

## データグリッド環境における大規模データの パイプライン処理アーキテクチャの提案

秋山豊和<sup>1</sup>, 山下浩嗣<sup>2</sup>, 原 隆浩<sup>2</sup>, 加藤精一<sup>1</sup>, 下條真司<sup>1</sup>, 西尾章治郎<sup>2</sup>

### 概要

近年バイオインフォマティクス技術の発展にともない、*in silico* 解析の速度が急速に向上している。*In silico* 解析の結果を創薬に適用するためには、観測装置を用いて実測による検証を行う必要がある。本稿では超高压電子顕微鏡 (UHVEM) や SPring-8 をはじめとする高性能な観測装置のうち、特に画像を出力とする観測装置に注目し、たんぱく質のように 3 次元構造を観測する観測対象に注目する。また、注目する実験環境において、グリッドコンピューティング技術を適用することで観測時間を短縮し、かつ、より正確な実験結果が取得可能な環境を構築することを目指す。高性能観測装置から出力される画像データは高精細であり、データサイズも大きいため、3 次元再構成やボリュームレンダリングなど、画像処理にかかる時間も長くなる。本稿では、グリッドコンピューティング環境における画像処理時間を短縮するため、入力データをフラグメント化し、パイプライン処理によって処理時間を短縮するアーキテクチャを提案する。また、提案するアーキテクチャにおいて検討すべき問題点について述べる。

## A Proposal of Pipeline Processing Architecture for Large Scale Image Data in a Grid Environment

Toyokazu Akiyama<sup>1</sup>, Hiroshi Yamashita<sup>2</sup>, Takahiro Hara<sup>2</sup>, Seiichi Kato<sup>1</sup>, Shinji Shimojo<sup>1</sup>, Shojiro Nishio<sup>2</sup>

### Abstract

Recently, bioinformatics technologies reduce the calculation time of *in silico* analysis. However, the analysis result validation by direct specimen observation is required to apply those results to the drug discovery field. In this paper, we notice the special observation devices, such as Ultra High Voltage Electron Microscope (UHVEM) and SPring-8, which produce image output and the specimens which are required to observe their 3D structure. We will build high throughput image-based observation environment by using a grid computing environment. Since the special observation devices outputs high resolution images which have large data size, it takes long period to process those images such as 3D reconstruction and volume rendering. In this paper, we will propose architecture to reduce image processing time in a grid computing environment by applying pipeline processing technique with fragmented input data. Furthermore, we will discuss the issues which should be considered in the proposed architecture.

---

<sup>1</sup>大阪大学サイバーメディアセンター, Cybermedia Center, Osaka University

<sup>2</sup>大阪大学大学院情報科学研究科, Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University

## 1. はじめに

近年バイオインフォマティクス技術の発展にともない、*in silico* 解析の速度が急速に向上している。*In silico* 解析の結果を創薬に適用するためには、観測装置を用いて実測による検証を行う必要がある。また、観測装置で観測した試料の 3 次元構造をパラメータとして与えることで、構造予測シミュレーションの精度や速度を向上させる手法なども提案されている [13]。このようなことから、観測装置におけるスループットおよび実験精度の向上がバイオ研究を推進する上での課題の一つとなっている。筆者らは、これまでに超高压電子顕微鏡 [8] や SPring-8 における高精細 CT (Computed Tomography) [15] などの高性能デバイスについて、情報技術を用いた性能改善の一つとして、遠隔操作システムの開発に取り組んできた [4][19]。これらのデバイスは世界でも有数の高性能デバイスであり、研究者は利用申請により割り当てられた、限られた実験時間内で観測を行う必要があり、観測時間の短縮は一つの課題になっている。これまで研究者は、観測装置設置施設において、PC などを用いて観測したデータを 3 次元再構築し、実験結果の確認を行ってきたが、高精細画像の再構築にはある程度の時間を要する。そこで本稿では、グリッドコンピューティング環境を用いて、遠隔地にある計算資源を利用して観測したデータの解析を行うアーキテクチャを提案する。注目しているデータは大規模データであるため、単純に遠隔地に伝送して処理した場合、データ伝送に時間を要してしまう。そこで、さらに観測データを適切なサイズにフラグメント化し、パイプライン処理を行うアーキテクチャを提案する。本稿では提案するアーキテクチャにおいて検討すべき課題と、現在検討を進めているデータフラグメントサイズの最適化について述べる。

