

# SPring-8データセンター構想

初井宇記

理化学研究所



# アウトライン

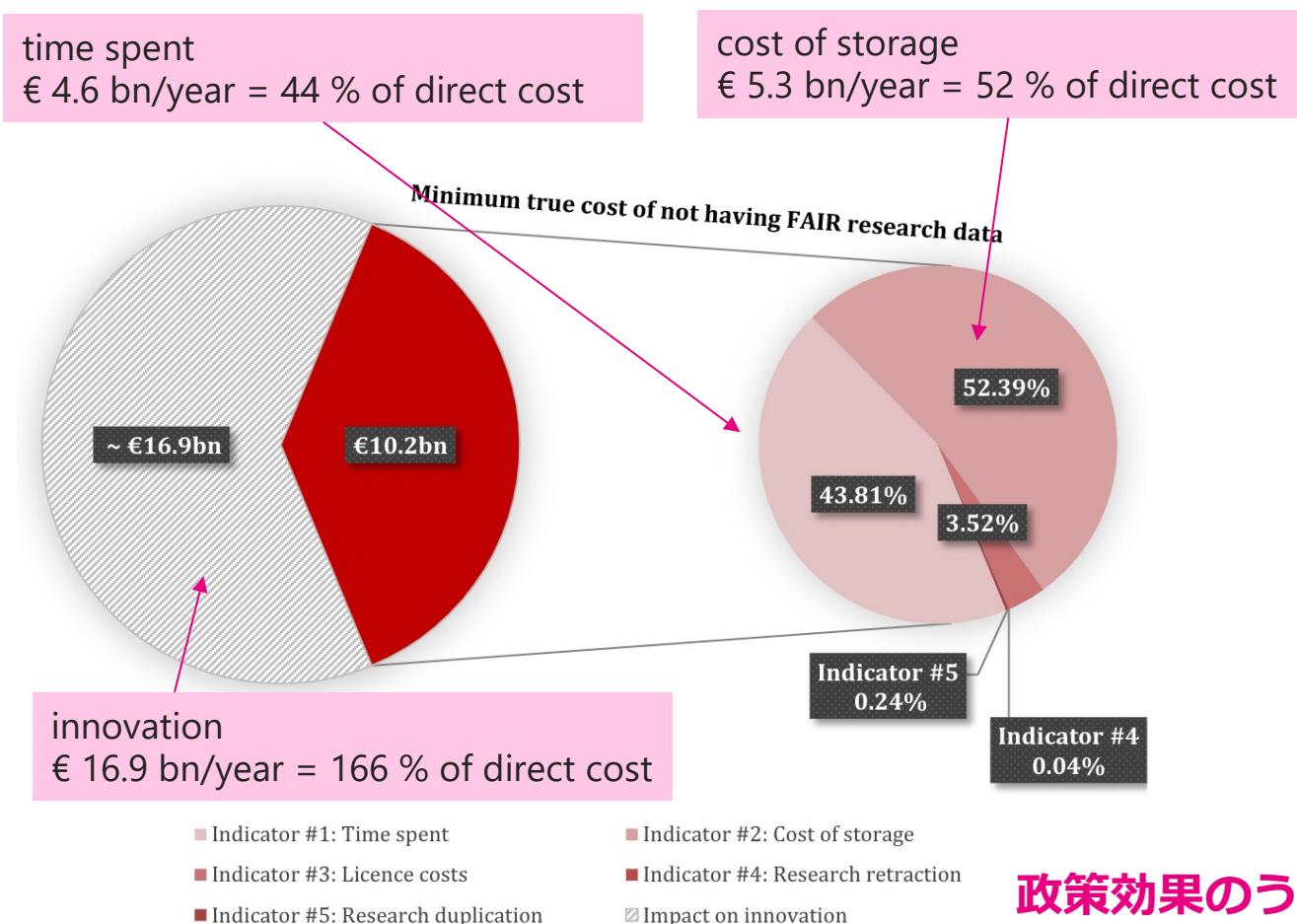
- 欧州・米国・日本の動向
- SPring-8のICT関係の整備状況
- SPring-8のデータ量動向
- SPring-8データセンター構想
  - インフラ
  - サービス
- まとめ

# 欧洲：FAIR data政策の効果の推定

Findable (見つけられる)、Accessible (アクセスできる)、Interoperable (相互運用できる)、Reusable (再利用できる)」

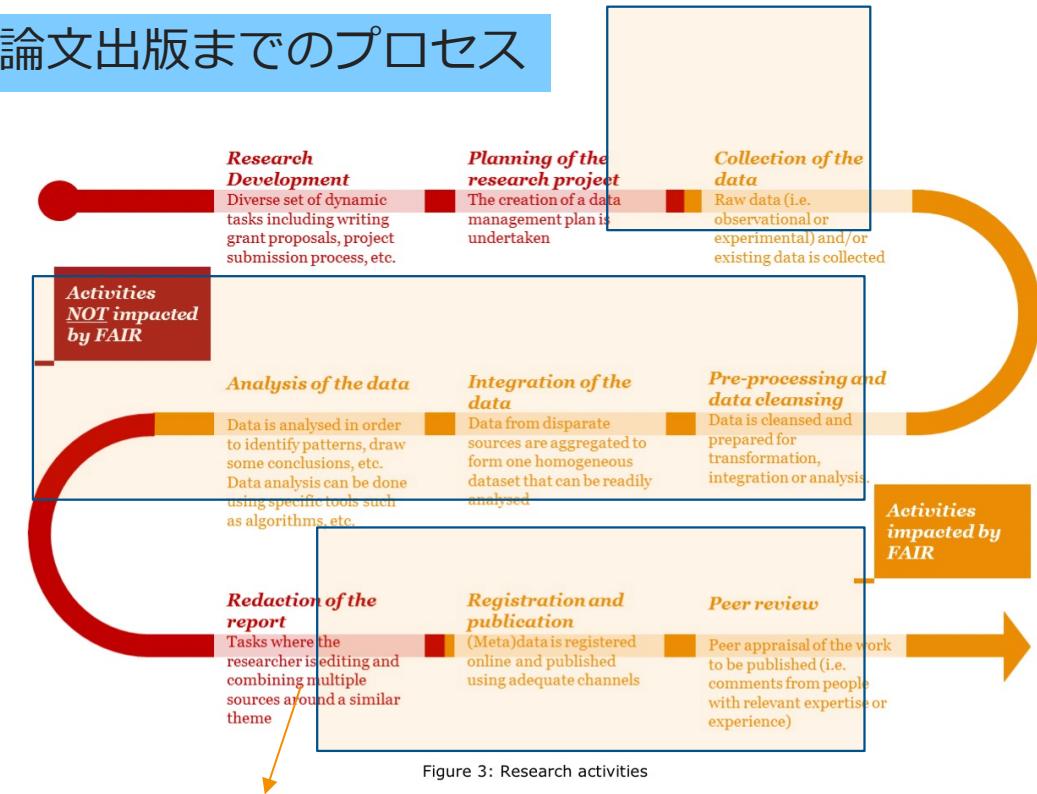
## ヨーロッパ全体のコスト削減見込み

Cost: cost not having FAIR research data



European Commission, Directorate-General for Research and Innovation, *Cost-benefit analysis for FAIR research data : cost of not having FAIR research data*, Publications Office, 2019, <https://data.europa.eu/doi/10.2777/02999>

