

SPRUC 第5回 BLsアップグレード検討ワークショップ
SPRUC 5th BLs Upgrade Review Workshop

2023.3.10 Fri 9:00-17:00

14:10 14:30 SPring-8 データセンター構想 理研/JASRI 初井宇記
SPring-8 Data Center Concept, RIKEN/JASRI, Takaki Hatsui

アウトライン

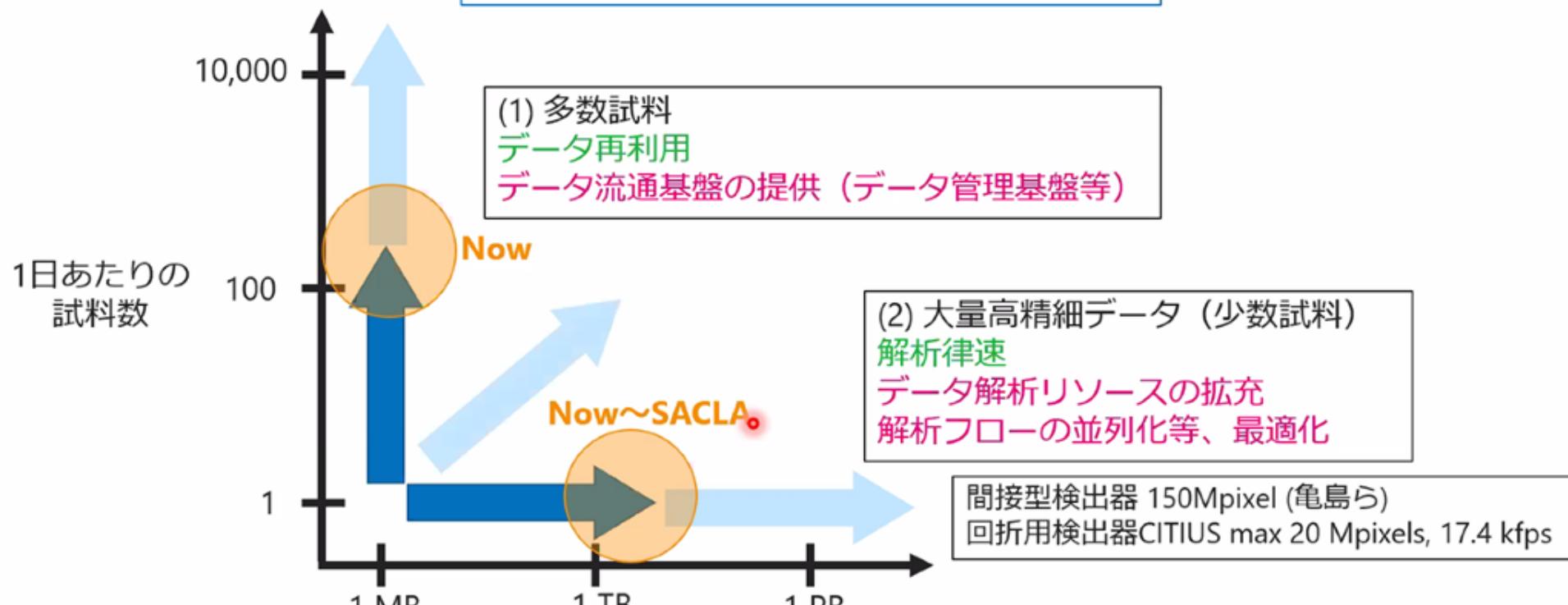
- 類型化と課題、施設側検討中の機能
 - (1) 多数試料
 - (2) 大量高精細データ (少数試料) ←本日のご報告
- まとめ