以下 2 章では本稿で対象としている観測装置について述べ、観測データを処理する上で必要となる情報技術について述べる。3 章では、本稿で提案するグリッドコンピューティング環境を用いたアーキテクチャについて述べ、4 章ではその中で特に本稿で注目するパイプライン処理の最適化について述べる。最後に 5 章で本稿のまとめとする。

## 2. 対象とする観測装置

本稿で対象としている観測装置は、大阪大学超高压電子顕微鏡センターで運用されている超高压電子顕微鏡および SPring-8 で運用されている高精細 CT である。これらのデバイスはどちらも試料画像を出力としている。超高压電子顕微鏡では、試料を透過した電子ビームと蛍光版により試料画像を生成している。試料を設置するステージが稼動するように設計されており、ステージを回転して試料を様々な角度から撮影することができる。SPring-8 の高精細 CT は、SPring-8 が提供する高出力の X 線を利用して、高精細な X 線画像を取得できる。電子顕微鏡と同様にステージが回転可能になっており、様々な角度から試料を撮影できる。このように試料を回転させて撮影した画像から 3 次元画像を再構築する手法は、既に確立されている [12]。図 1 に超高压電子顕微鏡で撮影したマウスの脳神経細胞の画像とそれを 3 次元再構築した画像を示す。

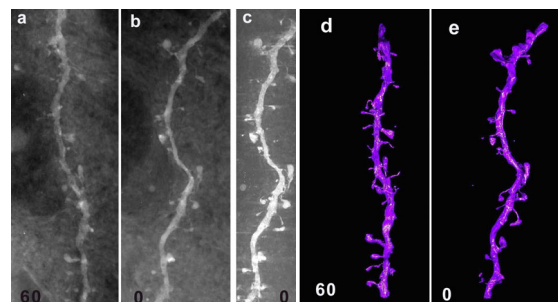


図 1 : マウスの脳神経細胞 (NCMIR 提供)

撮影された画像はどちらも TIFF 形式で保存される。サイズは 1 枚約 32MB で、SPring-8 の高精細 CT では、詳細なデータが必要な場合は 1 試料につき最大 720 枚の画像を撮影する。

ここで、電子顕微鏡に設置された画像取得用のカメラは、4096×4096 の解像度を持つ高精細 CCD カメラで、1 枚撮影するのに 20 秒ほど必要であるため、デバイスからリアルタイムに 3 次元再構築用のデータを取得するのは難しい。しかし、観測している際には、まず試料の 3 次元構造の概観だけ見てみたいという要求がある。そこで、ステージの位置あわせ用として利用している HDTV 品質のカメラから取得した画像を利用した、リアルタイム 3 次元画像生成について検討を進めている。また、ステージを回転する際に機械的な性能の限界から、回転後の試料と回転前の試料の軸がずれることなどが考えられる。画像処理技術を用いて、このずれを自動的に補正する手法についても検討している。

電子顕微鏡は高いエネルギーを持つ電子ビームにより試料を観測するため、電子ビームが試料固定用のホルダーに当たると放射線が発生する。この放射線により CCD の画像にノイズが入ってしまう。試料固定方法を検討することで、物理的にこのノイズを除去する方法と、画像処理により品質を落とさないようにノイズを除去する方法の 2 つの方向で改善手法を検討している。

電子顕微鏡などで生物試料を観測した場合、コントラストが弱いために、再構成後の画像解析が難しい場合がある。そのため、取得した画像にセグメンテーション処理を施してから、3 次元再構築を行うことが多い。現在 3 章で述べるアーキテクチャに適合するセグメンテーション手法について検討を進めている。

