



6. 検出器・データ取得システム・ 実験機器制御・解析

初井宇記^{1,2}, 亀島 敬², 小野 峻¹, 桐原陽一¹, 工藤統吾^{1,2},
小林和生^{1,2}, 遠茂谷誠彦², 尾崎恭介¹, 城地保昌², 徳久淳師¹,
堀米利夫³, 山鹿光裕², 古川行人², 清道明男², 杉本 崇², 広野等子²,
大端 通², Arnaud Amselem², 田中良太郎²

¹理化学研究所 播磨研究所 〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1 丁目 1-1

²高輝度光科学研究センター 〒679-5198 兵庫県佐用郡佐用町光都 1 丁目 1-1

³自然科学研究機構 分子科学研究所 〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町西郷中38

要旨 X線自由電子レーザー施設 SACLA では、大強度のフェムト秒 X線レーザーが生成される。SACLA の利用実験では、試料をパルス毎に取り換えながら実験を行うので、パルスに同期して実験データを取得できる X線 2次元検出器とデータ取得システムを開発した。また、このシステムを利用すると SASE に由来するパルス特性の揺らぎを考慮したデータ解析が可能となる。X線 2次元検出器からは最大約 2 TByte/hour のデータが得られる。この大量データの解析を可能にするインフラの整備状況についても現状を概観する。

6.1 はじめに

SPring-8 敷地内に建設された X線自由電子レーザー施設 SACLA では、空間コヒーレンスを持つ高強度のフェムト秒パルス X線が生成される。利用実験ではこのような X線パルスの特性に合わせて有効にデータを取得していく必要がある。試料に照射すると試料が破壊されることが多いため、パルス毎に試料を交換しながら実験を行う。このような実験で光源の持つ特徴を最大限に引き出すためには、それぞれのパルス毎に実験データを取得・整理しながら結果を解釈していく、という実験手法が主流となる。また、SASE によるレーザー発振ではパルス毎にスペクトルや強度が揺らぐことが避けられないが、パルスに同期してデータを取得することにより、光特性の揺らぎと実験データの相関を考慮したデータ解析が可能となる。

スペクトルや散乱計測では、波長や回折角をスキャンするのではなく、これらを空間的に検出器上に射影して計測することが有利になるので、検出器としては X線 2次元検出器が必須となる。フェムト秒スケールの時間内に多数の X線光子が同一ピクセルに飛来するので、電子回路で X線光子数を計数することは不可能となる。そのかわりに、X線によってセンサー内に生じた信号電荷の総量を正確に読み取る、XFEL 専用の検出器開発が必要である。

パルス毎にデータを取得する実験では、X線 2次元検出器だけでなく、ビームラインのパルス強度や位置、タイ

ミングなどの診断系でも、パルスに同期したデータ取得が必要である。これを可能にする専用の同期データ取得システムの開発・整備を行った。このシステムによって、すべてのデータにパルス番号（タグ番号）が紐付けされて保存される。

パルス毎にデータを保存することに加えて 2次元検出器の使用が標準となるため、最終的に得られる実験データ量も飛躍的に大きくなる。したがってデータの解析時に大規模な数値解析が必要となる。また、実験中にデータの質を判定する際にも相当程度の解析を行う必要がある。これを実現するため、SACLA 内の PC Cluster によるデータ解析環境を整備し、京速コンピュータ「京」とオンラインで連携する実験解析を可能にすべく整備を進めている。

本稿では、SACLA におけるパルスに同期した実験スキームを可能にする X線 2次元検出器、特に供用可能となっている Multiport Charge-Coupled Device (MPCCD) 検出器とデータ取得システムについて概説したうえで、データ解析のためのインフラの概要を述べる。最後に今後の展望についてまとめる。

