

SPring-8データセンター —稼働状況と今後—

初井宇記

理化学研究所



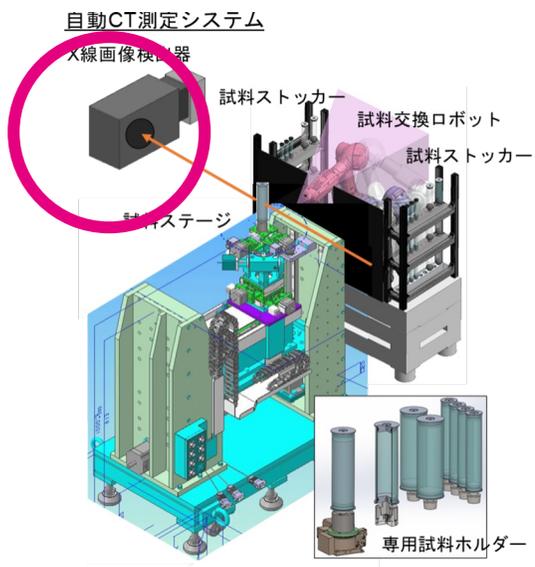
アウトライン

- SPring-8データセンター
 - 課題認識
 - ニーズの類型化
 - インフラ概要
- 事例紹介
- まとめ

SPring-8データセンター

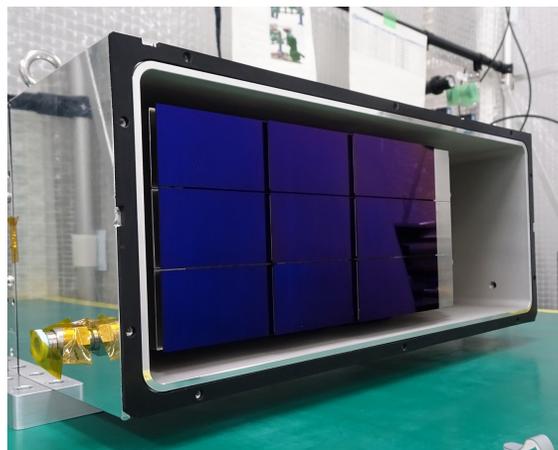
課題認識：出力データの飛躍的増大

CT測定: DIFRAS検出器



102 Mpixel 10 Hz 12 bit
→ 1.5 GB/s (12 Gbps)
→ 445 TB/day @ 30%
→ 0.134 M\$/year [1]

回折顕微鏡(ptychography)：CITIUS検出器



prototype
1/2 system

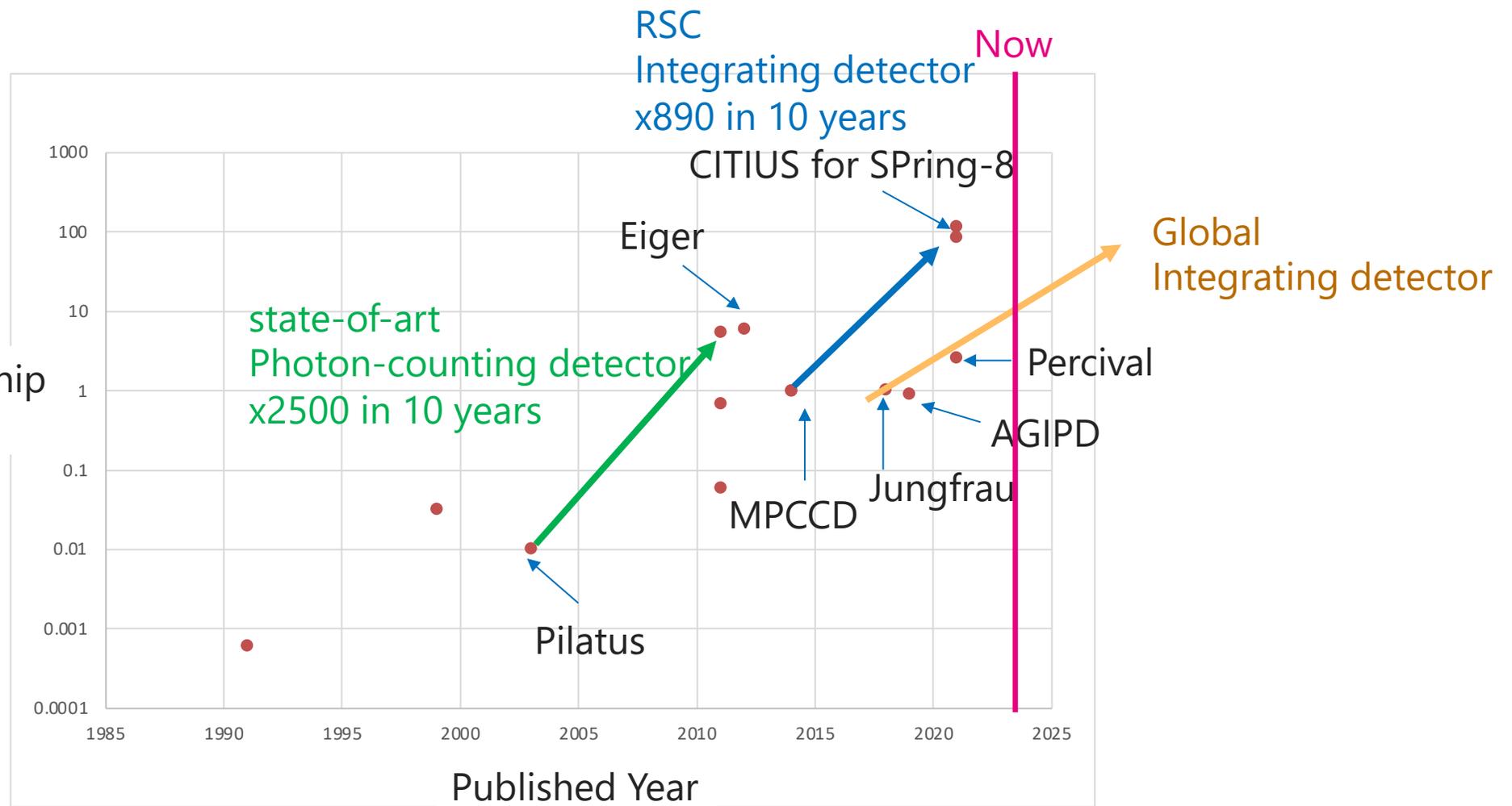
5 Mpixel 17.4 kHz 32 bit
→ 351 GB/s (2.8 Tbps)
→ 30.3 PB/day@100%
→ 9.1 M\$/year [1]

