蛍光X線ホログラムからの原子像再生の高速化

窪田 昌史† 八方 直久† 松下 智裕‡
†広島市立大学 ‡(公財) 高輝度光科学研究センター

1 はじめに

蛍光X線ホログラフィは、特定元素周辺の三次元原子配列をホログラムとして記録することができる構造解析法として注目されている [1]。本手法では、試料にX線を入射して得られる蛍光X線をホログラムとして記録し、そのホログラムデータに離散フーリエ変換 (DFT) を適用することで原子像を再生する。現状では、このDFTに長時間を要しているため、本研究ではその高速化を試みる。

2 原子像再生の概要

ホログラムデータのノイズ除去、データの補間などの前処理を行った後、DFTにより原子像を再生する。波長 λ の入射X線によって得られる球面上のホログラムの極座標 $\vec{k}(l,\theta,\phi)$ における値を $I_\lambda(l,\theta,\phi)$ とすると、直交座標 $\vec{r}(x,y,z)$ における原子像は3次元DFTで再生できる。この際、数種類の波長のホログラムから原子像を再生することで、真の原子像のみを強調させ、ゴーストイメージを低減できることが知られている [1]。我々は、処理時間を短縮するため、ホログラムの球面の半径 l と原子の位置 z を固定し、xy平面上の原子像を求めるようにしている。

$$\chi(x,y) = \sum_\theta \sum_\phi \sum_\lambda I_\lambda(\theta,\phi) \exp(i2\pi(|\vec{r}| + \vec{k}\vec{r})/\lambda) \sin\theta$$

3 原子像再生の高速化

前節で述べた3重の総和演算を離散化された各 (x,y) 座標に対して行うため、処理は5重ループとなる。今回、以下のような高速化を行った。

- キャッシュのヒット率向上のため、$x, y, \theta, \phi, \lambda$ のループのネスト順を $\lambda, x, y, \theta, \phi$ に変更する。
- ループ内で使用する三角関数値を、ループ実行前に計算しておく。
- x のループを OpenMP で並列化する。

4 性能評価

原子像再生のプログラムを6コアのCore i7 980 3.33GHz搭載のPCで実行した。コンパイラは、gcc4.4.7、最適化オプションは -O3 である。また、九州大学情報基盤センターのFX10(SPARC64 IX fx 1.848GHz, 16コア)の1ノードでも実行した。コンパイラの最適化オプションは -Kfast である。入力データは、入力X線波長が21種類のサンプル1(PZT; チタン酸ジルコン酸鉛) と、波長が9種類のサンプル2(YSZ; イットリア安定化ジルコニア) である。2,3節で述べた原子像再生のプログラムを、xy平面は200 × 200の点, $0° \leq \theta \leq 180°$, $0° \leq \phi \leq 360°$ の範囲で θ, ϕ は1° きざみとして実行した。表1にオリジナルの実行時間と、前節で述べた高速化を適用して1スレッドおよび12スレッド (HyperThreadingを適用した6コアのCore i7) または16スレッド (FX10) で実行した場合の実行時間、およびオリジナルに対する速度向上率を示す。並列化とループ交換や三角関数値のテーブル化との相乗効果が現れていることがわかる。

表 1: 実行結果

(a) サンプル1(PZT) の実行時間 (秒)

PZT	Original	1	12/16	(性能向上率)
Core i7	2,296	2,352	240	(9.57)
FX10	3,591	323	24	(149.63)

(b) サンプル2(YSZ) の実行時間 (秒)

	Original	1	12/16	(性能向上率)
Core i7	1,074	1,008	107	(10.00)
FX10	2,906	139	10	(290.60)

5 おわりに

本研究では、蛍光X線ホログラムからの2次元の原子像再生のDFTプログラムの高速化について述べた。今後の課題として複数ノードを用いた3次元の原子像再生の高速化などが挙げられる。

なお、本研究はJSPS科研費新学術領域「3D活性サイト科学」(26105013) の助成を受けたものです。ここに感謝いたします。

参考文献

[1] 林好一, 八方直久, 細川伸也, ”蛍光 X 線ホログラフィーによる局所格子歪みの評価”, 放射光 , pp.1-11, 2013.

ⓒ 2015 Information Processing Society of Japan