

Creation of 360° videos from volumetric datasets

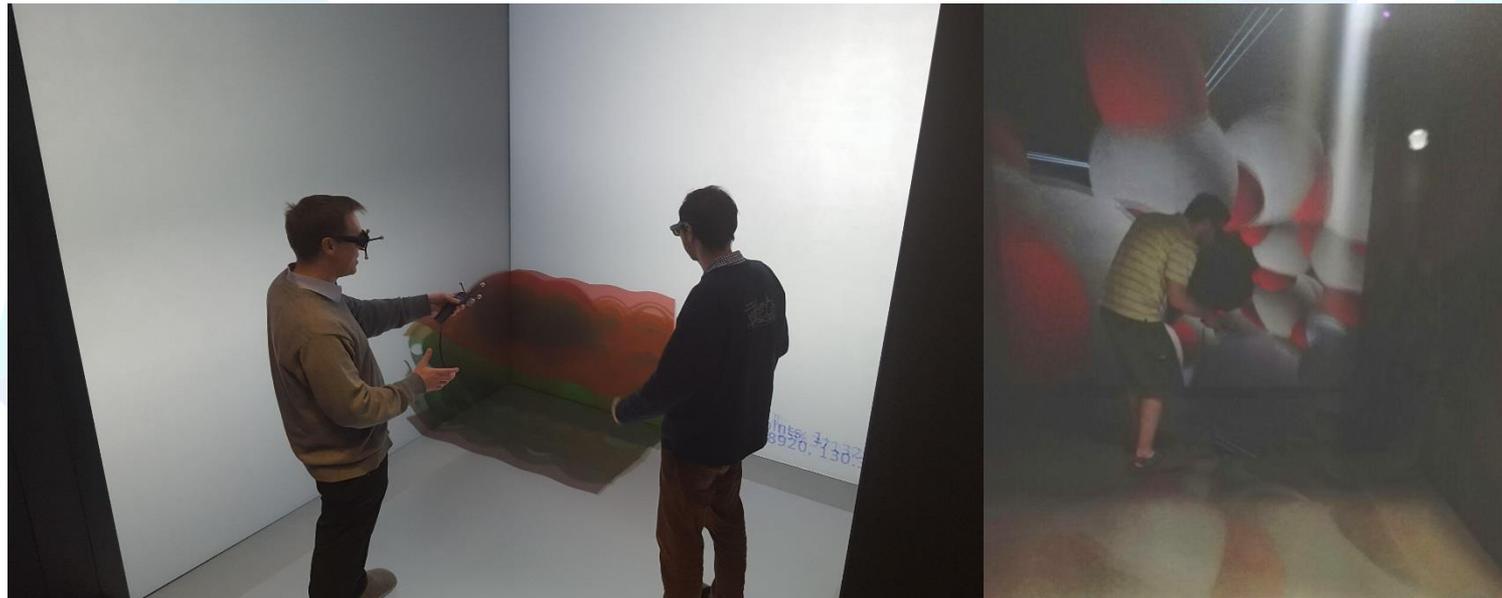
Use cases: Excitons in lithium fluoride
 Adsorption of carbon dioxide on calcium oxide

Rubén Jesús García-Hernández (LRZ)

SuperMUC Status and Results Workshop 2018
Garching, Germany. July 25, 2018

Field: Materials Science

Exploring chemical reactions to discover optimal materials for given usecases and new properties of existing materials



- NOMAD Repository: largest collection of materials science simulations
- Code-independent view (archive)
- Material-centric property view (encyclopedia)
- Machine learning to discover new properties and descriptors (big-data analytics)
- Advanced graphics for interactive data exploration
- VR technology allows a view into the nanoscale



