

SPring-8 実験データリポジトリ の構築

酒井 久伸[†] 古川 行人[†] 大端 通[†]

[†]公益財団法人 高輝度光科学研究センター 制御・情報部門 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1

E-mail: [†] {saki, furukawa, ohata}@spring8.or.jp

あらまし 大型放射光施設 SPring-8 では、高輝度放射光の特性を生かして、様々な分野の実験研究で、短時間・大容量のデータが創出される。我々は、これらの実験データを、実験条件等のメタデータを含めて管理蓄積するための「SPring-8 実験データリポジトリシステム」を構築した。実験分野・内容により多岐にわたる実験条件情報であるメタデータを、Key Value Store 型の DSpace をベースシステムとすることで柔軟に管理し、検出器からの実験データを遅滞なく格納できるデータ入力インタフェースおよび、大容量の実験データをオンラインで高速にダウンロードさせるデータ転送オフローダーとを組み合わせ、一つの完成形となったので、システムの詳細について報告する。

キーワード SPring-8, 実験データ, メタデータ管理, オンラインデータ転送, DSpace, Dublin Core

1. はじめに

第 3 世代の大型放射光施設である SPring-8[1]には、現在 56 本の放射光の取出し口であるビームラインが設置されている。ビームラインは、分光や集光を行ない実験に適した光を作り出す光学装置と、実験装置が据えつけられ、実際に利用者が実験を行なう場である実験ステーションが 1 つないし複数存在する。

実験ステーションでは、生命科学や、地球惑星科学といった基礎分野の研究利用から、製品の表面構造の解析といった産業利用まで幅広い分野の実験研究が実施されている。

放射光の発生原理については、別途文献を参照されたいが、概略すると放射光とは直線運動をしている電子が磁力によりその軌道を曲げられるときに発生する電磁波である。SPring-8 では、電子を繰り返す同じ方向に曲げた周回軌道が形成されているため、すべてのビームラインを同時並行利用することができる。

これまで実験ステーションで得られる実験データを系統的に管理する仕組みはなく、専ら各実験ステーションで個別に管理されるにすぎなかった。近年の技術進歩により、計算機による機器制御の高度化や、実験装置の高性能化に伴い、単位時間当たりのデータ生成量が飛躍的に増大したことや、情報通信技術の発達で従来実現困難だった施設外から実験装置を遠隔制御して、実験を行なうようなリモート実験が実現可能となった。

一方で、急速に進んだ実験ステーションの IT 化により、現場で維持管理業務を行なうビームラインサイエンティストの負担が増大し、我々制御情報部門への管

理移管の要望が少なからず存在した。

そこで、次の条件を念頭に置いた実験データ管理システムの設計・構築に取り掛かった。

- 1) 全ての実験ステーションで共通の仕組みとして利用可能であること
- 2) データの長期保管が可能であること
- 3) リモート実験にも対応可能であること
- 4) 種々の条件で検索や絞り込みができること
- 5) インターネットを介したデータダウンロード機能が使えること

SPring-8 に設置されている全てのビームラインは、基本的に全て異なる目的で設置されており、分光器など一部の機器についてはある程度の共通化がなされているものの、その機器構成は異なっている。そのため、実験を実施するための機器セットアップパラメタの種類や数はビームライン毎に異なっている。また、実験内容によっても機器の挿抜が発生するため、ビームライン毎に収集すべきメタデータが異なるのは言うまでもなく、同じビームラインでさえも実験毎に異なる場合がある。

加えて、施設先端性維持のため実験手法についての高度化開発も日々進められているため、機器の入れ替わり周期も短くなっている。そのため、システムには、機器の変更により管理すべきメタデータが変わることへの柔軟な追従性が求められる。

そこで、メタデータ管理を Key-Value Store 方式とし、Dublin Core[2]をベースにした Key を用いることで、機器変更に対する柔軟な追従性を確保した。詳細につい