撮影後の画像は、データグリッド環境を用い

て共有することを検討しているが、データの再利用性を高めるためには、試料の特徴を記述するメタデータを付加しておく必要がある。しかし、研究者にこのようなメタデータの入力を依頼した場合、逆に実験時間が増加してしまう可能性がある。そのため、試料の構造などの面で、自動的に特徴を抽出し、メタデータを付与する方法について検討している。

### 3. 提案アーキテクチャ

本章では、2 章で述べたようなデバイスから出力される大規模画像データを高速に処理するため、グリッドコンピューティング環境を用いて遠隔の計算機センターにデータを伝送し、画像処理を行い、結果を研究者のサイトで閲覧するシステムのアーキテクチャを提案する。

#### 3. 1. 関連研究

グリッドコンピューティング環境を利用した画像処理システムの構築に関する研究は既にいくつか取り組まれている[2][3][7]。文献[2]では、画像処理をグリッドコンピューティング環境で行う際に考慮すべき点について議論している。また、画像処理システムをグリッド上で実装している。この論文で述べられている SGI 社製の Vizserver[6]というソフトウェアでは高性能なグラフィックボードを搭載した計算機で計算した出力結果を、ネットワーク経由でクライアントに表示する機能を備えている。このソフトウェアは適切な計算リソースを選択して利用するグリッドコンピューティングのアプローチに適合すると考えられるため、最終的な画像表示部分では本稿でもこのソフトウェアを利用することを想定する。文献[2]では、データの分割方法、画像処理並列化における最適化手法について触れられておらず、汎用のグリッドコンピューティング環境に適用す

るには, 更なる考察が必要であると考えられる. 文献[3]では, 我々と同じく, 電子顕微鏡から得られる高精細画像をグリッドコンピューティング環境で解析するアプリケーションの構築を目的としており, アプリケーション構築を容易にするツールキットの設計, 実装について述べている. この論文では既存の画像処理ツールキットである, Insight Segmentation and Registration Toolkit (ITK)[5]および Visualization Toolkit (VTK)[11]をベースにツールキットを設計しているため, ITK および VTK でサポートされていないセグメンテーション, レンダリング手法に触れておらず, また, データをフラグメント化することによるパイプライン処理の最適化について検討されていない. 文献[7]では, ネットワークに接続された天体望遠鏡から取得された画像データをパイプライン処理するシステムをグリッドコンピューティング環境上で構築している. この研究でも同様にデータの最適化については議論されていない. 本稿のアプローチでは, データを最適化することで処理効率がどの程度改善できるかについて調査し, グリッドコンピューティング環境において, 提案する最適化手法が適用可能なアーキテクチャについて検討していく.

### 3. 2. 提案アーキテクチャと検討課題

図2に提案するアーキテクチャの概要を示す. ユーザは観測用のデバイスが操作可能なサイトからシステムを利用するものとする. 本稿では, 遠隔操作, 画像処理, データ共有などの機能をグリッドサービスとして実現することを想定し, それらをローカルアプリケーションまたは Web アプリケーションで制御する環境を想定している. 提案するアーキテクチャでは, これらのサービスをパイプラインとして結合し, パイプラインに流すデータサイズの最適化

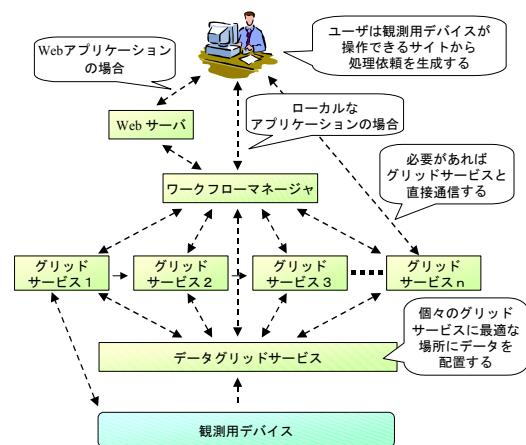


図2: 提案アーキテクチャの概要

により処理時間を短縮する. パイプラインの最適化に関する検討課題については 4 章で述べる. 本章では遠隔操作, 画像処理, データ共有の各機能をパイプライン化する上で検討すべき課題について述べる.

