



Летняя международная XXIX молодежная Школа-конференция по
параллельному программированию

Построение реконструкций распределения рентгенодифракционной интенсивности в обратном пространстве с применением параллельных вычислений

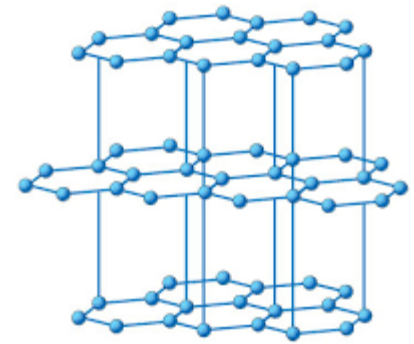
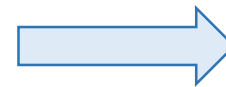
Сопов Константин Витальевич
Киреев Сергей Евгеньевич
Комаров Владислав Юрьевич

Новосибирск, 2017

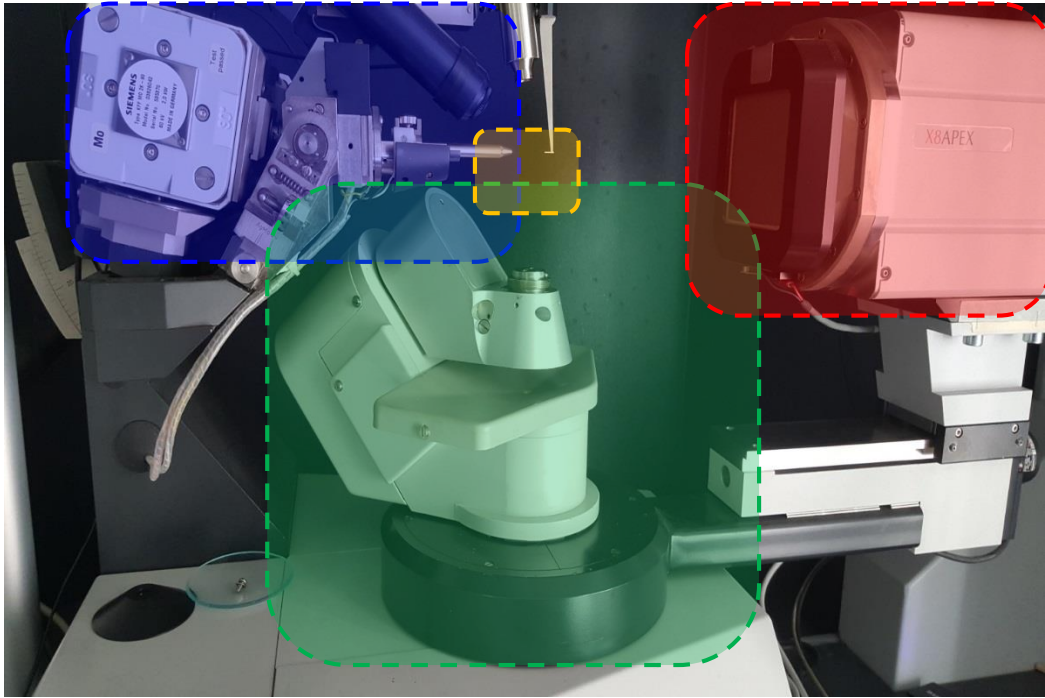
Рентгенодифракционный метод



- Рентгенодифракционный метод существует уже более ста лет, и на сегодняшний день является одним из наиболее информативных методов определения атомной структуры кристалла.
- Он основан на явлении дифракции рентгеновских лучей, проходящих через кристаллическую решетку.
- С его помощью ежегодно определяется более ста тысяч новых структур.