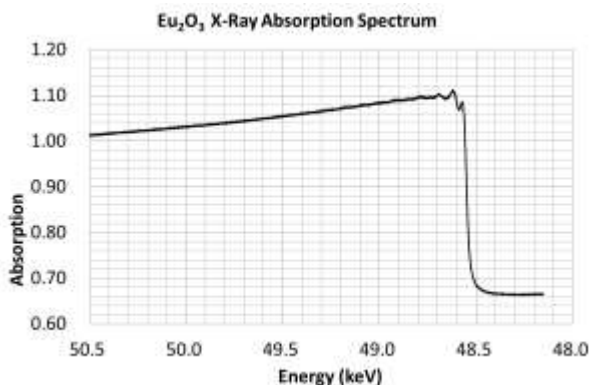


図1 スペクトル測定データ例

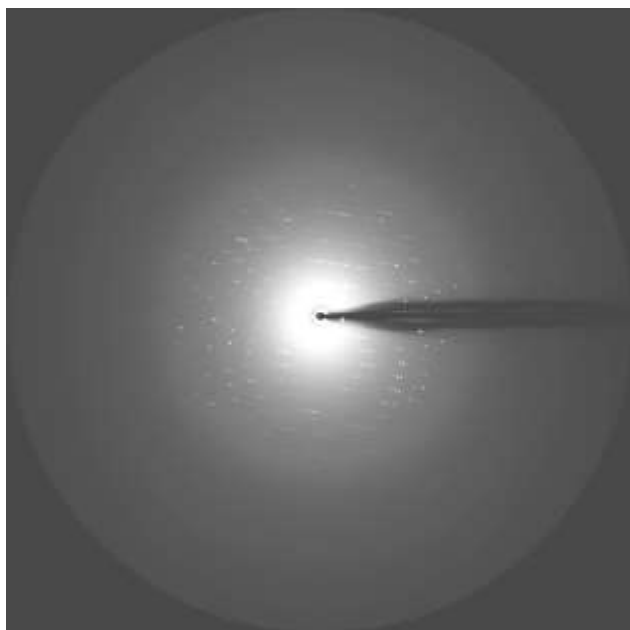


図2 イメージデータ例

ては、以前の報告[3]を参照されたい。

さて、SPring-8 実験データリポジトリの開発において、モデルケースとした産業利用 II (BL14B2) ビームラインの実験ステーションでは、主に XAFS というスペクトル測定の実験が行われている。この実験ステーションでは、SPring-8 や他の放射光施設で一般的な利用者自身が来所し自ら装置を利用して実験計測を行なう従来の利用様式に加えて、利便性の向上策として、測定代行実験というこれまでとは異なる新しい実験様式を取り入れている。この実験様式では、必ずしも利用者自身が実験ステーションに所在する必要はないため、実験データの受け渡しや、実験条件の伝達に課題があった。

図1は、この BL14B2 やその他のスペクトル測定を行なう実験ステーションで得られる実験データの一例である。これは、放射光のエネルギーと吸収係数の分散データであり、そのサイズは数 10kByte~数 MByte

と SPring-8 で行われている実験の中では最小区分に分類される小さなデータである。

一方回折実験や、イメージング実験では、図2に示すような二次元イメージセンサーによる画像データであり、1フレーム当り 10Mbyte~100Mbyte であり、短時間に大容量のデータが生成される。高速なものでは、1475pixel×1679pixel 32bit の画像データを毎秒 30 枚出力可能(約 300MB/sec)となっている。

大容量広帯域に生成される実験データの保存という視点では、高速なストレージシステムを用意することで解決できるが、保存された大容量のデータをインターネットを介してダウンロードする場面では、その所要時間が課題となる。

SPring-8 で数多くの実験が行われているタンパク質の結晶構造解析の実験計測を一例にあげると、1フレーム当り 2k pixel×2k pixel(16bit)~6k pixel×6k pixel(16bit)の2次元イメージデータを100~1000フレーム程度取得する。そのため、データ処理単位でダウンロードする場合、最大で 100GB 近いデータをダウンロードすることとなる。標準的なインターネット接続環境の場合 HTTP や FTP など通常の方法によるダウンロードが常用可能であるのは 1~2GB までであり、より大きな実験データのダウンロードは難しい状況である。そこで、データ転送における転送効率改善ツールをシステム中へ取り込み、大容量データの転送所要時間軽減を行なった。

2. システムの詳細

SPring-8 実験データリポジトリは、図3に示すように DSpace[4]を核に多くのコンポーネントが結びついて構成されている。

システムの主要なコンポーネントは、Converter Register, Regist Agent, 実験データストレージ基盤, DSpace, リバースプロキシサーバーである。

