

■ 会議報告

4th canSAS (Collective Action for Nomadic Small-Angle Scatterers) Workshop 報告

伊藤和輝 (物理化学研究所播磨研究所)

2004年5月12日から5月14日の3日間、イギリスのオックスフォード近くの Rutherford Appleton Laboratory (RAL) にて開催された表題のワークショップに参加する機会を得たので報告する。この会議は2年ごとに開催されており、X線と中性子の小角散乱実験装置の装置担当者らが集まり、実験デザイン、実験データのフォーマットや解析ソフトウェアの共通化について議論することを目的としている。多くのユーザーがX線および中性子、あるいは異なる放射光施設を利用して測定を行っており、異なるデータフォーマットが実験データ比較の障害になっている。これはデータ解析ソフトウェア開発にも影響し、同種の機能を有するデータ解析ソフトウェアが異なるフォーマットごとに存在するような状況が形成されている。このような状況を変えるために、canSASワークショップがESRFのWim Bras氏とILLのRon Ghosh氏の呼びかけで始まった。第1回は1998年にESRFで開催され、第2回は2000年にBNL、第3回は2002年に再びESRF、そして4回目としてISIS/RALで開催された。今回はイギリス22名、フランス11名、アメリカ7名、ドイツ7名、ウェールズ6名、日本2名、オーストリア、オーストラリア、チェコ、スウェーデン、スペインから各1名の計60名の参加があった(写真1)。会場スペースの関係で参加受付を途中で締め切ったほどだった。ワークショップは口頭発表、ポスター発表、そしてソフトウェア・デモンストレーションから構成され、それぞれ25件、26件、6件の発表があった。発表で使用された資料については口頭発表、ポスター発表とも後日CD-ROMにまとめて参加者に配布される予定である。ワークショップのURLは<http://www.isis.rl.ac.uk/LargeScale/LOQ/cansas/cansas4/cansas4.htm>である。

最初にISIS/RALの所長であるAndrew Taylor氏から歓迎の挨拶とRALにて進行している第三世代放射光光源施設であるDiamond Light Source (2006)とパルス中性子源であるISIS Second Target Station (2007)を利用したソフトマテリアル研究についての概略や研究所の基盤整備などについて話があった。それに続いてANSTOのElliot Gilbert氏の講演から最初のセッションがスタートした。氏は、一般論として、施設の建設予算は大きい、加速器、BL、実験ステーション、検出器、ソフトウェアの順



写真1 CanSAS-IV参加者集合写真

に予算額は小さくなり、そのためにもデータフォーマットや解析ソフトウェアの共通化を進めてコスト削減をするべきだ、という意見提起があった。次に、JAERIのJun-ichi Suzuki氏から集光磁気レンズによるSANSについての講演があった。その後Diamond Light SourceのMichael Drakopoulos氏からX線領域の屈折レンズとその小角散乱への応用についての講演があった。

X線小角散乱のビームライン技術に関する講演としては、ESRFのWim Bras氏から小角・広角同時測定装置を使った実験でのデータ処理に関する問題点についての講演があった。時分割測定を行うと大量のデータが発生するが、それを処理するためにはデータ測定から基本的な解析、データの可視化まで自動で行われるような仕組みが必要だ、と強調していた。静的な測定に関してはデータ処理の自動化はそれほど難しくないとと思われるが、時分割データに関しては人的資源の集約、例えば専任のソフトウェア開発者が必要であろう、と述べていた。ESRFのTheyencheri Narayanan氏からESRF ID02ではSAXS, Bonse-Hart型USAXS, partially coherent beamを用いたdynamic USAXSのコロイド研究への応用について講演があった。同グループのソフトウェア技術者Rainer Wilcke氏からESRF ID02での小角・広角同時測定装置のデータ収集

