公開用抜粋版

大規模可視化とHPCの活用で促進させる高分子ナノ複合材料研究

防衛大　萩田

2016.3.25

大阪大学　Cyber HPC Symposium

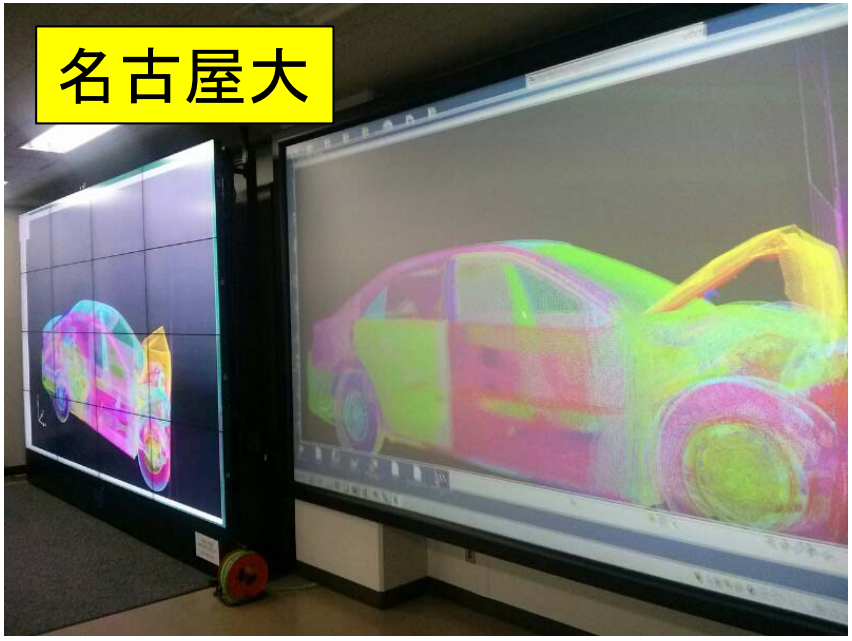
14:10-14:50

x

公開用抜粋版

“BIAC” in JAPAN at the present time

- 大きな“可視化装置（うめきた等）”を使っている（一応）“理論物理学者”です。
  - 「陰山先生、安心してください。BIACは、使えます。」
    - Bio-inter-Active-Computer



1

公開用抜粋版

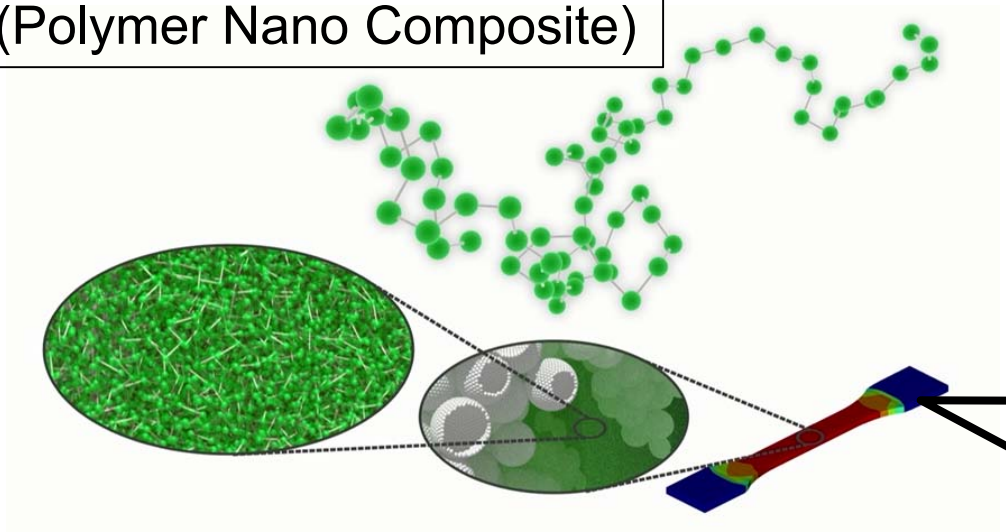
高分子複合材料計算

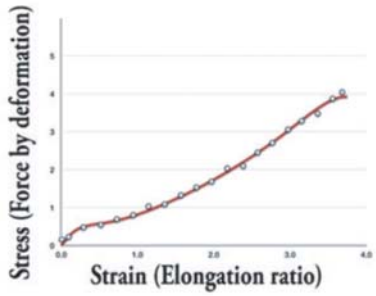
JHPCN

HPCI

- HPCと、大規模可視化の連携事例

高分子複合材料
(Polymer Nano Composite)





ナノ粒子: 10～100nmの直径
ポリマー: 1nm程度

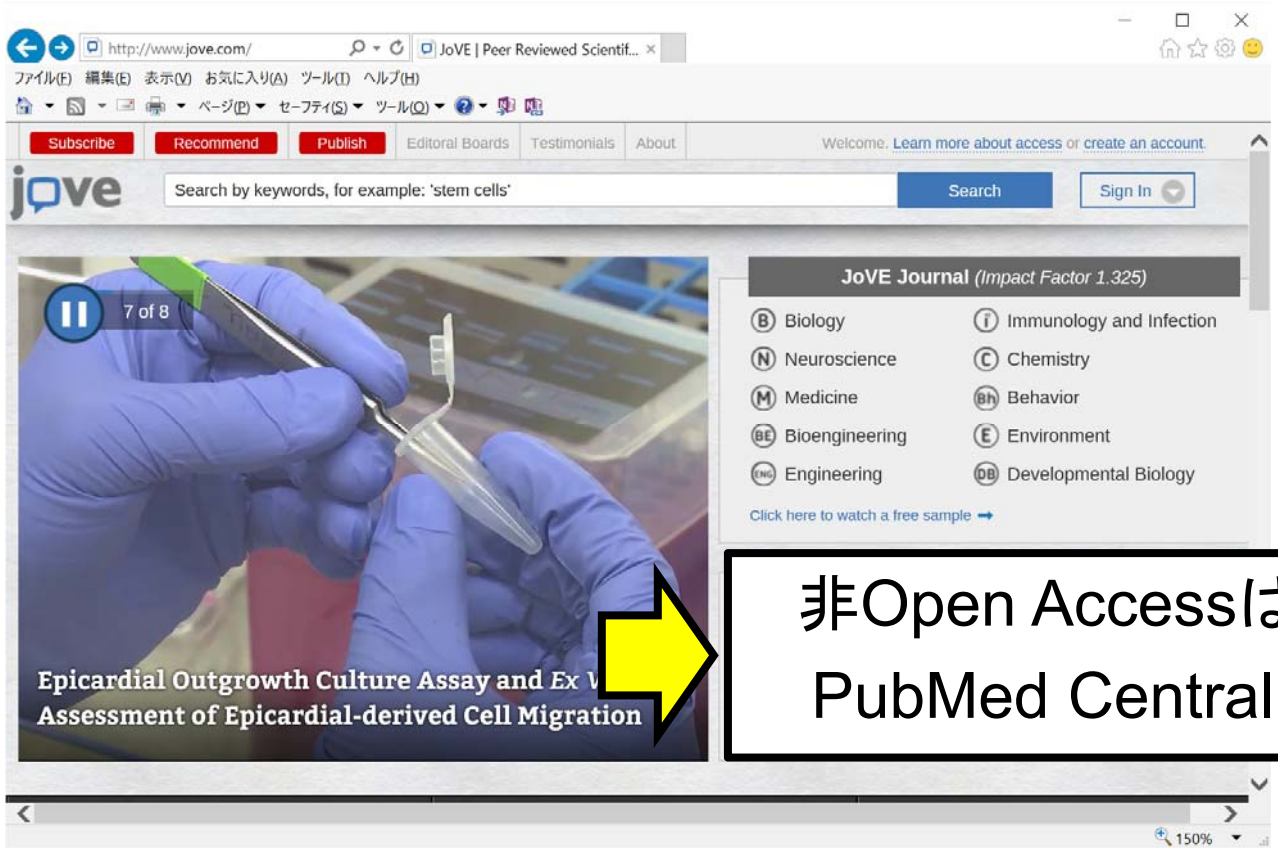
まずは、HPC可視化の結果を。

2

公開用抜粋版

Video Article（動画論文）

- 可視化した仮想実験（シミュレーションの動画）を、publishするには。。。　→ →　＄1200-
  - Journal of Visualized Expreiments　（IF 1.325）