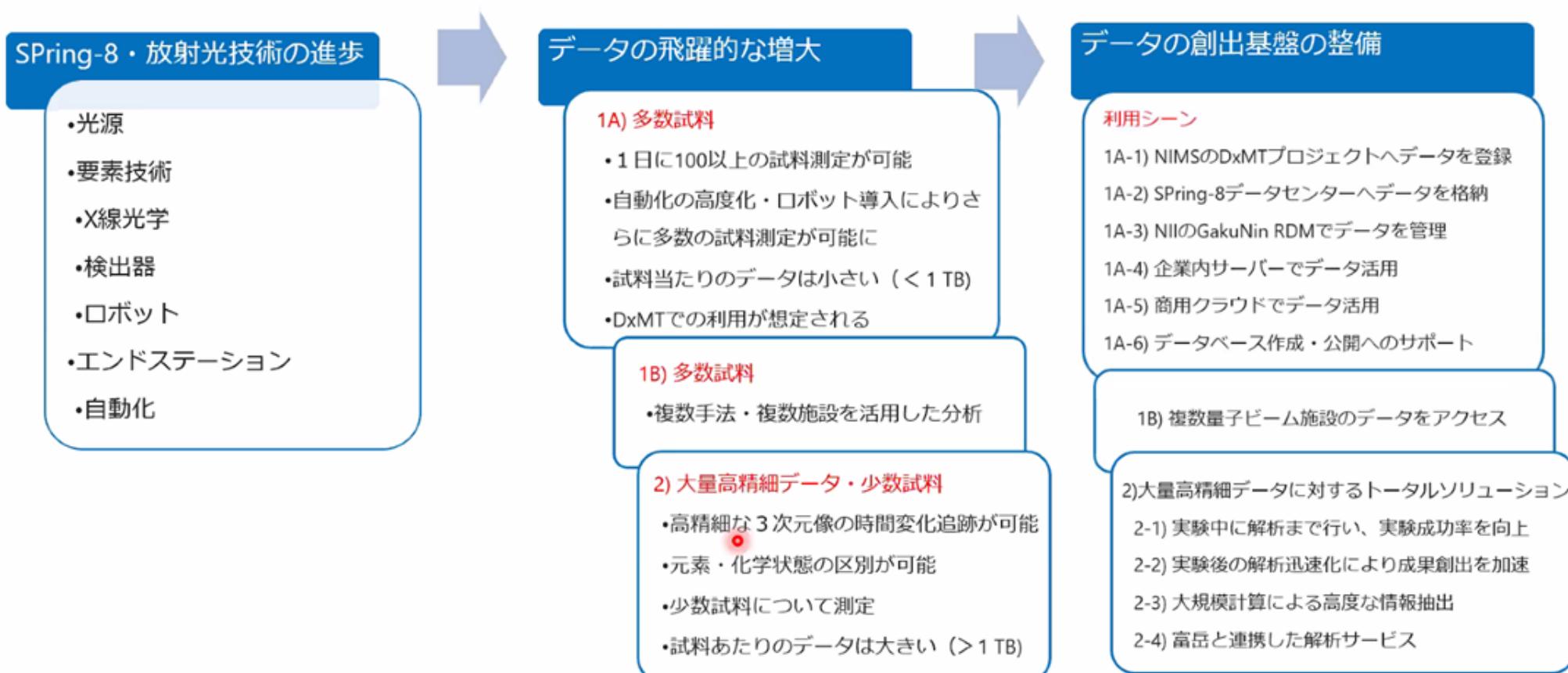
データ増大に関する類型化と課題、検討中の機能

SPring-8・放射光技術の進歩

- 光源
- 要素技術 (X線光学、検出器、ロボット...)
- エンドステーションの自動化...



SPring-8データセンター構想の動機・現状および検討中のサービス



2) 大量高精細データに対する トータルソリューション

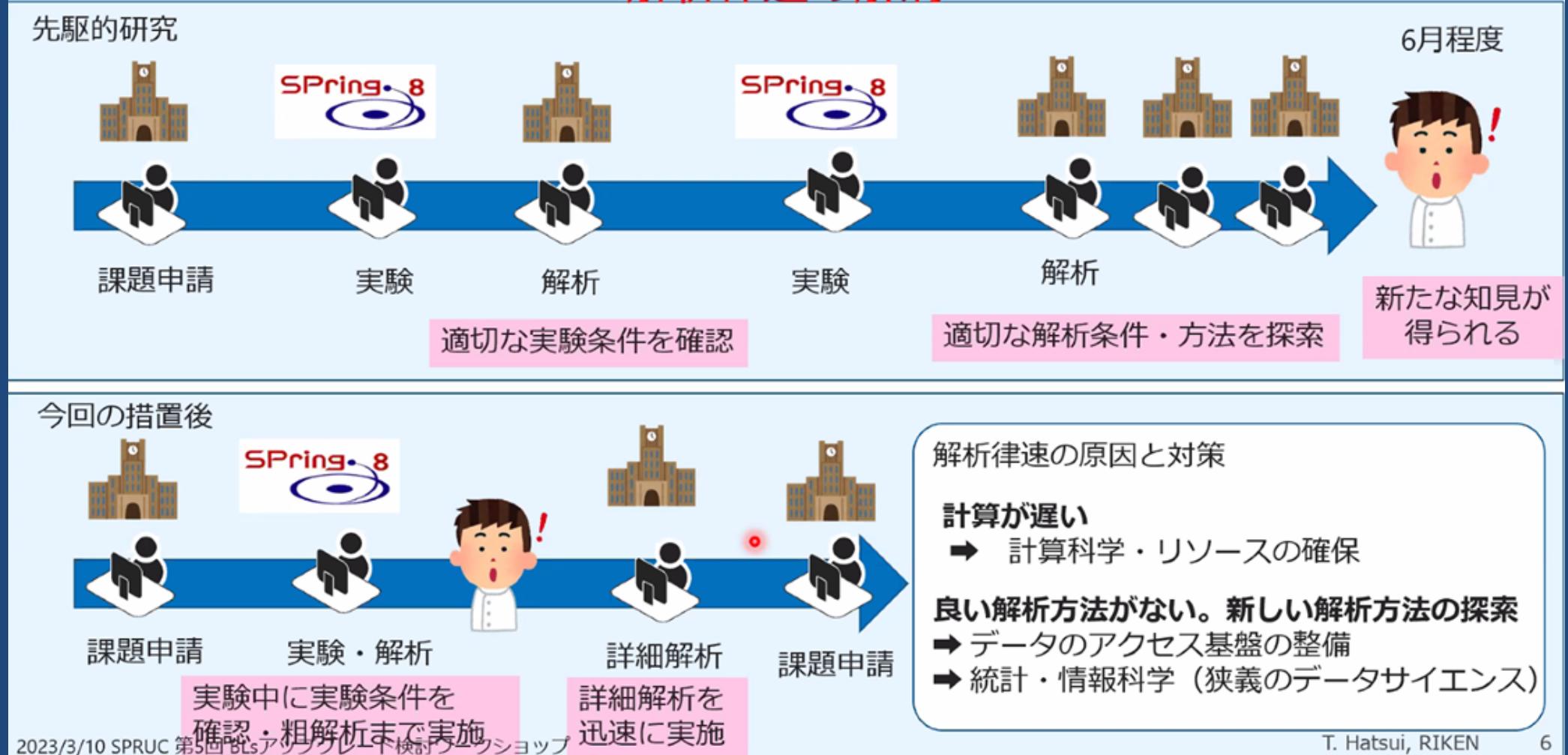
第1回データワークショップ「SPring-8データセンター構想によるデータ解析力の強化」