## 論文出版までのプロセス



FAIR dataによってコスト削減できるステップ

政策効果のうち38%が効率化によるものと算定

# 欧洲 : LEAPS data strategy

## 目標

- データを知識へ

## 参画機関

- 12施設の協力によりデータインフラを整備
- 中性子施設も加わる

## 方法

- 重複した開発をまとめることによる効率化
- Open Scienceの推進

欧洲全体のデータ戦略のなかでの位置づけが強調されている。

共同でのソフトウェア開発による効率化

貴重サンプル(化石や、COVID患者のCTデータなど)の引用が増加

# 米国：エネルギー省/Basic Energy Sciences

BESの強力なマネージメント

データインフラは施設のミッション達成の手段としての位置づけ

計算科学との連携/ESnet6(400 Gbps-1 Tbps)ネットワークの活用

## Achieving the BES Light Source Mission

**Advanced computing is crucial to address drastic and rapid increases in data from the facilities**

### New and more complex experiments

- Multi-modal experiments that combine data from multiple samples, techniques, and facilities
- In situ* and *in operando* experiments require real-time feedback and autonomous control

### Increased source brightness (orders-of-magnitude brighter)

- Due to facility upgrades and accelerator improvements: LCLS-II 1 MHz, APS-U, LCLS-II HE, ALS-U, NSLS-II

### Detector advances (orders-of-magnitude faster)

- Increased dynamic range
- Faster readout rates
- Larger pixel arrays



- Analyze and reconstruct massive multi-modal data volumes
- Identify and classify features and patterns
- Merge simulation and experiment data to drive experiments and new results
- Execute experiments dynamically using real-time reduction and AI/ML

## Scale of the Problem

**Over the next decade, the 5 Light Sources are projected to generate ~ 1 exabyte of data/year and will require 10s of petaflop/s to an exaflop/s of peak computing power**



1 exabyte/year = 1.5 million movies every day

- We don't need to just watch these movies, we need to look at every frame of every movie, analyze it in near real-time, and make decisions about what to do next
- Complicating this is the fact that there are hundreds of "types" of movies (experiments) that each require their own solutions

1 exaflop/s = 500,000 servers

- This will require up to 1 exaflop/s of peak compute power, fast networks (multiple Tbps), storage, and a robust software infrastructure to support near real-time analysis



# 米国でのOpen Data

2022年8月 ホワイトハウス科学技術政策局

## Ensuring Free, Immediate, and Equitable Access to Federally Funded Research

2013年の答申を大幅に拡大

COVID-19が契機

連邦政府下のすべての研究機関にデータ公開プランの提出を求めるもの

ii) Plans to maximize appropriate<sup>11</sup> sharing of the federally funded scientific data identified in Section 3(a) of this memorandum, such as providing risk-mitigated opportunities for limited data access;<sup>12</sup> and,

<sup>11</sup> The term “appropriate” is used to signal that public access to federally funded research results and data should be maximized in a manner that protects confidentiality, privacy, business confidential information, and security, avoids negative impact on intellectual property rights, innovation, program and operational improvements, and U.S. competitiveness, and preserves the balance between the relative value of long-term preservation and access and the associated cost and administrative burden.

August 25, 2022

MEMORANDUM FOR THE HEADS OF EXECUTIVE DEPARTMENTS AND AGENCIES

FROM: Dr. Alondra Nelson  
  
Deputy Assistant to the President and Deputy Director for Science and Society  
Performing the Duties of Director  
Office of Science and Technology Policy (OSTP)

SUBJECT: Ensuring Free, Immediate, and Equitable Access to Federally Funded Research

This memorandum provides policy guidance to federal agencies with research and development expenditures on updating their public access policies. In accordance with this memorandum, OSTP recommends that federal agencies, to the extent consistent with applicable law:

1. Update their public access policies as soon as possible, and no later than December 31<sup>st</sup>, 2025, to make publications and their supporting data resulting from federally funded research publicly accessible without an embargo on their free and public release;
2. Establish transparent procedures that ensure scientific and research integrity is maintained in public access policies; and,
3. Coordinate with OSTP to ensure equitable delivery of federally funded research results and data.

# 日本：情報分野の振興策

2022年3月23日：文部科学省、科学技術・学術審議会情報委員会、第6期科学技術・イノベーション基本計画を踏まえた情報分野の振興方策 取りまとめ

研究DXを通じてより付加価値の高い研究成果の創出を目指す

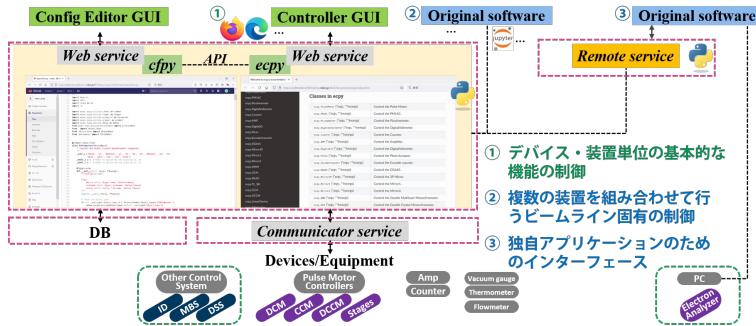
研究データの横断的検索を可能にするプラットフォームの下で、オープン・アンド・クローズ戦略に基づいた研究データの管理・共有・利活用を進める環境を整備

# SPring-8のICT関係の整備概況



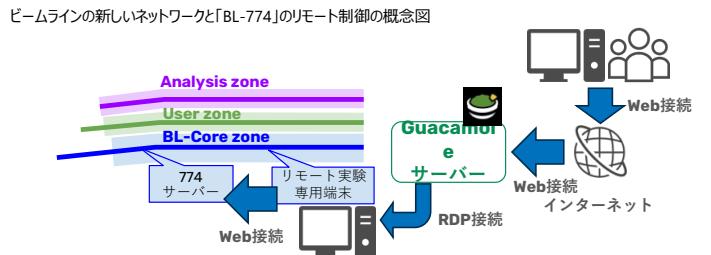
中嶋享, 本村幸治, et.al.,

## BL-774(導入中)



pythonベースのビームライン制御基盤  
ビームライン自動化  
データセンター接続  
AI/MLを導入する基礎

## ビームラインの新インターネット(導入中)



広帯域化

セキュア環境でのリモート実験基盤の提供

## 大規模言語モデルの活用(検討中)

Q: 光がハッチまで通っていない?