非Open Accessは出版2年後に、
PubMed Central (PMC) で公開

3

公開用抜粋版

材料のためのHPC・可視化は？

- 「HPCから得られる情報と人間の認知をクロスさせた素材材料イノベーション創出」

- マテリアルズ・インフォマティクス（MI）の流れで大量に蓄積されつつあるデータ（DB）。

- たぶん、「取り出し方がわからない玉手箱」。

⇨ 見ているもの（材料構造）から、
見たいもの（材料構造）を推論する。
最適材料を得て、イノベーション！！

公開用抜粋版

機械と人間の役割分担（現状）

- シミュレーション
  - 入力値は、あくまでも仮定。出力の解釈も重要。
    - 材料シミュレーションでは、実験と計算の間に、曖昧な仮定条件が多い。（実験上の不確定さ。計算近似。）
- AI／機械学習　（for 材料シミュレーション）
  - 入力した問題設定に対して、最適解を見つける。
  - 無仮定だが、材料の「意味や原理」の理解とは別。
- 人間の熟練（学習）
  - 「シミュレーション＋AI／機械学習」の結果を、（類似の入力群に対し）俯瞰的に「意味や原理」を認知。
  - HPCのVR可視化は、人間による「意味や原理」の認知を支援。（インスピレーションに寄与。）
    - AIが進化すれば機械の仕事。それまでの仕事かも。

公開用抜粋版

AI／機械学習の現実的将来

- 囲碁： game with perfect information
- 理想の材料開発： perfect information
  - 材料シミュレーションで、何でもわかる。
  - 材料合成で、何でも作れる。
- 現実の材料開発： imperfect information
  - 材料シミュレーションでは、実験と計算の間に、曖昧な仮定条件が多い。（実験上の不確定さ。計算近似。）
- AI-材料開発： partially perfect information
  - 曖昧さが実質的にない事柄の最適化。
  - 不都合なことは、後で何とかする。（使えるところを使う。）
    - 材料シミュレーションや材料合成の限界を伸ばして、perfect informationの領域を増やすのが、人間かAIの仕事。

公開用抜粋版

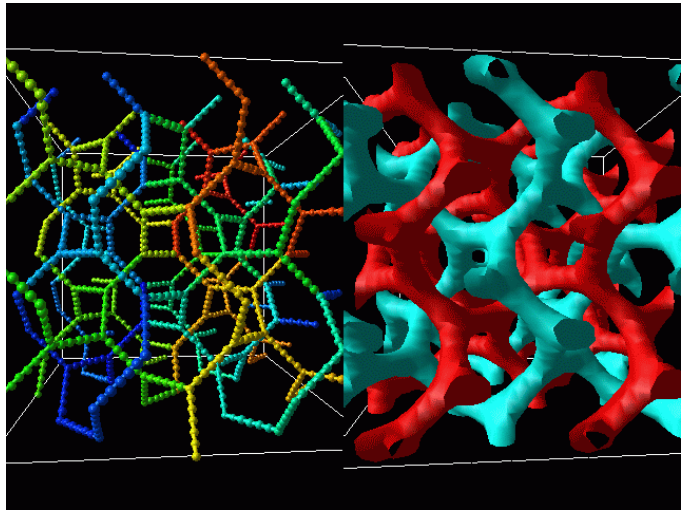
AI／機械学習と人間

- 人間による「高分子ナノ複合材料の実験やシミュレーション研究」は、将来のAI活用に必須。
- 人間の役割は、初期に、情報生成の種（ロジックや方向性）を与えること。
  - 細かい事は、AIによるHPCに任せる。（楽できる。）
- 当面、可視化（3dVR）は、人間による「ロジックの推論や方向性の創造」に有効なツール。
  - 将来は、可視化も、AIのHPCで解決してほしい。
  - Visualization of the HPC data, by the people (& AI), for the people

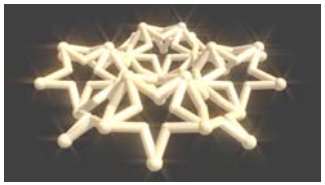
公開用抜粋版

流れ

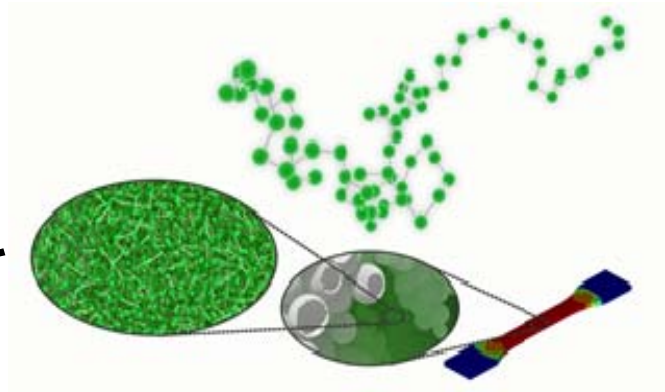
- 複雑な3次元構造:　高分子相分離構造
  - Double K4。Double Gyroid。
  - 炭素構造　･･･　研究中
    - ボロン、窒素
    - 材料数学: WPI-AIMR（東北）
    - 構造判定の機械学習:　LBNL



- PentaGraphene。カイロタイリング。
  - デザイン･意匠。



- ナノ粒子充填高分子複合材料



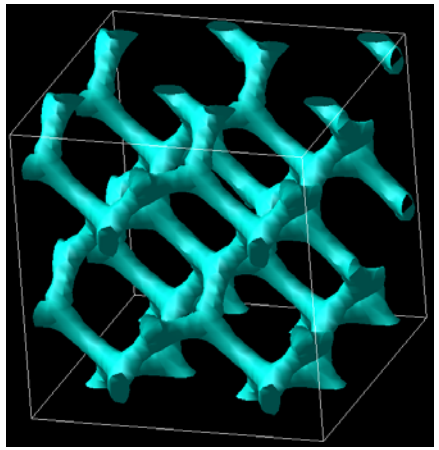
公開用抜粋版

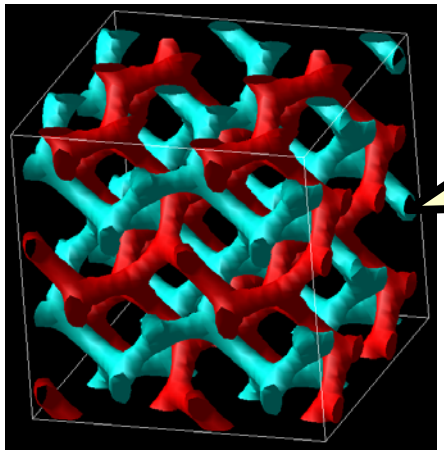
VR利用 （これまで良かったこと）

- ナノ工学（分子デザイン・ナノマテリアル）

空間群 214番　　空間群 230番

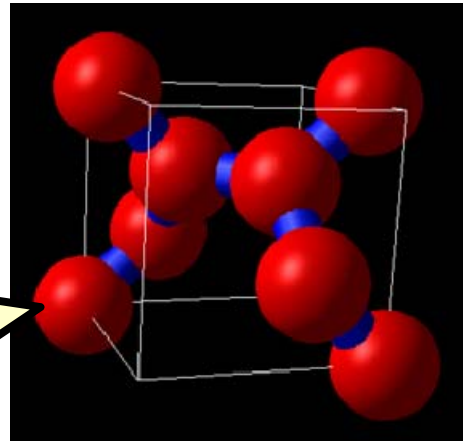
最小局面

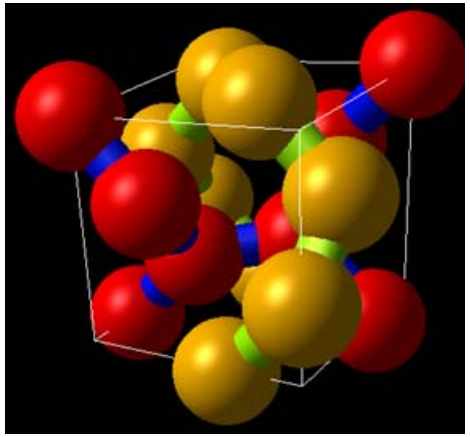




高分子相分離構造
(double gyroid)