Converter Register は、実験ステーションで稼働する汎用データ登録ツールであり、登録動作指示を記述した XML に従って実験データをシステムに登録する。

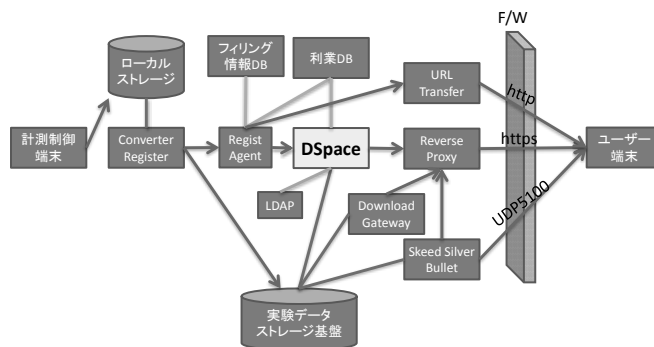


図3 システム構成

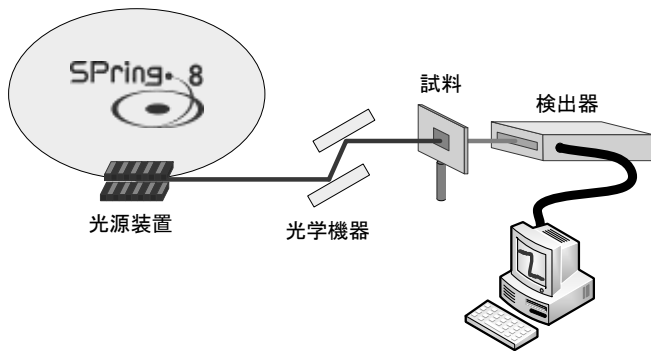


図 4 SPring-8 の構造概念

登録動作では、XML に記載されたメタデータを登録するだけでなく、実験データのフォーマットを規定したデータフォーマット定義ファイルを用意することで、テキスト形式、バイナリ形式を問わず様々な実験データファイルから、ファイル中に記録されたメタデータを抽出し登録する機能も併せ持っている。これにより、データファイル中のメタデータを検索可能とした。

Regist Agent は、DSpace が用意している HTTP ベースの外部データ登録インタフェース SWORD を SPring-8 標準の機器制御フレームワークである MADOCA の仕様に準拠したデータ登録インタフェースとして提供するとともに、次の 4 機能を担う。

- 1) 登録シーケンス番号の決定
- 2) 課題番号より検索可能なメタ情報の補完
- 3) 実験開始時刻より取得した蓄積リング運転パラメタの補完
- 4) SWORD インタフェース経由での DSpace のレコード生成

実験データストレージ基盤は、SPring-8 で生み出される全ての実験データを格納する目的で整備されたスケラブルな大規模ストレージシステムであり、実験ステーション毎に用意する実験データリポジトリシステムで共通利用される。

DSpace は、本システムの核であり、実験データストレージ基盤上に保管される実験データのインデックスとして機能する。利用者がダウンロード操作を行なうと、Download Gateway や SkeeSilverBullet[5] で稼働する SkeeFileMessenger にデータアクセスのためのパラメタを渡す動作をする。また利用者の要求によりデータ削除要求が行なわれた場合、システム管理者による削除実行で、実験データストレージ基盤上の実験データを削除する機能を持つ。

リバースプロキシサーバーは、DSpace、Download Gateway、SkeeFileMessenger の各ユーザーインタフェースをシームレスに統合し優れたユーザーエクスペリエンスの提供を実現している。

2.1 メタデータ管理

先に述べたように、SPring-8 で行われる実験は、多岐にわたること、同じ実験ステーションでも機器の更新サイクルが短いという特徴がある。実験ステーションで得られる実験データとデータに付随するメタデータを効率よく管理するために DSpace で利用する Dublin Core は、全ての実験ステーションの実験で SPring-8 実験データリポジトリが設定変更のみで利用できることを目標に設計した。

さて、SPring-8 のビームラインを主要構成要素に分けると、図 4 に示すように大きく 4 つに分けることができる。

光の上流から順に、磁力で電子の軌道を曲げ放射光を作り出す光源装置、光源装置で発生した放射光を集光したり、分光したりして実験に適した光に整形する光学機器、実験で計測する試料を設置する試料ホルダ、試料からの信号を検出する検出器となっている。

