

AOBA COMMUNIQUE 3 WORLD X-RAY SCIENCE FACILITIES

During the past year, through extraordinary efforts and dedication by the staff at the accelerator-based X-ray sources worldwide, research continued, particularly that focused on addressing many aspects of the Covid-19 pandemic. This was often made possible by carrying out such work with the users being ‘remote’ or samples ‘mailed-in’ with only staff on-site. From this experience and the use of remote access tools not just for carrying out experiments, but also for collaboration meetings, scientific meetings, user meetings and discussions, we have learned, as a community, what can be accomplished by the use of these new capabilities.

As we look forward, we will be able to open new possibilities for user access and for the engagement of an entire experimental team by sharing our experience and the tools that have been developed to provide, for example, on-line data analysis in near real time to guide an ongoing experiment. Such tools will:

1. open our facilities to underserved communities that might not have otherwise had access
2. reduce the carbon footprint of the facilities by significantly reducing the amount of user travel
3. enable international collaborations in ways we have not done in the past.

The experiments at our facilities fall into three general ‘classes’:

1. Use of well-established techniques and measurements, e.g. MX, bio-SAXS, standard micro tomography, standard powder diffraction, etc., which consist of repeated similar measurements by different user groups using standard beamline equipment;
2. Experiments (not measurements) that are complex in their conception and have specific user requirements, such as *in-situ* and *operando* experiments or other complicated samples or sample environments. These tend to vary from user group to user group, but utilize equipment routinely installed at the beamline;
3. Experiments that are close to “one-off,” i.e. that are both complex and highly demanding as they require that users bring their own equipment, which needs to be adapted to the beamline.

For “class-1” standard measurements, facilities in many cases offered remote access prior to the pandemic. However, there are many researchers who would benefit from synchrotron/FEL data, but who are often unable to make the measurements by themselves without significant training and post experiment support by facility staff. Establishing or increasing the extent of remote access along with enhanced access to training would offer these researchers excellent new opportunities.

For more complex experiments – as those in “class-2” and “class-3” – the potential for worldwide online collaboration, including participants from Asia, the Americas, and Europe, can be accomplished with a minimal number of user-team participants on site, in addition to opening up such experiments to communities that would not otherwise have access to them, for example those that lack resources to make use of them in the more traditional mode of access.

What is needed to maximize scientific outcomes:

- For all classes of experiment: further development of analysis software relying on standard data protocols is a must. It is important to recognize that, in general, higher quality data analysis often benefits from close collaboration with data scientists and access to high performance computing facilities.
- For “class-1” experiments, mail-in and remote-access is feasible, and may even be advisable and more effective than relying on an 'inexperienced' user to carry out the experiment. Requirements for “class-1” work are a standardization of the sample holders/sizes and experimental workflows, as has been pursued and achieved by the MX community. In addition, fast data evaluation is required to allow the remote user to steer the experiment.
- For the more complex “class-2” and “class-3” experiments, it is necessary to have domain-expert users on site who are directly involved in the execution of the experiment. They have expertise on the goals of the experiment, their samples, and their equipment, which is not available through facility staff, and which is critical to the effective use of the assigned experimental time. However, even in these cases remote participation of additional members of user groups may well be advisable to analyze data and to participate in/support the experiment without the need for travel. Of course, fast on-line data analysis is again extremely important to steer the experiment, and this analysis can in many cases be carried out remotely by the offsite team.

We also note that a significant increase in remote-access and mail-in schemes requires more facility staff than the equivalent amount of on-site user-driven work would. This is because facility staff are required to carry out the work that would otherwise have been carried out by on-site users and because the data and controls infrastructure required to enable remote-access and mail-in schemes itself requires additional staff to develop and maintain. Based on the experience of the past year, for a first phase of implementation for a significant increase of these new access modes an estimated 20% increase of the beamline operation and support staff would be required.

For many experiments, remote access cannot completely replace users on-site. On-site users will remain essential to the future health of the facilities and their scientific impact.

Roles of the users on-site

- Facilitate what are often the most impactful experiments.
- Many ideas for new experiments come up during informal discussions between users and staff whilst at the facility.
- Users must know what is possible to do at a beamline when they conceive their experiment and when they write a proposal for beamtime, and mail-in and remote access will not provide the necessary exchange and training between users and beamline groups.
- Their presence on-site and during experiments contributes enormously to the education and training of the next generation of X-ray scientists and engineers, people who will become future users and/or staff of the facilities. Fostering these aspects is crucial to guarantee innovation and progress in today's X-ray facilities worldwide.

