

可視化と純粋数学に駆動された物質科学計算の一例 ～K4 フェノール樹脂の DFT 計算と古典 MD 計算へ～

防衛大学校 応用物理学科 萩田 克美

最近のスーパーコンピュータを用いた大規模計算やビッグデータ系において、表現に必要な次元やデータ量の問題から、バーチャルリアリティ (VR) 可視化装置の援用が1つのツールとして注目されている。VR 可視化は、計算対象の物質構造の理解や計算結果の解釈・考察などの科学上の **Inspiration** に役立つのみならず、一般の人達に科学研究の内容を直感的に紹介し好奇心を高める **Fun** にも役立つものである。

これまで、VR を用いた仮想空間内での探索的観察は、装置の制約 (高額であり、一般利用の敷居が高い) などで、あまり普及してこなかった面が否めない。最近、大阪大学/名古屋大学/東北大学などの情報基盤センターにおいて、JHPCN など一般利用可能な VR 可視化装置を整備しつつある。特に、大阪大学では、うめきた (大阪・梅田駅の北側) の商業施設等に、一般の人達への科学宣伝向けの可視化装置を設置している。すなわち、仮想空間内での探索的観察はコモディティ化されつつある。

本講演の前半では、VR 可視化で **Inspiration** を得て大規模計算 (DFT 第一原理計算/大規模古典 MD 計算など) のニーズ発掘 (HPCI 課題申請) につながった事例を紹介する。これは、純粋数学から提案された K4 格子について、VR 可視化を通して、具体的な材料評価研究につながった (成功) 事例である。K4 フェノール樹脂について、VR 画像とともに紹介するとともに、計算の展望について説明する。

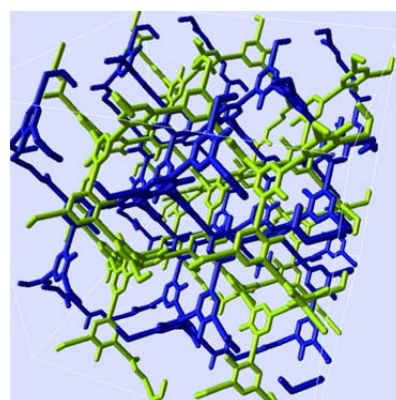


図1 double K4 フェノール樹脂

後半では、上記のメールアドレスの VR 画像として用いた **gfa** ファイルと、VR 可視化装置の利用について紹介する。

また、大規模データ処理や、AVS/Express での各自のデータ形式への対応 (ワークフローを考慮した可視化) 等の VR のコモディティ化の取り組みを紹介する。

当日はビデオ配信による講演のため、可視化動画や VR の送信は難しい。その対策として、**gfa** ファイルや Youtube を用いた動画を準備した (表1)。PPT ベースのテレビ会議での議論/講演において、**gfa** ファイルや Youtube を用いることの有効性を検討してみる。

表1 本講演中で紹介する **gfa** ファイル Youtube 動画の URL

	Win (gfa ファイル)	Mac (youtube 動画)
K4 炭素結晶	http://urx.nu/5N7P	http://youtu.be/ILK-1Hfc-K0
Double K4 炭素結晶	http://urx.nu/5N7R	http://youtu.be/bWadGe4yTKY
K4 フェノール樹脂	http://urx.nu/5N7X	http://youtu.be/rdPJr7_WTqs
Double K4 フェノール樹脂	http://urx.nu/5N7Z	http://youtu.be/qdnXfi5d040