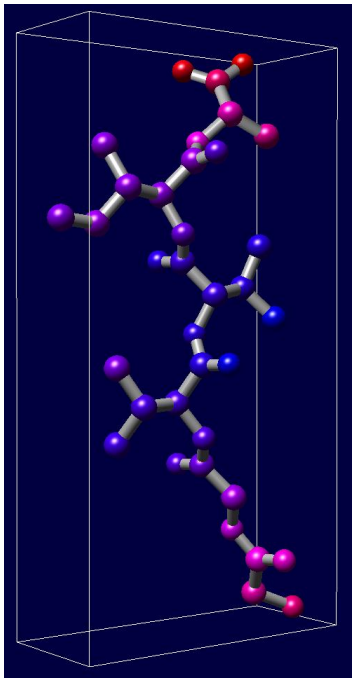
- Proteindaten aus PDB-Datei laden
  - Schleife über alle Atome
  - Jedes Atom als Kugel darstellen
  - Verbindungen anzeigen



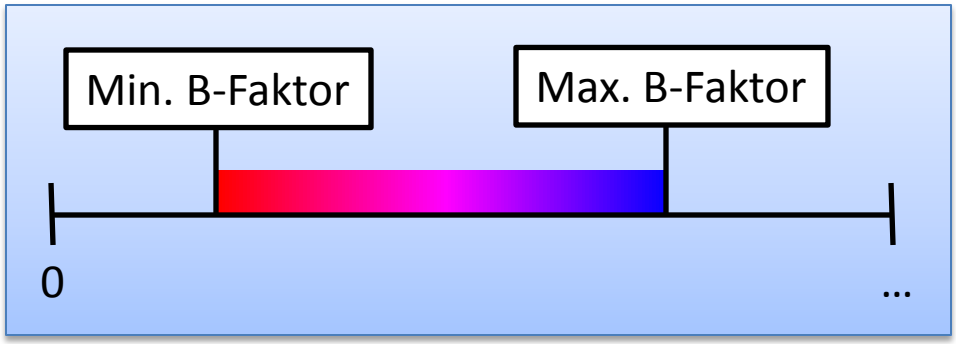
```
…
AnzahlKugeln = dat.AnzahlKugeln;
for (int j = 0; j < dat.AnzahlKugeln; j++) {
  Kugel[j].Position = dat.AtomDaten[0][j].Position;
  Kugel[j].Radius = dat.AtomTypRadius(dat.AtomDaten[0][j].Typ);
  Kugel[j].Farbe = dat.AtomTypFarbe(dat.AtomDaten[0][j].Typ);
}

AnzahlVerbindungen = dat.AnzahlVerbindungen;
for (int i = 0; i < dat.AnzahlVerbindungen; i++) {
  Verbindung[i] = dat.Verbindung[i];
}
```

3.2. Einfärben nach B-Faktor

- Farbmischung nach B-Faktor
  - Wertebereich zwischen maximalem und minimalem B-Faktor
  - B-Faktor-Werte auslesen und speichern

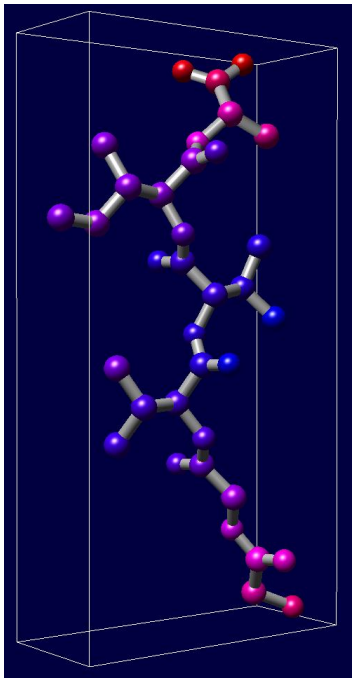


```
double BFaktor, MaximalerBFaktor = 0.0,
MinimalerBFaktor = 0.0;
…
for (int j = 0; j < dat.AnzahlKugeln; j++) {
  …
  BFaktor = dat.AtomDaten[0][j].BFactor;
  if( j == 0 ) {
    MaximalerBFaktor = BFaktor;
  }
  if( MaximalerBFaktor < BFaktor ) {
    MaximalerBFaktor = BFaktor;
  }
…
```

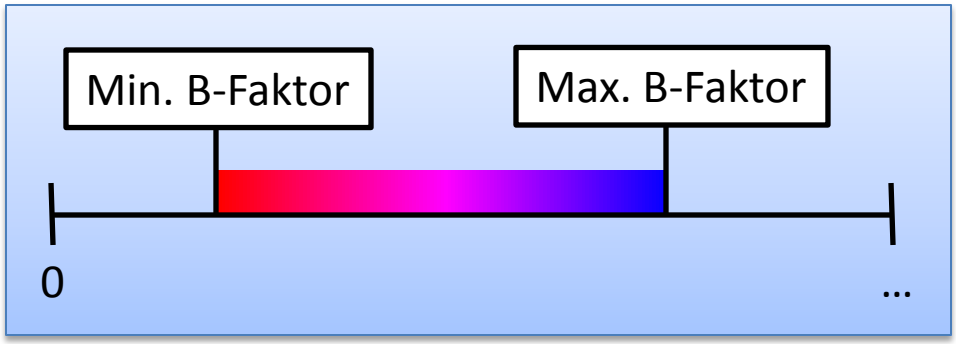


3.2. Einfärben nach B-Faktor

- Farbmischung nach B-Faktor
  - Mischfaktor zwischen 0 und 1 berechnen
  - Farbe berechnen und zuweisen



```
…
for (int j = 0; j < dat.AnzahlKugeln; j++) {
  BFaktor = dat.AtomDaten[0][j].BFactor;
  Kugel[j].Farbe = Farbe.Mischen( Farbe.Blau, Farbe.Rot,
    ( BFaktor - MinimalerBFaktor) /
    ( MaximalerBFaktor - MinimalerBFaktor) );
}
```



3.3. Animation zeitbasierter Daten

- Simulationsdaten haben viele Zeitpunkte
  - Andere Positionen in jedem Zeitpunkt

```
AnzahlZeitpunkte = dat.AnzahlZeitpunkte;
…
for (int i = 0; i < dat.AnzahlZeitpunkte; i++ ) {
  AktuellerZeitpunkt = i;
  for (int j = 0; j < dat.AnzahlKugeln; j++) {
    Kugel[j].Position = dat.AtomDaten[i][j].Position;
    …
  }
}
```

4. Zeitbasierte Daten aus der Physik

```
IMDDaten dat = new IMDDaten();
if (!dat.DateiLaden()) return;
```

- IMDDaten wie in Aufgabe 2.1. laden
- „Ja“ mehrere Dateien laden
  - 1 Zeitpunkt pro Datei

```
AnzahlZeitpunkte = dat.AnzahlZeitpunkte;
…
for (int i = 0; i < dat.AnzahlZeitpunkte; i++ ) {
  AktuellerZeitpunkt = i;
  for (int j = 0; j < dat.AnzahlKugeln; j++) {
    Kugel[j].Position.Setzen(
      dat.Zeitpunkt[i].AtomDaten[j, x],
      dat.Zeitpunkt[i].AtomDaten[j, y],
      dat.Zeitpunkt[i].AtomDaten[j, z]);
    …
  }
}
```

- Zeitbasiert verwalten wie in Aufgabe 3.3.

Fin

Wir hoffen es hat euch Spaß gemacht!

Vielleicht haben wir ja sogar Interesse für das Studium geweckt.

Fragebogen bitte ausfüllen.