Bandwidth Challenge
ネットワーク転送が困難

Capacity Challenge
保存が困難

[1] AWS S3 service, Osaka DC 0.3 M\$/PB/year as of 29th Feb., 2024

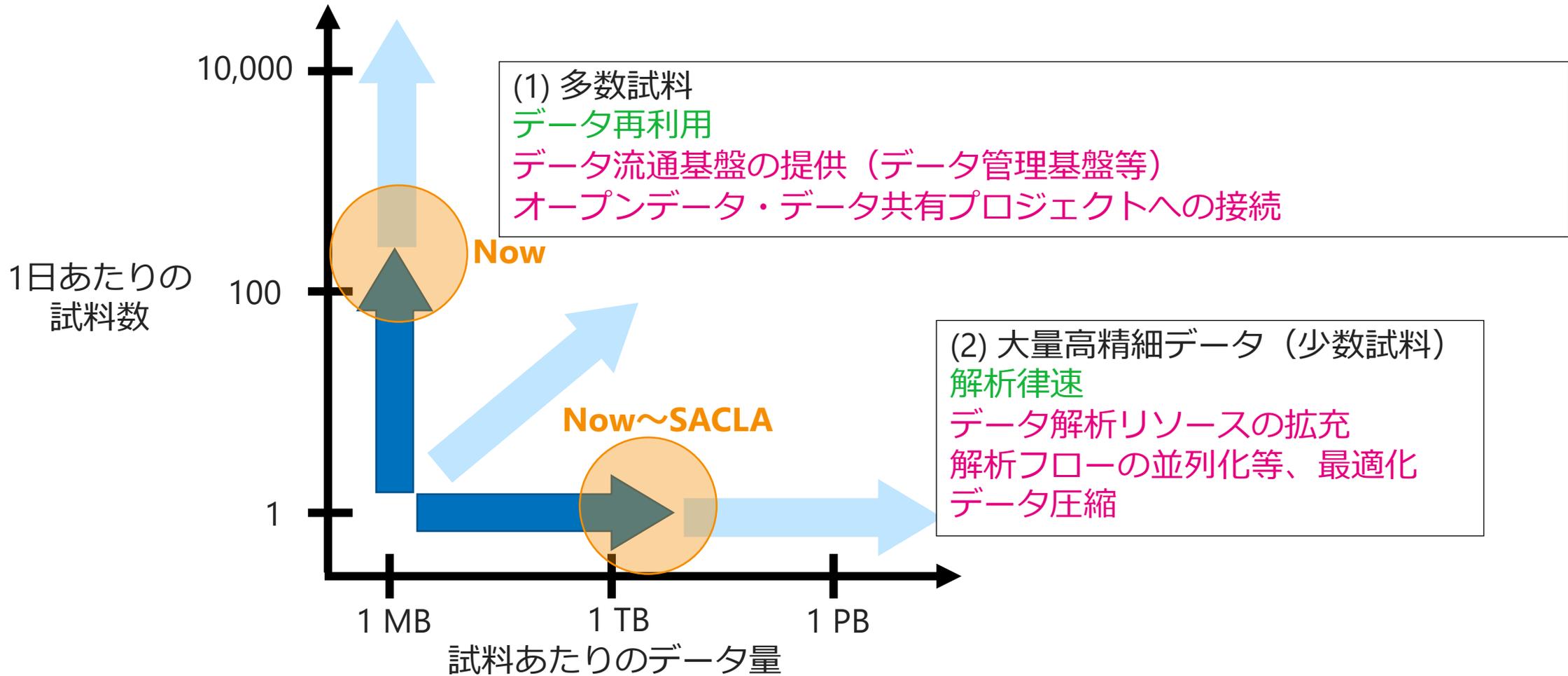
Data Rate per CMOS chip
[Gbit/s/chip]



世界に先駆けて高速積分型検出器CITIUSの開発に成功

SPring-8データセンター

ニーズの類型化と課題、施設に求められる機能



SPRING-8データセンター: 方針

大規模データ：ビームライン近傍でのデータ前処理 **Edge Computing**

- SPRING-8サイト内であっても大規模データは移動ができない
- ビームライン近傍で圧縮・前処理、その後に転送

SPRING-8サイト内データセンターの役割 **Hybrid Data Infrastructure**

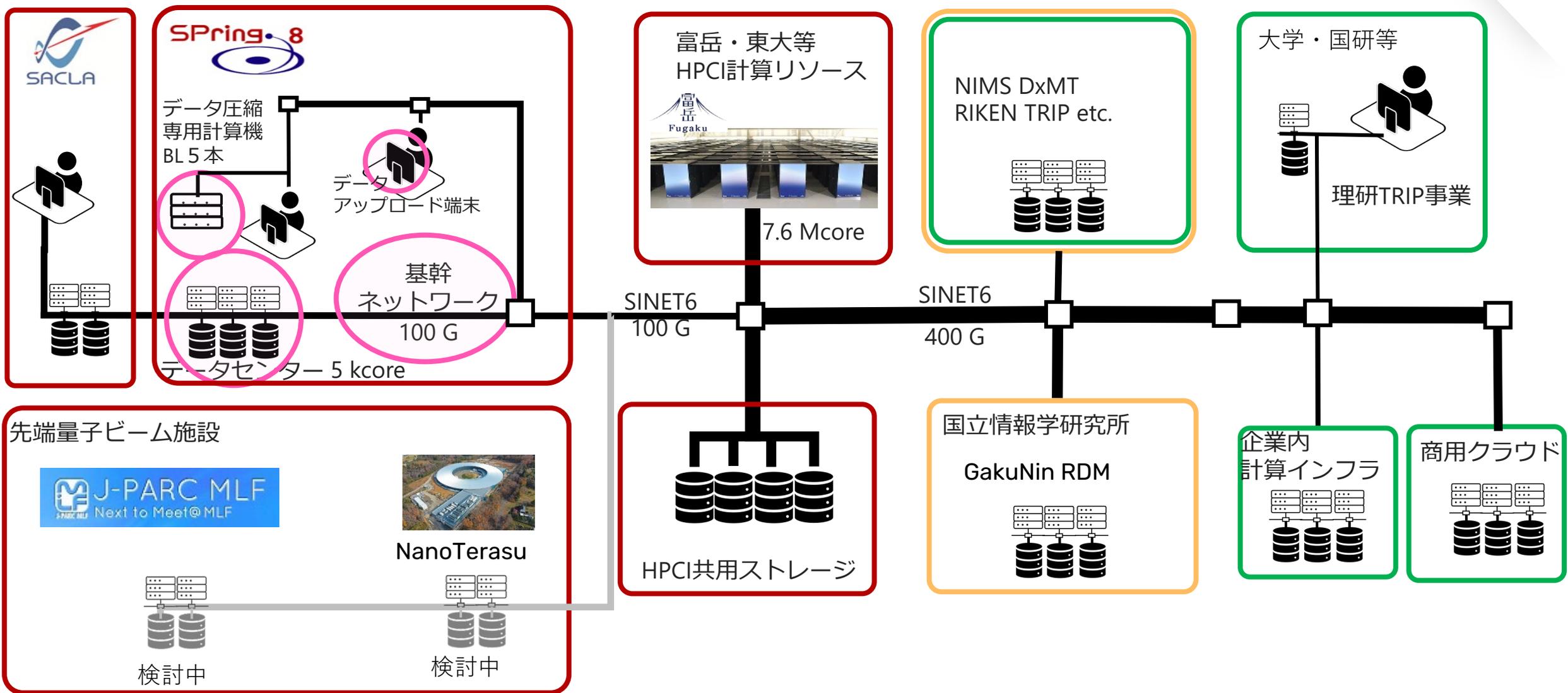
- NIIのデータ管理基盤、富岳やHPCIコンソーシアムのスーパーコンピューター、他のプロジェクトと連携
- オンサイトのSPRING-8データセンター
 - SPRING-8サイト内に設置しなければならない機能（実験中のデータ可視化・データ格納・データ流通基盤）に絞る
 - クラウド上のアカデミック・商用サービスと積極的に連携
 - 今後は商用サービスとの連携も検討