この構成は、全てのビームラインで共通であり、ビームライン毎の差異は、こられの機器構成の違いに他ならない。そこで、これらの条件を元に

全てのビームラインで共通に利用することのできる “SPring-8 Dublin Core 基本語彙”

を設計した。

そのうえで、モデルケースとして導入する BL14B2 の実情に合わせて、この基本語彙を修飾する精密化語彙を定義し、BL14B2 用の Dublin Core 語彙集を作成した。

実験データ自体の管理は、SPring-8 では、現在利用可能な PILATUS や C-MOS / CCD イメージセンサーに加えて、開発中の MPCCD[6] や CdTe 検出器[7] などの次世代型高速検出器への対応を考慮し、実験データストレージ基盤上での実験データの保存先アドレス情報をメタデータとして管理する方法とした。

さて、実験データを管理する手法として、データ自体をデータベースに取り込んで管理する方法と、ファイルとしてファイルシステム上に配置し、その配置場所情報をデータベースに取り込む手法がある。前者は、データの中身に対する検索が可能になる利点がある一方で、データベース自体が肥大化する問題や、検出器からの出力をデータベースに取り込む際のスループットが、データベース性能に依存してしまう問題がある。後者は、データの中身に対する検索が困難という欠点があるものの、検出器の出力性能に対応したストレージシステムを用意することで、検出器の高速性を毀損することなく、大容量高速検出器への対応が可能になる利点がある。そこで、高速検出器対応の点で有利な後者の手法を選択した。

2.2 データ登録

現在の構成では、計測制御端末より出力された計測データは、データを実験者に紐づける課題番号および、その他のメタデータや登録動作指示が記された XML ファイルと共に、ローカルストレージに保存される。

次に、Converter Register は cron で定期的に起動され、作業ディレクトリに XML ファイルが存在すると、記載された動作指示に従い実験データを、システムのメインストレージである実験データストレージ基盤に、ストレージシステムの直接操作によるデータ持ち出しを困難とする目的で、推測困難な一意の名称に変えて配置し、その配置位置、元ファイル名、元ディレクトリ情報をメタデータと共に Regist Agent へ渡す。尚 Converter Register は、階層構造を持つディレクトリの登録も可能であり、この場合の推測困難な一意の名称は、登録対象となるディレクトリに与えられ、それ以下の階層のファイル名・ディレクトリ名の変更は行われない。

Regist Agent は、Converter Register から渡された情報のうち、課題番号と、実験日時を利用して、システムに登録するためのメタデータセットを完成させる。まず、課題番号を元に、課題情報データベース（利業 DB）から、共同実験者や、その他実験課題に関する情報を得る。次に、実験日時から、蓄積リングの運転状態のうち、データ解釈上必要なフィリングパターンをフィリング情報 DB に問い合わせ、実験時のフィリングパターンを得る。得られたデータを、Converter Register から渡されたメタデータに統合し完成されたメタデータセットは、DSpace の SWORD インタフェースを介して DSpace に登録する為、SWORD 用のフォーマットに変換後、SWORD に渡され、登録が完了する。

Converter Register と Regist Agent との間はメッセージベースのインタフェース設計を行った。これにより、計測制御ソフトウェア中に Converter Register が担う機

能を組み込むことで、リアルタイムのデータ登録が可能になる仕様とした。

2.3 データダウンロード

データのダウンロードは、DSpace のメタデータとして、外部のダウンロード用 CGI 呼び出す URL を用意した。この値を用いて図 5 に示すようにデータ表示画面でリンクとして表示させている。そのため、ダウンロード用の CGI の代わりに、データ処理用の CGI に置き換えることで、データ処理やグラフ描画などの機能拡張が容易な設計とした。

2.3.1 HTTP によるダウンロード

ユーザーインタフェースの詳細については、後の項目で記述するのでここでは割愛するが、データのダウンロードは、メタデータとして保持されたダウンロード URL を開くことで実現される。この URL は URL Transfer を指示しており、ここで実際に Download Gateway を通して実験データストレージ基盤上の実験データを取り出すために必要な CGI 起動のためのパラメータを含めた URL に転送される。この手法により、システムの複雑性は高まるが、URL Transfer での対応付けを再定義することで、DSpace で管理されているメタデータの内容変更を行なうことなく、ダウンロード動作の改修が可能となる。

