

XAFS CTにおける データインフラの現状とニーズ

JASRI

分光推進室

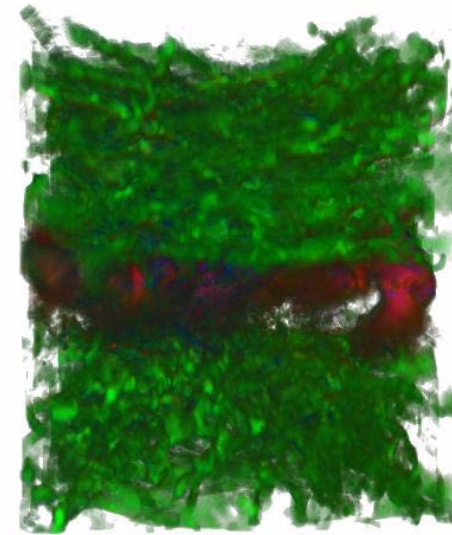
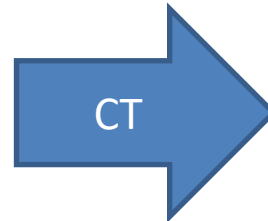
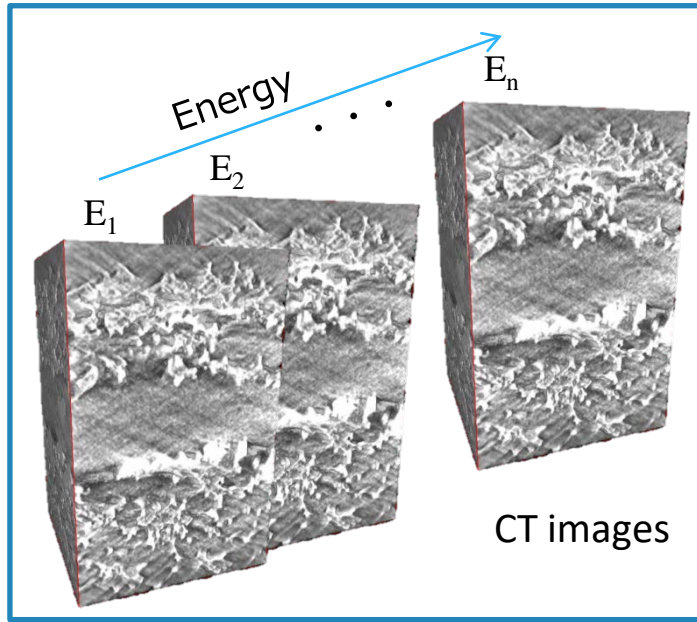
動的分光イメージングチーム

関澤央輝

目次

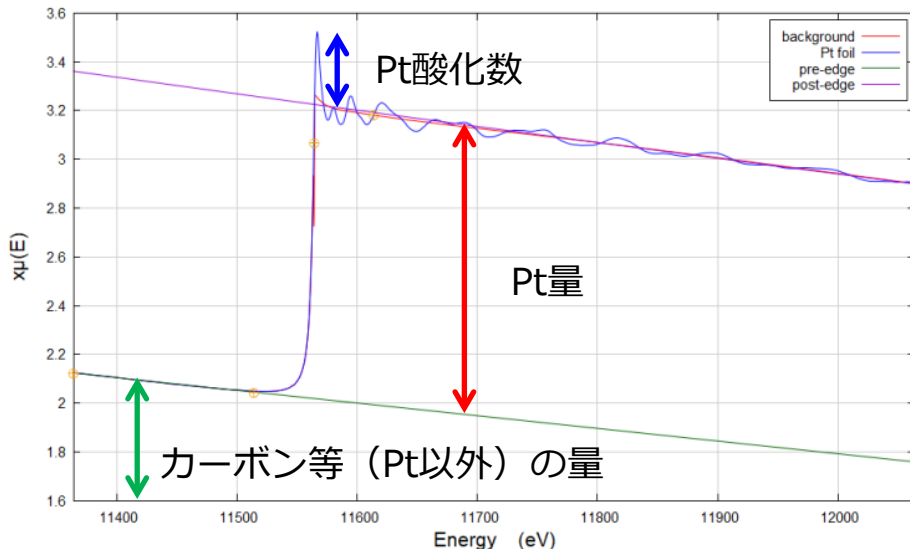
- CT-XAFS (XAFS-CT)
- BL37XUの計測システム
- データ保存の現状
- 解析の現状
- 今後の計画