原子配置



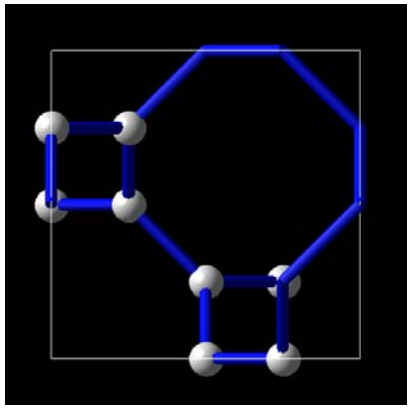


数学CREST
小谷チーム
（K4炭素結晶）

公開用抜粋版

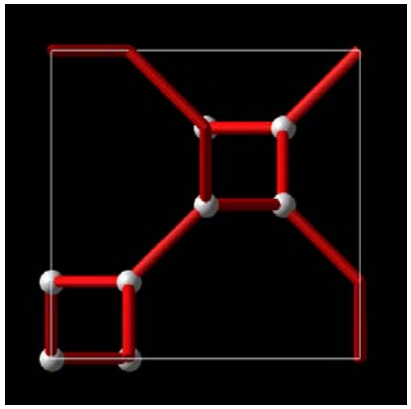
入れ子のK4 格子

K4 lattice



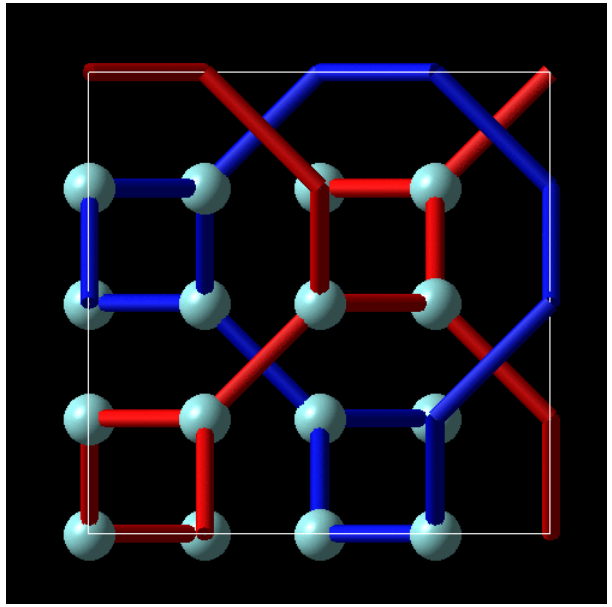
+

K4 lattice



=

Nested K4 lattice

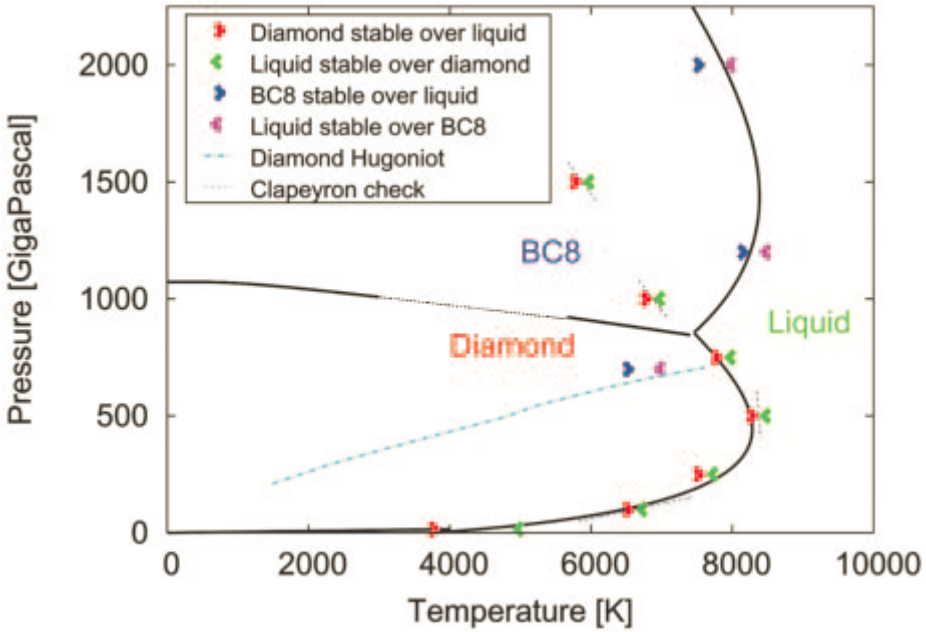


炭素の結晶で、材料計算（DFT）してみた。

公開用抜粋版

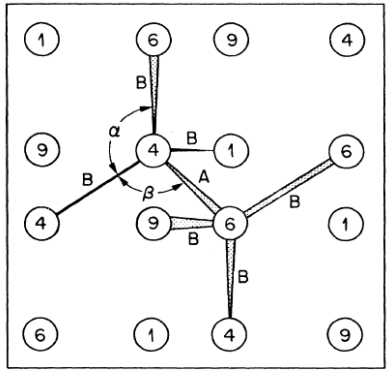
BC-8 構造（高圧の炭素結晶）

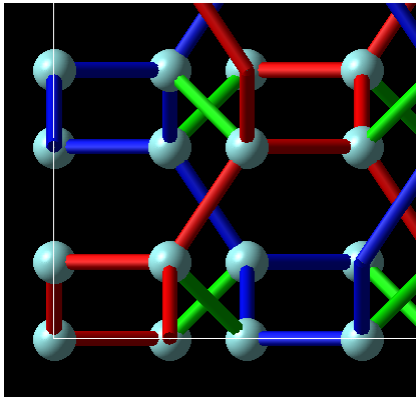
- BC-8 structure of Carbons is expected at high pressure region (around 1500G).
  - In experiments, BC-8 structures of Si and Ge are observed as a metastable phase.