6.2 MPCCD 検出器の概要

XFEL での多くの利用実験では、1光子から多数の光子までを検出できる低ノイズ高ダイナミクス性と、パルス毎にデータを取得するための高速読み出しを兼ね備えた 2

次元検出器が必要となる。このような特性を持つ検出器は存在しないため、SACLAだけでなくLCLSやEuroXFELなどで検出器開発が活発に行われている。SACLAでは供用開始時に確実に利用可能とする検出器としてMPCCD検出器を、供用開始後の高度化時に利用可能とするSOIセンサー技術を利用したSOPHIAS (Silicon-On-Insulator Photon Imaging Array Sensor) 検出器¹⁾を2009年に選定し開発を進めてきた。以下では現在供用に付しているMPCCD検出器の概要について述べる。

XFEL利用実験では多様な実験スキームが提案されているが、要求されるX線2次元検出器の基本性能は似通っている。そこでSACLAでは、各実験に最適化した検出器を複数開発するのではなく、多様な検出器形状に柔軟に適用できる検出器プラットフォームを開発することにした。このプラットフォームでは、センサーを含む検出器の各コンポーネントをモジュール化し、実験毎の要求の差異をモジュール構成の違いで吸収する。MPCCD検出器では、ビームラインのビーム診断用分光器やゴニオメーターに搭載するブラック回折計測などにはMPCCDセンサーを1個搭載した小型の検出器を使用し、コヒーレント回折顕微鏡や微小結晶構造解析などの用途には、同一センサーを8個モザイク状に並べた検出器 (MPCCD Octal Sensor Detector) を使用する。量産に成功したMPCCD

phase Iセンサーの性能をTable 1に示す。センサー内の8個の読み出しポートから並列に読み出すことで60 fpsを実現している。また、6 keVのX線光子に対して0.18光子以下のノイズ性能を実現しており、1光子レベルの微弱な信号を正確に計測可能である。

phase Iのセンサーでは、結晶性試料のブラック反射など強い局所的なX線信号を検出する場合に最大信号強度が不足する。そこで、phase Iセンサーに蛍光体をFOP (Fiber-Optic Plate) を介して接続したセンサーも開発した。このphase IIセンサーでは6光子程度のノイズがあるが、高強度のX線ピークであっても計測が可能である。phase Iセンサーは空間分解能とピーク信号を優先させた設計となっているため、高エネルギーX線領域での感度に難がある。そこで、有感層を50 μmから300 μmへ厚くすることにより感度特性を改善したphase IIIセンサーを開発しており、2013年度に供用開始の予定である。これにより12 keVでの量子効率率はphase Iの20%から70%へ改善される。

6.3 MPCCD 検出器のモジュール構成

MPCCD Octal Sensor Detectorの場合のMPCCD検出器のモジュール構成をFig. 1に示す。センサーモジュールはそれぞれ読み出しボードに接続され、さらに1対1で後段のデータ取得用サーバー (Data-Handling Server) に接続し、最終的にストレージシステムに保存される。Data-Handling ServerにキャッシュされたデータはEvent-Building Serverにも転送され、アレイ状に並んだデータに再構成されてユーザー端末上にリアルタイムで表示される (LiveView)。

センサーモジュールの外観をFig. 2に示す。センサー本体の下部にインバー部材を接着し、さらにインバーブロックよりもセンサーが外側へ張り出す構造となっている。この構造によって、センサーを長辺方向と短辺方向の両方向に敷き詰めることができる。現在稼働中の8つのセンサーを並べた検出器 (MPCCD Octal-Sensor Detector) をFig. 2cに示す。この検出器では中央部に入射X線/極小角散乱を下流に導く穴を設けており、開口サイズをモーターにより制御することが可能である。これは、センサーからの配線に柔軟性をもつS字型のフレキシブルケーブルを採用することで実現している。

MPCCDは表面入射型の金属酸化膜半導体 (MOS) 構造を持つセンサーのため、一般にX線照射に対する耐久性は低い。そこで、年間X線照射量²⁾を 1.6×10^{14} photon/mm²と想定し試作センサーについて耐久性評価を行ったところ、XFEL用途の場合はリーク電流の増大と酸化物層の帯電による動作電圧のシフトがセンサーの寿命を制限することを明らかにした。この結果をもとにピクセル構造を最適化した実センサーを製造したところ、1年間の想定

