

高分子材料の破壊・構造形成時の二次元散乱パターンとディープラーニング分析技術の開発



本研究課題のねらい

大規模計算と情報システム検討を統合した課題で高分子材料系の小角散乱実験データの解析において、ディープラーニング技術の活用を実現する。

課題採択前の実施予定項目:

- A. 高分子メルト中のナノボイドの生成と成長の動態と、仮想散乱実験データとの対応検討
- B. 高分子相分離構造などのナノ構造の変形と、仮想散乱実験データとの対応検討
- C. 仮想散乱実験データと断面スナップショットを、Deep Learning学習させ、断面スナップショットから、二次元散乱パターンのregressionが可能かの検討

採択された計算資源

- ・北海道大学 XLサーバ(40cores)1台相当 10ヶ月利用
- ・名古屋大学 153,670P
- ・大阪大学 VCC 共有利用:21,000ノード時間、OCTOPUSポイント:4,000ポイント

データ作成の大規模計算分は、削減。

高分子材料研究でのディープラーニングの活用例

超解像

Hagita, et al. Scientific reports 8 (2018) 5877.

画像分類

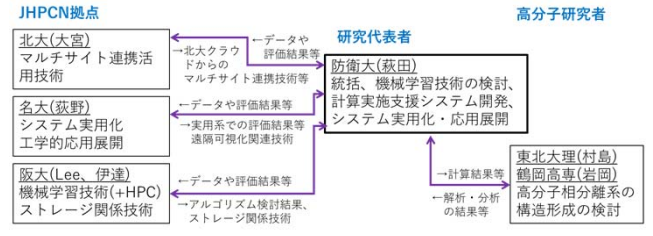
萩田 et al. 日本ゴム協会誌 91 (2018) 3-8.

trainとtestで、それぞれ、8000枚準備

採択資源を踏まえたJHPCN課題実施内容

大規模計算はできないので、データも得られないので、H31以降の計算実施を想定した、情報基盤整備を進める。
 大量データ生成のために、「ジョブの実行管理、データ処理の効率化において、「クラウド上でのロボット化」が、重要な情報システム技術。
 「センター間でのpython(paramiko)ベースの遠隔制御ツール・システムの構築と、実践的な動作確認」を実施する。

研究体制



研究全体の進行状況

高分子のナノ破壊起点と二次元散乱パターン

ポリマーメルトを一軸延伸。ポアソン比(0.4, 0.46, 0.5)を仮定。ナノボイドが形成すると、二次元散乱パターンに反映されることを検証。
 ポアソン比0.46は、フィラーが充填された系の値。数十nmの領域を再現。

高分子相分離の構造形成と二次元散乱パターン

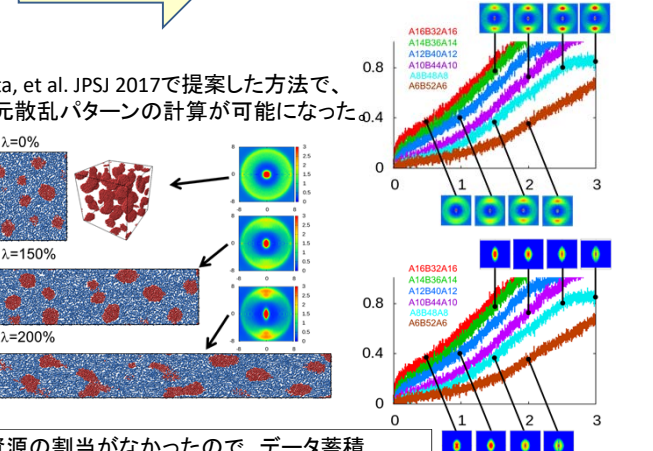
Kremer-Grest 模型での相分離構造計算 (Aoyagi, et al. JCP 2003)

一軸延伸させ、応力を評価 (体積一定)

ドメイン構造に応じて、SSカーブが系統的に変わる。

今後
 H30は計算資源の割当がなかったため、ナノボイドのサイズ分布の検討と、散乱パターンのディープラーニングベースの解析は断念。
 H31以降のHPCIやJHPCN課題において、大規模な計算で、「ナノボイドのサイズ分布の検討と、散乱パターンのディープラーニングベースの解析」ができるように、課題申請書の作成に注力する。

大規模計算は延期し、現状の結果で論文化
 Hagita, Polymer (2018) in press.



今後
 H30は計算資源の割当がなかったため、データ蓄積とディープラーニング技術の適用可能性検討は断念。
 H31以降のHPCIやJHPCN課題において、大規模な計算で、「データ蓄積とディープラーニング技術の適用可能性検討」ができるように、課題申請書の作成に注力する。

大規模計算は延期し、現状の結果で論文化
 Hagita, et al. J. Chem. Phys. Submitted.