A. A. Correa et al., PNAS, 103 (2006) 1204.

M. Yin, PRL, 30 (1984) 1773.

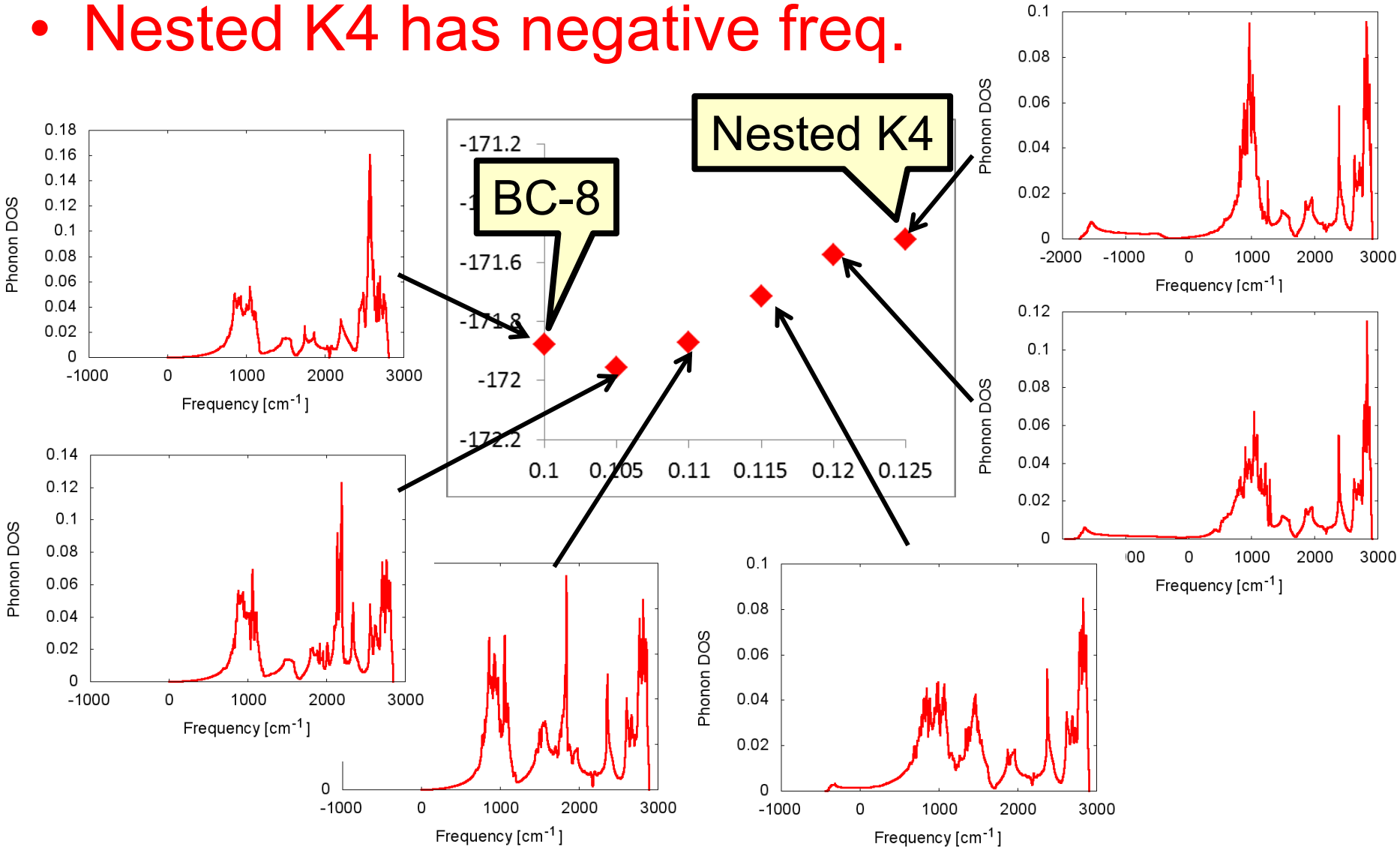




公開用抜粋版

フォノン計算（Phonon DOS）

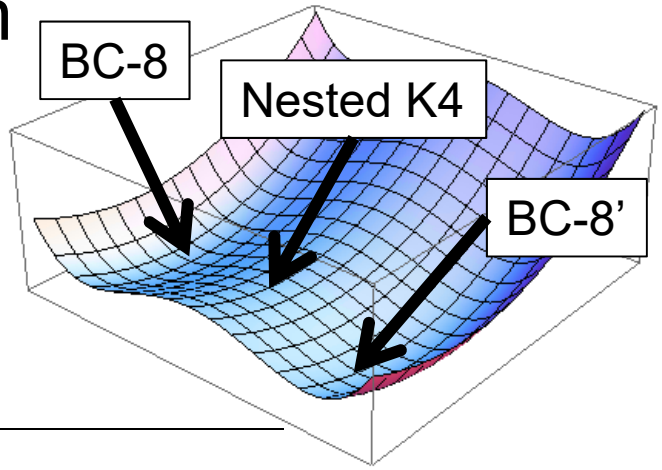
- Nested K4 has negative freq.



公開用抜粋版

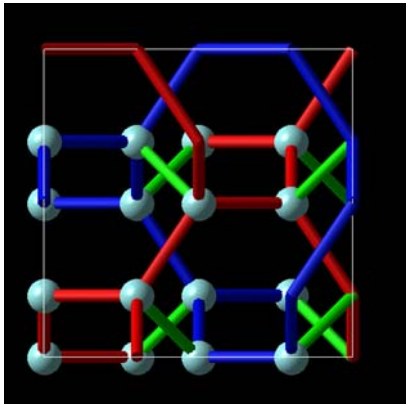
From BC-8 to nested K4

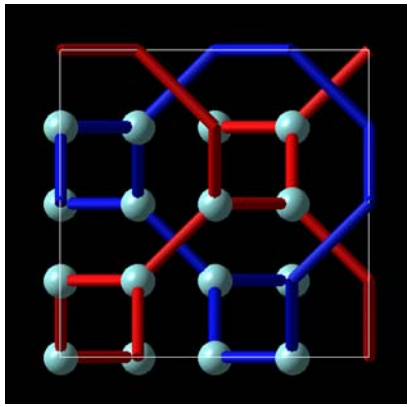
- Expected energy landscape from BC-8 to BC-8' via nested K4

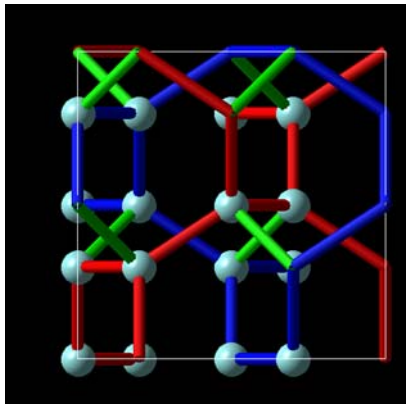


BC-8 | Nested K4 | BC-8'

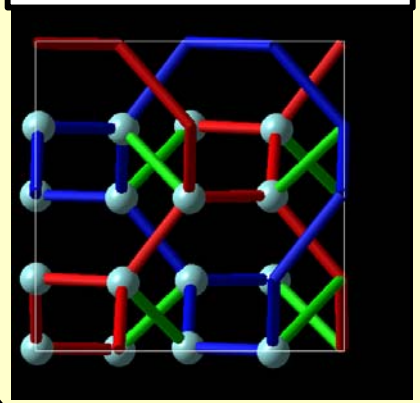
x=1/10 =20/200 | x=1/8 =25/200 | x=6/40 =30/200







DFT-MD 10 psec
T=7200K



公開用抜粋版

15 材料探索の方針（戦略）の創出

- Wyckoff座標
  - 結晶構造が取り得る座標配置。
  - 空間の対称性ごとに分類。

http://www.cst.ehu.es/

Wyckoff Positions of Group 206 (*Ia*-3)

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
			(0,0,0) + (1/2,1/2,1/2) +
48	e	1	(x,y,z) (-x+1/2,-y,z+1/2) (-x,y+1/2,-z+1/2) (x+1/2,-y+1/2,-z) (z,x,y) (z+1/2,-x+1/2,-y) (-z+1/2,-x,y+1/2) (-z,x+1/2,-y+1/2) (y,z,x) (-y,z+1/2,-x+1/2) (y+1/2,-z+1/2,-x) (-y+1/2,-z,x+1/2) (-x,-y,-z) (x+1/2,y,-z+1/2) (x,-y+1/2,z+1/2) (-x+1/2,y+1/2,z) (-z,-x,-y) (-z+1/2,x+1/2,y) (z+1/2,x,-y+1/2) (z,-x+1/2,y+1/2) (-y,-z,-x) (y,-z+1/2,x+1/2) (-y+1/2,z+1/2,x) (y+1/2,z,-x+1/2)
24	d	2..	(x,0,1/4) (-x+1/2,0,3/4) (1/4,x,0) (3/4,-x+1/2,0) (0,1/4,x) (0,3/4,-x+1/2) (-x,0,3/4) (x+1/2,0,1/4) (3/4,-x,0) (1/4,x+1/2,0) (0,3/4,-x) (0,1/4,x+1/2)
16	c	.3.	(x,x,x) (-x+1/2,-x,x+1/2) (-x,x+1/2,-x+1/2) (x+1/2,-x+1/2,-x) (-x,-x,-x) (x+1/2,x,-x+1/2) (x,-x+1/2,x+1/2) (-x+1/2,x+1/2,x)
8	b	.-3.	(1/4,1/4,1/4) (1/4,3/4,3/4) (3/4,3/4,1/4) (3/4,1/4,3/4)
8	a	.-3.	(0,0,0) (1/2,0,1/2) (0,1/2,1/2) (1/2,1/2,0)