Table 1 Specifications and Achieved Performance of Multiport CCD sensor

Description	Achieved	Unit
Pixel size	50×50	μm
Pixel Number	1024×512	—
Imaging Area	51.2×25.6	mm ²
Sensing Material	Epitaxial Silicon	—
Sensing Layer Thickness	50	μm
Sensor Structure	Front-illumination	—
Image format	Full Frame Transfer	—
Operation Temperature ¹⁾	0~30	°C
Quantum Efficiency	80	%@6 keV ²⁾
	20	%@12 keV
System Noise	<300 ³⁾	e ⁻⁴⁾
	0.18	photons@6 keV ⁴⁾
Peak Signal ⁵⁾	2500-3000	photons/pixel@6 keV
	4.1-5.0 ⁶⁾	Me ⁻ /pixel
Radiation Hardness	>1.6×10 ¹⁴	photons/mm ² @12 keV
Frame Rate ⁷⁾	60	Hz
Pixel Readout Speed ⁷⁾	5.4	MHz
Readout Port	8	—
Dark signal	600	ke ⁻ /pixel/sec@20°C

¹⁾Sensor should be operated below -20°C in order to suppress the radiation induced leakage. ²⁾The detection layer is epitaxial silicon with a thickness of 50 μm. ³⁾Typical noise performance is 130-230 e-rms. ⁴⁾in rms. ⁵⁾Full well capacity. ⁶⁾Performance is lot dependent. ⁷⁾Sensors are currently operated at the reduced frame rate of 30 frame/sec with 3.3 MHz pixel readout.

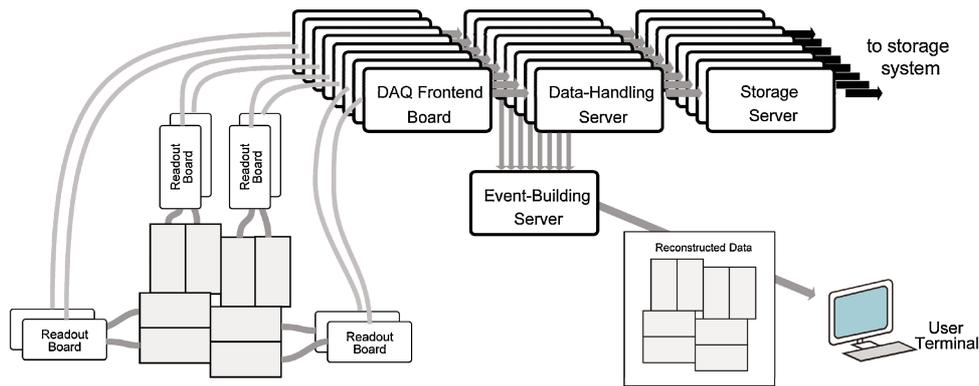


Fig. 1 Schematic of module layout for MPCCD octal-sensor detector. Each sensor is connected to a DAQ-frontend board via a readout board, where the analog signals are converted to digital data. All the data are sent to the storage system via data-handling and storage servers. Cached data on the data-handling servers are also transmitted to an event-building server, and reconstructed to arrayed data, which is displayed on the user terminals.