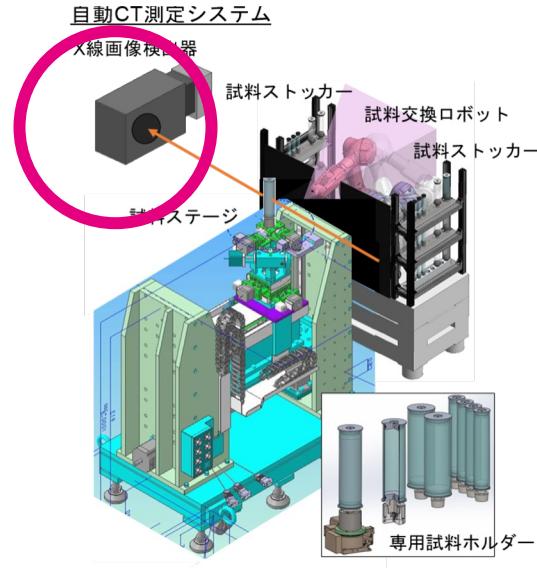
A: 実験ハッチまで光が通らない原因はいくつか考えられます。以下を確認しました。

1. Ring Currentは問題ありません。現在の値は100 mAです。
2. UndulatorのGapは問題ありません。現在6 mmで通常 $10^{11}$  photons/sの光強度が期待されます。

自然言語によるビームラインのオペレーション

# 出力データの今後の動向

## CT測定: DIFFRAS検出器



102 Mpixel 10 Hz 12 bit  
 → 1.5 GB/s  
 → 445 TB/day @ 30%  
 → 0.112 M\$/year

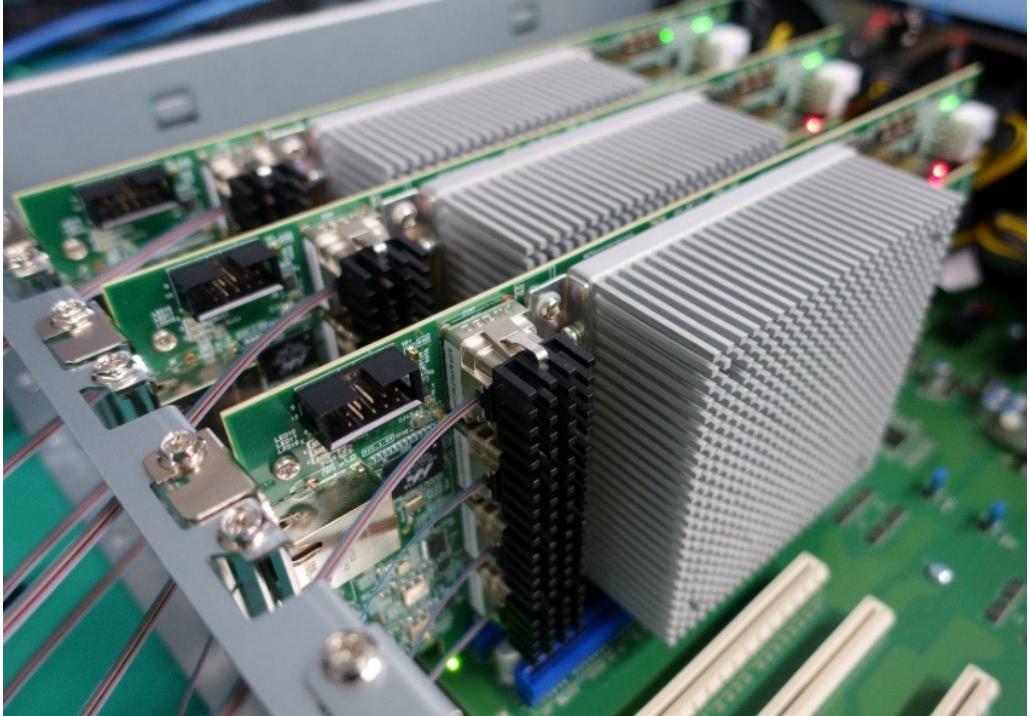
## 回折顕微鏡(ptychography) : CITIUS検出器



5 Mpixel 8.6 kHz 32 bit  
 → 173 GB/s  
 → 51 PB/day @ 30%  
 → 12.7 M\$/year

→ ネットワーク転送前にデータ圧縮

# Edge Computingによる圧縮



CITIUSのデータ圧縮に用いられたFPGA演算加速基板



佐野チーム、佐藤チーム  
理研R-CCSとの共同研究  
理研TRIP事業

**FPGAによる演算加速  
200–7000倍の圧縮をCITIUS検出器に対して  
実現[1-2]**

齋藤真器名(東北大学) et.al.,  
SACLA/SPring-8基盤開発プログラム2023  
BL35XU

**CTデータについてもAIによるデータ予測を圧  
縮効率向上に利用する研究等を進めている[3]**

[1]平木俊幸、初井宇記、特願2021-175897

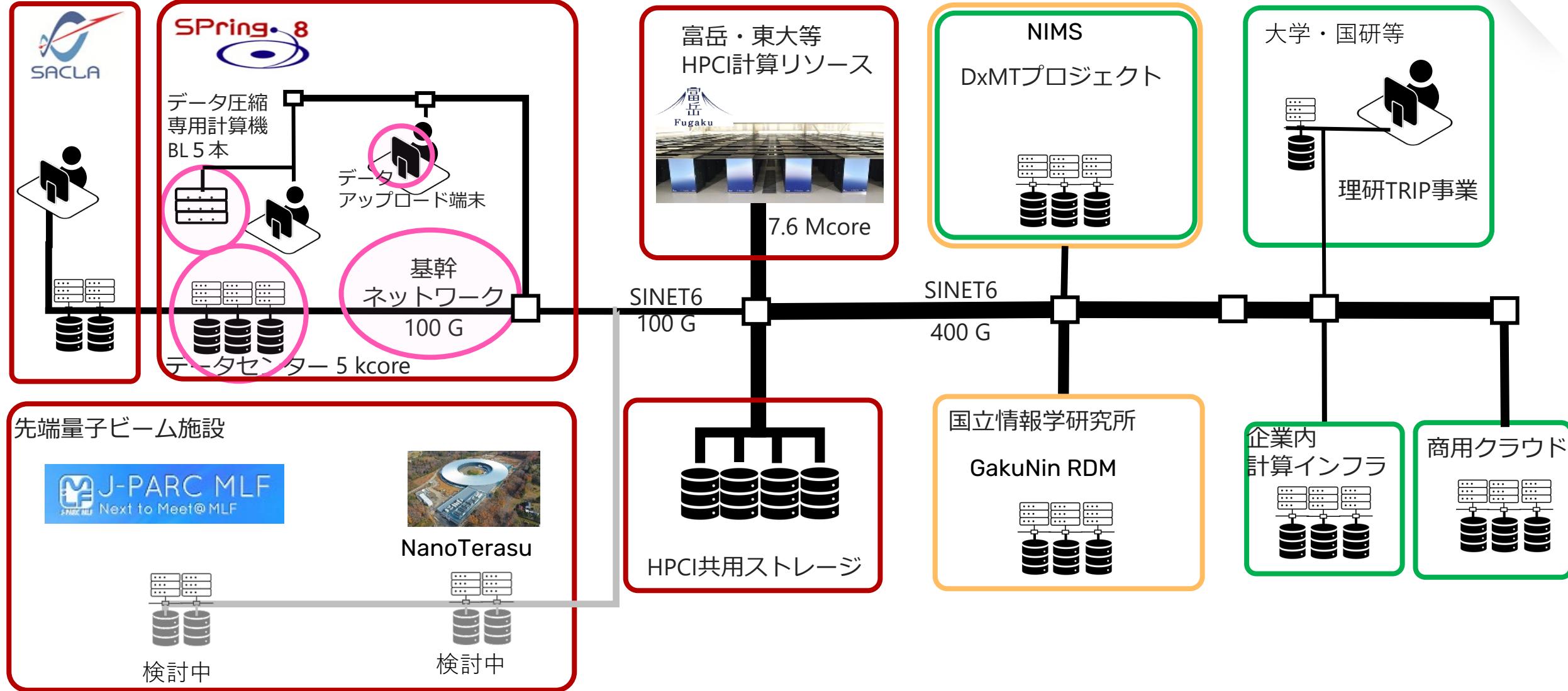
[2] T. Hiraki et.al., in preparation