Wyckoff座標は、規約ではない。

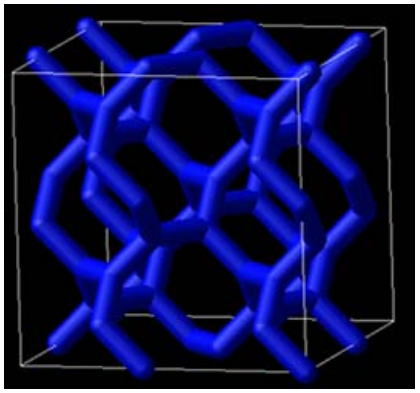
係数xの変化で、対称性が変わる。

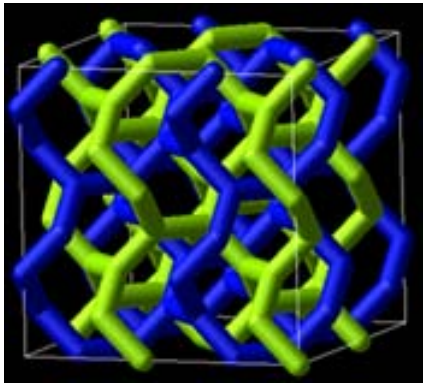
例) Nested K4 -> BC8

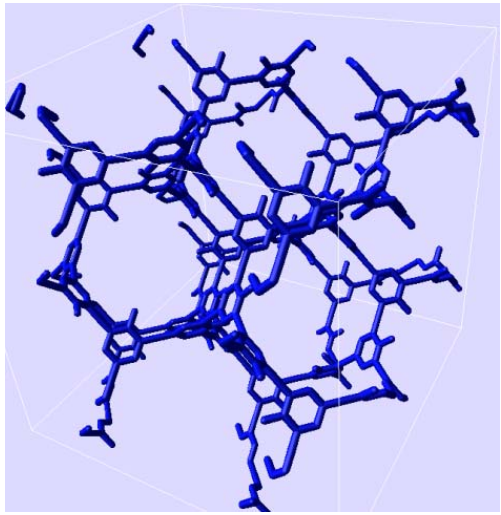
新材料の構造探索を促進できる（かも）

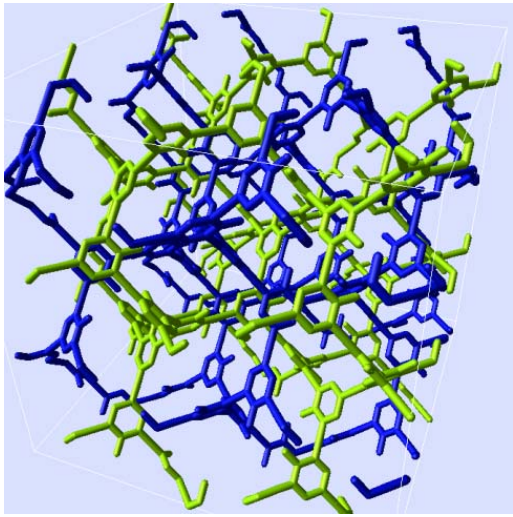
公開用抜粋版

K4フェノール樹脂









H26年度HPCI課題

・・・　基礎的なことは
だいたい押さえた

平面波DFT

・精密な構造安定性の評価
（ダイレクトアプローチ法）

平面波DFT

・電気伝導性の評価　→　バンド図
・xTAPP　（MateriApps）

古典MD

・密度の簡易評価
・一軸延伸による応力歪関係
・LAMMPS

公開用抜粋版

VR利用 （これまで良かったこと）

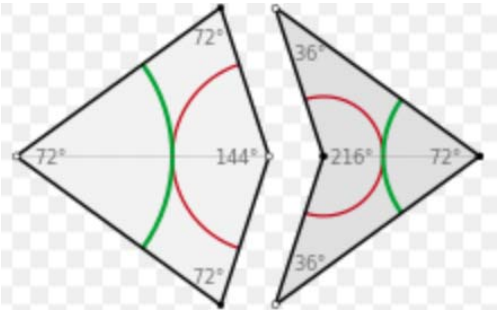
- VRを使って、良いことはあるのか？
  - 未来は、わからない。
    - インスピレーションは、各個人のbackgroundに依る。
  - 過去は？　個人的体験談。。。。（個人的感想です（笑）。）

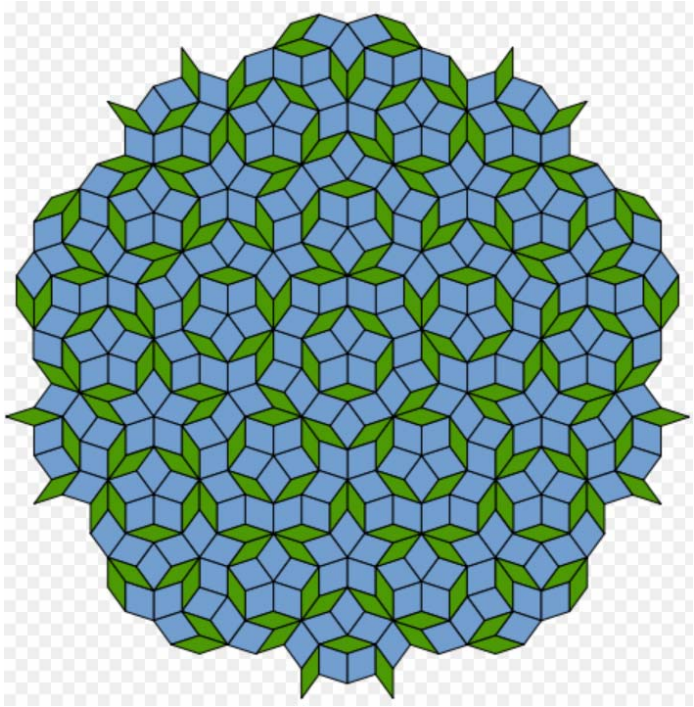
ペンローズ

理論物理学者
・ブラックホールの特異点定理
・準結晶（ペンローズタイル）

公開用抜粋版

- ペンローズ・タイリング
  - 1974年 Bull Inst Math Appl
  - 二種類の菱形
  - 平面充填形





- US特許
  - US 4133152, Penrose, Roger, "Set of tiles for covering a surface", published 1976-06-24, issued 1979-01-09.