量子ビーム施設間のデータ基盤の共通化 **Standardization**

- 複数施設のデータを統一的に活用できる基盤につなげる（中期課題）
- 最初のステップはSPRING-8サイト内の認証基盤の整備、NIIの次期認証基盤に発展的に合流
- 富岳・J-PARC・NanoTerasuと共通化へ

SPring-8データセンター: インフラ

新設

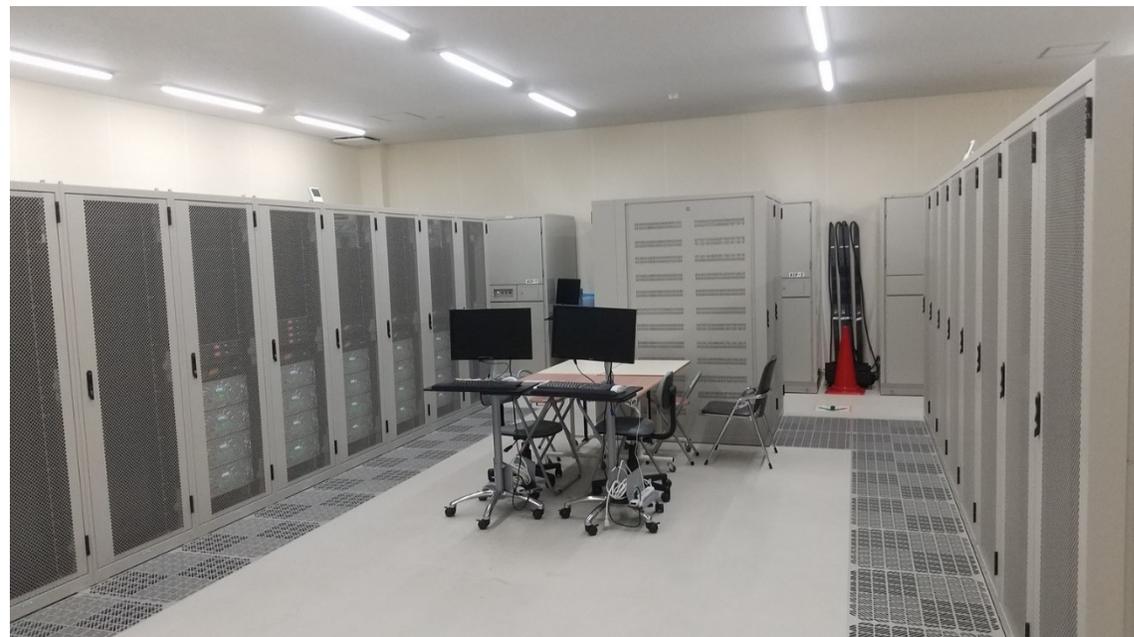


SPring-8データセンター（オンサイト）



仕様概要

- 特徴
 - I/Oに最適化された構成
 - 30 GB/s
- 計算ノード
 - 5k CPU cores (intel CPUs)
 - Nvidia A100 x16
- ストレージ
 - 10 PB
- ネットワーク
 - 100 GでSINET6に接続