CT-XAFS : 3次元顕微化学状態イメージング



- カーボン繊維等
- Pt量
- Pt酸化数

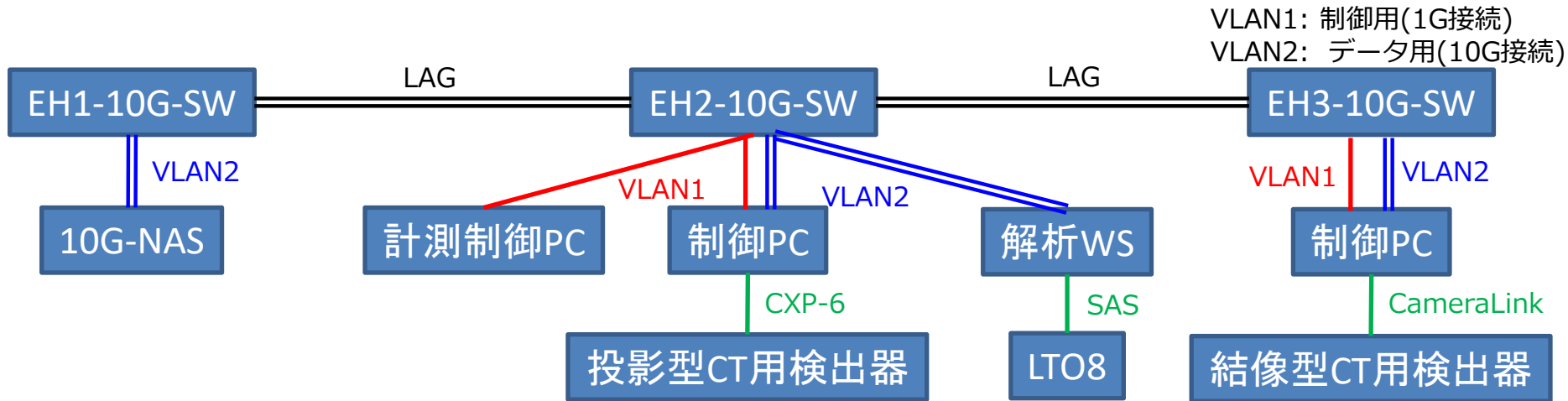
PEFC中のPtの3次元化学状態



Pt L3-edgeのXAFSスペクトル

リチウムイオン電池や燃料電池の電極内部は空間的に不規則であり不均一に反応が進行する。反応要因や劣化メカニズムを理解するためには、電極触媒や活物質が3次的に化学状態がどのように変化するかを知ること、すなわちin-situ/operandの3次元化学状態イメージングが必要である。

BL37XUの計測システム



➤ 概要

- EH1~EH3を10Gネットワークで接続

➤ 検出器

- Dual CoaXpress-6 : 最大944 MB/s
- Camera Link Full : 最大800 MB/s
- M.2 SSD (1次キャッシュ) : 7.2TB (8 TB×1)
- データの書込速度は2000 MB/sぐらい

➤ 10G-NAS

- HDD (2次キャッシュ) : 76.4TB (12TB×8 RAID5)
- データの転送速度は400~500 MB/sぐらい

➤ テープドライブ

- LTO8カートリッジ (保管) : 非圧縮12 TB
- データの転送速度は300 MB/sぐらい
- ブランクメディアのストックは20巻ちょっと
- LTO9対応 (非圧縮18TB)

➤ 解析WS

- OS: Windows 10 for WS 64bit
- CPU: Intel Xeon Gold 5222 ×2
- RAM: 576 GB
- GPU: nVidia TITAN RTX 24GB
16.31 TFLOPS (FP32)
- SSD (解析用) : 10.9TB (2TB×7)
- データの転送速度は500 MB/sぐらい

CT-XAFSのデータ容量



- ORCA-Flash 4.0 (浜松ホトニクス)
Cell size: $6.5 \times 6.5 \mu\text{m}$
Pixel array: 2048×2048 (16bit, 8MB)
Effective area: $13.3 \text{ mm} \times 13.3 \text{ mm}$
Maximum frame rate: 100 Hz (2048×2048) \Rightarrow 800MB/s
IF: Camera Link Full (7.14Gbps)



- ORCA-Fusion BT (浜松ホトニクス)
Cell size: $6.5 \times 6.5 \mu\text{m}$
Pixel array: 2302×2302 (16bit, 10.1 MB)
Effective area: $14.976 \text{ mm} \times 14.976 \text{ mm}$
Maximum frame rate: 89.1 Hz (2302×2302) \Rightarrow 944 MB/s
IF: Dual CoaXpress-6 (12.5 Gbps)

CT-XAFS 1セットのデータ容量の例

$8 \text{ MB} \times 1800 \text{ projection} \times 100 \text{ energy} \doteq$ **1.4 TB** の生データ

$10.1 \text{ MB} \times 1800 \text{ projection} \times 100 \text{ energy} \doteq$ **1.7 TB** の生データ

データ保存の現状

▶ データ容量 (2021B期) : 40~45 TB (4課題, 14日)