#### 3. 2. 1. 遠隔操作機能

遠隔操作の機能としては, (1)デバイスのコントロール, (2)デバイスから取得した画像のデータグリッドサービスへのアップロード, などの機能が要求される. 遠隔操作は現状ユーザが手で制御し, 画像の撮影を行うため, クライアントがグリッドサービスを経由して直接デバイスをコントロールする形となっている. そのため, 画像取得部分は 4 章で述べるパイプライン処理には含まれていない. しかし, 2 章で述べたような手法で, あらかじめ指定したパラメータをもとに自動的にデータ取得を行う方法を検討しており, 自動取得が可能になればパイプラインに組み込める.

#### 3. 2. 2. 画像処理機能

画像処理はセグメンテーションやレンダリング等, 異なる処理は異なるサービスとして構築される. クライアントアプリケーション側でユーザが必要な処理内容を定義して処理を依頼すると, ワークフローマネージャにおいて,

指定された処理内容がグリッドサービスの組み合わせに変換される。処理内容によっては、必ず同じ組み合わせで利用されるものも存在するため、最終的には処理のオーバーヘッドを考慮して複数の処理を一つのサービスとして構築することも検討する必要がある。データサイズを任意に分割してパイプラインの最適化を行うためには、処理内容もデータ分割に合わせて独立に分割できる必要がある。文献[18]で述べているように、まず、ボリュームレンダリングについてパイプライン化を検討し、**Splatting** というアルゴリズムを採用することで、パイプライン化に対応できることが分かった。現在セグメンテーションについてパイプライン化を検討している。

### 3. 2. 3. データ共有機能

サービス間でのデータの共有はデータグリッドサービスを経由して行われることを想定しているが、現状実装されているデータグリッドミドルウェア[9][10]は、データを一旦ディスクに保存するものがほとんどであるため、性能面ではサービス間で直接データの受け渡しを行うのが望ましい。しかし、障害が発生した場合や、パラメータを変更したい場合など、再実行が必要な場合に備えて途中結果の保存も必要である。現状のミドルウェアを拡張し、サービス間で直接データの受け渡しを行いながら、途中結果をデータグリッドに格納し、かつ、ユーザの要求に合わせて途中結果を再利用する仕組みを実現する必要がある。ただし、記憶容量や性能を考慮して、途中結果の格納は再利用の可能性が高い場合に限定するのが望ましい。そのため、パイプラインの利用状態解析なども必要となる。グリッドコンピューティング環境における資源利用状況のモニタリングについては研究が行われている[14][17]。さらに、パイプラインの最適化のために任意のサイズに

データを分割することになるが、ユーザから見て分割されたデータを論理的に一つのデータとして見せる機能を提供する必要がある。この機能については、[9]のミドルウェアでは実現されている。

## 4. パイプライン処理の最適化

本章ではパイプライン処理の最適化について述べる。本章ではグリッドサービスを処理単位として記述しているが、最適化を行う場合、例えばネットワーク転送やディスクアクセスなどの、より小さな処理単位を採用することも可能である。3章で述べた機能をパイプライン処理として実現するためには、以下のような項目について検討する必要がある。

### 4. 1. パイプラインパスの最適化

3.2.2 節で述べたようにクライアントからの処理要求はサービスのワークフローの形でワークフローマネージャに渡されるため、受け取ったワークフローを提供されているグリッドサービス群に変換する必要がある。アプリケーションレベルの抽象的なワークフロー記述を具体的な処理内容に変換する研究は文献[1]などで行われている。ワークフローの各ステージを  $WS_k$  と表した場合、ワークフローはステージ群  $WF = \{WS_1, WS_2, \dots, WS_n\}$  として記述できる。ここで、提供されているグリッドサービスのうち、 $WS_k$  を処理可能なグリッドサービスの集合を  $GS(WS_k) = \{GS_1(WS_k), GS_2(WS_k), GS_3(WS_k)\}$  のように表した場合、図3に示すように、クライアントによって与えられた  $WF$  を処理可能なグリッドサービス群を求めることができる。本稿ではこのように目的の処理を実現できるサービス群をパイプラインパスと呼ぶ。サービスの粒度は必ずしもグリッドサービスである必要はないが、ここでは簡単のため