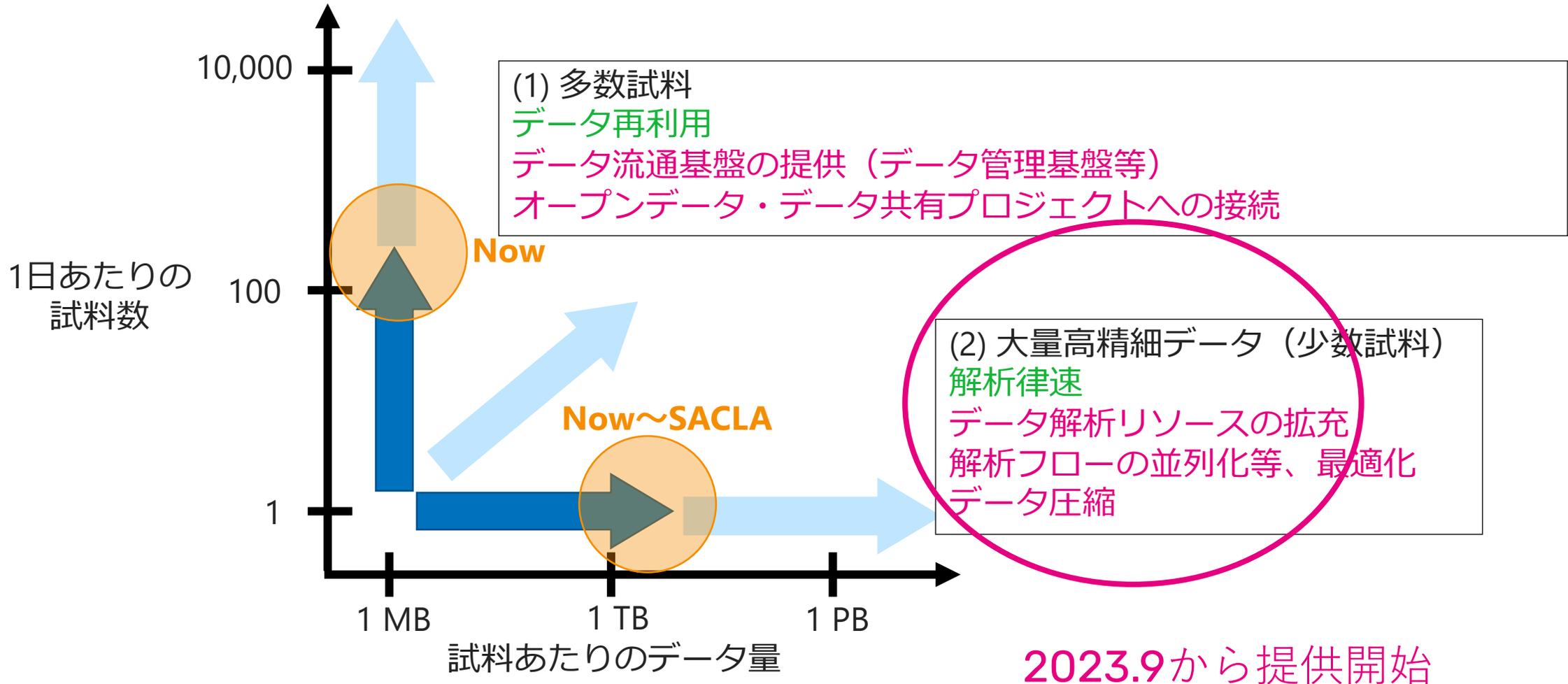
2023.9から共用開始

利用方法

- ビームライン担当者が理研データセンターへ接続を申請
- ユーザは課題申請時に利用希望を提出

SPring-8データセンター

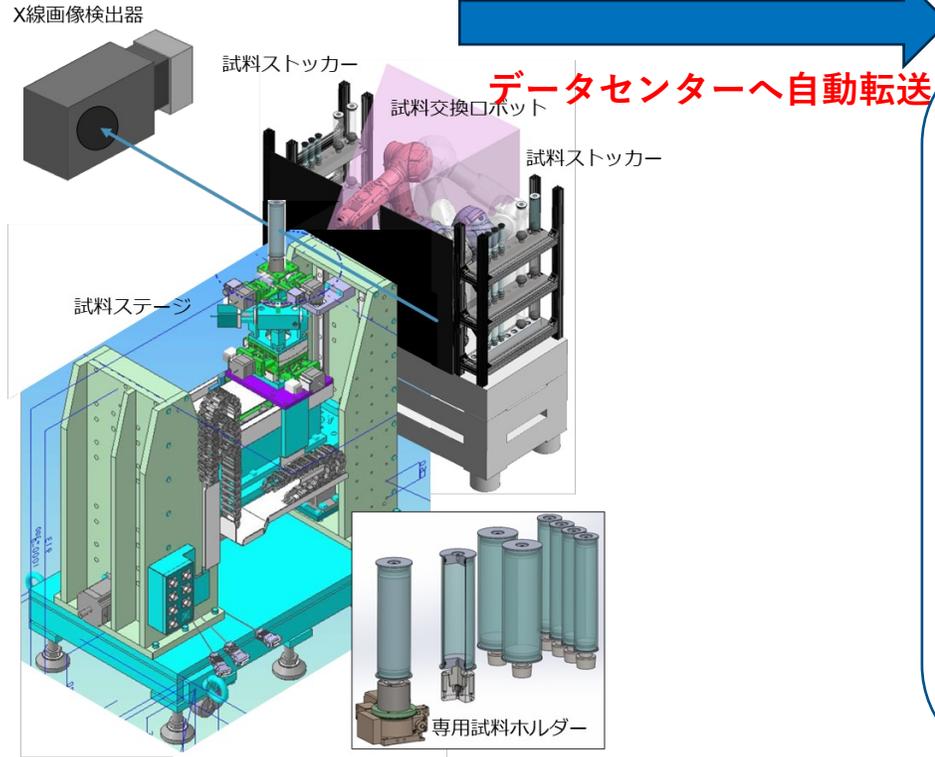
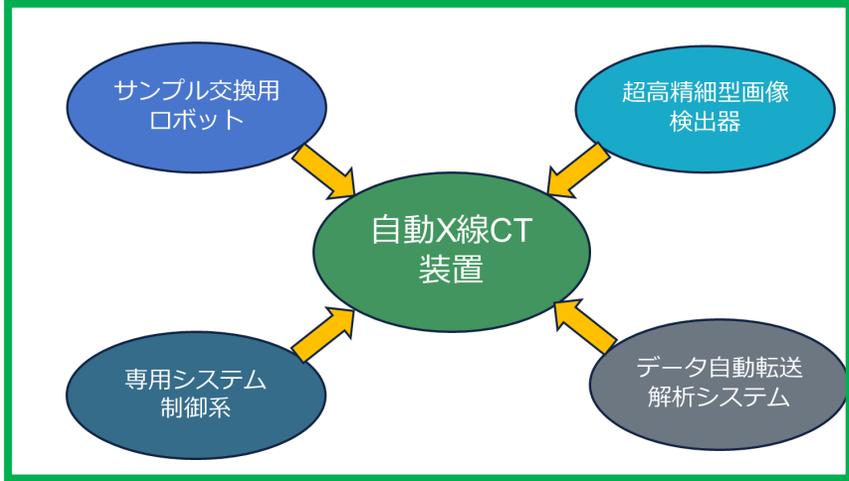
ニーズの類型化と課題、施設に求められる機能



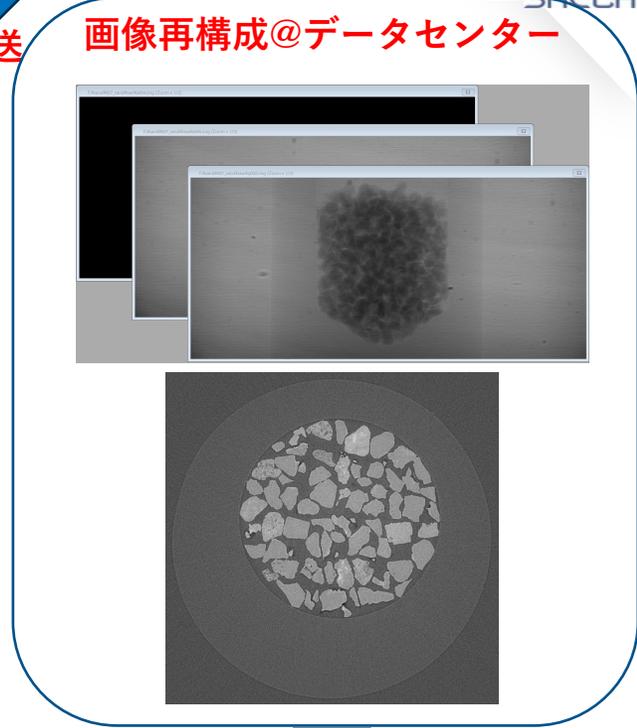
事例(1)

BL28B2自動X線CT/画像再構成まで提供 (運用中)

courtesy of 上杉健太郎 (JASRI)



BL28B2光学ハッチ2の上流部分に設置



データセンターからダウンロード (S3&Nextcloud)