Устройство дифрактометра и принцип работы

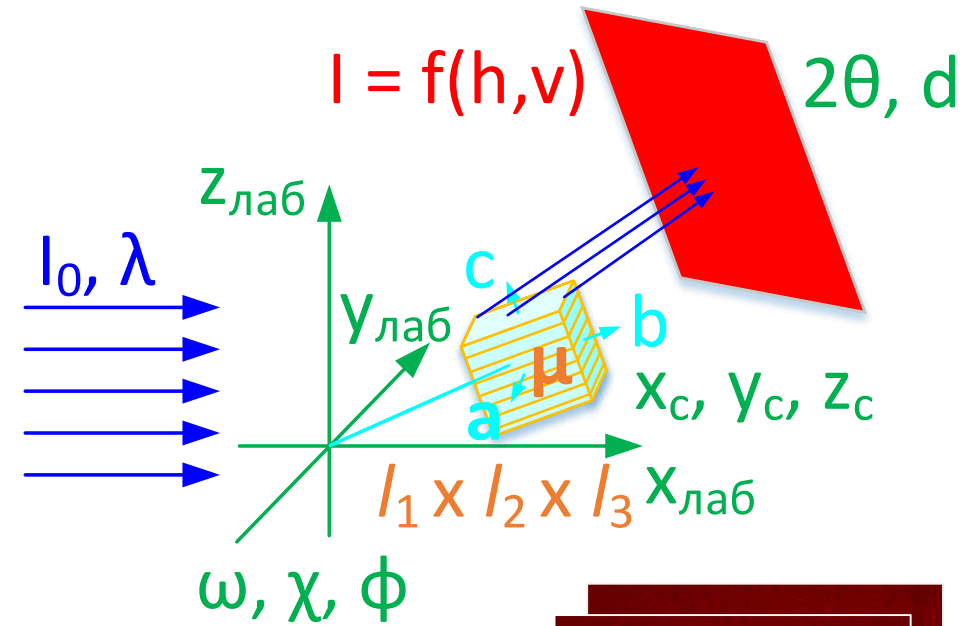


Источник излучения

Гониометр

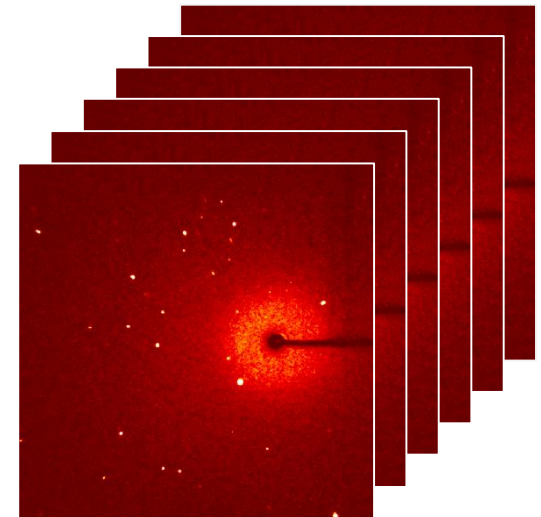
Образец

Детектор



Один фрейм – результат съемки во время поворота кристалла на определенный небольшой угол ($1^\circ - 0,01^\circ$). Типичный размер фрейма 512×512 или 1024×1024 пикселя.

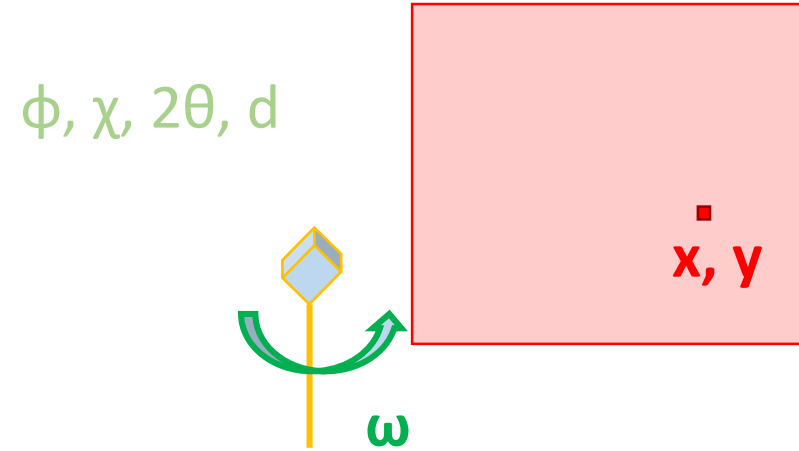
Ран – серия фреймов, получаемых при последовательном повороте вокруг одной оси гониометра. Типичная длина рана – 50 – 1000 фреймов.