[3] Rupak Roy, et. Al., Proceedings of the 21 IEEE/ACM Int. Sym. on Cluster, Cloud and Internet Computing (CCGrid 2021), (2021).

T. Hatsui, RIKEN

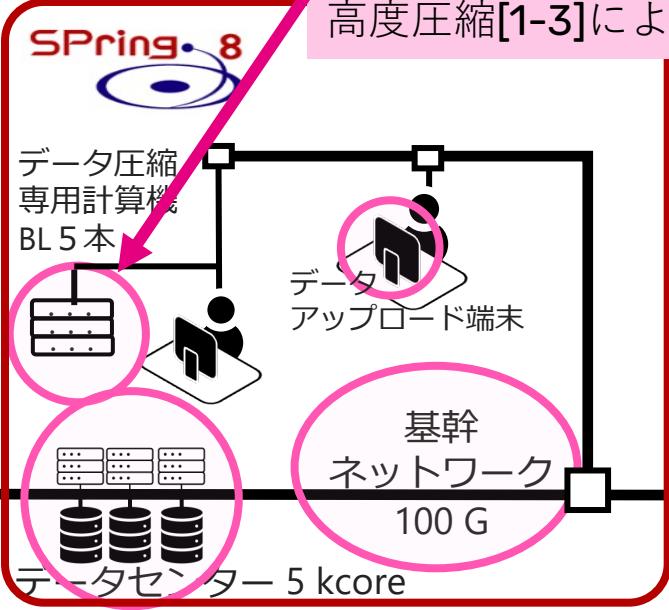
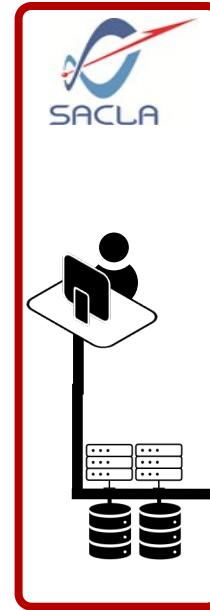
# SPring-8データセンター構想: インフラ

R3補正による新設



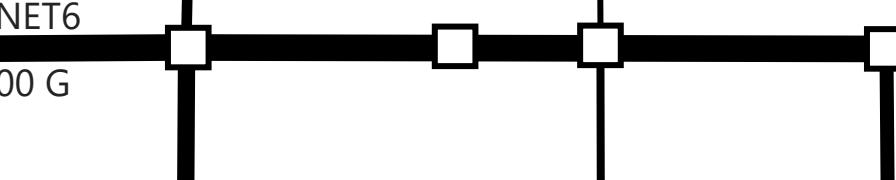
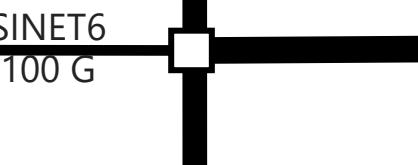
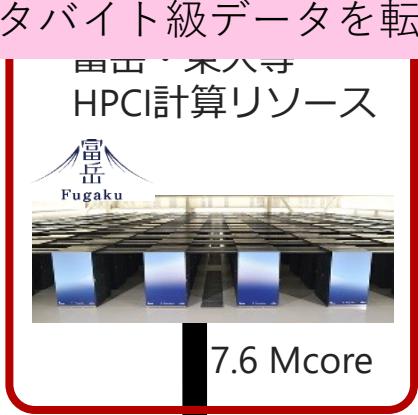
# SPring-8データセンター構想: インフラ

R3補正による新設

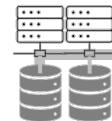


## 圧縮

高度圧縮[1-3]によりペタバイト級データを転送・保存可能にする



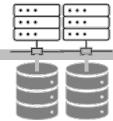
## 先端量子ビーム施設



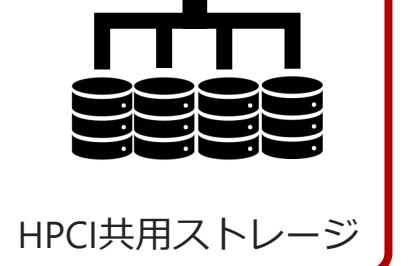
検討中



NanoTerasu

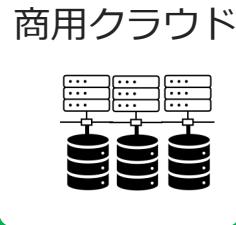
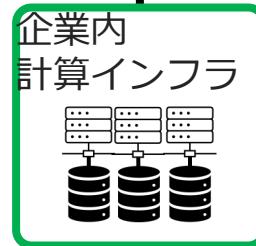
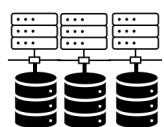


検討中



## 国立情報学研究所

GakuNin RDM



- [1] Rupak Roy, et. Al., Proceedings of the 21 IEEE/ACM Int. Sym. on Cluster, Cloud and Internet Computing (CCGrid 2021), (2021).
- [2] 平木俊幸、初井宇記、特願2021-175897
- [3] T. Hiraki et.al., in preparation