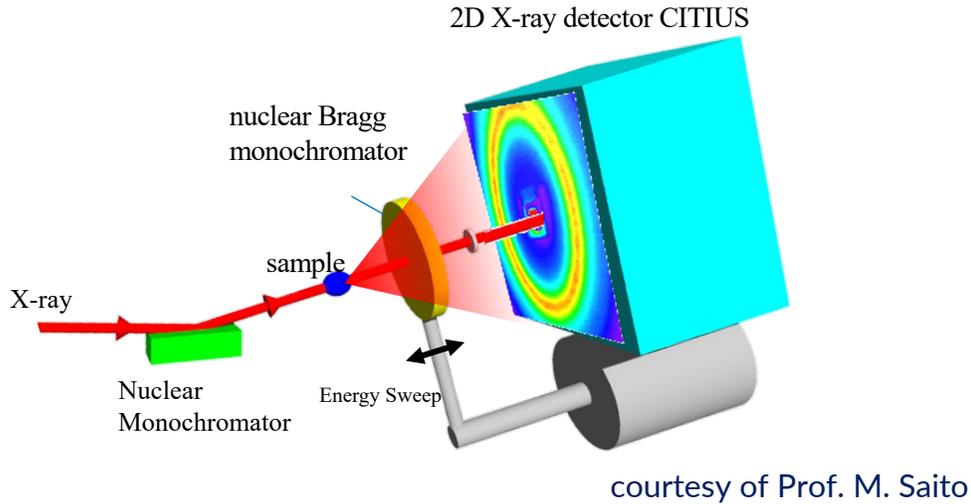
- ✓ データセンターのプロトタイプ計算機で転送&解析システム開発・2022年度末から試験運用
- ✓ 2023B期からデータセンターにて転送&解析システム運用開始
- ✓ 自動解析サービスに向けた更なる高度化を目指しR&D中

⇒ X線CT解析@BL20XU, BL20B2, BL47XU, XAFS-CT@BL36XU, BL37XUへ展開予定

事例(2)

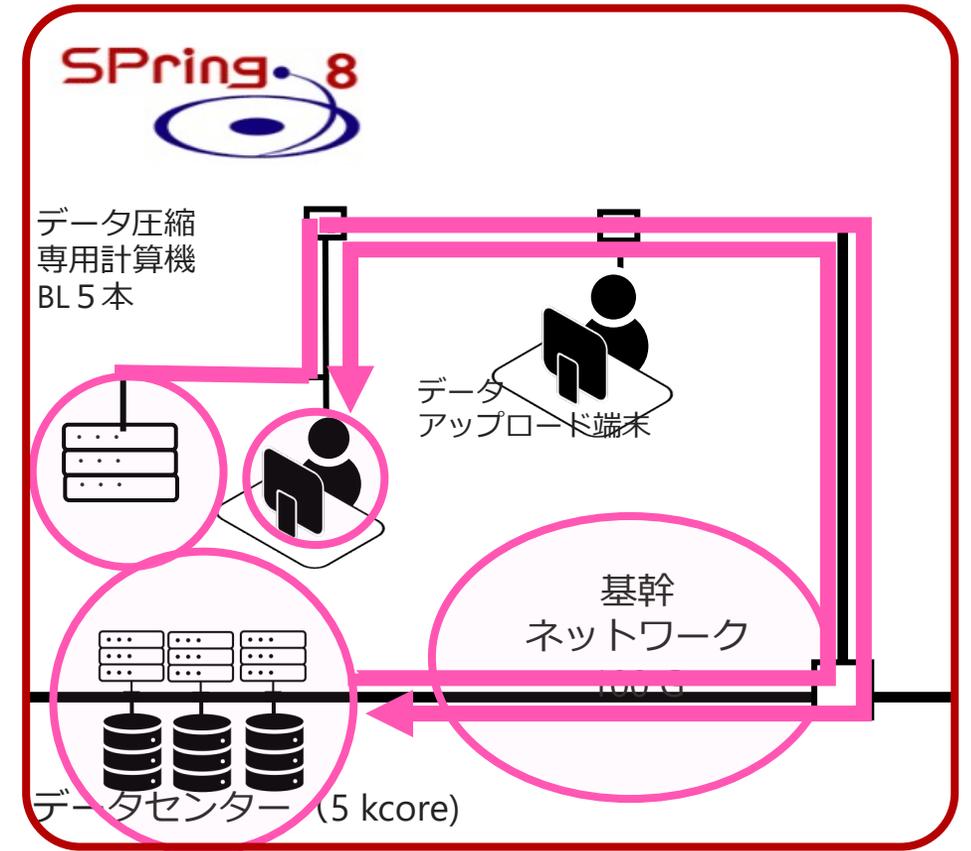
二次元検出器を用いたエネルギー領域上のガンマ線準弾性散乱測定 データ圧縮・SPring-8 DCを用いた利用実験(運用中)

齋藤真器名 (東北大) et.al., SACLA/SPring-8基盤開発プログラム
M.Saito et al., submitted



- 2次元X線画像検出器CITIUSを導入
- 17.4 kframe/sでセンサは稼働
- 2次元回折データにナノ秒ダイナミクスの情報を付与
- 新しい準弾性散乱測定系が完成

施設からみた課題
5.1 PB/day



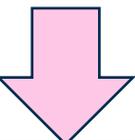
事例(2)

二次元検出器を用いたエネルギー領域上のガンマ線準弾性散乱測定 データ圧縮・SPring-8 DCを用いた利用実験(運用中)

齋藤真器名 (東北大) et.al., SACLA/SPring-8基盤開発プログラム
M.Saito et al., submitted



840k/17.4 kfps
5.1 PB/day

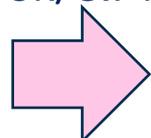


データ圧縮専用計算機



9 FPGA boards developed for CITIUS

840k/8.7 kfps

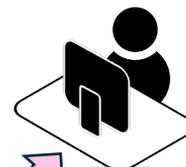


SLC[1]
Lower entropy data

310 MB/day



データセンター (5 kcore)



課題

- 17.4 kfpsのデータ収集
→ **FPGAの伝送帯域を2倍に強化**
- 熟練した方以外も解析できる仕組みが必要
→ **解析フローサービスの導入を検討中**

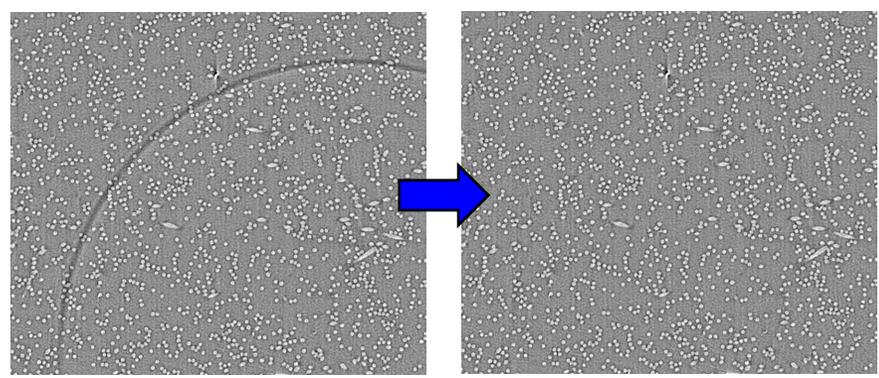
[1] T.N. Hiraki et al.,
SLC (Statistically lossless compression)

事例(3) 二次元検出器を用いたCTデータのセグメンテーション データ圧縮・SPring-8 DCを用いた利用実験(運用中)