グリッドサービスとして記述している。パイプラインパスを利用するには以下のような項目について検討する必要がある。

- (1) 複数のパイプラインパスが選択可能な場合、最適なパイプラインパスを選択する必要がある。
- (2) 複数のパイプラインパスを同時に利用可能な場合、ワークフローの並列処理に利用できる。このような場合、複数のパイプラインに対するデータ分割方法について検討する必要がある。
- (3) ボトルネックになっていないサービスは余剰資源を保持しているため、他のパイプラインに再利用可能である。資源を有効利用するためには、上述のパイプラインパス選択において、ボトルネックを検出し、余剰資源についても考慮する必要がある。

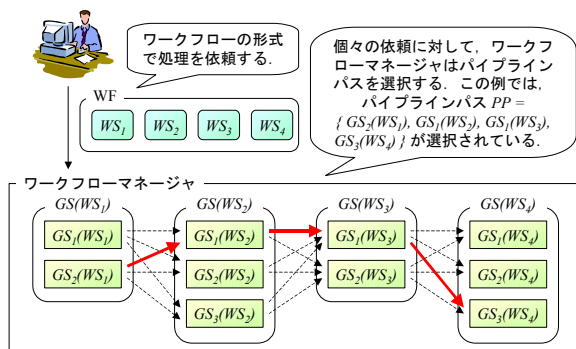


図 3：パイプラインパス選択

#### 4. 2. データフラグメントサイズの最適化

フラグメントサイズの最適化手法は文献[18]において議論しているので、本稿では省略する。基本的な戦略としては、文献[16]で述べられているデータ通信におけるデータフラグメント最適化手法をグリッドコンピューティング環境に適用している。グリッドコンピューティング環境においてはステージの特性がデータ通信の場合よりも多様であり、また、動的に変化する可能性があるため、文献[18]ではボ

トルネックの動的な検出手法を提案している。また、文献[18]では簡単のため、均一サイズでのデータ分割を採用しているが、フラグメントサイズを動的に変化させることによる処理効率向上の可能性についても調査を行っている。

#### 5. おわりに

本稿では、グリッドコンピューティング環境における画像処理時間を短縮するため、入力データをフラグメント化し、パイプライン処理によって処理時間を短縮するアーキテクチャを提案した。また、提案したアーキテクチャにおいて検討すべき課題について述べた。

本稿では特に画像処理に注目して議論を進めてきたが、本稿で述べたアーキテクチャは画像処理だけでなくワークフローで記述可能な汎用のグリッドサービスに適用可能である。提案するアーキテクチャを標準化が進められているグリッドコンピューティング環境上に実現し、他のサービスへの応用についても検討していきたい。

#### 謝辞

本研究は、文部科学省科学研究費補助金特定領域研究(C)「Grid 技術を適応した新しい研究方法とデータ管理技術の研究」(13224059)および若手研究(B) (80324862) の助成を受けて行われた。ここに記して謝意を表す。

#### 参考文献

- [1] Y. Chen-Burger, "Automatic Support for Enterprise Modelling and Workflow," URL: <http://www.aktors.org/technologies/workflow/>.
- [2] K. Czajkowski, A. Demir, C. Kesselman, and M. Baux: "Practical resource management for grid-based visual exploration," in *Proc. of 10th IEEE Symp. on High Performance Distributed Computing*. IEEE Computer Society Press, (2001).
- [3] S. Hastings, T. Kurc, S. Langella, U. Catalyurek,