開催日時: 2021年12月13日(月) 14:30～17:00

開催形式: Zoomによるオンライン開催

<https://dncom.spring8.or.jp/workshop/data-workshop/index.html>

2) 大量高精細データ 解析律速の解消



大規模並列計算による解析フローの短縮

先駆的研究



今回の措置後



先行研究の蓄積をもとに候補となる解析条件をいっぺんに探索

- 並列計算基盤KMRを活用(SACLAデータセンターで利用実績あり)
- スパコン「京」時代に開発された技術。簡単に大規模並列化可能。

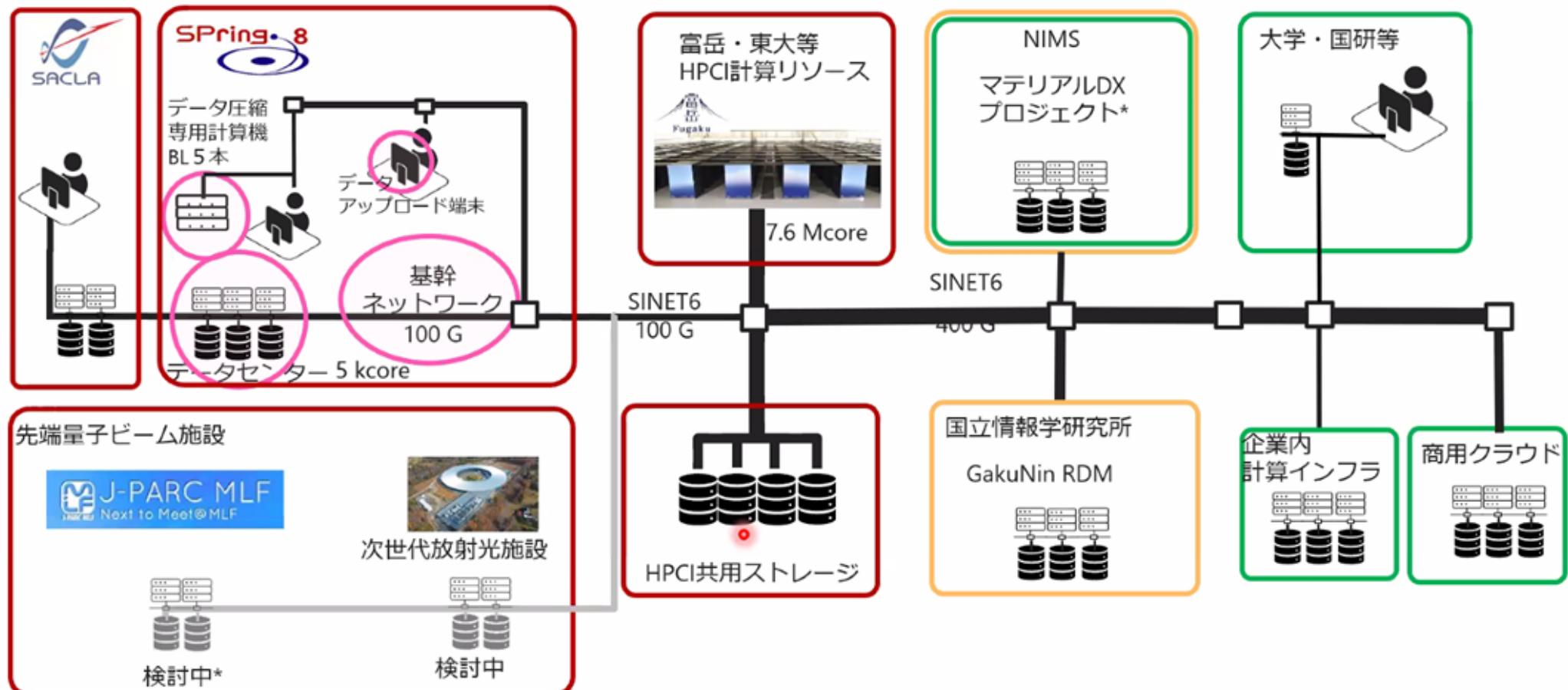
非専門家にも利用できる解析フローへ
GUIを整備し、非専門家への敷居を下げる
データ共有