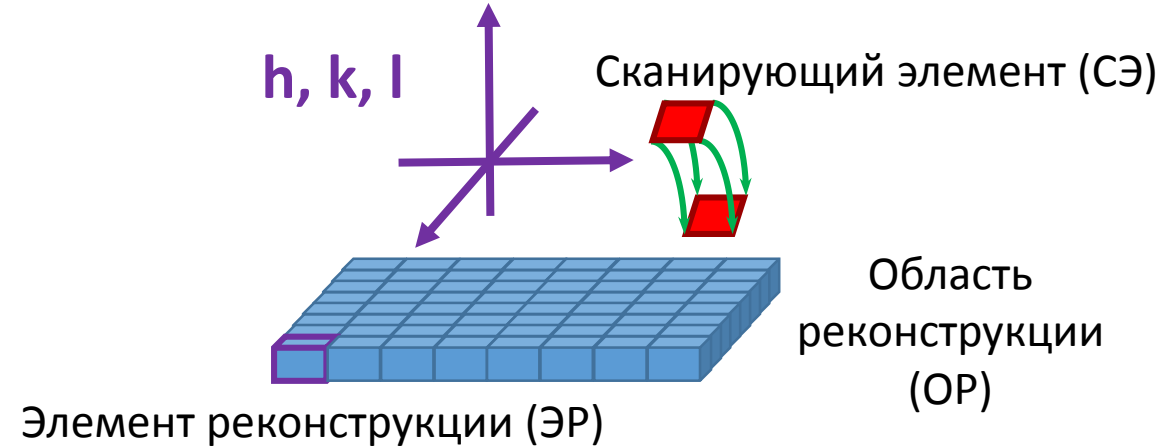
Редукция экспериментальных данных

- Для анализа экспериментальных данных используют т.н. обратное пространство.
- Каждому пикселю детектора при фиксированном положении кристалла соответствует точка в трехмерном обратном пространстве.
- В процессе съемки фрейма из-за вращения кристалла изменяются координаты вершин пикселей в обратном пространстве.
- Это приводит к тому, что каждый пиксель фрейма в обратном пространстве представляется в виде объемной фигуры с восемью вершинами (сканирующий элемент).

Экспериментальное пространство



Обратное пространство (ОП)



Последовательный алгоритм

Алгоритмы:

- **«Численное» суммирование:**
 - представление СЭ в виде множества точек;
 - суммирование доли интенсивности СЭ в ЭР, в которые попадают эти точки.
- **«Аналитическое» суммирование**
 - представление СЭ в виде многогранника;
 - суммирование в ЭР интенсивности пропорционально объему его пересечения с СЭ

Цикл (перебор фреймов)

{

Цикл (перебор пикселей детектора)

{

Разбиение СЭ на множество точек;

Вычисление координаты в ОП;

IF (Принадлежность точки ОР)

Добавление доли интенсивности в ЭР;