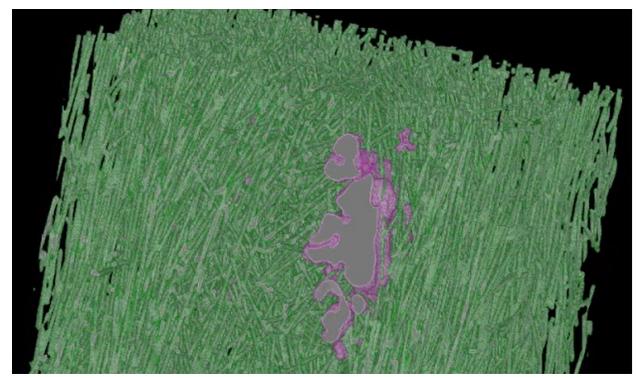
課題

- 151 Mpixel検出器による大規模CTデータ
- 屈折コントラストなどを考慮した領域分割
- 解析に経験と計算量が必要

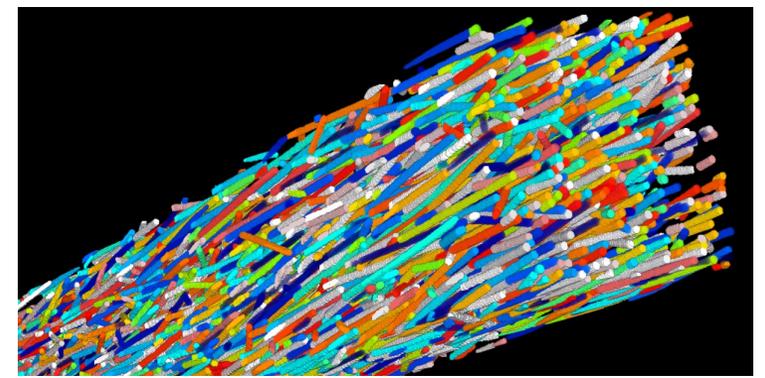
東裕介、葛西卓磨、亀島敬、高野秀和（理研） et.al.
増永淳史、岩花宗一郎、野村 圭一郎（東レ）
JST未来社会創造事業
Society5.0の実現をもたらす革新的接着技術の開発



撮像アーティファクトを
画像処理により軽減



古典的手法により
炭素繊維と空隙の位置を同定
(semantic segmentation)

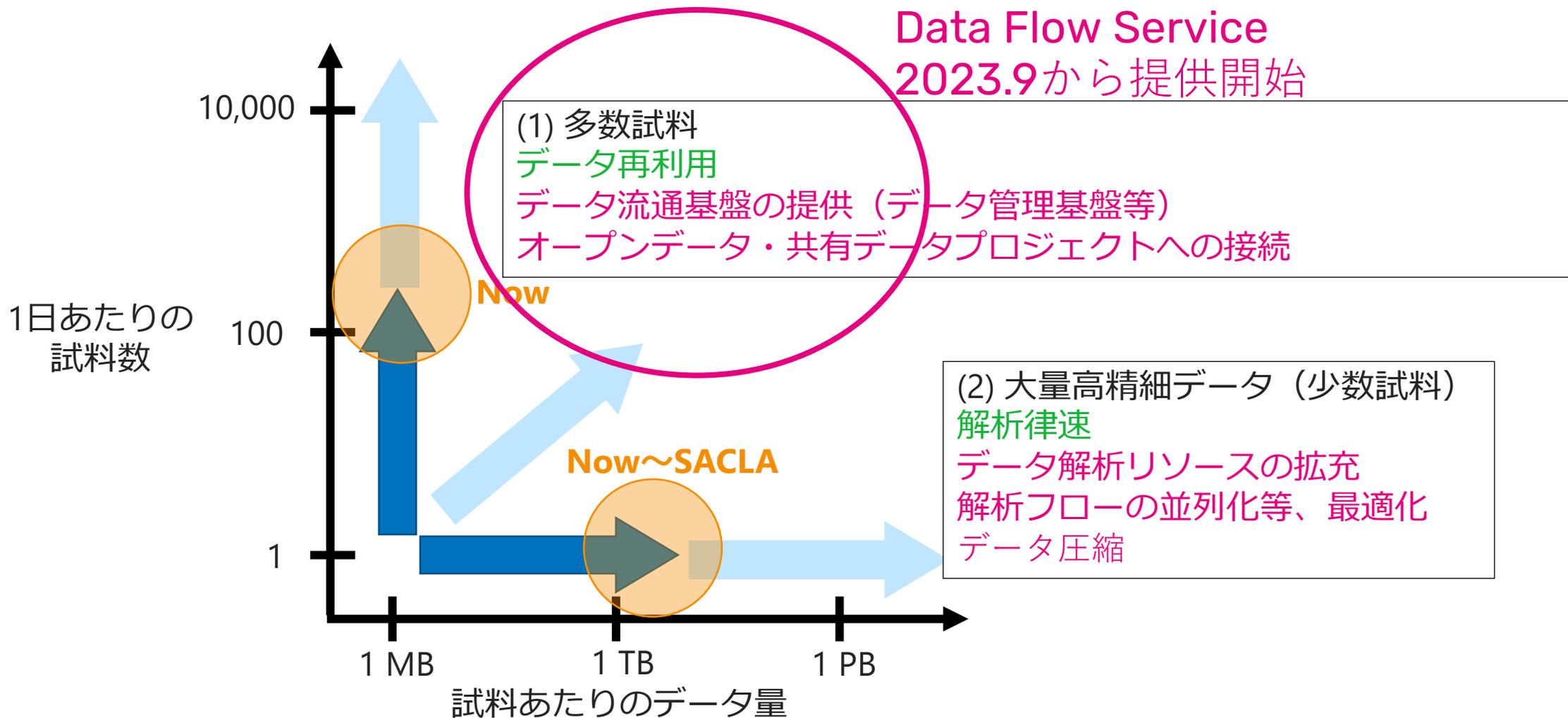


細胞解析向けの深層学習モデルを転
用し炭素繊維の走向を追跡
学習なしで高速に配向などの統計解
析が可能となった。
(instance segmentation)

SPring-8データセンターに実装し、試験利用を準備中

SPring-8データセンター

データ増大に関する類型化と課題、施設に求められる機能



Data Flow Service (Standard)



The screenshot shows a web browser window with the URL <https://dc-dfs.spring8.or.jp/index.php/login>. The page features the SPring-8 logo at the top center. Below the logo is a login form titled "SPring-8 Data Flow Service : standard ヘログイン". The form contains two input fields: "アカウント名またはメールアドレス" and "パスワード". A "ログイン" button is located below the password field. A link "パスワードをお忘れですか?" is positioned below the login button. At the bottom of the page, a notice states: "SPring-8 Data Flow Service : standard - β版につきサービスの仕様、機能、内容等を予告なく変更することがあります。"