- T. Pan, and J. Saltz: "Image Processing for the Grid: A Toolkit for Building Grid-enabled Image Processing Applications," in *Proc. of the 3rd IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid (CCGrid2003)*, pp.36-43 (2003).
- [4] D. Lee, A. W. Lin, T. Hutton, T. Akiyama, S. Shimojo, and F. Lin: "Global Telescience featuring IPv6 at iGrid2002," *Journal of Future Generation Computer Systems*, vol. 19, issue 6, pp.1031-1039 (2003).
- [5] National Library of Medicine: "Insight Segmentation and Registration Toolkit (ITK)," URL: <http://www.itk.org/>.
- [6] C. Ohazama: "OpenGL vizserver," Internet white paper, 2000. URL: <http://www.sgi.com/software/vizserver/>.
- [7] R. Plante, D. Mehringer, D. Guillaume, and R. Crutcher: "The Networked Telescope: Progress Toward a Grid Architecture for Pipeline Processing," *Astronomical Data Analysis Software and Systems X ASP Conference Series*, vol. 238, (2001).
- [8] Research Center for Ultra-High Voltage Electron Microscopy Osaka University: URL: <http://www.uhvem.osaka-u.ac.jp/>.
- [9] 産業技術総合研究所: "Grid Datafarm for Petascale Data Intensive Computing," URL: <http://datafarm.apgrid.org/>.
- [10] San Diego Supercomputer Center: "The SDSC Storage Resource Broker," URL: <http://www.npaci.edu/DICE/SRB/>.
- [11] W. Schroeder, K. Martin, and B. Lorensen: "The Visualization Toolkit: An Object-Oriented Approach To 3D Graphics," Prentice Hall, 2nd edition, (1997).
- [12] G.E. Soto, S.J. Young, M.E. Martone, T.J. Deerinck, S. Lamont, B.O. Carragher, K. Hama, and M.H. Ellisman: "Serial section electron tomography: a method for three-dimensional reconstruction of large structures," *Neuroimage*, vol. 1, pp.230-243 (1994).
- [13] F. Tama, M. Valle, J. Frank and C. L. Brooks III: "Dynamic reorganization of the functionally active ribosome explored by normal mode analysis and cryo-electron microscopy," in *Proc. of Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 100, no. 16, (2003).
- [14] B. Tierney, R. Aydt, D. Gunter, W. Smith, V. Taylor, R. Wolski, and M. Swany: "A grid monitoring architecture," *Tech. Rep. GWD-PERF-16-2, Global Grid Forum*, (2002).
- [15] K. Uesugi, A. Tsuchiyama, H. Yasuda, M. Nakamura, T. Nakano, Y. Suzuki, and N. Yagi: "Micro-tomographic imaging for material sciences at BL47XU in SPring-8," *Journal de Physique. IV France*, vol. 104, pp.45-48 (2003).
- [16] R. Wang, A. Krishnamurthy, R. Martin, T. Anderson, and D. E. Culler: "Modeling Communication Pipeline Latency," in *Procs. of ACM International Conference on Measurement and Modeling of Computer Systems (SIGMETRICS '98)*, (1998).
- [17] R. Wolski, N. Spring, and J. Hayes: "The Network Weather Service: A Distributed Resource Performance Forecasting Service for Metacomputing," *Journal of Future Generation Computer Systems*, Vol. 15, No. 5-6, pp. 757-768, (1999).
- [18] 山下浩嗣, 秋山豊和, 原 隆浩, 加藤精一, 下條真司, 西尾章治郎: "データグリッド環境における大規模データ処理のパイプライン化に関する一考察", 情報処理学会データベースと Web 情報システムに関するシンポジウム論文集 (2003年11月).
- [19] K. Yoshida, H. Mori, S. Shimojo, Y. Kadobayashi, T. Akiyama, and Mark H. Ellisman: "Design of a remote operation system for trans-Pacific microscopy via international advanced networks," *Journal of Electron Microscopy*, vol. 51 (supplement), pp. 253-257 (2002).
- [20] X. Zhang, J. Freschl, and J. Schopf: "A Performance Study of Monitoring and Information Services for Distributed Systems," in *Proc. of IEEE Symposium on High Performance Distributed Computing (HPDC2003)*, pp.270-282 (2003).