

発表概要

# 蛍光 X 線ホログラムからの 3次元原子像再生の XcalableMP による並列化

窪田 昌史<sup>1,a)</sup> 松下 智裕<sup>2</sup> 八方 直久<sup>1</sup>

2016年6月9日発表

蛍光 X 線ホログラフィーは、特定元素周辺の数 nm にわたり 3次元原子配列を再生できる 3次元中距離局所構造解析技術である。3次元原子像再生には離散フーリエ変換 (DFT) を適用しているが、この DFT の処理に長時間を要しているのが現状である。本研究では、この DFT に対して並列処理プログラミング言語 XcalableMP を用いて並列化処理を行った。入力 X 線波長が 21 種類のエネルギー、 $179 \times 360$  点のホログラムデータから 3次元の各軸 201 点の直交座標の原子像データを求める処理を、8 ノード 96 コアの Xeon X5660 2.8 GHz の PC クラスタ上で実行したところ、逐次実行に対し 94 倍の高速化が達成された。

## Parallelization of Three-dimensional Atomic Image Reconstruction from X-ray Fluorescence Holograms with XcalableMP

ATSUSHI KUBOTA<sup>1,a)</sup> TOMOHIRO MATSUSHITA<sup>2</sup> NAOHISA HAPPO<sup>1</sup>

Presented: June 9, 2016

X-ray fluorescence holography is a three-dimensional middle range local structure structural analysis method, which can provide three-dimensional atomic images around specific elements within a radius of a few nanometers. Three-dimensional atomic images are reconstructed by applying discrete Fourier transform (DFT) to hologram data. Presently, it takes long time to process this DFT. In this study, the DFT program is parallelized by using a parallel programming language XcalableMP. The DFT process, whose input is 21 holograms data of  $179 \times 360$  points and output is a three-dimensional atomic image of  $201^3$  points, is executed on PC cluster which consists of 8 nodes of Intel Xeon X5660 processors and 96 cores in total and we confirmed that the parallelized DFT execution is 94 times faster than the sequential execution.

<sup>1</sup> 広島市立大学  
Hiroshima City University, Hiroshima 731-3194, Japan

<sup>2</sup> (公財) 高輝度光科学研究センター  
Japan Synchrotron Radiation Research Institute, Hyogo  
679-5198, Japan

a) kubota@hiroshima-cu.ac.jp