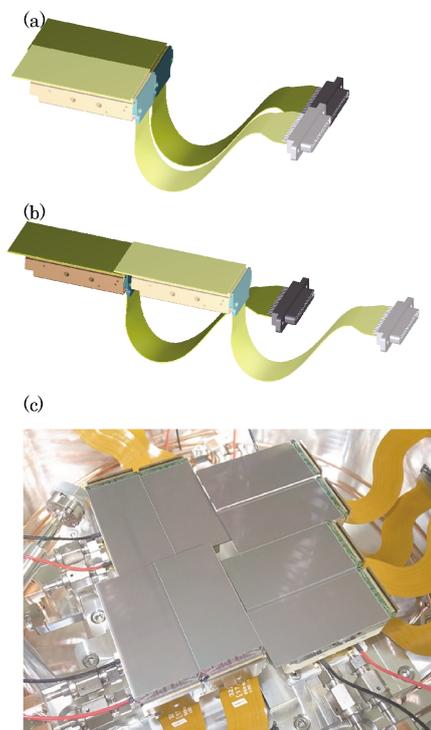


Fig. 2 Examples of MPCCD sensor array for 1024×1024 pixels (a) and 512×2048 pixels (b). Sensor is mounted onto an invar packaging block with an overhang assembly. The MPCCD sensor package with 4-side buttable modular design allows wide range of array formats. The 8 sensor array with 2048×2048 pixels in operation at SACLA is shown (c). The central hole is used to deliver the direct x-ray beam downstream, where another MPCCD detector is positioned to detect ultra-small angle scattering.

X線照射量を浴びても全体性能が劣化しないことが確認出来た。**Fig. 3**にX線照射後のリーク電荷量の温度依存性を示す。センサーを -20°C 程度まで冷却することによりリーク電流を大幅に低減でき、ノイズ性能に悪影響を与えないことがわかる。最大信号強度（飽和電荷量）は設計目

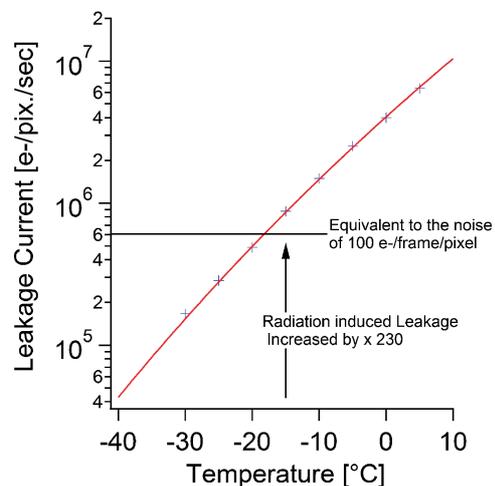


Fig. 3 Leakage current measured for a MPCCD Phase I sensor after x-ray irradiation of 1.6×10^{14} photons/ mm^2 at the photon energy of 12 keV, which is a presumed annual x-ray dose at SACLA. Radiation induces larger leakage charge by 230 times. In order to keep the single photon sensitivity, the leakage induced noise should be less than 100 e^- rms, which corresponds to the leakage current of 6×10^5 $\text{e}^-/\text{pixel}/\text{sec}$. This will be achieved by cooling the sensor down to -20°C .

標が 5 Me^- であったが、実際に製造したセンサーを測定したところ $4.1 \sim 5.0 \text{ Me}^-$ の間に分布していた。十分な歩留まりを実現するため、 4.1 Me^- を満たすべき仕様性能とし供用に用いている。

センサーモジュールは読み出し回路に接続しており、ここでセンサーが出力する電圧信号はデジタル信号に変換される。読み出し回路には高ゲインと低ゲインの2系統の信号処理回路を備えており、信号強度に応じてピクセル毎に適切な回路からのデータを出力する。各系統の回路特性は事前に校正を行い、校正パラメーターを各画像データに追加して出力する設計となっている。後段のデータ取得システム中で校正パラメーターを用いて自動的に校正が行わ

れるので、利用者は校正を気にすることなくデータの可視化・保存ができる。読み出し回路もモジュール化されており、単独および複数を連結した場合いずれも動作するように設計されている。複数連結時は、読み出し回路の1つをマスター、他をスレーブモードに設定し、マスターに設定されたボードからベースクロックとトリガー信号を配る構成となっている。