# SPring-8データセンター（オンライン）



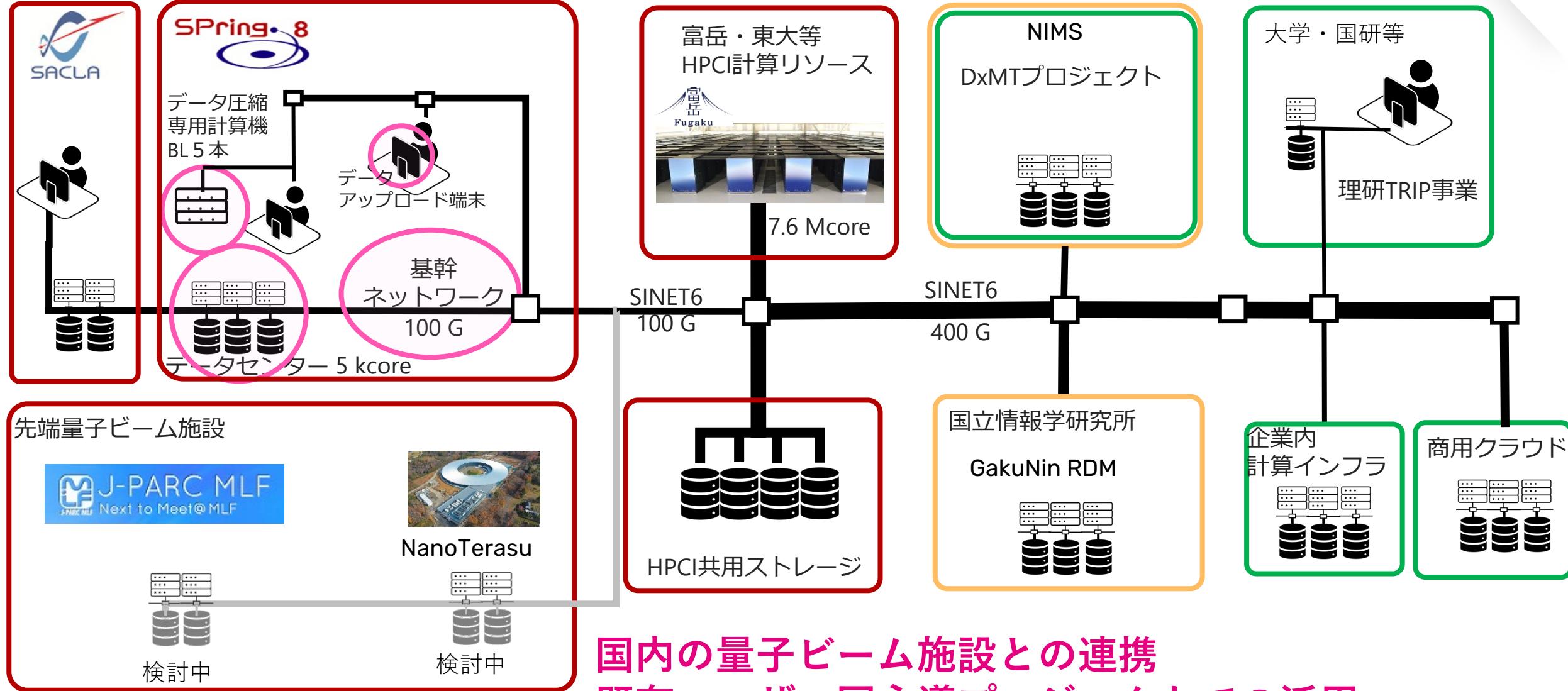
## 仕様概要

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



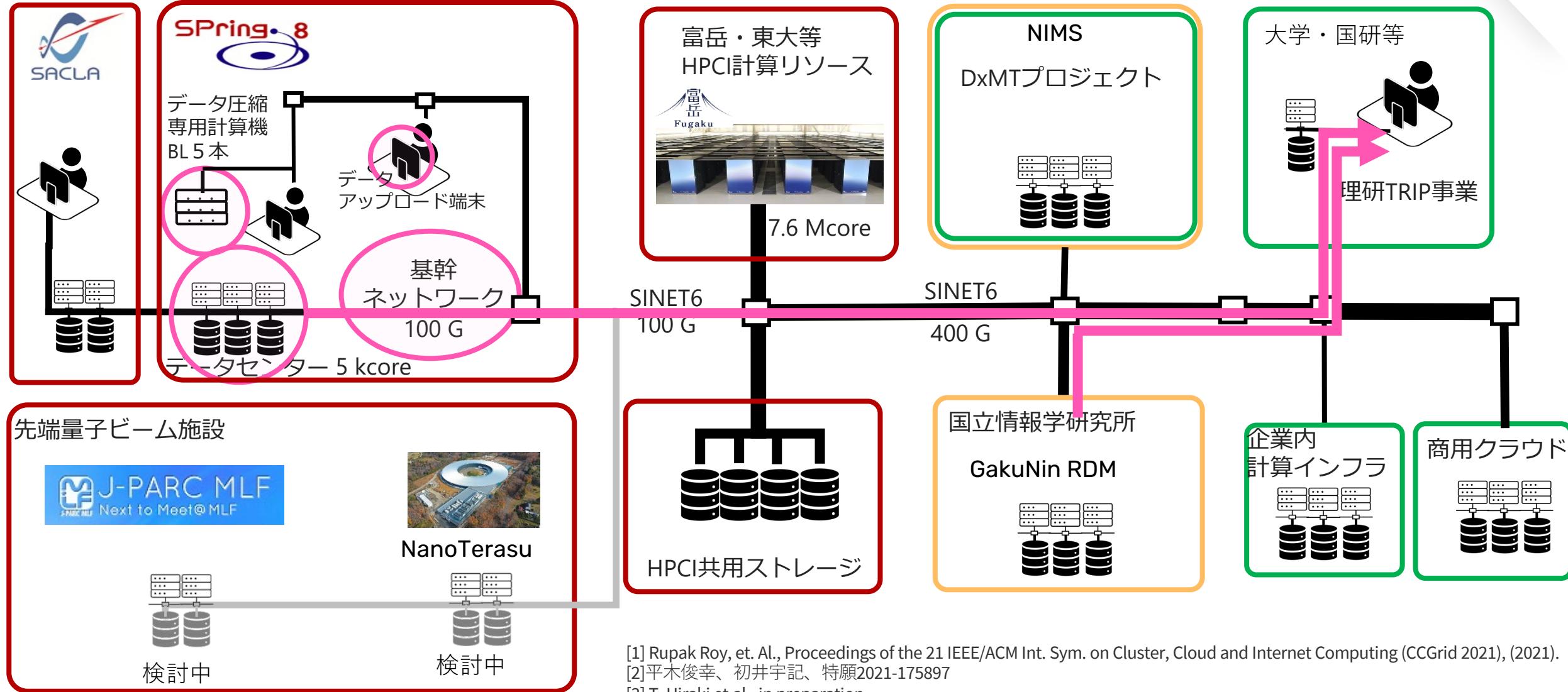
# SPring-8データセンター構想: インフラ

R3補正による新設



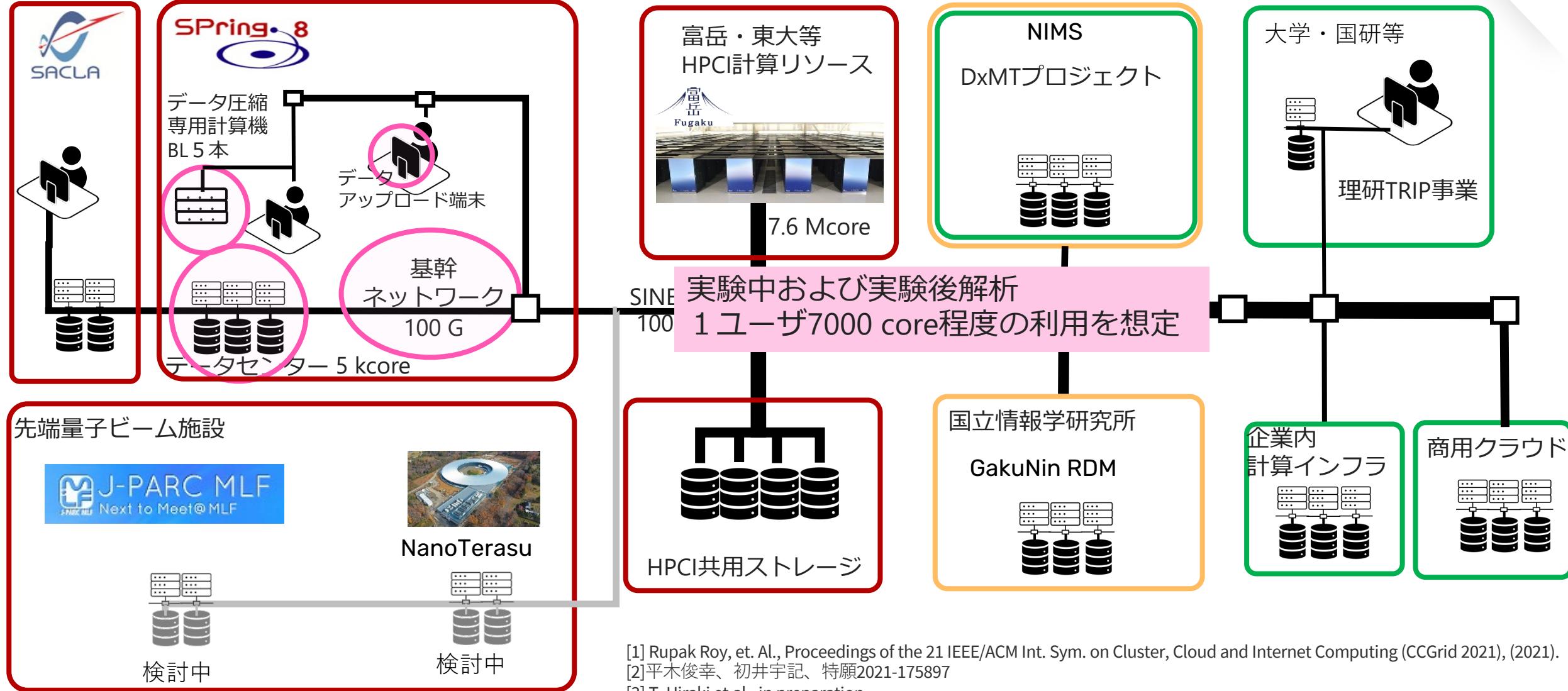
# SPring-8データセンター構想: インフラ

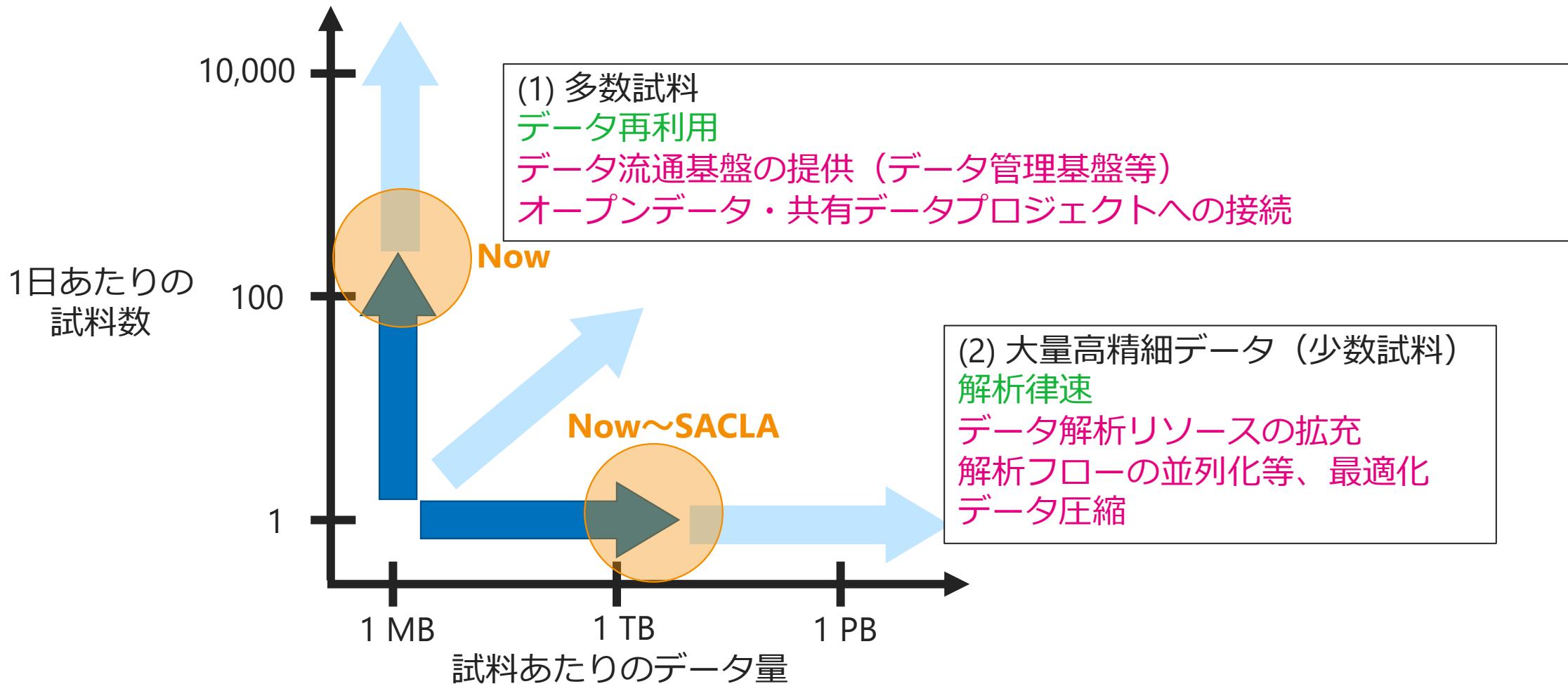
R3補正による新設



# SPring-8データセンター構想: インフラ

R3補正による新設





# (1) 多数試料 Data Flow Service (Standard)

ログイン - SPring-8 Data Flow Service

https://dc-dfs.spring8.or.jp/index.php/login

SPring-8 Data Flow Service

すべてのファイル > 2022B2222 > BL28B2 > △ ここにファイルをアップロードまたは作成する権限がありません

最新

お気に入り

1234

1 個のフォルダー

メタデータ付与  
データ共有  
今後  
データ公開・データ共有プロジェクトへの半自動登録  
webブラウザーで利用できる OpenOnDemand によって計算リソースを提供  
(jupyter, Vscodeなど)

お気に入りに追加  
詳細  
名前の変更  
移動またはコピー  
ローカルで編集  
ダウンロード



# (2) 大量高精細データ（少数試料） X線CT測定代行の例

自動的に

- データセンターに測定データが移動
- メタデータ付与
- 3次元再構成

ユーザ

- 3次元再構成データをダウンロード



j0001544	.....
<input type="button" value="ログイン →"/>	
パスワードをお忘れですか? デバイスを使ってログインする	