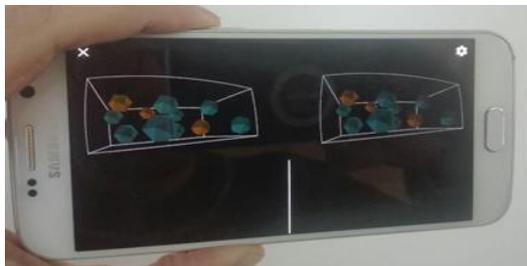
THE ARCHIVE

NOMAD
REPOSITORYMATERIALS
ENCYCLOPEDIAADVANCED
GRAPHICSBIG-DATA
ANALYTICS

OUTREACH

HPC
INFRASTRUCTURE

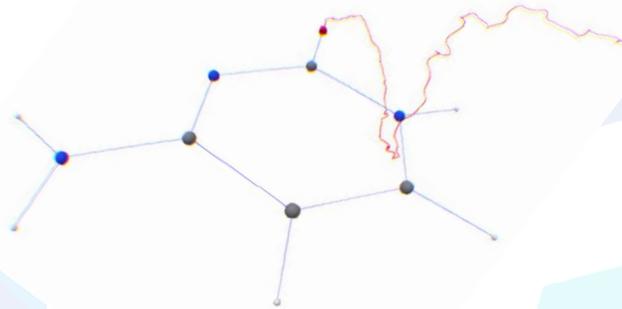
Crystal structures,
integrated with
encyclopedia



Nb_8As_4

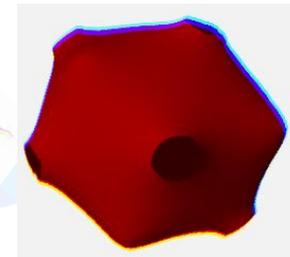
(space group 62)

