

利用系グループ活動報告

XFEL 利用研究推進室 先端計測・解析技術グループ

公益財団法人高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室
 国立研究開発法人理化学研究所 放射光科学研究センター
 城地 保昌、初井 宇記

1. はじめに

XFEL 利用研究推進室・先端計測・解析技術グループでは SACLA のために、検出器およびデータ取得・解析基盤の開発・運用を理化学研究所（理研）とともにに行っている。データ取得・解析基盤は、SACLA でのハイパフォーマンスコンピュータ（HPC）を多用する実験を可能としている。これらの実験では、HPC などの計算技術に不慣れなユーザーでもソフトウェアを短時間で作成できることが望ましいが、このニーズに対応した技術基盤である API（Application Programming Interface）も提供を行っている。直近ではコロナ禍対応のためのリモート実験環境も準備を進めている。本稿では、データ取得・解析基盤を支えている各種技術・システムの現状について概説する。

2. SACLA のデータ取得・解析基盤の開発・運用

SASE 型の XFEL は、ショット毎にその特性が変わるため、最大 60 Hz の周期で発振するすべてのパルスの特性を後から参照できるように記録しておく必要がある。また、大強度の XFEL パルスが照射されると試料は 1 ショットで損傷してしまうため、多くの場合、ショット毎に試料を交換して実験が行われる。したがって、XFEL パルスの特性と実験データとの相関をとるために、XFEL パルス毎に同期して実験計測を行う必要がある。SACLA では、ビームラインの光診断で取得されたパルスの特性と、試料を介して検出されるデータをすべて網羅的に取得・保存する。実験ユーザーは、試料に X 線パルスが意図した通りに照射できていたかどうかを確認するため簡易の迅速解析によりデータを可視化するなどして、所望の実験を遂行する。その後、計算時間を要する詳細解析を行う。実験データの最大スループットは、我々が開発した

MPCCD センサー^[1]12 個分にあたる 6 Gbps を想定している。以上のような要件を満たすため、我々は、SACLA のデータ取得・解析システム^[2-4]を開発・運用している。図 1 はその模式図である。

データ転送性能およびセキュリティを担保するためファイアウォールで保護された 3 つの LAN (DAQ-LAN、DAQ-USER-LAN、HPC-LAN) から構成される。DAQ-LAN と DAQ-USER-LAN は、ビームラインごと (BL1、BL2、BL3) にそれぞれ独立に整備されている。大まかにいえば、DAQ-LAN には高速に検出器の生画像データが流れ、DAQ-USER-LAN には実験条件設定やオンライン解析を行うための機器が接続され、HPC-LAN にはオフラインの迅速解析と詳細解析、お