情報科学研究者とのデータ共有を促進、共同研究
を支援

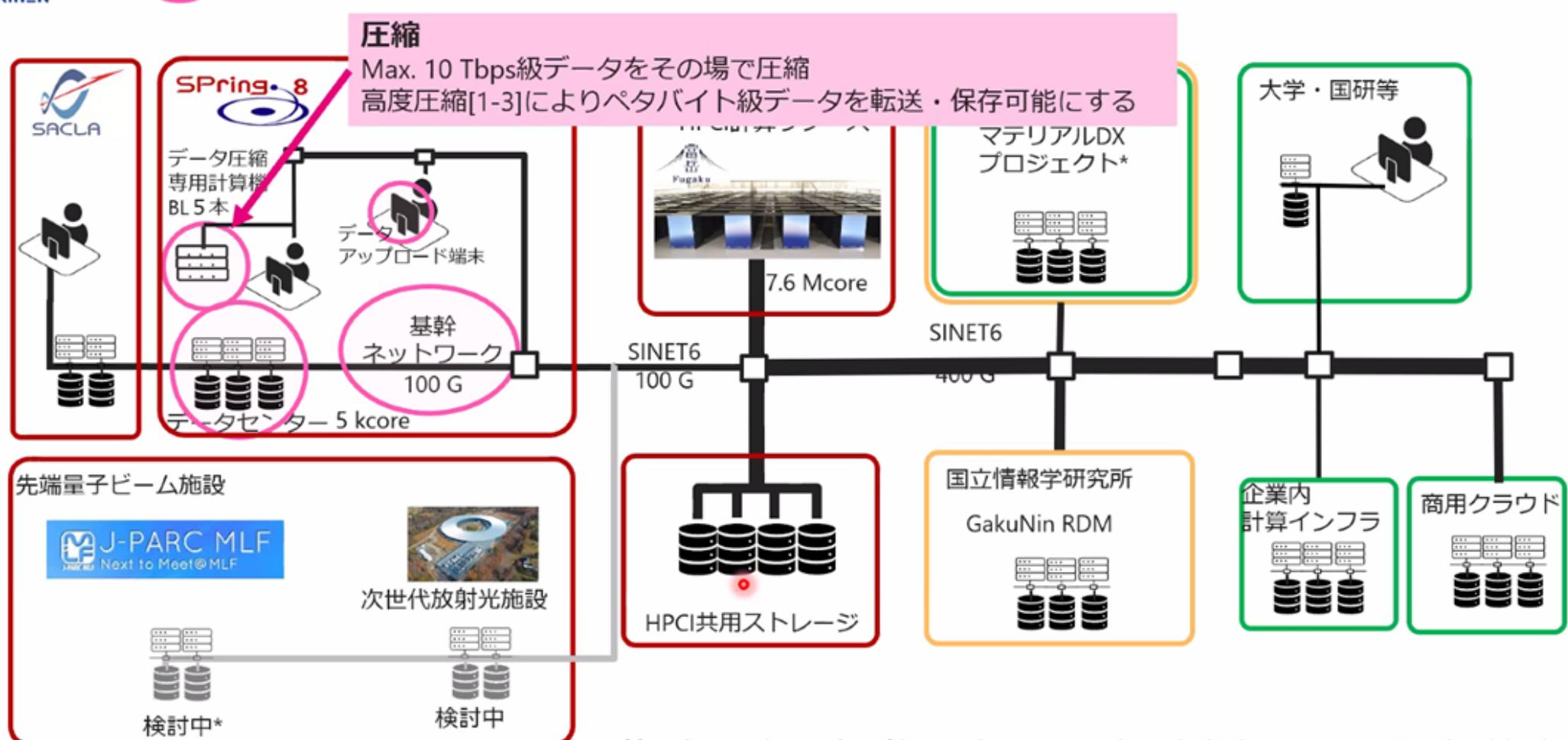
| Run ID | Status | Total | Processed | Accepted | Rate | Elapsed | Comments |
|------------------------|--------|-------|-----------|----------|------|----------|----------|
| 344800-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344801-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344802-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344803-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344804-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344805-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344806-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344807-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344808-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344809-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344810-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344811-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344812-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344813-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344814-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344815-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344816-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344817-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344818-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344819-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344820-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344821-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344822-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344823-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344824-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344825-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344826-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344827-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344828-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344829-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344830-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344831-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344832-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344833-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344834-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344835-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344836-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344837-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344838-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344839-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344840-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344841-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344842-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344843-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344844-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344845-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344846-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344847-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344848-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344849-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344850-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344851-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344852-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344853-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344854-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344855-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344856-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344857-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344858-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344859-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344860-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344861-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344862-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344863-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344864-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344865-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344866-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344867-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344868-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344869-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344870-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344871-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344872-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344873-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344874-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344875-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344876-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344877-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344878-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344879-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344880-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344881-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344882-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344883-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344884-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344885-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344886-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344887-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344888-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344889-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344890-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344891-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344892-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344893-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344894-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344895-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344896-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344897-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344898-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344899-dark Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |
| 344900-light Processed | Done | 2048 | 2048 | 2048 | 0.00 | 0.15 sec | |