Molecular
dynamics



Cytosine

Fermi
surfaces

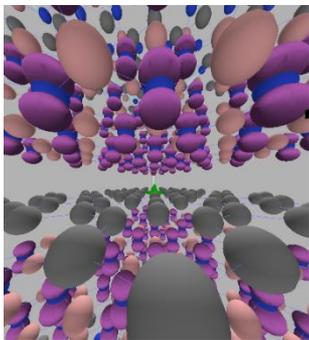


Ag

Electron
density

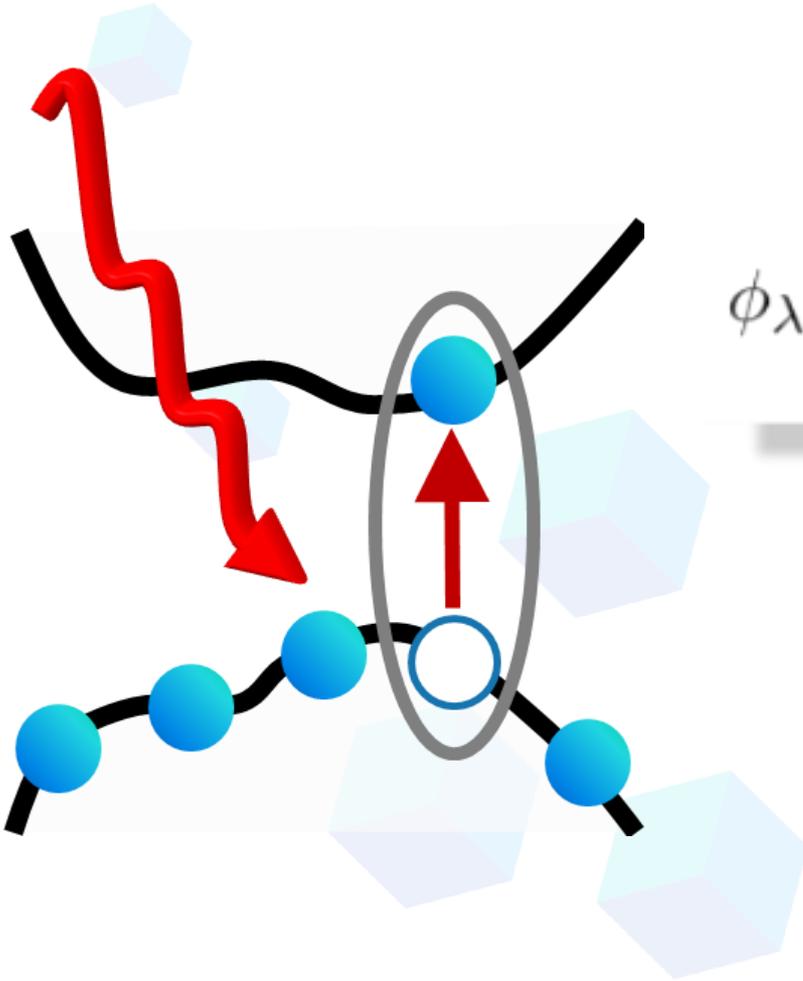


CO_2 -CaO
adsorption



Excitons, graphene-BN heterostructures

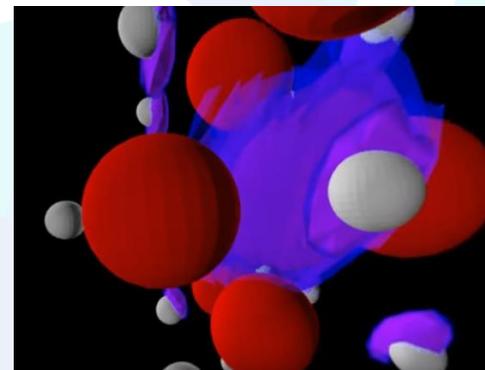
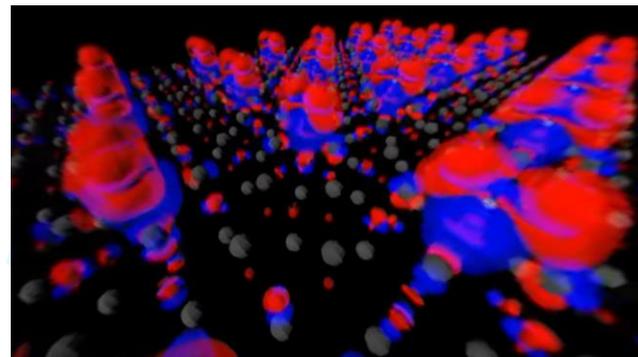
Excitons: electron-hole pairs



$$\phi_{\lambda}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{cv} A_{\lambda}^{cv} \psi_c(\mathbf{r}_e) \psi_v(\mathbf{r}_h)$$

$$\phi_{\lambda}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$$

- Two example chemical systems chosen:
 - Adsorption of CO_2 on CaO surface
 - 4D dataset, time evolution of electron density
https://youtu.be/zHIS_8PwYYs
 - Electron-hole (exciton) interaction in LiF
 - 6D dataset
<https://youtu.be/XPPDeeP1coM>
- Use of the pipeline for virtual reality preprocessing to generate stereo, panoramic videos



- We use Blender with the cycles renderer, which has support for creation of 360° panoramas
- Isosurfaces (ply) can be imported directly
- Atoms in xyz format can be imported by using an external plugin <https://wiki.blender.org/index.php/Extensions:2.6/Py/Scripts/Import-Export/XYZ> (alternative, export to vrml using paraview or other software)
- Python scripting can be used to load the scene, setup the camera and render frames
- Use e.g. ffmpeg to prepare the video

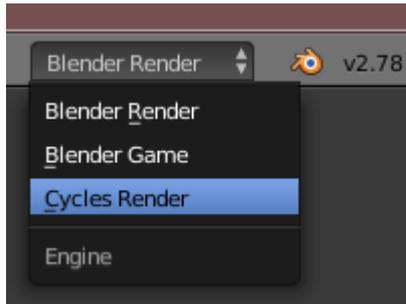


Things to take into account:

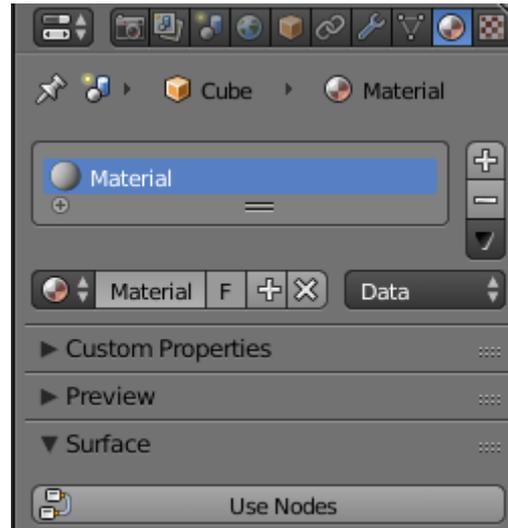
- Cycles is physically based -> new material definitions
- High resolution required: 8k or 16k
 - 8k for visualization in VR devices
 - 16k for upload to youtube, because of the zoom control
 - This means: high memory and cpu requirements for video generation
- High quality rendering in the raytracing parameters to avoid flickering (samples per pixel)

Example

Enabling
Cycles



Use Nodes for physically
based BRDF



Change the camera Lens to Panoramic
Type: Equirectangular





Immersive, 360° video creation

NOVEL MATERIALS DISCOVERY

Resolution and aspect ratio

Stereo

Stereo3D, top-bottom

Render Presets panel showing Resolution (2048 px X, 2048 px Y, 100% Aspect Ratio) and Frame Range (Start Frame: 0, End Frame: 4713, Frame Step: 1). Frame Rate is set to 25 fps. Time Remapping is set to Old: 100, New: 100. Border and Crop options are visible.

Views panel showing a RenderLayer and Views section with Stereo 3D and Multi-View options. The Views list includes 'left' and 'right' views, both checked.

Output panel showing file path (/tmp/), Overwrite and File Extensions checked, Placeholders and Cache Result unchecked. Output format is PNG, Color Depth is 8, Compression is 15%. Views Format is set to Stereo 3D, and Stereo Mode is Top-Bottom. Squeezed Frame is unchecked.

Raytracer
Samples

Sampling panel showing Path Tracing settings. Settings include Seed (0), Clamp Direct (0.00), Clamp Indirect (0.00), and Light Sampling T (0.00). Samples are set to Render: 128 and Preview: 32. Pattern is Sobol.