Download Gateway では受け取ったパラメータを元に DSpace のメタデータから、実験データストレージ基盤上の当該ファイルをローカルワークディレクトリに元ファイル名でシンボリックリンクを張る。このとき、データの種別がファイルであれば、そのままファイルの内容をクライアント側ブラウザに MIME type = application/octet-stream として送り出す。また、データの種別がディレクトリであれば、tar-gzip または、zip アーカイブをストリーム生成し、ファイル同様、クライアント側ブラウザに送り出す。これにより圧縮アーカイブ生成の待ち時間なく素早いデータ転送動作への遷移が可能となっている。

2.3.2 転送効率改善ツール経由のダウンロード

大容量実験データの転送効率の改善対策として、Skeed 社の SkeedFileMessenger (SFM) を採用した。SFM は、同社の高速データ転送ツールである SkeedSilverBullet の汎用動作を、ファイル転送に特化させたサブセットであり、本システムではそのうちのサーバー→クライアントのデータ転送機能のみを組み込み利用している。

転送の際には、セッション専用のダウンロード用 Java クライアントが生成されるため、クライアント側



図 5 データ表示画面

は Java の実行環境以外に特別なアプリケーションのインストールが不要である。

SFM は動作仕様として、データ転送セッションで作成された一時ディレクトリ内をファイル・ディレクトリに関わらず全て転送する。また、シンボリックリンクの場合も、SFM のサービスプロセスが到達可能であれば辿って転送する動作を行なう。

そのため、前項 2.2.1 と同様に受け取ったパラメタより DSpace のメタデータから、実験データストレージ基盤上の当該ファイルを転送用一時ディレクトリ内に元ファイル名でシンボリックリンクを張り、転送準備を整える。その後ダウンロード用の Java クライアントが生成され、端末側に転送・実行されることでデータ転送が開始される。

2.4 ユーザーインターフェース



図 6 データの一覧表示画面

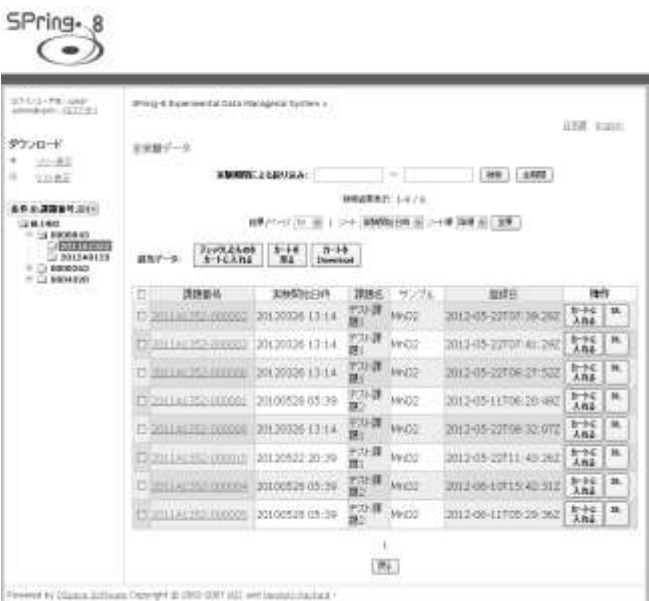


図 7 データのツリー表示画面

本システムのベースとした DSpace は、本来文献データベースとして開発されたものであり、登録データは、図 6 に示すように一覧表示よりデータを選択するリスト型の表示が可能である。それに対して実験ステーションで取得される実験データは、実験者により微妙な違いはあるが、概ね実験日、サンプル名、測定回数というようなディレクトリ構造で管理されている。そこで、新たにツリー型のデータ表示機能を作成し、併せて複数の実験データを纏めてダウンロードするショッピングカート機能を追加した。

ツリー型のデータ表示機能では、データ登録時にメタデータとして保持されている元ディレクトリの情報を利用したディレクトリ構造の再現に加えて、図 7 に示すような、人-課題番号-実験日というツリー表示など、メタデータのうち、設定であらかじめ指定した項目でグルーピングしたツリー構造を表示できる。このグルーピングは、DSpace 内で検索エンジンとして利用されている Lucene3[8]で実装されたグルーピング機能を利用している。