}

}

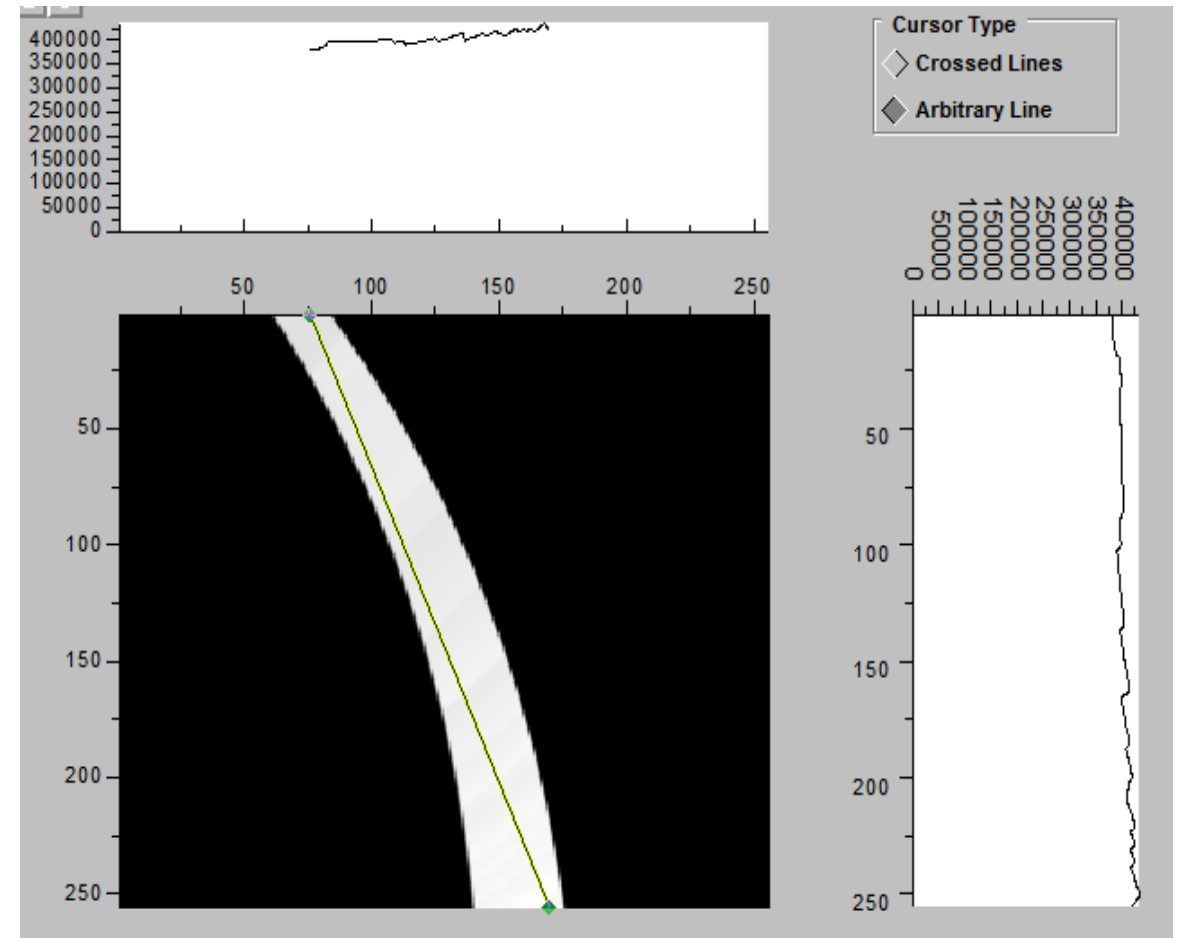
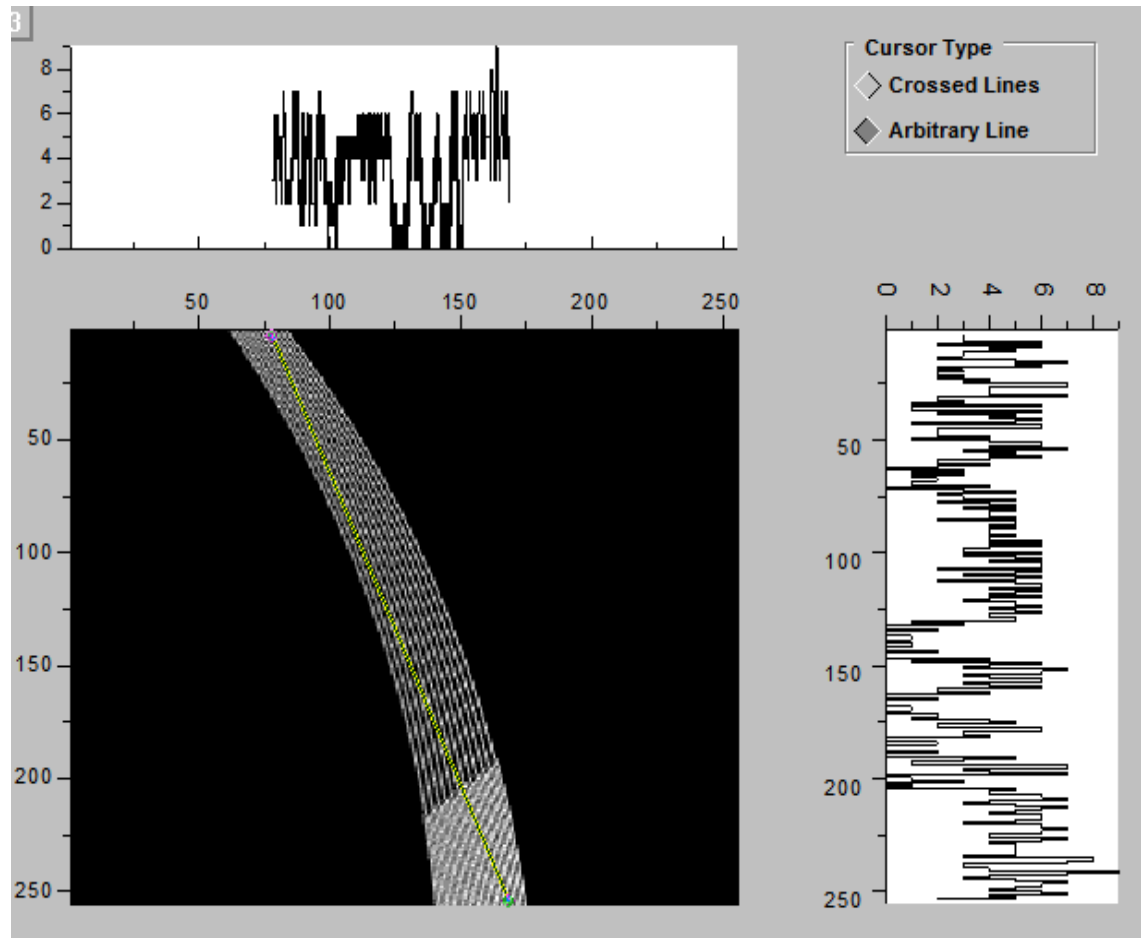
Обратное пространство (ОП)