19

公開用抜粋版

ペンローズ

- 日本国特許「ある表面を覆うタイルの一組」
  - 玩具・ゲームの製造に適している。

優先権証明書補充

	第一国の国名	第一国の出願日	出願番号
優先権主張	イギリス國	1976年6月24日	第26904/76号
		19 年 月 日	第 号
		19 年 月 日	第 号

収入印紙 1000円

(Y 4.000) 特 許 願

特許庁長官 殿 昭和51年6月25日

1. 発明の名称

ある表面を覆うタイルの一組

2. 発明者

居所 特許出願人と同じ

氏名 (ほか 名)

3. 特許出願人

住所 イギリス国オックスフォード、ウインチエスターロード 6、フラット 2

~~名称~~

氏名 ロジャー、ペンローズ

~~(代表者)~~

国籍 イギリス国 (ほか 名)

4. 代理人

⑲ 日本国特許庁

公開特許公報

⑪特開昭 52-34528

㊸公開日 昭52.(1977) 3.16

㉑特願昭 51-73744

㉒出願日 昭51.(1976) 6 25

審査請求 未請求 (全8頁)

庁内整理番号

6828 22

㊷日本分類	㊺Int.Cl².
86(1)B32	E04F 13/08

公開用抜粋版

PentaGraphene

- PentaGraphene

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America

PNAS

CURRENT ISSUE // ARCHIVE // NEWS & MULTIMEDIA // AUTHORS // ABOUT COLLECTED ARTICLES // BROWSE BY TOPIC // EARLY EDITION // FRONT MATTER

> Current Issue > vol. 112 no. 8 > Shunhong Zhang, 2372–2377, doi: 10.1073/pnas.1416591112

CrossMark

Penta-graphene: A new carbon allotrope

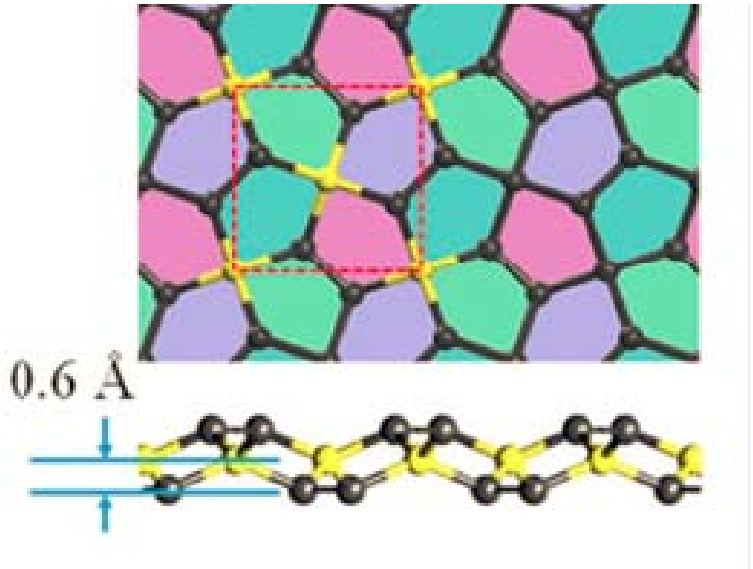
Shunhong Zhang[a,b,c], Jian Zhou[c], Qian Wang[a,b,c,1], Xiaoshuang Chen[d,e], Yoshiyuki Kawazoe[f], and Puru Jena[c]

This Issue

February 24, 2015
vol. 112 no. 8
Masthead (PDF)
Table of Contents

PREV ARTICLE NEXT ARTICLE

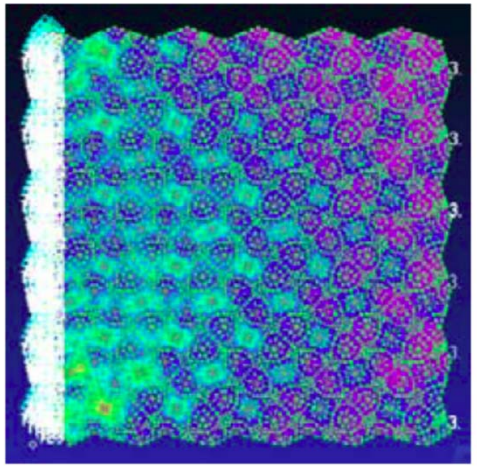
- カイロタイリング

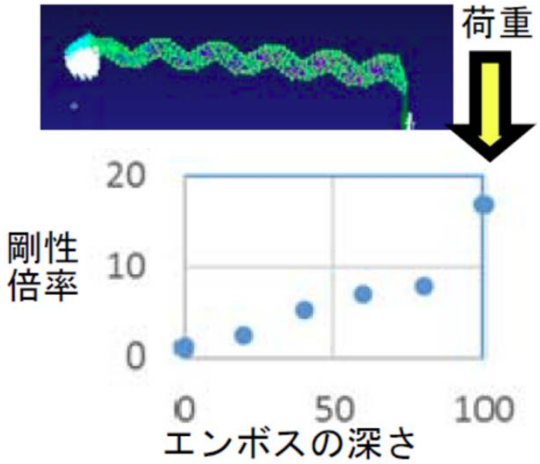


公開用抜粋版

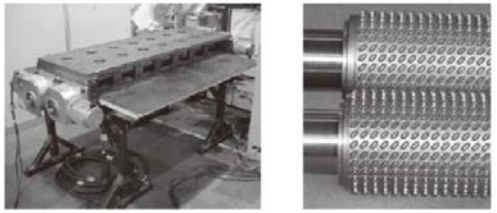
PentaGraphene構造の応用展開

- 負のポアソン比
  - 有限要素法（FEM）





トヨタ・大同工業大
2013年



(a) Panoramic view (b) Roll

Fig.1 Roll forming apparatus

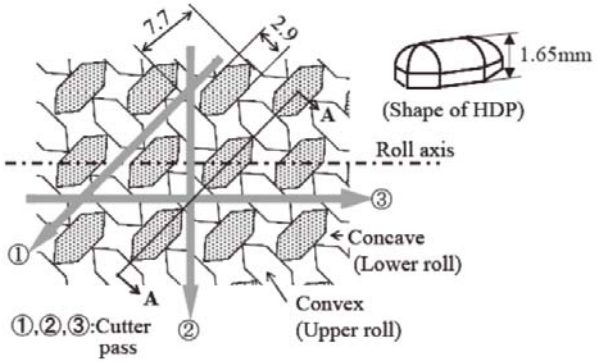


Fig. 2 Development of rolls and dimple size

公開用抜粋版

ナノ粒子／高分子系の背景

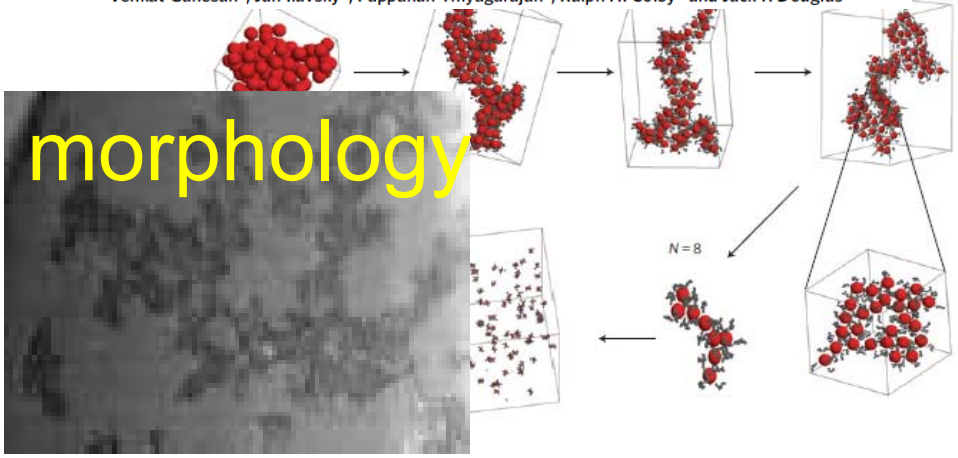
- ナノ粒子の構造形成の観点での研究が多い。
- Highly filled materialsに移りつつある。

孤立したナノ粒子群

ARTICLES
PUBLISHED ONLINE: 22 MARCH 2009 | DOI: 10.1038/NMAT2404
nature materials