ショッピングカート機能は、複数のファイルを選択し一括ダウンロードする機能である。ツリー表示で、グルーピングされたデータを、一括選択しダウンロードするための機能として実装した。

2.3 項で記したとおりダウンロードの際には、データのコピーは行わず、シンボリックリンクでデータを取り扱うため、選択に関する容量制限は設けていないが、HTTP によるダウンロードでは、アーカイブで複数データを束ね、1 ファイルとしてデータ転送を行なうため、転送上限を Windows の 32bit アプリケーションが通常扱える上限の 2GiB とした。

SFM によるダウンロードでは、SFM の仕様としてファイル転送数に設定上の制限が存在するため、転送容量ではなく、総ファイル数での制約となっている。この設定上の制限は、今後のβテストを通してシステム負荷を勘案しながら値を決める予定である。

3. 性能評価

3.1 実験データ登録

SPRING-8 実験データリポジトリは、SPRING-8 の実験ステーションで取得した実験データを保管し、必要に応じてオンラインで取得するためのシステムであり、安定動作に加えデータ登録性能は最重要要素である。

2.2 で述べたように、計測制御システムとの連携を前提にしており、本システムが一連の計測工程の中で律速要因になってはならない。そこで、データ登録性能の評価を実施した。データ登録における主な律速要因は、次の 4 つである。

- 1) Converter Register → 実験データストレージ基盤

へのデータコピー

- 2) Regist Agent → 利業 DB への問い合わせ
- 3) Regist Agent → フィリング情報 DB への問い合わせ
- 4) SWORD インタフェースを介した DSpace へのデータ登録

まず、全体の登録速度の計測として、1KB 程度のデータデータを 1000 ファイル用意し、その登録性能を計測したところ 227 msec (3.6files/sec)であった。この性能は、現時点において SPring-8 での大部分の実験に対応できる性能である。

次に、1)の計測を行った。全体の速度計測と同じデータデータを 1000 ファイル用意し、NFS でマウントされる実験データストレージ基盤へ、Linux の cp コマンドでコピーする所要時間を計測し求めたところ 33msec (30files/sec)であった。

2) の利業 DB への問い合わせは、MySQL の SQL 接続による問い合わせで、0.6msec (1500queries/sec)程度の性能が出ている。

3) のフィリング情報 DB は、http による CGI への問い合わせとなっており、wget コマンドによる 1000 回の繰り返し問い合わせで、116msec (8.6queries/sec)であった。

4) に関しては、直接計測が困難であるため、全体から、1)~3)を引くことで見積もったところ、128 msec であった。

3.2 データダウンロード

SkeedFileMessenger の効果測定を目的に、1GB の乱数データ 1 ファイルおよび、1MB の乱数データ 1000 ファイルをシステムに登録し、著者自宅並びに外部拠点からのデータダウンロード評価を実施した。実施結果を表 1 に取りまとめた。

SkeedFileMessenger による転送効率改善効果は、概

表 1 データ転送試験の試験結果

拠点	HTTP (Mbps)	SFM (Mbps)	回線ほか
著者自宅	8.9	61	NTT 西 100M
北海道大学	34	94	SINET
高エネルギー物理学研究所	21	50	SINET
名古屋大学	34	140	SINET
京都大学	2.3	×	UDP 遮断
大阪大学	54	66	SINET
沖縄科学技術大学院大学	92	133	SINET

ね良好であるが、端末が Gigabit Ethernet で接続されている名古屋大学や沖縄科学技術大学での改善効果は限定的である。

また、SFM による転送は UDP を利用した独自プロトコルによる転送であるため、京都大学での結果のように、セキュリティポリシーで UDP が遮断されていると利用することができない。

4. まとめ

データベースシステムによる実験データの管理は、これまで、ISPyB[9], EDgrid[10]など様々な取り組みがなされてきているが、ISPyB は、タンパク質結晶構造解析の実験データの管理が目的であり、EDgrid は、実大三次元震動破壊実験施設の実験データ管理といずれも限られた実験分野の実験データを管理するシステムであった。これらのシステムは、各分野に特化したデータ管理システムであるため、その分野におけるシステムの最適化はされているものの、他の実験研究分野への対応は、データ解釈に必要な情報が異なるなど、管理すべきデータが異なるため困難であった。