Сканирующий элемент (СЭ)

Область реконструкции (ОР)

Элемент реконструкции (ЭР)

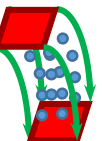
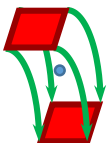
Тестирование последовательного алгоритма



Расстояние между точками СЭ / среднее количество точек на СЭ / время расчета

$10^{-2} \text{ \AA}^{-1} / 1 / <1 \text{ секунды}$

$10^{-4} \text{ \AA}^{-1} / 130 \cdot 10^3 / \sim 10 \text{ часов}$




Оптимизация и распараллеливание программы

- Добавлен цикл предварительного отбора пикселей
- Произведено распараллеливание OpenMP методом циклов предварительного отбора и перебора пикселей


Обратное пространство (ОП)
Сканирующий элемент (СЭ)
Область реконструкции (ОР)
Элемент реконструкции (ЭР)

```
Цикл (перебор фреймов)
{
    #pragma omp parallel for
    Цикл (отбор пикселей, СЭ от которых пересекаются ОР)
    {
        Вычисление координаты центра СЭ в ОП;
        IF (принадлежность центра СЭ ОР)
            #pragma omp critical
            Добавление пикселя и его «соседей» в контейнер;
    }
    #pragma omp parallel for
    Цикл (перебор пикселей из контейнера)
    {
        Разбиение СЭ на множество точек;
        Вычисление координаты в ОП;
        IF (принадлежность точки ОР)
            #pragma omp atomic
            Добавление доли интенсивности в ЭР;
    }
}
```