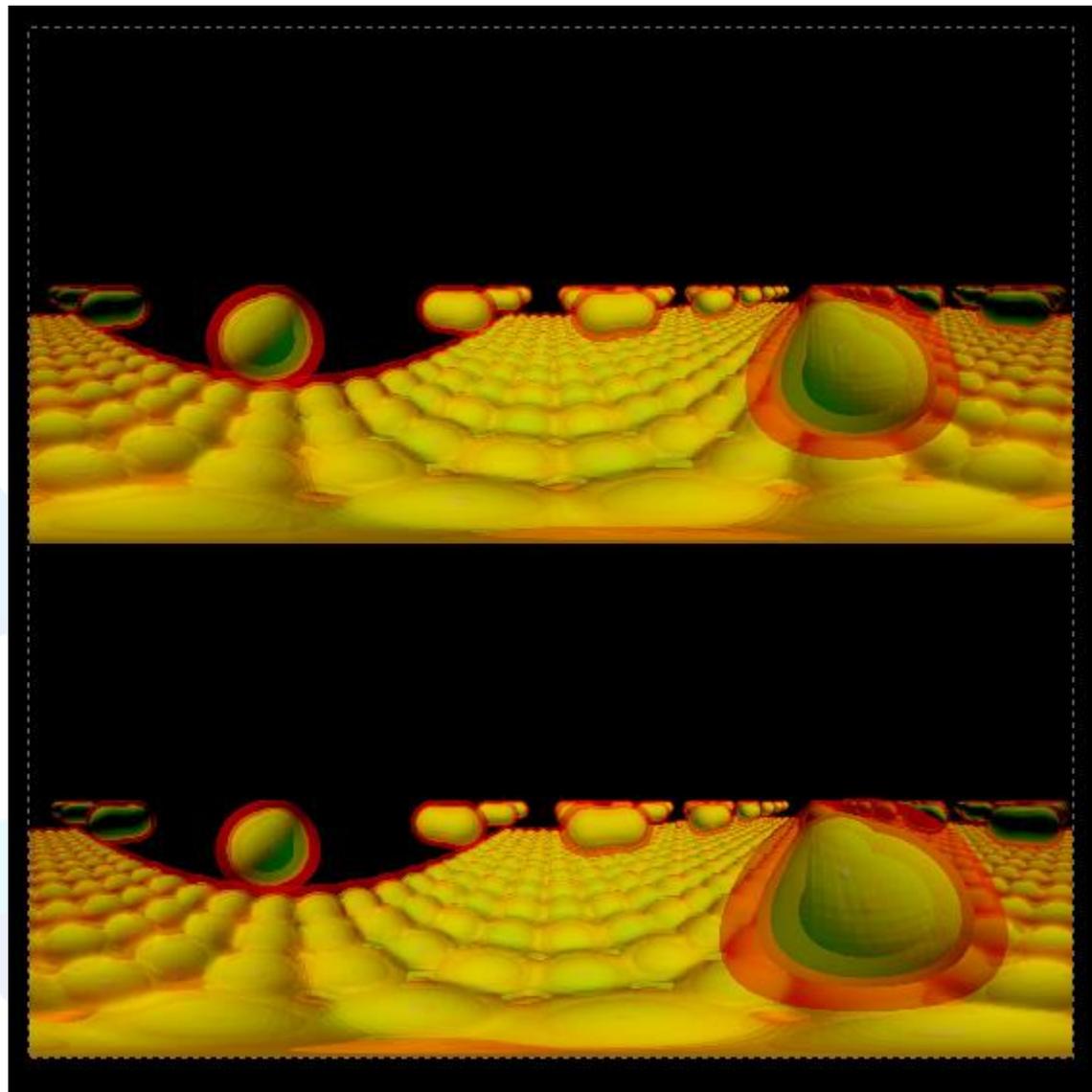
Loading, cloning, transform, render, save

```
import bpy
matISO1=bpy.data.materials.get("ISO0001")
    # loop through frames
camera.location=(...)
bpy.ops.import_mesh.ply(filepath=string)
bpy.context.scene.objects.active.data.materials.append(mat)
M=bpy.data.objects.new("atom %d %d" %(i,j), MBase.data.copy())
scn.objects.link(M); scn.update()
M.location=...; M.scale=...; M.parent=...;
bpy.data.scenes["Scene"].render.filepath=OUTPUTPATH % time
bpy.ops.render.render(write_still=True )
```

Cleanup

```
for o in bpy.data.objects:
    if (o.type=='MESH'):
        scn.objects.unlink(o)
        o.user_clear()
        bpy.data.objects.
            remove(o)
```

Resulting frame:



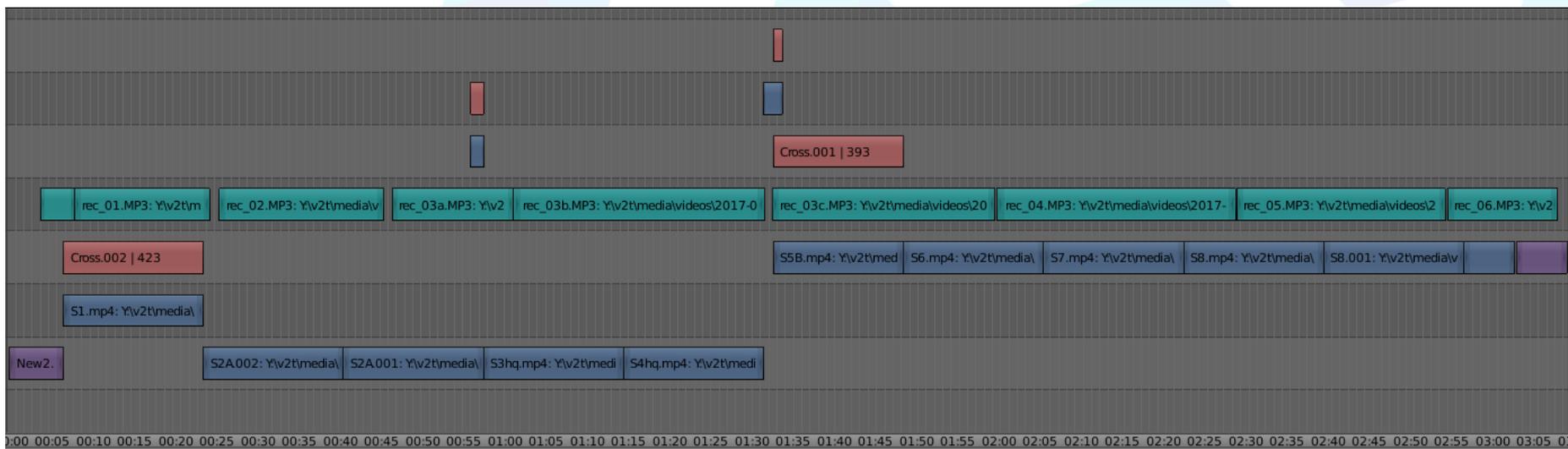


Immersive, 360° video creation

NOVEL MATERIALS DISCOVERY

Various scenes and audio tracks can be combined to create the final video

Video-editing panel of Blender



- Raytracing is an expensive algorithm, especially at the resolutions and quality settings required for 360° video
- Each frame can be calculated independently, so parallel batch jobs can be used to calculate multiple frames simultaneously.
- Since each frame may take a different time, CPU use is maximized by calculating various consecutive frames in each blender instance
- Cycles was added in a relatively recent version of blender, so proot can be used to run the newest version within a suitable environment

- LRZ Linux Cluster and SuperMUC were used to render parts of the movies.
- Each frame takes about 7 hours of wall processing time on the 24 core machines (i.e. 168 CPU hours / frame).
- 941 frames rendered.
- Total = 158088 CPU-hours

- Immersive exciton visualization
- Showcased during the Long Night of Science in Berlin, at the Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft
- Youtube + Google Cardboard
- A 360° movie by NOMAD: An Exciton in Lithium Fluoride – Where is the electron?



NOVEL MATERIALS DISCOVERY

Computational Materials Science Rechnergestützte Materialwissenschaften

Die Entwicklung von Materialien mit verbesserten oder neuartigen Eigenschaften sind der Schlüssel für technischen Fortschritt.



Leitfähige Gläser



Reduzierte Schadstoffemission

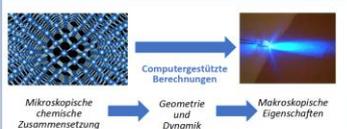


Leichte, aber widerstandsfähige Karbonfasern



Hocheffiziente Solarzellen

Wie können wir neue Materialien und Werkstoffe finden?
Wir müssen die Eigenschaften von Materialien aus deren Zusammensetzung berechnen.



Seit ca. 1978 werden solche Berechnung der Eigenschaften von Festkörpern und Flüssigkeiten „aus ersten Prinzipien“ (ab initio) durchgeführt.

In der Praxis:
Lösen der Gleichungen der Viel-Elektronen Quantenmechanik mittels der Dichtefunktional Theorie

+ Gedankenexperimente leicht durchführbar und im Detail analysierbar

= Selbst näherungsweise Lösung numerisch kostspielig

Wir müssen Supercomputer verwenden, um die schwierigen Berechnungen durchzuführen



MPG Supercomputer „Hydra“ in Garching

Big Data

Big Data bedeutet große Datenmengen, und zwar bezüglich:

1. „volume“ - Datenvolumen, Umfang
2. „velocity“ - Geschwindigkeit, mit der die Datenmengen generiert und transferiert werden
3. „variety“ - Bandbreite der Datentypen und -quellen
→ schwierig zu handieren/analysieren, aber viel Potenzial

Wo erhofft man sich einen Erkenntnisgewinn?

- Marktanalyse
- Medizinische Datenanalyse/Diagnostik
- Vorhersage von Epidemien
- Verarbeitung von Daten aus Wetter-satelliten oder anderen Sensoren

und in den Materialwissenschaften!