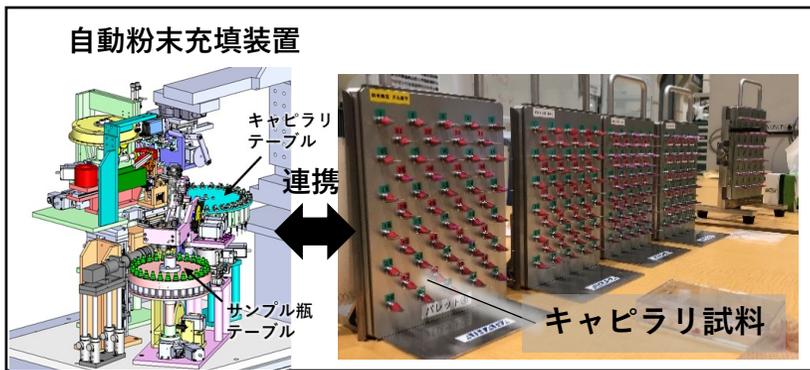
メタデータ付与
データ共有

事例(3)

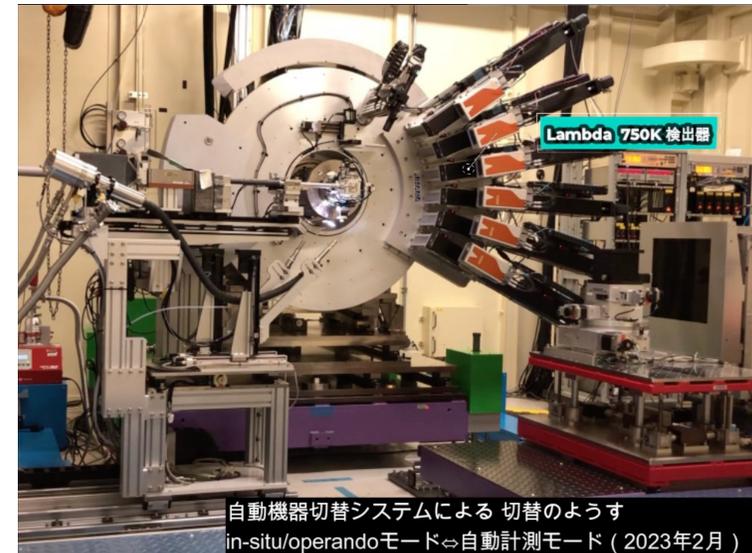
二次元検出器を用いたエネルギー領域上のガンマ線準弾性散乱測定 高分解能粉末回折装置 @ BL13XU EH3/データの自動アップロード(準備中)



- ✓ BL高度化によりハイスループット計測 (200試料/日)を実現
- ✓ 実験研究者が試料毎にアップロードするのが困難な試料数
- ✓ 実験研究者と外部(@ゲストハウス、@SPring-8外)との間でのスムーズな実験データ共有が課題
- ✓ 自動アップロードのためのAPIおよびサンプルプログラムを提供
- ✓ SPring-8 Data Flow Serviceでの試験運用を準備中



⇒ 各種ハイスループットBLへ展開予定



Webブラウザからの利用

Open OnDemand

データセンターはいわゆるスパコン

利用のしきいが高い

- ログイン
- ジョブ管理システムの利用

Webブラウザから利用

SP8DC ondemand Apps Files Jobs Clusters Interactive Apps Batch Jobs Passenger Apps My Interactive Sessions Help Logged in as r0071118 Log Out



OnDemand provides an integrated, single access point for all of your HPC resources.

Pinned Apps A featured subset of [all available apps](#)

Batch Jobs

 OpenFOAM	 SALMON	 GROMACS	 Job Submitter
---	---	--	--

Clusters

Webブラウザからの利用

Open OnDemand

OnDemand provides an integrated, single access point for all of your HPC resources.

Pinned Apps A featured subset of [all available apps](#)

Batch Jobs



Clusters



Files



Interactive Apps



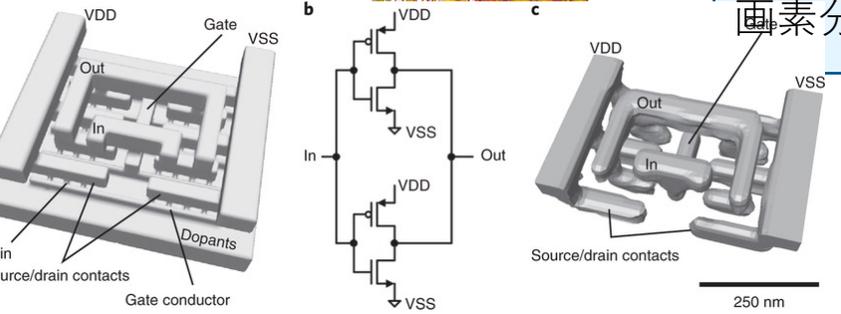
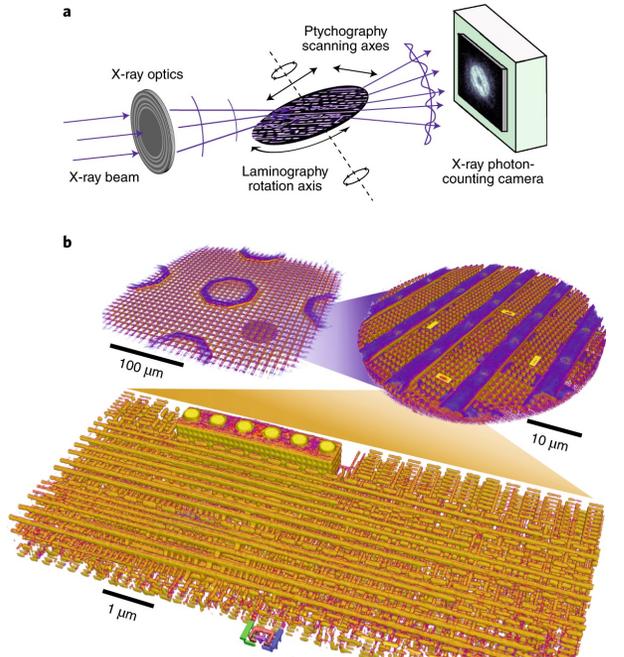
現在試験中

試用にご協力いただける方は
ご連絡ください。

今後の取り組み(1) 半導体構造評価：ptychography @ SPring-8-II

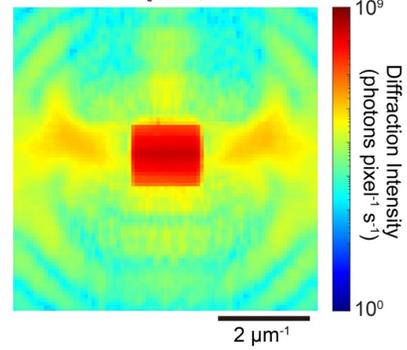
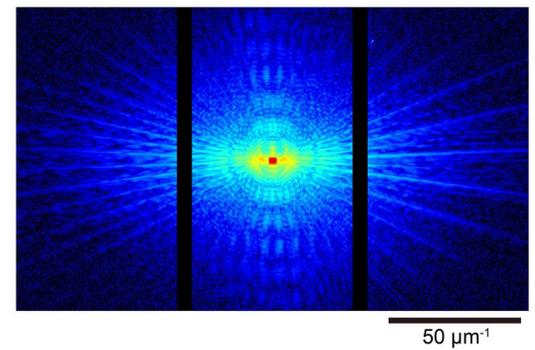
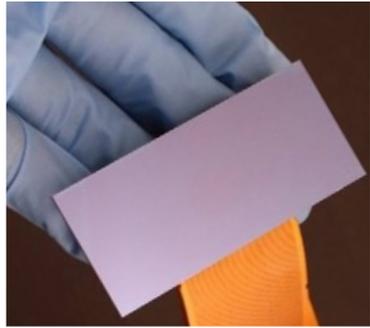
海外事例