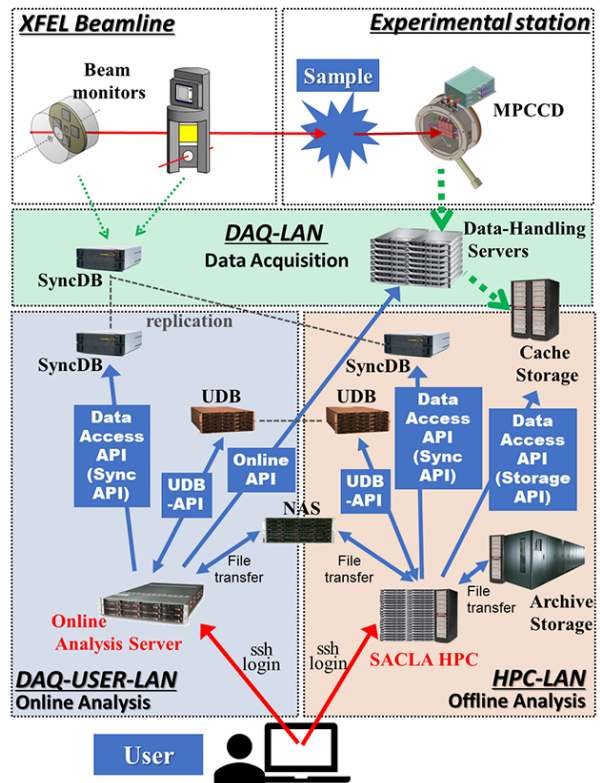


図 1 SACLA のデータ取得・解析システム

よび、その結果の保存のために高速の計算機システムと大容量のストレージがある。MPCCD センサーで取得した生画像データは、データハンドリングサーバーでバッファされ、高速書込みが可能なキャッシュストレージに確実に保存される。データハンドリングサーバーは DAQ-USER-LAN にも接続されており、バッファされている保存前のデータは、オンライン解析サーバーで読み出してリアルタイムに簡易解析することが可能である。その結果は、ユーザーが読み書きできるユーザーデータベース (UDB) に記録できる。光診断などの各種機器で測定された 0 次元データは、DAQ-LAN に接続された同期収集データベース (SyncDB) に記録される。SyncDB データは HPC-LAN に接続された SyncDB に複製され、キャッシュストレージは HPC-LAN にも接続されているので、SyncDB データや生画像データは、約 40 Tflops の計算性能をもつ HPC の各計算ノードで読み出して解析できる。HPC にはデータ処理のための短期保存領域として 2 PB のディスクストレージがある。中長期データ保存にはディスクシステム (1 PB) とテープシステム (10 PB) からなる階層ストレージ (アーカイブストレージ) を整備しており、生画像データ、SyncDB データ、ユーザー処理データのバックアップに用いられている。アーカイブストレージでは、データ書き込み時はディスクシステムに保存されるが、そのデータへのアクセスがない場合には、一定期間を過ぎると自動的にテープシステムにマイグレーションされる。実験ユーザーは、実験ステーションの DAQ-USER-LAN から HPC に ssh 接続できる。また、所外からも VPN を介して HPC-LAN に接続可能であり、実験前準備や実験後のデータ解析に利用できる。実験ユーザーは、SACLA の HPC ポータルサイト⁶⁾から計算機システムの最新情報を得ることができる。

SACLA では、このようなデータ取得・解析基盤を利用して、様々な実験が行われているが、少数の汎用ソフトウェアだけで多様な実験の個別要望に短時間で対応することは難しい。そこで、各実験においてユーザーが自由に素早く独自ソフトウェアを開発できるように各種 API を整備している (図 1)。データハンドリングサーバーにバッファされているストレージ前の生画像データは、OnlineAPI により読み出し可

能で、タイミングモニター解析ツール⁶⁾などの施設開発ソフトウェアや Cheetah⁷⁾、CASS⁸⁾などのユーザーソフトウェアで利用されている。UDB の読み書きには UserDatabaseAPI (UDB-API) が利用可能である。キャッシュストレージと SyncDB に記録されたデータは DataAccessAPI により読み出し可能で、この API は DataConvert4 などの施設開発ソフトウェアや、Cheetah、CASS、SITENNO⁹⁾などのユーザーソフトウェアで利用されている。これらの API は、C/C++ で作成され、その Python wrapper (olpy、udbpy、dbpy、stpy) もユーザー提供している。実験ユーザーは、これらを使えば、データのファイルフォーマットや、各データがどこにあるかなどを意識することなく、データを簡便に読み出すことが可能である。以上に紹介した各種 API と施設開発ソフトウェアのマニュアル、および、その利用例を HPC ポータルで公開している。

SACLA では、データ解析用の API だけでなく、実験制御用の API (ecpy) も提供している。SACLA の利用開始時から数年の間は、RunControlGUI や PulseMotorControlGUI などの汎用ソフトウェアで複数の実験制御に対応していたが、これらでは個別実験毎の様々な要求に短時間で対応することが困難であった。そこで、これらが持っている機能を分割・整理し Python API として提供することで、実験ユーザーが独自の実験制御ソフトウェアを簡便に開発することができるようにした。olpy と ecpy を組み合わせると、リアルタイムの画像解析結果を実験制御ソフトウェアにフィードバックする自動測定が可能になる。ecpy のマニュアル・利用例についても Web ページなどで公開する準備をしている。Python は近年の人工知能 (AI) 分野において標準的な言語である。実験中、実験後の AI 利用も直ちに可能なデータ取得・解析基盤となっている。

3. データ取得・解析システムの更新とデータ保持運用の変更

キャッシュストレージおよび HPC は、それぞれ 5 年ごとに更新しており、直近では 2021 年夏に HPC を更新する予定である。2022 年夏のキャッシュストレージ更新では、BL1 用キャッシュストレージの性能

改善およびデータ量の負荷分散を目的として、構成を大幅に変更する予定である。

アーカイブストレージは、導入から約7年が経過し、ディスクシステムのメーカー保守が終了した。アーカイブストレージには、現状で、生画像データが5 PB 強、ユーザー処理データが3 PB 強保存されている。これ以上のデータ増量に対し、すべてのデータを永久に保持するシステムを運用するのは予算的にも困難であり、ディスクシステムの更新を機に、アーカイブストレージの構成とデータ保持運用を見直すことにした。7.2 PB のディスクシステム (中期ストレージ) を中期保存用として新規導入し、長期保存用のテープシステムと分離して運用する。今後は、中期ストレージからテープシステムへの自動マイグレーションは行われず、ユーザーに協力いただき、2020 年度中に新システムへの移行が完了する予定である。新アーカイブシステムの有効活用のために、データ保持期限およびデータ量制限 (quota) を設定し (表 1)¹⁰⁾、2021 年 3 月から運用を実施する。このデータ保持運用は、SPring-8 データ・ネットワーク委員会¹¹⁾が、2020 年 2 月に策定した「SPring-8/SACLA 共用データシステムに関する実験データ保持ポリシー」に基づくものである。