SACLAのバイオ系ユーザが利用しているGUIの例。非スパコンユーザでも100万枚規模の画像解析が可能

SPring-8データセンター構想: インフラ

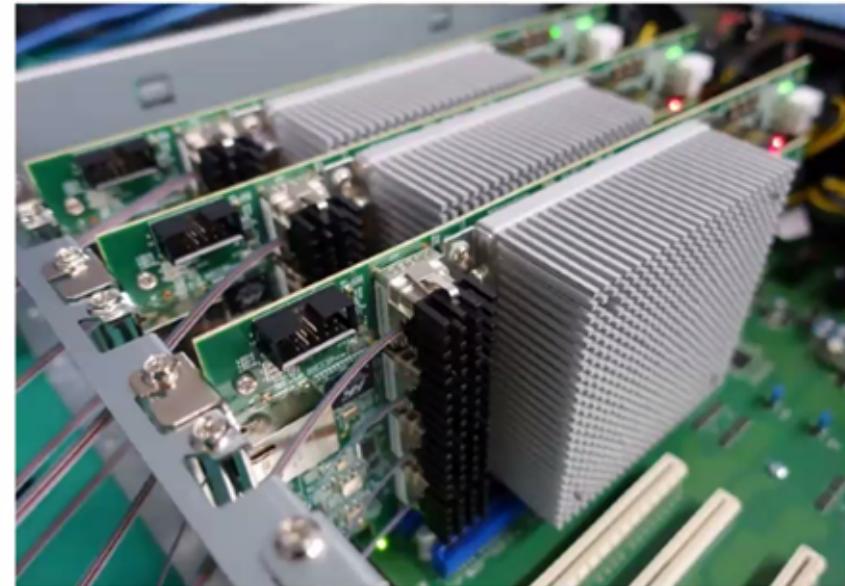


SPring-8データセンター構想: インフラ



Edge Computingによる圧縮：R&Dの進捗

- CT画像に対する圧縮：R-CCSとの共同研究
 - 検討中のアルゴリズム
 - AIを利用した圧縮[1]
 - 再構成アルゴリズムを利用した圧縮
 - 検出器の例
 - 151 Mpixel CMOS
 - max. ~100 TB/day
 - 10倍程度の実効圧縮率を目指す
- 回折実験向けデータ圧縮
 - Scientifically lossless compression[2,3]
 - 実績@BL35XU[4]
 - CITIUS検出器からのデータ生成レート
 - 8.7 kHz, 840 kpixel
 - 2.6 PB/day
 - 圧縮率：最大7000
 - 6日の実験で圧縮後のデータ33 TBを取得
 - 今後：他の実験への適用を継続して検討