6.4 データ取得 (DAQ) システムの概要

データ取得システムは、加速器やアンジュレーター部の主要データとビームラインの各診断機器や X 線 2 次元検出器などの実験データをパルスに同期してデータ取得するものである。SACLA では多様な実験スキームに柔軟に対応できるデータ取得システムが XFEL 科学の新しい可能性を開拓するために必須と考え、ユーザーが持ち込んだ計測機器もデータ取得システムに容易に連結できるように設計されている。Fig. 4 に機能的な概念図を示す。本データ取得システムでは、すべてのデータにタグ番号を付けて保存する。電子ビームのバンチ電荷などのマシンステータス、およびビーム診断部で測定されたパルス強度やビーム位置などは常時保存されている。診断部に設置されているビーム形状などのモニターは可視カメラが用いられているが、これらについてもタグ番号が付与されてデータ取得が行われる。アライメント時、あるいはサンプルをスキャンしながら実験を遂行するためには、パルスモーターを駆動しながらデータ取得することが必須である。そこで、パル

スモーターの位置、および駆動・停止といったステータスもタグ番号に紐づけられて保存されている。またユーザー機器についてもデータをデータ取得システム側にアップロードすれば、その時点のタグがつけられて保存される。

定型的な実験については、施設側で準備した制御・データ取得プログラムがユーザー端末から利用可能である。また、パルス毎のデータは施設側が提供する API ライブラリを利用することで取得可能であるほか、Python などのスクリプト言語でも利用できる。また LabVIEW 用ライブラリも提供しているため、LabVIEW による計測システムと施設側システムを連動させた実験も行われている。

データ取得システムでは 6 分間 (標準設定) の実験を run と定義し、run 単位もしくは複数の run 単位での実験データのダウンロードができる。この run データは HDF5³⁾ フォーマットに格納されており、市販のソフトウェアや専用のライブラリで読み出すことが可能である。MPCCD Octal-Sensor Detector では 60 Hz で 1 時間実験すると約 2 TByte の生データが得られる。このような大量のデータから実験状況を診断するのは簡単ではない。そこで run データをダウンロードする際には、信号強度が強いフレームのみを選別するなどの機能を持つ low-level フィルターをかけて、条件に適合したパルスのデータのみをダウンロードすることもできる。選別条件はユーザーが設定可能である。生データにはサンプルにヒットしていない不良データも多く含まれていることから、すべてのデータを無条件に長期保管することはストレージ容量を圧迫するので得策でない。そこでユーザーが短期保管用のディスク

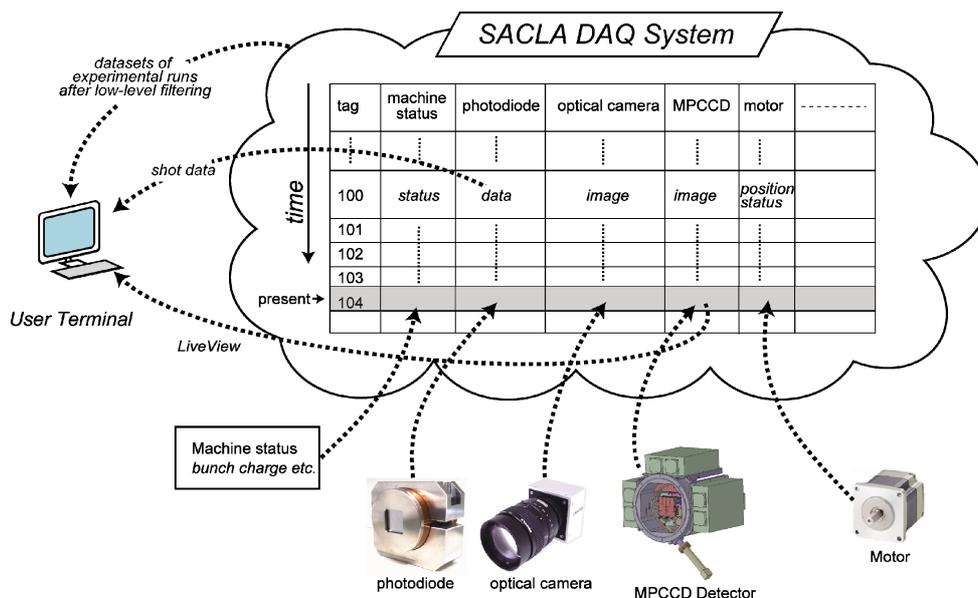


Fig. 4 Functional Schematic of SACLA Data Acquisition (DAQ) System. Data from all the detectors as well as the motors positions are labeled with the tag number of the associated XFEL pulse, and stored into the SACLA DAQ system. The shot data can be fetched from user terminals. Real-time monitoring scheme called LiveView dedicated to the real-time monitoring of the waveform and image is also available. Users can download the datasets of the specified experimental runs after low-level filtering.