ソフトウェアと各種補正の統合化による効率化についての講演があった。これは複数の二次元 X 線検出器からの画像の入力に対して、暗電流、画像歪みや感度補正をすべてオンラインで実行し、1 秒以内にユーザー GUI 上へ補正された画像を表示するものである。UltraSPARC-III 750 MHz で10フレーム/秒のデータを処理することが可能であるとのことだった。ESRF の A. Robert 氏からは ID10C での 2D-XPCS を利用したソフトマターの相転移に関する研究とその可能性についての講演があった。この手法は、可視光の DLS と同様な時間分解能の系のダイナミクスに関する知見が得られる。また、可視光の DLS よりも長い散乱ベクトルの情報と不透明な物質でも測定できる点で可視光の DLS よりも優れているが、試料への放射線ダメージが大きな問題である、と述べた。

また、ポスター発表に関しては、実験装置、施設関連の発表が目立っていた。X 線小角散乱の分野では、Diamond Light Source や SOLEIL のような中型第 3 世代放射光光源での SAXS 専用ビームライン計画や APS BioCAT や ESRF ID02 のビームライン高度化に関するポスターがあった。Diamond Light Source の小角散乱専用ビームライン（非結晶回折（NCD: Non-Crystalline Diffraction）ビームライン）は2007年度の稼働を目指しており、高分子、脂質、液晶、タンパク質などの幅広い非結晶状態の試料を対象とした研究を行う。また、マイクロビームや小角・広角同時測定を利用した研究も行えるように整備する予定であると述べていた。SOLEIL に関しては生物系試料だけではなく広く産業利用も視野に入れた SAXS 専用ビームラインを目指すとして述べていた。いずれのビームラインもアンジュレータを光源としたビームラインであり、高輝度、低発散のビームと小角散乱の相性の良さを十分に生かしたデザインとなっていた。

データフォーマットに関しては、NCSA の Elena Pourmal 女史から HDF5 (Hierarchical Data Format) についての話があったが、視点は大規模システムにおけるデータマイニングにあり、小角散乱のようなスモールサイエンスでの利用を考えると too much という気がした。また、NeXus データフォーマットについて、NeXus International Advisory Committee (NIAC) が発足したことが報告された。NeXus (URL: <http://www.neutron.anl.gov/nexus/>) は HDF をベースとした X 線と中性子散乱実験データ

の共通フォーマットとして APS/ANL を中心に開発が進められているものである。このデータフォーマットは高度に階層化されており、また、各種 API が整備されているので、データ入出力ソフトウェアの開発が容易である、という利点を持つ。しかし、専用のデータ表示ソフトウェアを用いないとデータの数値を見ることができないなど、使い易さという点で未完成の部分が多い。

最後の講演として、CCP13の議長である John Squire 氏から CCP13の歴史と現状、そして将来計画などについての話があった。CCP13は本来 Fiber diffraction のためのソフトウェア開発プロジェクトであり、イギリスが研究資金を提供している。そして、近年、高分子やコロイド系、タンパク質溶液散乱からのモデリングなどにもテーマを拡張する方向が議論されていると報告があった。

セッションの合間に施設見学があり、7~8人ずつグループ化して ISIS 実験ホール、Diamond Light Source の建物の建設現場など約1時間半ほどかけて見学を行った。Diamond Light Source のリング棟に関しては6割程度完成しており、急ピッチで建設が進められている、との話があった。

全体の印象として、本来の議題から枠を広げすぎた感があった。本来のテーマであるデータフォーマットや解析技術の共通化について、最終日に合計で1時間半ほど議論したに過ぎない。会議が2日半あったことを考えると割合が少な過ぎると感じた。もう少し議論する時間を設けるべきだったのではないだろうか。特に、解析技術、2次元データを1次元化するところなどは誤差の伝播も含めた議論が必要であろう。すでに4回目の会議を終え、X線と中性子の違いによる実験デザインや実験データの持つ情報についての差異について共通の視点が構築されたものと思う。CCP13と canSAS のオーバーラップが大きくなる可能性があり、この6月に ESRF で行われる CCP13 Annual meeting に Steve King 氏と Nick Terrill 氏が参加して率直な意見交換を行うこと約束した。今後このようなスタイルを続けていくのかも含めて、IUCr SAS Committee や CCP13 と話し合いを持ち、小角散乱コミュニティの形成を急ぐことも確認された。次回は2006年に京都で開催される SAS2006の中で、もしくは小規模なサテライトとして canSAS-V を開催することが提案された。