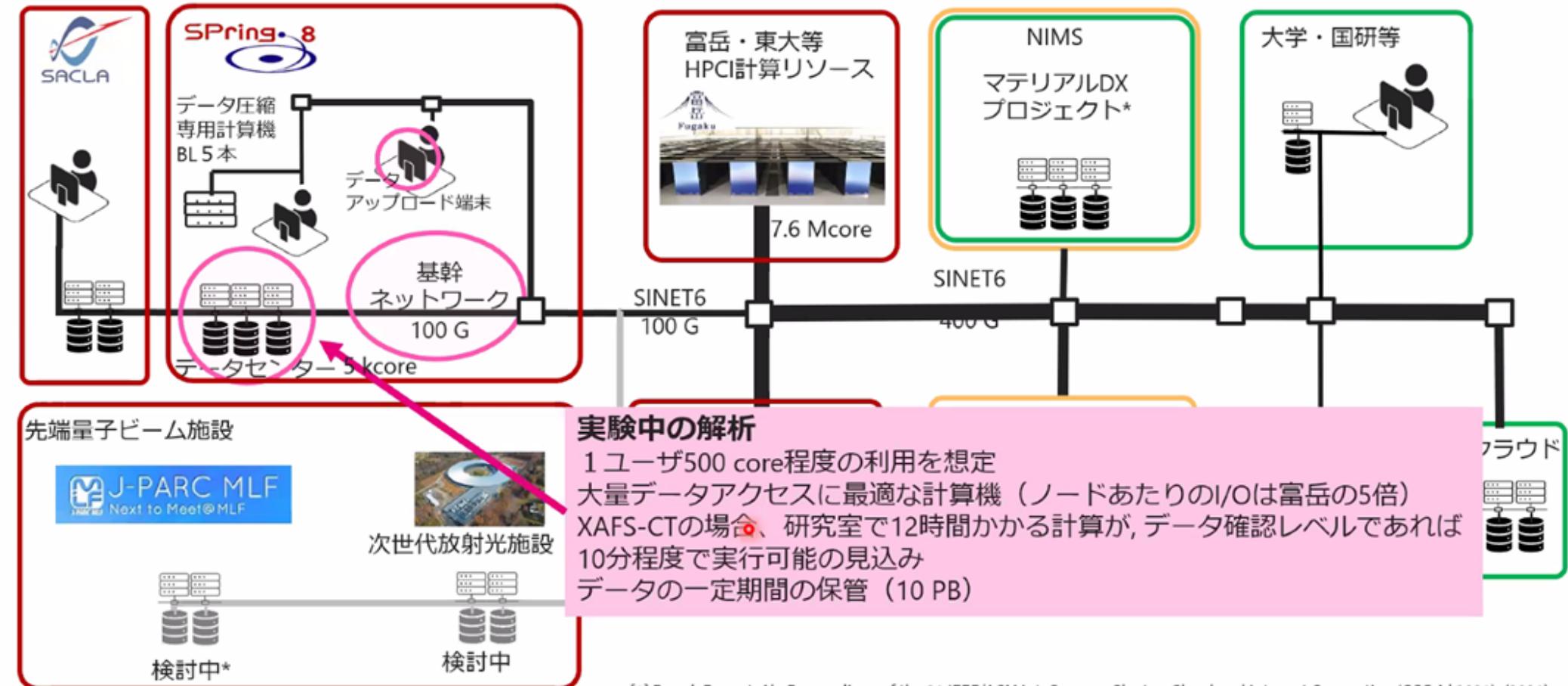


CITIUSのデータ圧縮に用いられたFPGA演算加速基板



- [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
- [4] 西野玄記(JASRI/RIKEN), et.al., 斎藤真器名(東北大大学) et.al., SACLA/SPring-8 基盤開発プログラム2023