Anisotropic self-assembly of spherical polymer-grafted nanoparticles

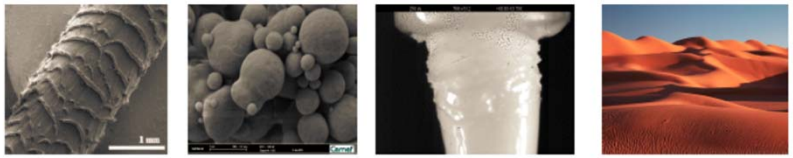
Pinar Akcora[1], Hongjun Liu[1], Sanat K. Kumar[1]*, Joseph Moll[2], Yu Li[3], Brian C. Benicewicz[3], Linda S. Schadler[4], Devrim Acehan[5], Athanassios Z. Panagiotopoulos[6], Victor Pryamitsyn[7], Venkat Ganesan[7], Jan Ilavsky[8], Pappanan Thiyagarajan[8], Ralph H. Colby[9] and Jack F. Douglas[10]



Highly filled materials

IMP-CEMEF-SIMM/ESPCI 1st workshop

Flow and Processing of Highly Filled Materials



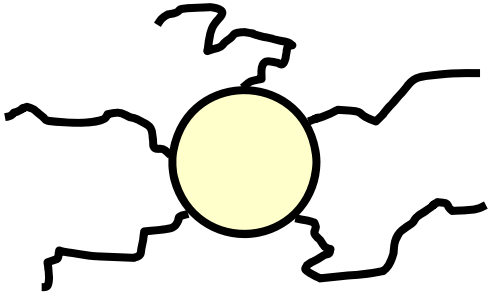
Location: Institut Pierre-Gilles de Gennes -PARIS January 28-29, 2016

（応用） プラスチック、タイヤゴム、フィルム、コンクリート、セラミック、ヘルスケア製品など

公開用抜粋版

ナノ粒子／高分子系の背景

- 「ガラスの物理学」との接点が、増えてきた。
  - 浅井誠さん@Kumar-Lab
    - 実験とシミュレーションの連携。Grafted-ナノ粒子。



Roughness
Sphericity
Coverage 等

log η=C (T/Tg)^a

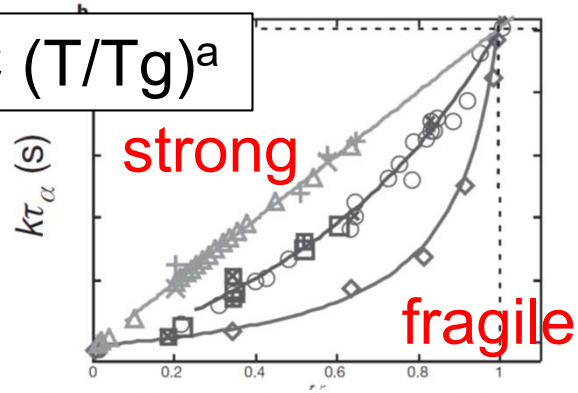


Figure 2 | Fragility range for colloids.

- ガラスのFragility
  - 「物質によって違う」、これまでの理解。
  - 「Slow Dynamicsの特徴・起源を解明したい」流れ。
  - Nature 461 (2009) 83.
    - MicroGELの架橋度 ー＞　起源は？？？
  - Asai-Kumar: unpublished。（面白い結果）
    - Low-grafted-NP -> roughness（これが起源？）

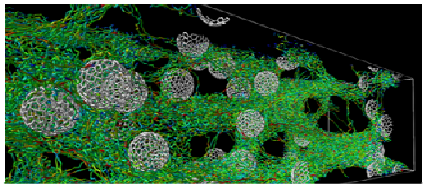
公開用抜粋版

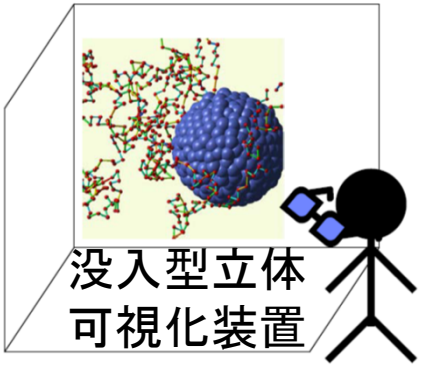
大阪大CMCの HPCと可視化

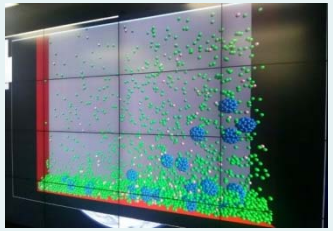
- JHPCN（情報基盤センター群；学際拠点）で、「HPC+可視化の文化圏」形成。

JHPCN HPCI

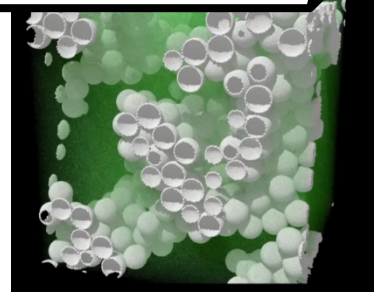
VR(仮想現実)





阪大CMC		24面（HD）タイルドディスプレイ（6x4） 11520x4320 6台のPCでのマスター スレーブ Win/Linux	（連動）バックエンド可視化用PCクラスター (Xeon E5-2670v2 x2 64GBメモリ) x 62台
		15面シリンドリカルディスプレイ (5x3) 6830x2304 5台のPCでのマスター スレーブ Win/Linux	
名大		16面（HD）タイルドディスプレイ (4x4) 7680x4320 1台のSGI Altix UV Linux 1280Cores 20TBmem	

高品位可視化



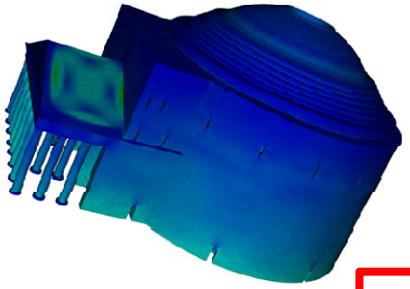
公開用抜粋版

JHPCNでの可視化

- 名古屋大 荻野先生

Numerical examples of FEM simulation data

- Elastostatic analysis by FEM using ADVENTURE
- Unstructured mesh of 35 million nodes
- Displacement (3d) & Mises stress (s) of double
- Allowed error of JHPCN-DF: $\epsilon > \|x - \tilde{x}\| / \|x\|$



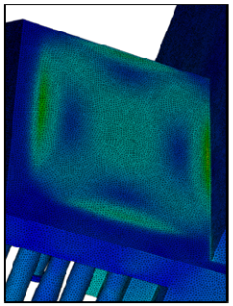
File size (Space savings)

Original	w/ DEFLATE	w/ JHPCN-DF	
1,552 MB	1,289 MB (16.9 %)	$\epsilon = 10^{-2}$	164 MB (89.4 %)
		$\epsilon = 10^{-3}$	200 MB (87.1 %)
		$\epsilon = 10^{-6}$	545 MB (64.9 %)

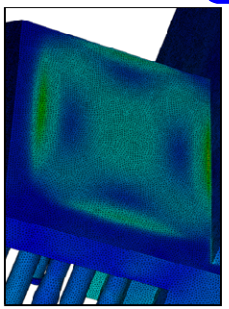
単純gzip
15%削減

可視化用
90%削減

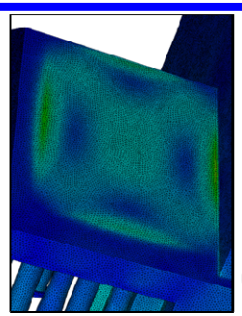
解析用
65%削減



Original



$\epsilon = 10^{-2}$



$\epsilon = 10^{-3}$

Courtesy by
荻野正雄@名大/
CREST塩谷team

公開用抜粋版

高精細3d-VRのためのHPCは？

- 可視化のためのHPCは、NVIDIAのQuadroの性能頼み。
  - Quadroは、GeForceの一世代遅れ。
  - GeForceは、ゲーム業界が牽引。
- 国産で、世界最高性能 3d-VR処理系は、作れないのでしょうか？
  - ゲームのハードウェア先行開発として、、、 ●●●億円
  - 国が投資して良い分野！　＜サイバー先進国＞
- 「HPCのための可視化、可視化のためのHPC」としては、「DGEMM性能」と「3d-VR性能」

