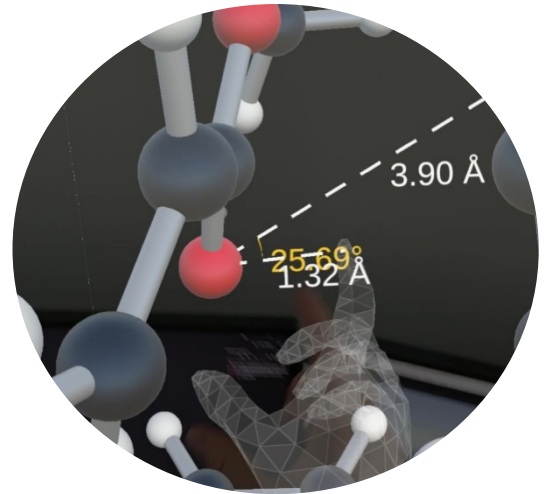


Bachelor-/Masterarbeit

Interaktive Simulationen durch Manipulation in einer AR Umgebung

Betreuer
Tobias Rau

Prüfer
Prof. Dr. Andreas Köhn



Motivation

Ob zum Auffinden alternativer Konformationen, zur Beobachtung eines Reaktionspfades, oder zur Bestimmung der Spindichte eines Moleküls, Simulationen sind ein zentrales Werkzeug in der Quantenchemie. Dabei werden Simulationen meist nach Bestimmung der Anfangsbedingungen nicht weiter manipuliert, was bei vielen Systemen auch sinnvoll ist, da die meisten Simulationen nicht in Echtzeit gerechnet werden können. Einfache Simulationen wie z.B. empirische Kraftfelder, welche meistens den Bau von Molekülen begleiten, werden bereits interaktiv eingesetzt um Eingaben des Benutzers zu unterstützen und zu vereinfachen. Die neusten Entwicklungen von empirischen und Machine Learning (ML) Modellen können bereits Reaktionen in Echtzeit simulieren. Hier kann eine Anbindung an ein solches Modell zur interaktiven Manipulation durch einen Benutzer beispielsweise den Findungsprozess von geeigneten Anfangsbedingungen erheblich beschleunigen. Dies soll in dieser Arbeit mit der von uns entwickelten Software zur Visualisierung und Konstruktion von Molekülen in Augmented Reality (AR), welche den Umgang mit 3D Objekten verbessert und Interaktion so natürlich wie möglich gestaltet, erforscht werden. Diese Technologie, welche stark auf Verwendung von neuartigen Geräten (hier HoloLens™) setzt, bringt zusätzliche Herausforderungen mit sich, wie z.B. Echtzeitfeedback, Limitierungen durch Leistungsfähigkeit der Geräte, geeignete Einbettung von Benutzerinteraktion.

Diese Abschlussarbeit ist Teil einer Kollaboration des Instituts für theoretische Chemie und des Instituts für Visualisierung in interaktive Systeme innerhalb des Cluster of Excellence SimTech.

Aufgaben

Ihre erste Aufgabe besteht darin die bestehende Berechnung des empirischen Kraftfeldes in ein eigenes (Python) Script auszulagern und mit der von uns entwickelte Software zu verbinden.

Anschließend soll diese Anbindung erweitert werden um auch Simulationen von ausgewählten empirischen und ML Modellen zu unterstützen.

Voraussetzungen

- Studium in den Fächern Chemie, Materialwissenschaften oder Simulation Technology (Naturwissenschaftszweig)
- Etwas Erfahrung mit einer Skriptsprache (Python, C#, ...)

Bewerbung

Bitte senden Sie eine Nachricht an tobias.rau@theochem.uni-stuttgart.de