SPring-8データセンター構想: インフラ



SPring-8データセンター（オンサイト）

城地保昌、中町将貴、平木俊幸、杉本崇、渡邊一輝他
荒川正士、グローリーシステムクリエイト

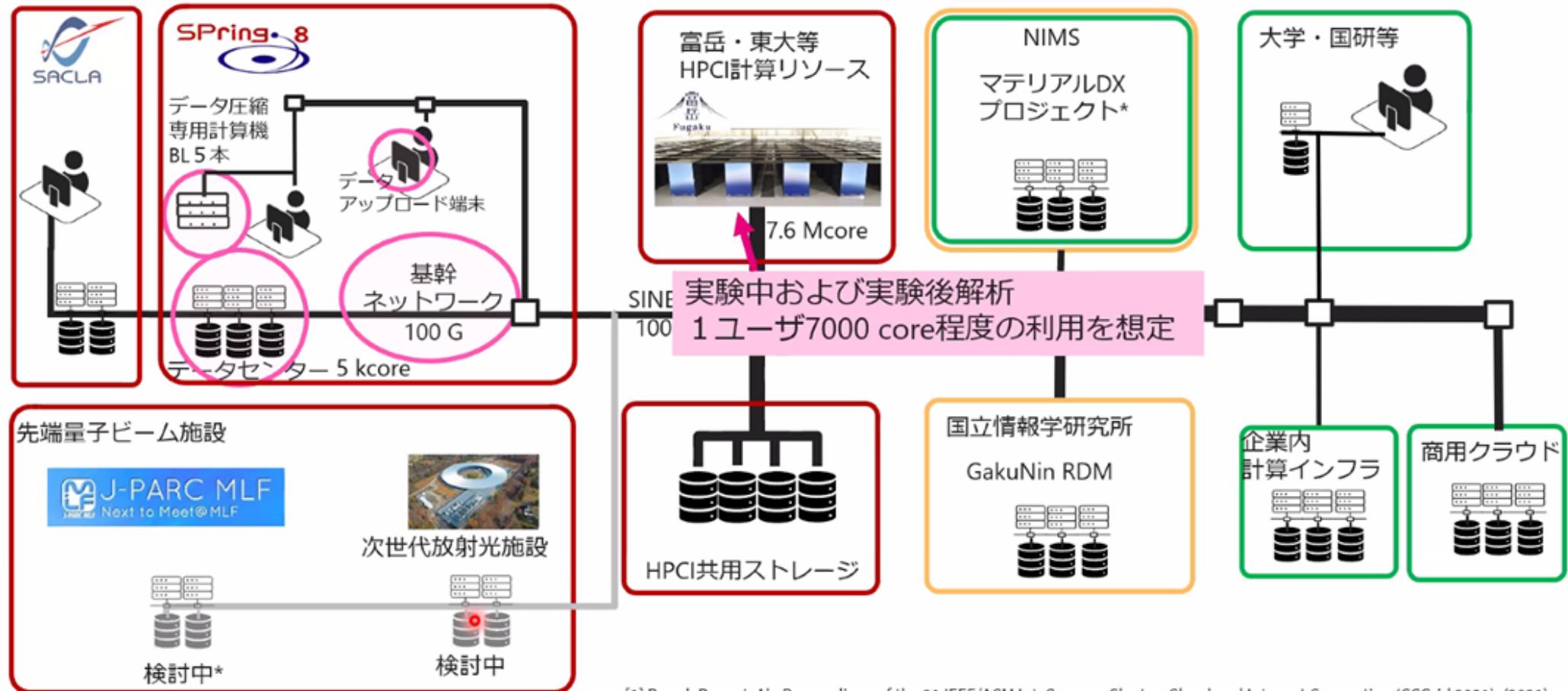


- 100 GでSINET6に接続(3月末)
 - 富岳、HPCIスパコン、public cloudに広帯域で接続可能
 - 富岳、広帯域転送を希望されるユーザと共同でデータ転送のテストを進めている。
- 仕様概要
 - 特徴
 - I/Oに最適化された構成
 - 総スループットが読み書きとも > 100GB/s
 - 計算ノード
 - CPUノード(64ノード) 4k CPU cores
 - GPUノード(16ノード) 1k CPU cores, 111k CUDA cores
 - ストレージ
 - ユーザー向け10 PB



100GbpsでSINET6に接続予定のスイッチ

SPring-8データセンター構想: インフラ



2023年度実験用HPCシステムアップグレード検討ワークショップ

[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

1A-3) NIIのGakuNin RDMでデータを管理

NII上に構築されているGakuNin RDM
orプロジェクトのデータ管理基盤

The screenshot shows the GakuNin RDM dashboard with a title bar "GakuNin RDM". Below it is a "ダッシュボード" section with a search bar "プロジェクトを検索" and a message "あなたのプロジェクトを登録、検索するには、マイプロジェクトを開きます" (Open your project to register and search). A table lists two projects: "project1" and "project2", each with a title, member, date, and project manager. A red arrow points from this table to a callout box.

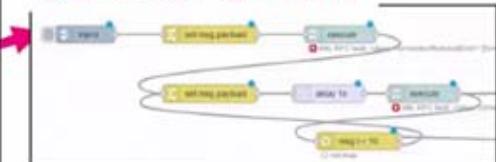
所属機関サーバ
プロジェクトサーバ
商用クラウド

研究テーマごとのページ

The screenshot shows a "研究テーマごとのページ" (Research theme-specific page) for "project1". It includes a "OPEN project1" button, a "FILE" section with a "FILE LIST" table, and a "WORKFLOW" section with a "WORKFLOW" tab. A red arrow points from the "FILE LIST" table to a callout box.

SPring-8データセンター or
HPCI共用ストレージ上 (新規)
実験中の解析を最先端のアルゴリズムで
実施できる (ユーザのブラウザ上)

フローベース：一般ユーザー向け



コマンドベース：専門家向け



SPring-8データセンター or HPCI共用ストレージ上 (新規)
データの実体はSPring-8が管理するサーバにあるが
ユーザからは手元にあるように見える

| SPring-8 SP8drive:BL37XUdata | |
|------------------------------|---------------------|
| data1.dat | 2021-05-10 07:43 PM |
| data2.dat | 2021-05-10 07:43 PM |
| data3.dat | 2021-05-10 07:43 PM |
| data4.dat | 2021-05-10 07:43 PM |