⇨ ベンチマークと懸賞の創設。
HPC-3dVR-TOP 7ランキングとか。

公開用抜粋版

まとめ

- 「HPCから得られる情報と人間の認知をクロスさせた素材材料イノベーション創出」
  - HPC Data-プランナー
  - Visualization of the HPC data, by the people (& AI), for the people
- 「高分子ナノ複合材料」は、面白い＋役立つ。
- HPC+可視化 → 多様な成果 on JHPCN

x

公開用抜粋版

AVSの、フルカラー3Dプリント

- AVS/ExpressのWrite STLを改良。
  - NetFabb Basicのカラー STLに対応。
  - PLYデータ形式で、DMM.make にWeb注文。

次期バージョンでリリース予定

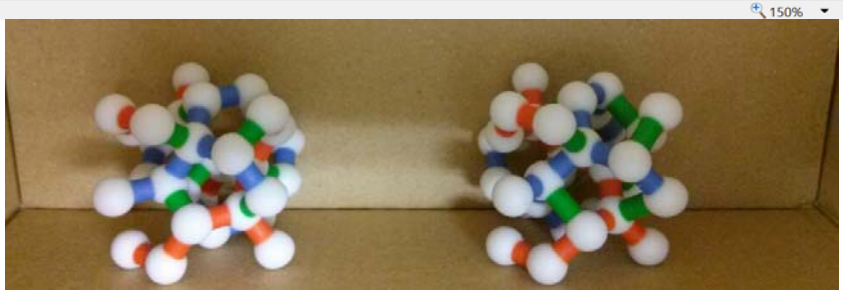
AVS/Express

色つきSTL形式

netfabb
The Software for 3D Printing

PLY形式のデータ

アップロード



x

公開用抜粋版

AVSの、大規模3Dプリント

- DMM.makeでは、圧縮後100MBが、リミット。
  - Autodesk MeshMixerで、3Dプリント用に削減。
  - STLデータをzip圧縮して、DMM.make にWeb注文。

AVS/Express

STL形式(980MB)

AUTODESK 123D

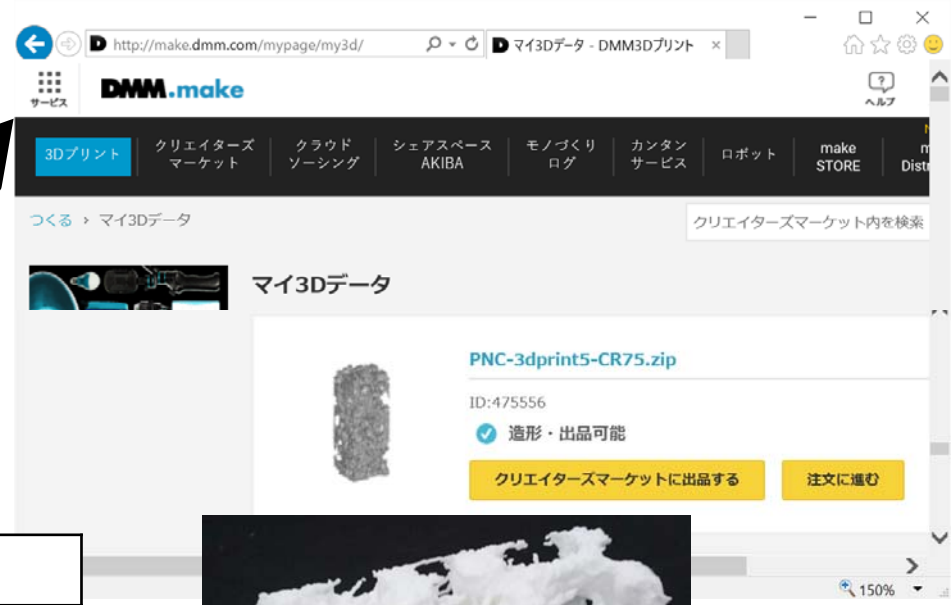
Meshmixer 3.0

STL形式(202MB)
→ zip 92.3MB

アップロード

JHPCN-DF圧縮

Tolerance	size
0.1	39.0MB
0.01	54.1MB
0.001	64.9MB



x

公開用抜粋版

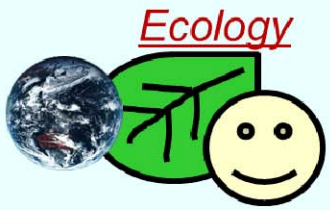
JPHCN-DF圧縮

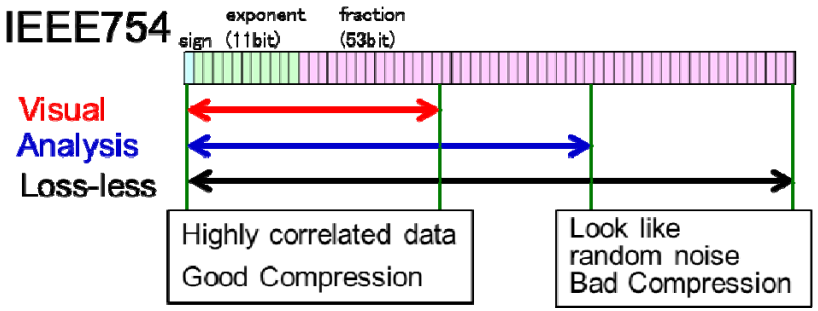
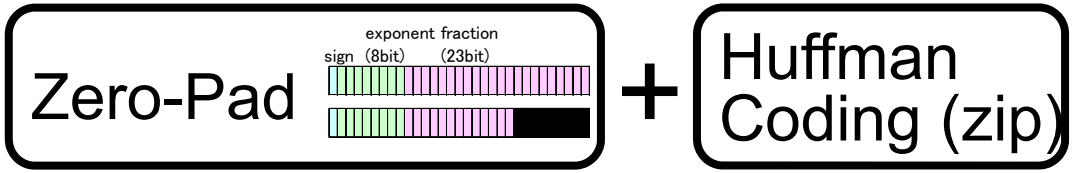
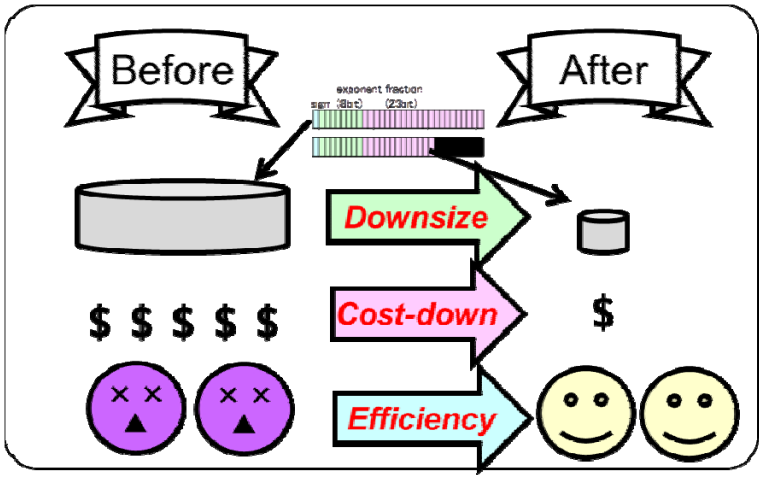
Small data size, equal numerical precision!

Downsize of data ➡ Reduce storage space

Speed-up data transfer

Improve data handling



Lossy data compression method

JHPCN-DF