すべてのファイル

名前

更新日時

サイズ

- 20220000
- 2023A2957
- 2023A2356
- 2023A2355
- 2023A2354
- 2023A2342
- 2023A2339
- 2023A2316
- 2023A2310
- 2023A2308
- 2024A0000**
- 20282091
- 2028B2087
- 2028B2082
- 2028B2081
- 2028B2080
- 2028B2074

課題番号を選択

すべてのファイル

名前

更新日時

サイズ

- HEADER.ind
- 082
- 080**
- 081
- 079
- 078
- 077
- 076
- 052
- 051
- 050
- 049
- 048
- 047

**測定番号を選択**

# まとめ

## データ政策

- 日米欧に違いがあるもののデータ基盤の重要性は共通
- 一定以上のサイズのデータは動かせない → データ近傍で解析

## SPring-8のICT関係の整備概況

- ビームラインへのBL-774、新ネットワークの導入 ← データセンター連携・AI/MLの基盤

## SPring-8データセンター構想：インフラ

- ネットワークで移動できないデータ量 ← 圧縮
- 国内データ基盤との連携 ← ハイブリッドインフラ

## SPring-8データセンター構想：サービス

- (1) 多数試料向け、(2) 大量高精細データ（少数試料）それぞれにサービスを開始

# 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

# SINET6に接続している事業者

<b>北海道・東北</b> <b>北海道</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>さくらインターネット</li> <li>北海道総合通信網</li> </ul>	<b>関東</b> <b>群馬県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>富士通Japan</li> </ul> <b>埼玉県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>東日本電信電話</li> <li>フルノシステムズ</li> </ul> <b>東京都</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>アマゾンウェブサービス ジャパン</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>イデア・コンサルティング</li> <li>内田洋行</li> <li>NHNテコラス</li> <li>NTTコミュニケーションズ</li> <li>グーグル・クラウド・ジャパン</li> <li>さくらインターネット</li> <li>GMOインターネットグループ</li> <li>東北緑化環境保全</li> <li>日本アイ・ビー・エム</li> <li>日本オラクル</li> <li>日本事務器</li> <li>日本マイクロソフト</li> <li>ネットワンシステムズ</li> <li>富士通クラウドテクノロジーズ</li> </ul>
<b>中部</b> <b>富山県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>北電情報システムサービス</li> </ul> <b>福井県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>三谷商事</li> </ul> <b>岐阜県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>ミライコミュニケーション ネットワーク</li> </ul> <b>愛知県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>西日本電信電話</li> </ul>	<b>近畿</b> <b>京都府</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>西日本電信電話</li> </ul> <b>大阪府</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>アマゾンウェブサービス ジャパン</li> <li>インターネットイニシアティブ</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>NTTスマートコネクト</li> <li>オプテージ</li> <li>グーグル・クラウド・ジャパン</li> <li>西日本電信電話</li> <li>日本アイ・ビー・エム</li> <li>日本オラクル</li> <li>三谷商事</li> </ul>
<b>九州・沖縄</b> <b>福岡県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>NTTスマートコネクト</li> <li>NTTデータ九州</li> </ul> <b>佐賀県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>佐賀IDC</li> </ul> <b>沖縄県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>GLBBジャパン(調整中)</li> </ul>		<b>中国・四国</b> <b>鳥取県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>鳥取県情報センター</li> <li>西日本電信電話</li> </ul> <b>広島県</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>株式会社エネルギア・コミュニケーションズ</li> </ul>

提供中 32社 (42拠点)  
調整中 1社

# 国内のデータ関連インフラ

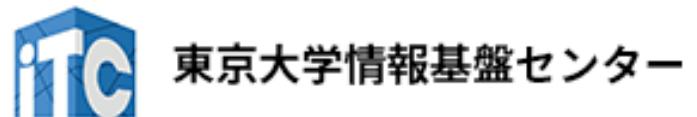
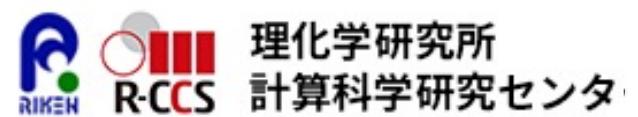
国立情報学研究所 : SINET6 400 Gbpsバックボーン



国立情報学研究所 : データ管理基盤



HPCI共用ストレージ



HPCIに参画しているスーパーコンピュータ



パブリッククラウド

国内インフラとの連携  
施設内インフラは必須機能のみを整備

# SPring-8データセンター構想：インフラ

## Edge Computing

FPGA演算加速

## On-Site

データセンター

10 PB storage

5 kcore CPUs

## Off-site Computing

Fugaku (7.6 Mcore)

HPCI  
supercomputers

Public Cloud  
(Amazon etc.)

(1) 多数試料  
データ再利用  
データ流通基盤の提供（データ管理基盤等）



[1] Freitas A., Curry E. (2016) Big Data Curation. In: Cavanillas J., Curry E., Wahlster W. (eds) New Horizons for a Data-Driven Economy. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-21569-3\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-319-21569-3_6)  
 [2] digital object identifier

### SPring-8の場合

- メタデータを付与したデータの格納（3年）
- 認証・認可基盤によりアクセス権限を課題責任者が設定・変更可能
- 標準試料データを用いたデータ校正
- Data Quality  
• Trust/Provenance  
• Annotation  
• Data Validation  
• ...
- データの格納  
• データアクセスの提供  
• DOI[2]の付与
- データの活用のための機能提供



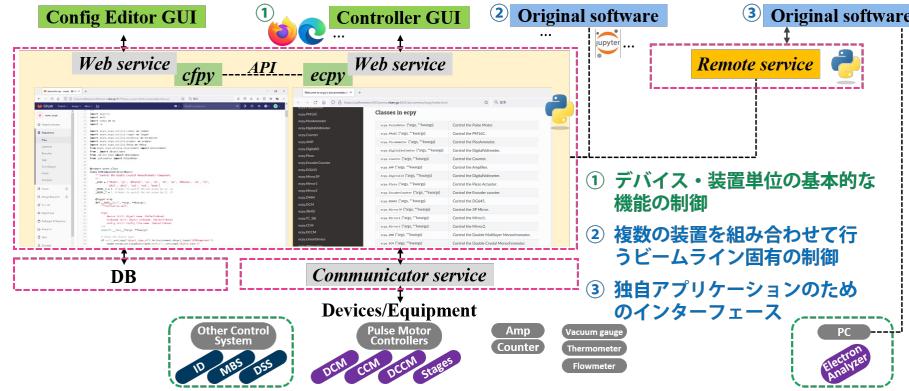
- SPring-8データセンター構想**
- 解析律速の解消  
SPring-8内データセンターおよび富岳等HPCIスパコンによる計算リソース
  - データ共有の簡便化