研究室の他の装置のデータと一括管理が可能

SPring-8のデータは実体はSPring-8にあるが参照先が分かる。

解析もここからアクセス可能とする予定

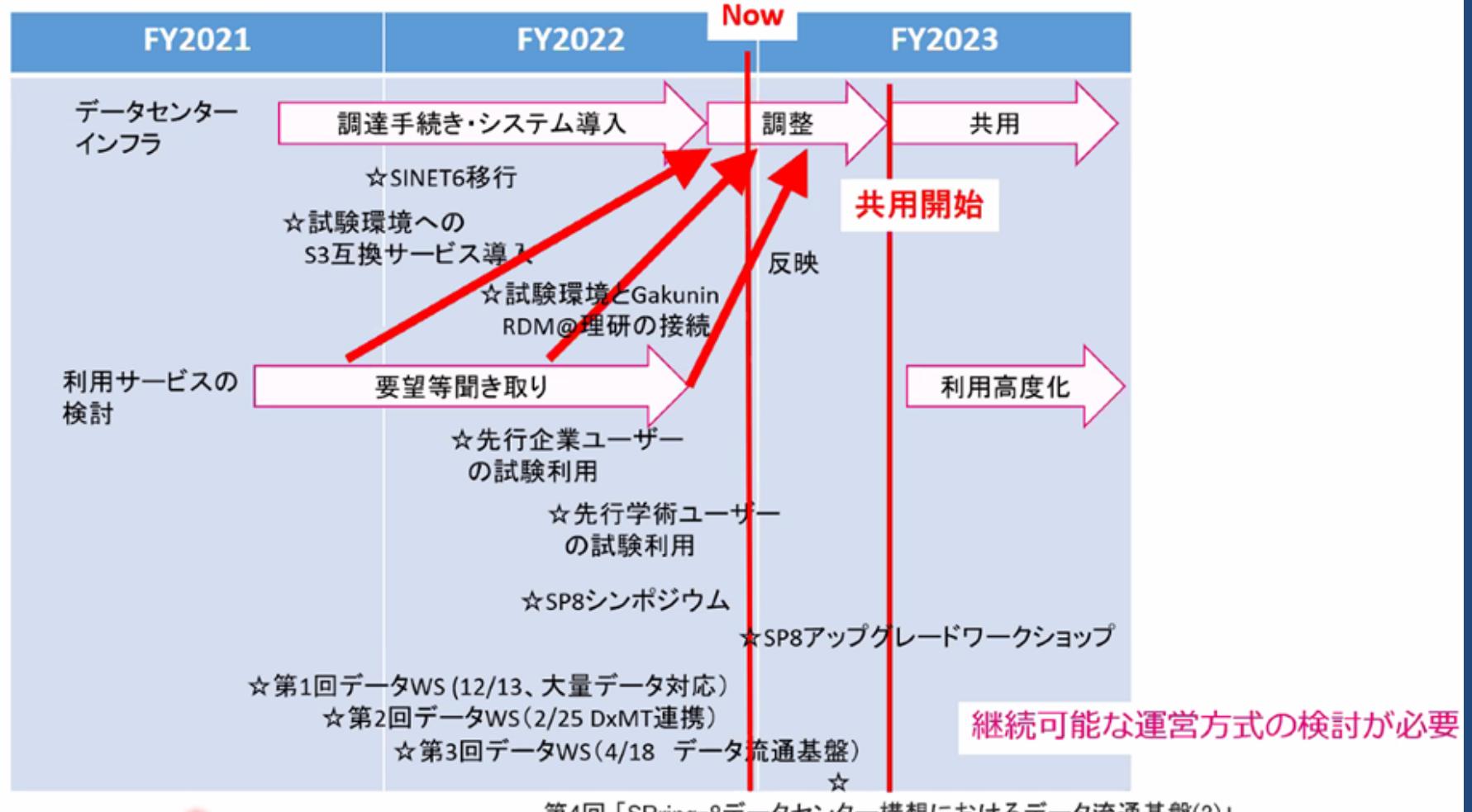
GakuNin RDMが想定している利用形態と異なる仕様があることから
NIIがSPring-8等大型共用施設のためのR&Dを行っている。

データワークショップの開催

- 第1回 「SPring-8データセンター構想によるデータ解析力の強化」
 - 開催日時: 2021年12月13日(月) 14:30~17:00
 - 開催形式: オンライン開催
- 第2回 「SPring-8データセンター構想とDxMTプロジェクトとの連携」
 - 開催日時: 2022年2月25日(金) 13:00-17:00
 - 開催形式: オンライン開催
- 第3回 「SPring-8データセンター構想におけるデータ流通基盤」
 - 開催日時: 2022年4月18日(月) 13:00-16:40
 - 開催形式: オンライン開催
- 第4回 「SPring-8データセンター構想におけるデータ流通基盤(2)」
 - 利用方法、メタデータの付与方法など技術的な内容を予定
 - 開催日時: 2023年5月末頃
 - 開催形式: オンライン開催



スケジュール



まとめ

- 類型化と課題、施設側で検討中の機能
 - (2) 大量高精細データ（少数試料）
 - オンサイトのデータセンター（新設）と富岳等スパコン
 - 使いやすいツール
 - (1) 多数試料
 - 国が進めている研究DXと歩調を合わせて整備
 - 国立情報学研究所NIIのGakuNinRDMとの接続
 - 物質・材料研究機構NIMSのDxMT拠点との連携
 - 量子ビーム施設間の連携
 - 共通
 - 情報科学研究者との共同研究の促進と成果の共有
 - ← データの流通基盤
 - 企業ユーザのニーズへの対応
 - ← データの流通基盤、データ前処理
 - スケジュール
 - 2023年夏から共用を段階的に開始
- お願い：是非ご意見をお寄せください。
 - データセンターへのご要望
 - 試験利用への参加をいただける方

- ご連絡先
dnccs@spring8.or.jp
- データ・ネットワーク関連の情報
<https://dncom.spring8.or.jp/>
- データワークショップ
<https://dncom.spring8.or.jp/workshop/data-workshop/>

SPRUC 第5回 BLsアップグレード検討ワークショップ
SPRUC 5th BLs Upgrade Review Workshop

2023.3.10 Fri 9:00-17:00

14:40 14:50 自動化関連のトピックス提供 JASRI 坂田修身
Automation-related topics, JASRI, Osami Sakata

自動装置

自動試料準備装置

- ・粉末自動装填装置
- ・XAFS試料自動調整装置

現在、試行運用中。

オペレーションなど、今後要検討。

自動測定装置

- ・BL28B2 X線マイクロCT自動測定装置
測定代行開始
- ・液体試料チェンジャー@BL40B2
測定代行検討中

BL28B2 X線マイクロCT自動測定装置

- 自動測定の「手軽さ」により、潜在的需要を発掘
- 効率向上、省力化、利用の活性化を実現
- 高エネルギーマイクロCT実験がより簡便に。
 - ✓ 24時間連続自動測定
 - ✓ 3D画像再構成までのデータ処理も自動化
- 測定代行（1時間単位）も受付: <https://user.spring8.or.jp/?p=42152>

自動CT測定システム

X線画像検出器