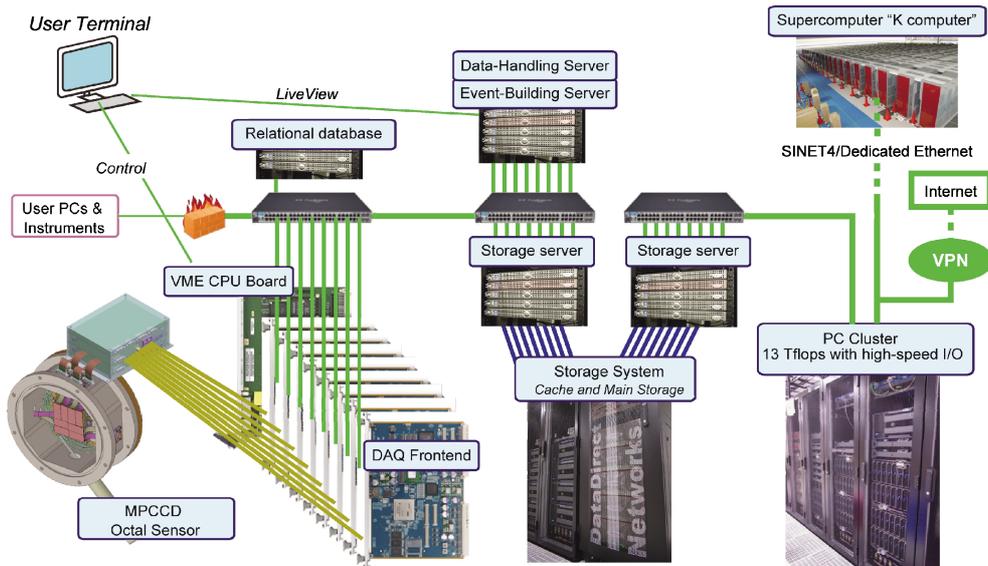


Fig. 5 Overview of the SACLA DAQ system. Data from the detectors are first transmitted to the DAQ frontend, and pooled on the memory of the data-handling servers. These data are securely saved into the high-speed disk cache of the storage system. High-level filtering and pre-analysis of the data are carried out on a PC cluster, The super-computer “K computer” is connected via networks so that on-line analysis of the experiment will be feasible.

・キャッシュからメイン・ストレージ（2012年度整備）へデータを移動する時に、low-level フィルターをかけて明らかな不良データを排除できるよう整備を進めている。

6.5 データ取得 (DAQ) システムおよび機器制御の実装

Fig. 5 に実際に構築したデータ取得システムの概要を示す。本システムでは、データを保存する仕組みとしてリレーショナル・データベースと高速ディスク・キャッシュを採用している⁴⁻⁵⁾。パルス強度測定用のフォトダイオードなどのパルス毎のデータ量が小さな検出器（0次元検出器）については、加速器と共通の同期データ取得システムによってリレーショナル・データベース (MySQL) ヘデータが常時保存されている。一方、パルス毎に 1 MByte オーダーのデータが生じる波形や画像データ（1-2次元検出器）については、まず Data-Handling Server に送られる。このサーバーはメモリー上に大きなデータキャッシュを保持しており、一時的にデータをプールすることができる。プールされたデータは、ストレージサーバー計算機を介してディスクで構成されるキャッシュ・ストレージに確実に保存される。Data-Handling Server はプールされたデータを端末へ転送する LiveView 機能も有しており、実験中にデータをリアルタイムにモニターすることができる。各計算機等コンポーネントは 1 Gbps もしくは 10 Gbps ネットワークで接続されており、最大 MPCCD センサー12個からのデータを同時に伝送するために必要な 5.8 Gbps の広帯域データ取得が実現できている⁶⁾。この帯域