- ✓ 投影型CT-XAFS@リチウムイオン電池 (毎期CT-XAFSを利用) : 20 TB / 3day
 - ▶ 2017B~2021Bで通算250~300 TB
 - ▶ BL36XUのストレージに一時的にデータを保存してからLTO8にコピー
 - ▶ ユーザータイム終了時にLTO8 1枚持ち帰り、残りは1枚は後から郵送
- ✓ 結像型CT-XAFS@リチウムイオン電池 (毎期CT-XAFSを行うユーザー) : xx TB / 3day
 - ▶ 2月実施予定
- ✓ 投影型CT-XAFS@酸化物材料 : 5.3TB / 1day
 - ▶ 初めてのCT-XAFS利用、コピーしきれなかった一部のデータは後日
- ✓ 結像型CT-XAFS@酸化物材料 : 0.4 TB / 1day
 - ▶ 投影型に引き続き結像型を実施、このタイミングで投影型のデータをコピーして持ち帰る
- ✓ 結像型CT-XAFS@リチウムイオン電池 : 5.6 TB / 4day
 - ▶ 終了時に全て持ち帰り (SSD)
- ✓ 投影型CT-XAFS@リチウムイオン電池 : 6.4TB / 2day
 - ▶ 外付け12TB HDDにコピー (USB接続のためコピーに2日以上) 、のち郵送

▶ データ輸送方法

- LTOで持ち帰るのが転送速度を含めコストパフォーマンス良い
LTOを取り扱うユーザーはごく一部
- 多くは外付けHDD, SSDを利用、大抵コピーが追い付かないため郵送する

CT-XAFSの解析

CT-XAFS 1セットのデータ容量の例

測定時 10.1 MB × 1800 projection × 100 energy ≙ **1.7 TB** の生データ

解析時 1. 三次元再構成を先にする場合 (CT → XAFS)

- 各エネルギーに対して投影像(16bit 2302 × 2302 × 1800: 17.8 GB)から三次元再構成
- 再構成画像(32bit 2302 × 2302 × 2302: 45 GB)が100エネルギー分(**4.4 TB**)得られる
- 再構成範囲の9.6G voxel(1151 × 1151 × π × 2302)に対して各々XAFS解析を行う

2. XAFS解析を先にする場合 (XAFS → CT)

- 各投影角に対して5.3M pixel (2302 × 2302)のXAFS解析を行う
- XAFS解析パラメータ毎に (32bit 2302 × 2302 × 1800: 35.5 GB) のデータが得られる
- それぞれに対して3次元再構成を行う

どちらも最終データは**38.4 GB × パラメータ数**

(他にも位置補正などの画像処理が行われる)

いずれも並列処理が大半を占めるので、GPUによる画像再構成、XAFS解析を行うことで時間を短縮できる

解析の現状

● 解析支援ニーズのためのインフラ

➤ CT-XAFSを解析するだけで月単位で要する可能性もあり

- リチウムイオン電池のケースでは 4000点ほどCT計測をしている。
- 仮に1CT 10分で再構成できた場合、処理に1ヵ月かかる
 - ✓ 再構成の時間は測定条件・再構成アルゴリズムにかなり依存する
 - ✓ 逐次近似サイクルを重ねる場合はその分上乘せになる

➤ 並みのパソコンでは解析が困難

- GPUを複数搭載したサーバで解析をする必要がある
 - 解析中に出てくるデータを読み書きする高容量の高速ストレージも必要
 - 解析結果を複数表示するためにはメモリも必要（1CTあたり36 GB）
- リチウムイオン電池のCT-XAFSの場合（每期CT-XAFSを行うユーザー）
 - 2018B期までBL36XUのGPUサーバで解析（SPring-8に半年に1, 2週間程度の解析出張）
 - 2019A期よりユーザーがGPUサーバを調達したのでそちらで解析

➤ 解析用計算機

- BL37XUにはGPUを1基搭載した解析WSが1台
 - マシンタイム中のごく一部のみ解析し測定位置や計測できているかの確認しかしていない。
- ヘビーユーザーは自前の計算機を利用
 - 新規参入には解析用計算機の導入は敷居が高い

今後の計画

● 時間分解CT-XAFSの開発

- ✓ ほぼ連続計測を開始予定 ($944 \text{ MB/s} \times 3600 \text{ s} = 3.24 \text{ TB/h}$)
- ✓ 検出器の1次キャッシュ (8TB) が2時間で埋まる
- ✓ 1次キャッシュから10G-NASへの転送 (500 MB/s) が律速になりそう
→ 1次キャッシュの増強か2次キャッシュの転送速度の増強が必要

● 圧縮センシングによる画像再構成

- ✓ 時間分解CT-XAFSに伴う投影数の低減、露光時間の短縮に対応するため圧縮センシングの導入
- ✓ デメリットは圧倒的な解析時間 (例: CPU処理, Core i7-7700K, python: skimage - iradon)
FBP: 数秒
OSEM-TV: 7分/1レイヤー/1サイクル (1800×1800) → 20サイクルで2h強

手法	代表例	解析速度	必要投影数	ノイズ・アーチファクト
解析的手法	FBP	早い	多い	弱い
代数的 統計的手法	ART, SIRT OSEM等	遅い (逐次近似計算)	中程度	中程度
+圧縮センシング	OSEM-TV等	とても遅い	少ない	強い

これからは測定速度も速くなりより多くの計測が見込まれる。(10~TB/day)

(新規参入には) 解析用計算機の導入は敷居が高い → データセンターでの解析に期待