現状では、実験ユーザーは、VPN 経由のデータ転送、または、ポータブルディスクに保存して、ユーザー処理データを持ち帰ることが可能であるが、これらは大量データの扱いに向かない。データ保持運用変更に伴い、大量データを持ち帰るための環境整備として、

(1) VPN を介さずに高速データ転送するための外部転送ノードの導入、(2) リニアテープオープン (LTO) テープドライブおよびオプティカルディスク・アーカイブ (ODA) ドライブのユーザー利用開始を 2020 年

表 1 SACLA のデータ保持期限と quota 設定

分類	短期	中期	長期
SyncDB データ	240 日 (SyncDB@DAQLAN)	3 年 (SyncDB@HPC-LAN)	+7 年 (テープ)
生画像データ	90 日 (キャッシュ)	3 年 (中期ストレージ)	+5 年 (テープ)
ユーザー処理 データ	90 日 [<10 TB] (HPC ストレージ)	3 年 [100 TB] (中期ストレージ)	-

[] 内は quota 設定値、() 内は保存場所を示す。

度中に行う予定である。(1) では、理研・計算科学研究センター (R-CCS) と連携して、SACLA の実験データを HPCI 共用ストレージ¹²⁾に効率的に転送する環境の整備も進めている。HPCI 共用ストレージを利用するには、ユーザーが個別に HPCI 課題の利用申請をする必要があるが、HPCI 資源を利用することで SACLA の実験データ活用が促進されるというメリットもあると考えている。(2) について、LTO カートリッジは、1 巻あたり非圧縮時 12 TB、圧縮時 30 TB、ODA カートリッジは、1 巻あたり 5.5 TB のデータ保存ができる。

4. 所外からのデータハンドリング環境の改善

新型コロナウイルス感染症の拡大防止のため、来所者数を必要最小限にとどめ、所外の共同実験者との議論やデータ解析を円滑に行うための取り組みについて紹介する。2020 年 10 月に、実験制御端末から Google ドキュメント、スプレッドシート、ドライブなどへ、プロキシサーバーを介してアクセスできるようにした。実験ユーザーが実験ホールで利用可能な無線 LAN は、Zoom、Microsoft Teams、Google Meet などの Web 会議ツールを利用するのに十分な性能をもっており、Google ドキュメントなどの情報共有ツールと併用することで所外の共同実験者との円滑な議論が行うことができる。また、所外の共同実験者が HPC でデータ解析する際の、VPN を介した GUI の動作速度を改善するために FastX を導入し、2020 年 10 月から試験利用を開始した。FastX は、ユーザー PC に特別なソフトウェアをインストールする必要がなく、Web ブラウザから利用可能で、利用者からはその操作感に好評を得ている。2020 年度中に一般利用を開始する予定である。前節で紹介した外部転送ノードも所外の共同実験者との円滑なデータ共有に寄与すると期待している。さらに、来所できない実験グループのために、所外から実験をリモート制御する環境の整備を検討している。最初の実験候補として、ハイパワーレーザーとの同時利用実験を想定している。

5. まとめ

SACLA のデータ取得・解析基盤の現状について報告した。これらは JASRI と理研が緊密な連携のもと

開発・整備してきたものである。現在、約500名のユーザーに利用いただいております、年間生データ生成量1.6PBをサポートしている。SACLAのような大量データを扱うデータ基盤の開発には最先端の計算科学技術の導入が重要であり、そのために富岳を運用している理研・R-CCSとの連携を進めている。本稿がユーザーの皆様のご参考になれば幸いです。また、これらのデータ取得・解析基盤の開発と運用のノウハウはSPring-8においても活用できる。現在、SPring-8の基盤強化についても検討を進めている。

参考文献

- [1] T. Kameshima *et al.*: *Rev. Sci. Instrum.* **85** (2014) 033110.
- [2] Y. Joti *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **22** (2015) 571.
- [3] Y. Joti *et al.*: *Synchrotron Rad. News* **30** (2017) 16.
- [4] 改訂版 放射光ビームライン光学技術入門 第14章4.
- [5] <http://xhpcfep.hpc.spring8.or.jp> (VPN 接続が必要)
- [6] K. Nakajima *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **25** (2018) 592.
- [7] T. Nakane *et al.*: *J. Appl. Cryst.* **49** (2016) 1035.
- [8] L. Foucar: *J. Appl. Cryst.* **49** (2016) 1336.
- [9] Y. Sekiguchi *et al.*: *J. Synchrotron Rad.* **21** (2014) 600.
- [10] <http://xfel.riken.jp/users/bml09.html>
- [11] <http://dncom.spring8.or.jp>
- [12] https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_2016_st-1

城地 保昌 JOTI Yasumasa

(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室
(国研) 理化学研究所 放射光科学研究センター
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0992
e-mail : joti@spring8.or.jp

初井 宇記 HATSUI Takaki

(公財) 高輝度光科学研究センター XFEL 利用研究推進室
(国研) 理化学研究所 放射光科学研究センター
〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1
TEL : 0791-58-0992
e-mail : hatsui@spring8.or.jp