でユーザー利用実験を行うと、半年間で約 1 PByte の実験生データが生じる。そこで2012年度には、設置済みのキャッシュ・ストレージ（現行約 200 TB）の増強に加え 1 PByte 以上の容量を持つ長期データ保管用のメイン・ストレージも整備する。このメイン・ストレージには、キャッシュ・ストレージから low-level フィルターを行って無駄なデータを取り除いた後のデータを保管する。様々な利用実験において期待する選別が実現できるよう low-level フィルターの高度化も順次行っていく。

実験ホール内には計測機器が分散して設置されている。これらはネットワークで連結されており、SPring-8 での加速器制御で実績のあるフレームワークである Message And Database Oriented Control Architecture (MADOCA) を利用することにより遠隔からの機器制御を実現している。今回開発したデータ取得システムは、MADOCA フレームワークに利用実験に必要な広帯域データ取得機能を追加して実現した。

6.6 データ解析

SACLA には、データの 1 次解析用として約 13 TFlops の計算能力をもつ PC Cluster を整備している。この PC Cluster はすべてのノードが約 8 GByte/sec で読み書き可能な共有ファイルシステムに接続しており、大容量のデータを高速アクセスしてデータ解析を行うことに最適化された構成となっている。このシステムには画像の特徴を高度な解析で診断し有効なデータのみを選別する high-level フィルターを行うソフトウェアを順次整備していく。また、

コヒーレント X 線回折顕微鏡のための解析ソフトウェアについてもユーザーコミュニティと共同で国際的に開かれたオープンな形で開発・整備を進めていきたいと考えている。コヒーレント X 線回折で 3 次元構造解析を行うためには大きな計算能力が必要である。そこで、理化学研究所計算科学研究機構と共同で、2012 年秋から供用開始予定の京速コンピュータ「京」においても解析が行えるようデータ転送・データ解析用 I/O ライブラリ等の整備を開始している。10 Gbps の広帯域が利用可能な学術情報ネットワーク (SINET4) 経由のデータ転送については接続試験・最適化を行っているところである。常時安定にデータ転送を行うことが出来る専用線についても今後整備をしていきたい。これらのデータ転送基盤の整備により「京」を利用したデータ解析が可能になると、大量のデータであってもビームタイム中にデータの品質を即座に判定できるようになり、実験の質的飛躍に結びつくと期待される。

6.7 まとめと今後の展望

供用にむけて開発・整備を行った X 線 2 次元検出器 MPCCD とデータ取得システムを概観した。解析については、インフラ整備が終了し、解析ライブラリ・ソフトウェアの整備に取り組みつつある状況である。また、スーパーコンピュータ京との連携については、データ転送などの基盤の整備に見通しが立ち、最終的なデータ解析を目指した開発を進めている。

今後は、より多様な実験への MPCCD の適用と高度化を行う。CCD は本質的に遅い電荷転送を利用する技術であるため、高速化に限界がある。また、大電荷の高効率転送が困難であるためピーク信号強度の改善も難しい。そこで、これらの技術的制約を打ち破ることが可能な新しい SOPHIAS センサー¹⁾の開発もあわせて行っており、2013 年には 1 センサーを搭載した小型検出器の供用化を目指している。

本稿で紹介した検出器およびデータ取得・解析システムは、利用実験の進歩に従って進化発展していくべきものである。今後は、より堅牢なシステムとして開発を進めると共に、利用実験の将来の動向を踏まえながらより使いやすいシステムになるよう改善に努めていきたい。

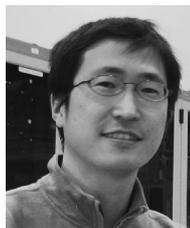
LCLS や Euro XFEL では、ワークショップを何度も開催し各コミュニティの要望を集約することにより実験装置