Тесты

 CPU 2x12
Xeon E5-2680v3 @ 2,50ГГц

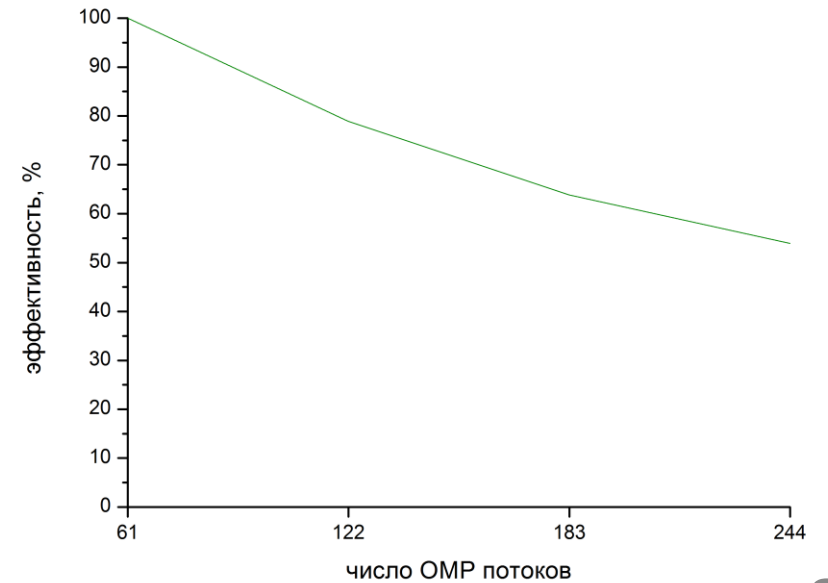
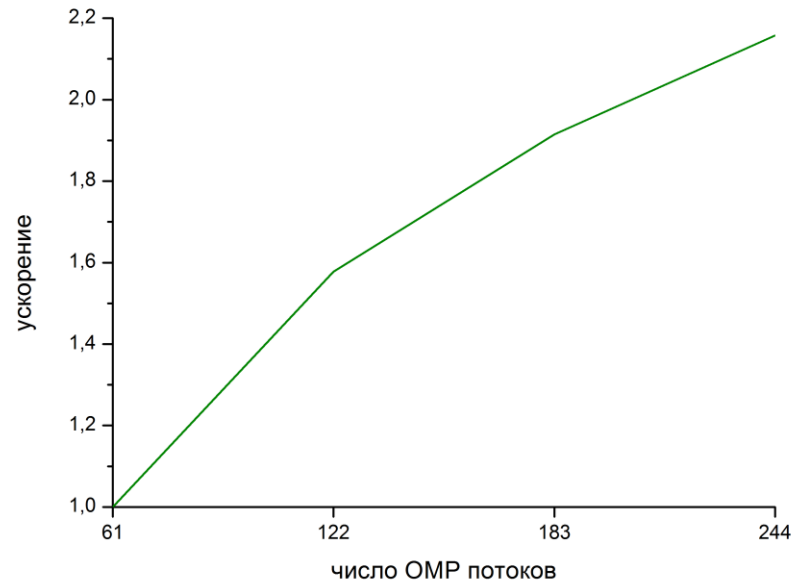
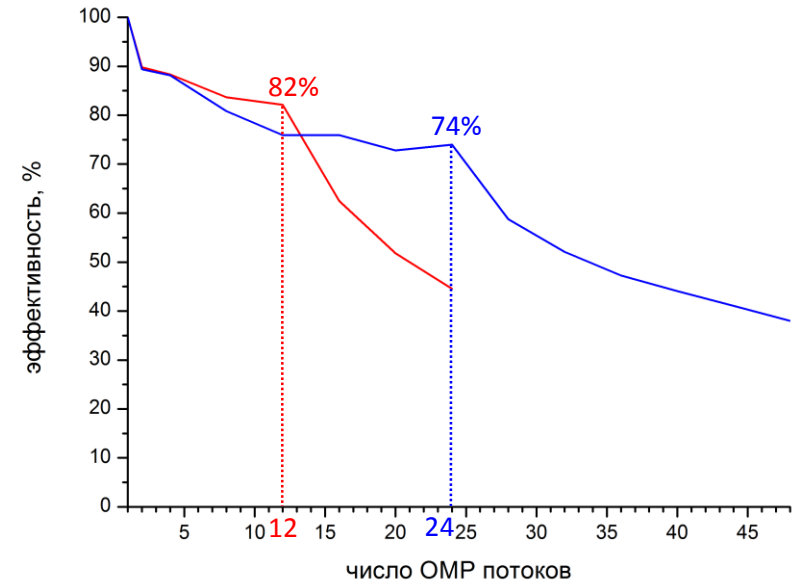
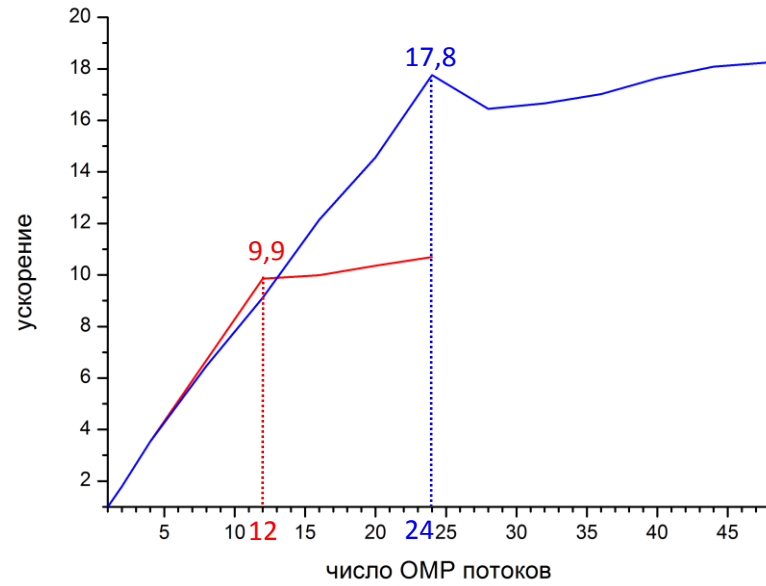
20 секунд

 CPU 2x6
Xeon X5670 @ 2,93ГГц

42 секунды

 MIC 1x61
Xeon Phi 7120p @ 1,25ГГц

55 секунд



Благодарю за внимание!