Nature Electronics volume 2, pages464-470 (2019)
スイスの放射光施設で実施, Intelとの共同研究



SPring-8の現状

東北大学高橋教授グループ他 自動車関係の利用が主
2022年12月 CITIUSを利用したテストチャートのデータ



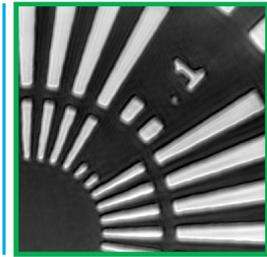
入射X線 : 7×10^8 phs/s
検出器 : $\sim \max 1$ Mcps/pixel
測定時間: 60 時間
画素分解能 ~ 13 nm

入射X線: 7×10^{11} phs/s
検出器 : $\max 1,100$ Mcps/pixel
測定時間: 24 時間
画素分解能 ~ 2 nm

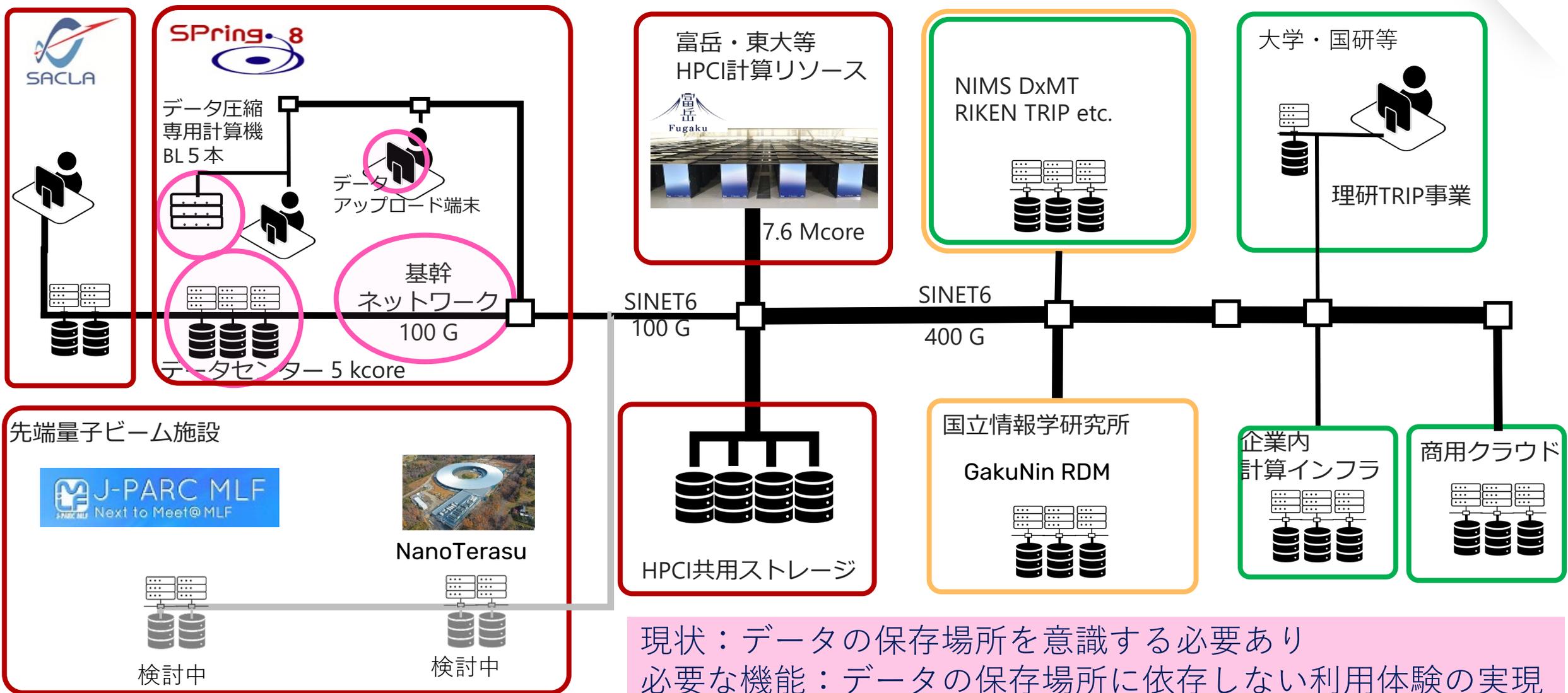
x1,000
x1,000
~x1/3
~1/4.5

理研・阪大のX線光学技術、CITIUS検出器と組み合わせると、
実用画素分解能2 nmが実現可能

30 PB/sample/dayのデータ処理
AIによる領域分割の実現



今後の取り組み(2) データインフラの高度化に向けた技術開発



現状：データの保存場所を意識する必要あり
 必要な機能：データの保存場所に依存しない利用体験の実現
IOWN技術の活用を検討中(NTT)

お願い

SPring-8データセンター

1) 解析までのフローを構築していく段階

ユーザの皆様のご意見が極めて重要

新規サービスの立ち上げでは“**Teacher User**”が重要

2) ガバナンス

SPring-8データ・ネットワーク委員会

ご連絡先

初井、もしくはdncs@spring8.or.jpへ

まとめ

- SPring-8データセンター
 - 課題認識：大規模データへの対応
 - ニーズの類型化
 - インフラ概要：Edge computing, Hybrid Data Infrastructure, Standardization
- 事例紹介
- まとめ

Acknowledgment

RIKEN and JASRI Team

- K. Ozaki, Y. Honjo, H. Nishino, K. Kobayashi, T. Hiraki, Y. Joti, T. Kudo, T. Sugimoto, M. Yamaga, T. Kameshima, Y. Inagaki, K. Fujiwara, T. Nakagawa, Y. Oyaki, M. Kimoto, M. Nakamachi, M. Yabashi, T. Ishikawa

RIKEN R-CCS

- S. Matsuoka, K. Sato, K. Sano, F. Shoji and their division members

R-IH

- N. Kobayashi, M. Nomoto, H. Jitsumoto

NII

- Y. Komiyama, T. Hirabara

Private Companies

- GLORY System Create Ltd, Ryobi Systems Co., Ltd., Meisei Electric Co. Ltd, Tokyo Electron Device Limited