Das NOMAD („Novel Materials Discovery“) Projekt



- Weltweit rechnen Wissenschaftler mit unterschiedlichen Computerprogrammen Eigenschaften von verschiedenen Materialien aus. → Es gibt schon viele Daten
- Solche Rechnungen und ihre Ergebnisse werden im **NOMAD Repository** gesammelt. Bereits über 3 Millionen Datensätze sind enthalten!

Und wofür benutzen wir diese Daten?

- In bereits berechneten Materialien kann nach bestimmten Eigenschaften gezielt gesucht werden
- **NOMAD Enzyklopädie**
- Wir möchten in den vorhandenen Materialdaten, Materialien mit bestimmten, aber noch nicht berechneten Merkmalen entdecken und bisher unbekannte Materialien mit erwünschten Eigenschaften und Merkmalen vorhersagen
- **NOMAD Big-Data-Analytik** (z.B. maschinelles Lernen)

Siehe: <https://nomad-con.eu/>

Beispiel: Solarzelle



Eine Solarzelle wandelt Sonnenenergie in Strom um. Trifft Sonnenlicht auf die Zelle, werden positive und negative Ladungsträger in der Zelle freigesetzt.

Damit die positiven und negativen Ladungsträger richtig geleitet werden, werden dem Halbleiter unterschiedliche Fremdatome in die verschiedenen Schichten eingebaut, so dass die eine Schicht „gerne“ Elektronen (-) freigibt und die andere Schicht gerne Elektronen absorbiert (p/n-dotiert).

Exziton

Wenn Sonnenlicht das Material „anregt“ erhält man ein so genanntes Exziton oder Elektronen-Loch Paar.

- Ein Loch (+) ist ein fehlendes Elektron, d.h. ein Atom hat ein Elektron weniger als normal. Elektron und Loch ziehen sich aufgrund der entgegengesetzten Ladung an. In der Solarzelle werden die Materialien aber so angeordnet, dass Elektron und Loch getrennt werden und zu den Metallkontakten wandern, d.h. es fließt Strom.

Das Verständnis des Verhaltens eines Exzitons – besonders wie sich die Positionen von Elektron und Loch zueinander verhalten – ist sehr wichtig, um optimale Materialien für Solarzellen zu finden.

Visualisierung

In dem 360° Film „A 360° movie by NOMAD: An Exciton in Lithium Fluoride - Where is the electron?“ möchten wir ein Exziton genauer betrachten.

Dieser Film (und andere) können auf unserem YouTube-Kanal [fhtheory](https://www.youtube.com/user/fhtheory) gefunden werden:

<https://www.youtube.com/user/fhtheory>



Um das Video mit einer VR-Brille zu erleben, muss man es auf einem kompatiblen Smartphone in der YouTube App (!) öffnen und auf das Bluetooth-Symbol klicken.

Zu sehen ist zunächst ein Kristall aus Lithium (rot) und Fluor (weiß) Atomen.

Es hat eine Anregung statt gefunden, d.h. es befindet sich ein Exziton im Kristall. Nachdem wir den Kristall näher zoomen und die meisten Atome ausblenden, sehen wir kleine gelbe Wolken.



Diese „Wolken“ in unterschiedlicher Farbe illustrieren die Elektronendichte, d.h. wo sich das Elektron am wahrscheinlichsten aufhält. Im Laufe des Films wird die Position des Lochs verändert – und dadurch ändert sich auch die Elektronenverteilung. So lernen wir das Exziton besser zu verstehen.

The project received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program under grant agreement no. 676580 with The Novel Materials Discovery (NOMAD) Laboratory, a European Center of Excellence.

The NOMAD team provided datasets, suggestions and insights.