- 国・ユーザーコミュニティが実施するプロジェクト
- 蛋白質構造データバンク(PDB, 代表 栗栖源嗣教授)
  - マテリアル先端リサーチインフラ(ARIM)
  - データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT)
  - トランスフォーマティブリサーチイノベーションプラットフォーム (TRIP)

# ビームライン実験のICT環境の最適化

## BL-774（ビームライン制御・データ収集・オンライン解析プラットフォーム）の導入

「BL-774」の基幹システム「774BasicSystem」の概念図

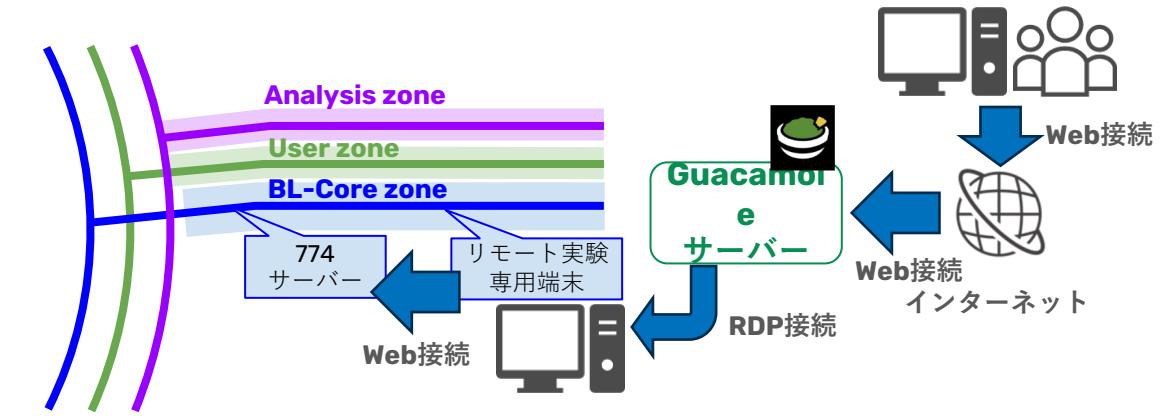


「BL-774」はこれからビームライン実験を推進するさまざまな機能を提供する。基幹的なソフトウェア・システム「774BasicSystem」が提供するPythonベースのコーディング環境とWebベースの各種サービスは、ビームライン実験のためのソフトウェア開発のモダン化を実現する。

Nakajima, K. Motomura, T. N. Hiraki, K. Nakada, T. Sugimoto, K. Watanabe, T. Osaka, H. Yamazaki, H. Ohashi, Y. Joti, T. Hatsui and M. Yabashi, "Design and implementation of an instrument control platform for future beamline experiments at SPring-8", 2022 J. Phys.: Conf. Ser. 2380 012101.

## ビームラインへの新しいイントラネットの導入

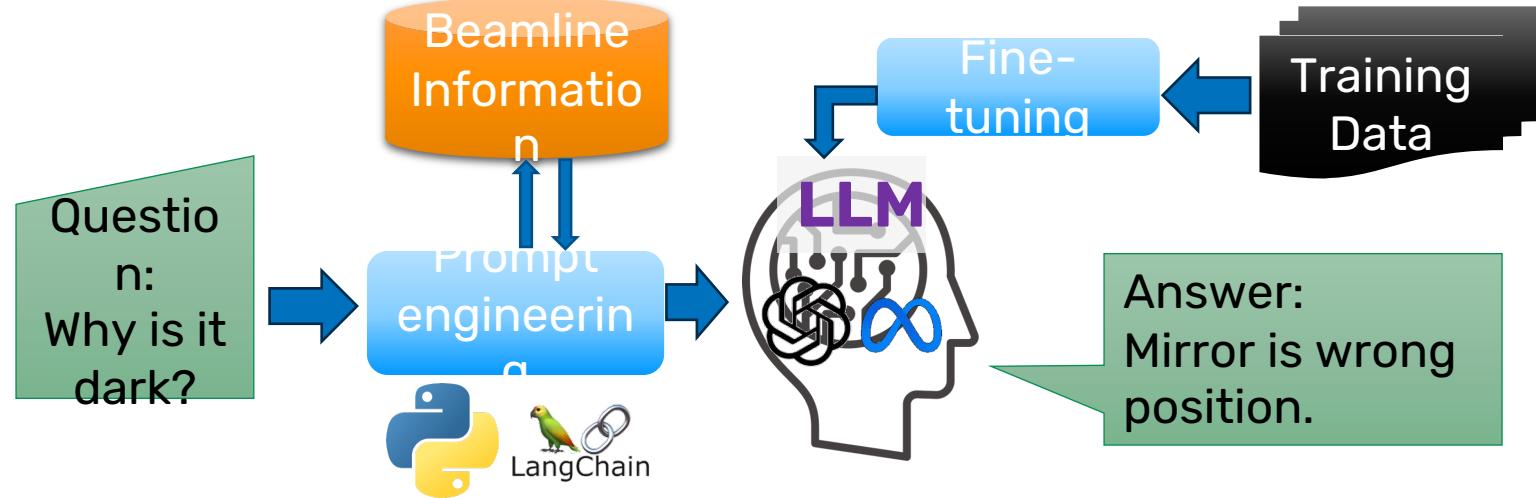
ビームラインの新しいネットワークと「BL-774」のリモート制御の概念図



SPring-8のビームラインに導入を進めている新しいイントラネットはネットワークに係わるさまざまな課題を改善する。用途別に提供される3つのネットワークを選択的に利用することにより、インターネット環境からのリモート制御、実験の進行状況の所内外からのモニター、ビームラインからSPring-8データセンターへのデータ転送などの機能が標準で可能になる。

# ビームライン実験のICT環境の最適化

ビームライン実験をサポートする目的特化型LLM



大規模言語モデル(LLM)を特定の目的に特化させ、専門性の高い質問に対し回答の精度を高める試みが現在盛んに研究されている。ビームラインでの実験においても、高品質な情報をチャット形式で入手可能になれば、実験の効率化に非常に有用である。LLMを特定の知識領域に対し性能を高める代表的な手法として、prompt engineering, fine-tuning等が用いられているが、入力する学習データをSPring-8の情報に特化することで、ビームラインの情報、実験コードの例などを生成する自然言語インターフェイスの実装を目指す。

# Question & Answer



Q: 光がハッチまで通っていない？

A: 実験ハッチまで光が通らない原因はいくつか考えられます。以下を確認しました。

1. Ring Currentは問題ありません。現在の値は\*\*mAです。
2. UndulatorのGapは問題ありません。現在\*\*mmで通常\*\*W程度の光強度が期待されます。
3. 光を遮る可能性のある機器はすべて抜かれている状態です。ただし手動で操作するデバイスがある場合、個々に確認してください。
4. Mirror 2aが通常の値から大きく外れています。現在\*\*です。この値は通常\*\*から\*\*の間です。5分前は\*\*でした。調整する場合`http://bl774-main01/Mirror2a_ctrl`へアクセスして操作してください。過去の動作記録を参照する場合は`http://daq***/**`へアクセスしてください。