開発を進めている。一方 SACL A では、ワークショップだけでなく、研究者同士の膝詰めの議論を土台にし、将来的な発展を可能にする柔軟性のあるシステムの開発を進めてきた。したがって、特異な実験スキームが必要となる挑戦的な実験であっても対応できるものとなっている。

参考文献

- 1) Multi-via 概念を利用した高ダイナミクスセンサーで、これまで Multi-via 検出器と呼んでいたもの。
- 2) 各フレームに対して 1 pixel あたり 12 keV の X 線が 500 光子センサー面に到達する条件で、60 フレーム/秒で 150 日間連続して実験を行ったときに相当する X 線照射量。
- 3) <http://www.hdfgroup.org/HDF5/>
- 4) M. Yamaga, A. Amselem, T. Hirono, Y. Joti, A. Kiyomichi, T. Ohata, T. Sugimoto, R. Tanaka and T. Hatsui: Proceedings of ICALEPCS2011, Art. Number TUCAUST06 (2011).
- 5) A. Kiyomichi, A. Amselem, T. Hirono, T. Ohata, R. Tanaka, M. Yamaga and T. Hatsui: Proceedings of ICALEPCS2011, Art. Number WEPMN028 (2011).
- 6) T. Sugimoto, Y. Joti, T. Ohata, R. Tanaka, M. Yamaga and T. Hatsui: Proceedings of ICALEPCS2011, Art. Number WEBHAUST03 (2011).

● 著者紹介 ●



初井 宇記

物理化学研究所 放射光科学総合研究センター XFEL 研究開発部門 ビームライン研究開発グループ データ処理系開発チーム チームリーダー
E-mail: hatsui@spring8.or.jp
専門: X 線計測, X 線分光

【略歴】

1999 年総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻博士課程修了博士(理学), 1999 年日本学術振興会特別研究員, 2000 年岡崎国立共同研究機構・分子科学研究所・助手, 2006 年科学技術振興機構 さきがけ研究員(兼任), 2007 年自然科学研究機構・分子科学研究所・助教, 2007 年財団法人高輝度光科学研究センター・利用促進研究部門・研究員, 2008 年理化学研究所・X 線自由電子レーザー計画推進本部・利用グループ・データ処理系開発チーム・チームリーダー, 2011 年 4 月より現職。

6. Detector, Data Acquisition System, Instrument Control, and Data Analysis

Takaki HATSUI^{1,2}, Takashi KAMESHIMA², Shun ONO¹, Yoichi KIRIHARA¹, Togo KUDO^{1,2}, Kazuo KOBAYASHI^{1,2}, Motohiko OMODANI², Kyosuke OZAKI¹, Yasumasa JOTI², Atsushi TOKUHISA¹, Toshio HORIGOME³, Mitsuhiro YAMAGA², Yukito FURUKAWA², Akio KIYOMICHI², Takashi SUGIMOTO², Toko HIRONO², Toru OHATA², Arnaud AMSELEM², Ryotaro TANAKA²

¹RIKEN Harima Institute, RIKEN, 1-1-1, Sayo, Sayo-cho, Hyogo, 679-5148

²Japan Synchrotron Radiation Research Institute, 1-1-1, Sayo, Sayo-cho, Hyogo, 679-5198

³Institute for Molecular Science, National Institutes of Natural Sciences, 38 Nishigo-Naka, Myodaiji, Okazaki 444-8585

Abstract SACLA generates intense femtosecond X-ray laser pulses by SASE mechanism. Each X-ray pulse is so intense to induce the frequent specimens damage, which demands the shot-by-shot data acquisition synchronizing with the pulse X-rays. This system also enables the post analysis to correlate the obtained data and the pulse fluctuation inherent in SASE XFEL. In this report, we summarize the development of the detectors and data acquisition system. The raw data stream becomes maximum 2 TB/hour at SACLA. The current status of the development for large-scale data analysis is also addressed.