本システムでは、個々の実験研究分野への最適化には、ユーザーインタフェースのカスタマイズなどの工夫が必要なものの、DublinCore を定義することで全てのデータを取り込むことが可能になり、最小限の改修作業で多くの実験分野のデータ管理に適用することができる。これは、SPring-8 のような非常に多岐にわたる実験分野が存在する施設の施設インフラとして、実験データ管理システムを用意する場合には、システムマネジメントの視点から非常に有用である。

また、開発当初懸念された大容量実験データのオンライン転送も、SkeedFileMessenger を組み込んだことにより大幅な負担軽減がなされている。

現状は、βテストを開始したばかりであり、改善すべき点は多数存在することが見込まれるが、実験ステーションで得られた実験データを管理し、必要に応じてインターネット経由でのデータ取得が可能なシステムとしては一定の評価が得られるものであると確信している。

5. 今後の展開

SPring-8 実験データリポジトリシステムは、開発モデルとした BL14B2 での実験用途には、十分活用できる性能を有するが、現有の高速検出器や、開発中の次世代検出器のバックエンドシステムとして利用するためには、データ登録速度の更なる向上が必要であり、当面の開発目標として、現有高速検出器の PILATUS 2M の 30Frames/sec に対応させたい。

また、データダウンロードに関して、将来的には、

二次元検出器の大口径化による更なるデータ量の増大が予測され、現状の転送速度では性能不足となるため、SFM を含めてシステムの全体的なチューニングをすすめ、更なる転送効率の改善を目指したい。

6. 謝辞

本システムの構築に当たっては、(公財) 高輝度光科学研究センター 産業利用推進室の廣沢一郎博士、本間徹生博士、高垣昌史博士、谷口陽介氏には、システムの構築全般並びに、実験ステーションへの導入について多大な支援を頂き、感謝いたします。

Dspace の改修全般のコーディングに関して、著者の無理な要求に度々お応えいただいたアイクラフト株式会社の重島隆行氏、ネクストジェネレーション株式会社の木川幸則氏、竹本清二氏に感謝いたします。

SkeedFileMessenger の組み込みにあたり、多大なご協力を頂きました株式会社 Skeed の明石昌也氏、柳澤建太郎氏に感謝いたします。

最後に、βテスト環境の整備に際し、技術面で多大な支援を頂きました(公財)高輝度光科学研究センター 制御・情報部門の古寺正彦氏、間山皇氏、横田滋氏、清水太一氏並びに、βテストに協力いただきました諸氏に感謝いたします。

参 考 文 献

- [1] 菊田 惺志, "SPRING-8における高輝度放射光利用研究への期待," 放射光 9(5),379-383,1996
- [2] ISO, "Information and documentation -- The Dublin Core metadata element set," ISO 15836:2009, 2009
- [3] 酒井久伸, 古川行人, 大端通, "SPRING-8 共通データストレージシステムの構築" 信学技報, vol. 111, No. 361, DE2011-44, pp. 25-29, 2011
- [4] DSpace Foundation, "DSpace.org," <http://www.dspace.org/>, (2013年1月31日参照)
- [5] 柳澤建太郎, "SkeedSilverBullet が求められている理由" SoftwareDesign, Vol.331, pp. 112-121, 2012/11/18
- [6] T. Kameshima, et al., "Development status of X-ray2D Detectors for SPRING-8 XFEL", IEEE Nuclear Science symposium N13-4 (2010)
- [7] 豊川秀訓, "SPRING-8における計数型1次元・2次元検出器の開発とその応用" Advances in X-Ray Chemical Analysis, Japan, vol. 42, pp. 95-110, 2011
- [8] Apache Software Foundation, "Apache Lucene," <http://lucene.apache.org/>, (2013年1月31日参照)
- [9] Delagenière S et al, "ISPyB: an information management system for synchrotron macromolecular crystallography.", Bioinformatics, Vol 27(22), pp3186-3192 2011
- [10] 谷村勇輔, "振動実験データの保存・公開システム", 産総研 TODAY, Vol06, No05 pp22-23, 2006