NOMAD

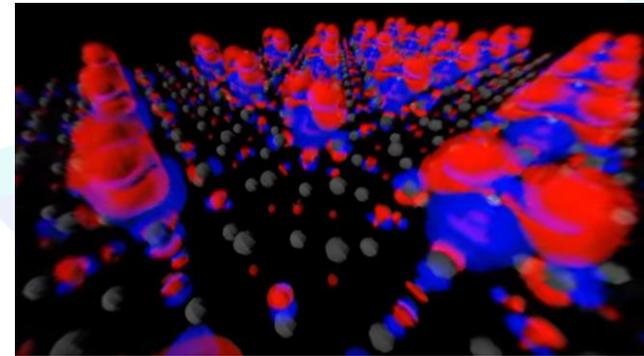
360° Video Demo & Questions

NOVEL MATERIALS DISCOVERY



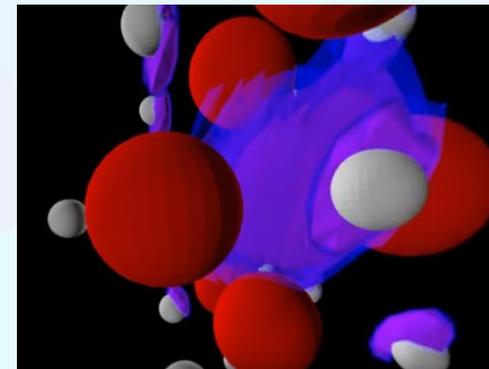
Adsorption of CO₂ on CaO surface

https://youtu.be/zHIS_8PwYYs



Electron-hole (exciton) interaction in LiF

<https://youtu.be/XPPDeeP1coM>





Stereoscopic video creation



- The HTC Vive allows creation of monoscopic or stereoscopic videos.
- Procedure:
 - Indicate in the config file if monoscopic or stereoscopic is desired
 - Press the menu button to start/stop the recording of screenshots
 - Use e.g. ffmpeg to prepare the video

- The NOMAD Remote Visualization can also be used to create stereoscopic videos.
- Procedure:
 - Create the scene you want to display using VisIt GUI/CLI
 - Select the “Stereo” option in the “Set save options” → “Format options” tab. This will render each scene twice: once for the left eye, one for the right eye.
 - Merge each set of frames individually, creating 2 movies, one for each eye.
 - Arrange the movies in a side-by-side frame for visualization by stereoscopic-enabled devices.

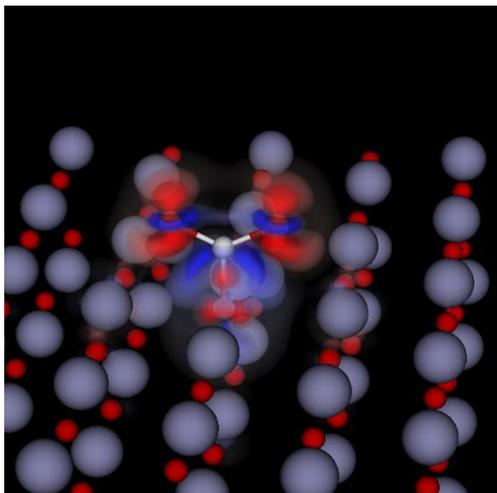
- Examples (MPCDF, HUB):

<https://youtu.be/1ytS7n2Ilqw>

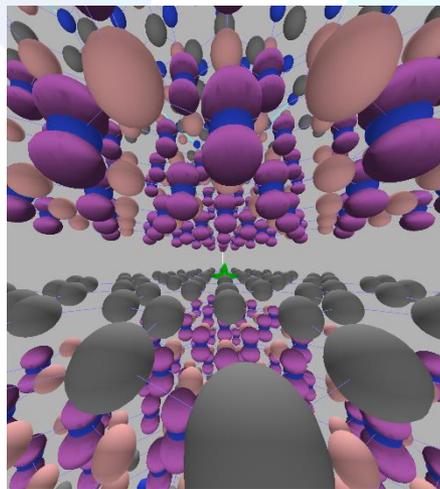
<https://www.youtube.com/watch?v=tQrAPuFpFh8>

<https://www.youtube.com/watch?v=2c0mQp6RYXA>

CO₂@CaO
adsorption



graphene/BN heterostructure
excitons



pyridine@zinc oxide