For these reasons, a user-free facility should not be our aim, since this would severely hinder the progress in science. Despite the clear benefits of the new remote access tools, we need to maintain the spirit of scientific interaction at our facilities to maintain and strengthen progress in science.

New remote access opportunities, advancing X-ray science for innovation and to benefit society, and the training of the next generation of X-ray scientists and engineers will require an attentive and balanced approach for the best use of the state-of-the-art X-rays produced at synchrotrons and X-ray free electron lasers worldwide. Increased collaboration on the development of tools for easy access of the broad scientific community is required to ensure maximum benefit from X-ray facilities.

Therefore, as facilities, we commit to continue our broad collaboration efforts

- On the development of the required new tools, with the objective to establish standards making access for research with positive societal impact as efficient and effective as possible
- To develop the community of young researchers who are our future users and staff.

Delegates:



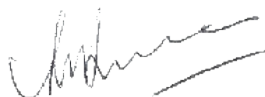
Prof. Dr. Hideo Ohno
President
TOHOKU University



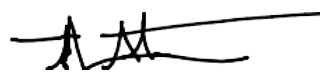
Dr. Chi-Chang Kao
Director
SLAC National Accelerator Laboratory



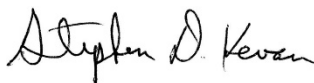
Prof. Paul McIntyre
Director
SSRL



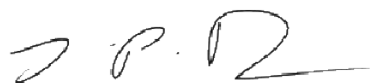
Prof. Michael Dunne
Director
LCLS



Dr. Stephen Streiffer
Director
Advanced Photon Source



Dr. Stephen Kevan
Director
Advanced Light Source



Dr. John Hill
Director
NSLS-II



Prof. Joel Brock
Director
Chess



Dr. Andrew Peele
Director
ANSTO Australian Synchrotron



Dr. Gwo-Huei Luo
Director
NSRCC



Dr. Tetsuya Ishikawa
Director
RIKEN SPring-8 Center



Dr. In Soo Ko
Director
Pohang Accelerator Laboratory



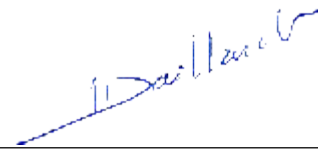
Dr. Francesco Sette
Director General
ESRF



Prof. Edgar Weckert
Research Director
DESY



Prof. Robert Feidenhans'l
Chair, Board of Directors
European XFEL



Dr. Jean Daillant
Director
Soleil Laboratory



Prof. Andrew Harrison
CEO
Diamond Light Source Limited



Dr. Caterina Biscari
Director
ALBA LEAPS Chair



Prof. Gabriel Aeppli
Head Photon Sciences
Paul Scherrer Insitut



Dr. Ian McNulty
Director
MAX-IV



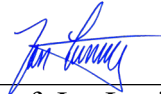
Prof. Alfonso Franciosi
CEO
Sincrotrone Trieste



Prof. Robert Lamb
CEO
Canadian Light Source Inc.



Dr. Harry Westfahl Jr.
Director
Brazilian Synchrotron Light Laboratory



Prof. Jan Lüning
Scientific Director
BESSY II @ Helmholtz-Zentrum Berlin

AOBA コミュニケ 3

この1年間、世界中の加速器を用いた X 線源のスタッフによる大変な努力と献身を通じて、特に COVID-19 パンデミックの様々な局面を対処するための研究が続けられた。これはユーザーが「リモート」である場合や、サンプルが「メールイン（郵送）」され、スタッフのみが現場で、作業の実行を可能にすることが多かった。この経験とリモートアクセスツールの使用から、実験を行うだけでなく、コラボレーションミーティング、科学的ミーティング、ユーザーミーティングおよびディスカッションにも、これらの新しい機能を使用することで何が達成できるのかをコミュニティとして学んできた。

将来的には、私たちの経験と、そのために開発されたツールを共有することで、例えば進行中の実験を指導するためのほぼリアルタイムでのオンラインデータ解析等、ユーザーアクセスと実験チーム全体の関与といった、新しい可能性を切り開いていくことができるだろう。そのようなツールは以下の通りである：

1. 他の方法ではアクセスできない可能性のある、未整備のコミュニティに施設を開放する。
2. ユーザーの移動量を大幅に削減することで、施設の二酸化炭素排出量を削減する。
3. 過去に行ったことのない方法で国際的なコラボレーションを可能にする。

我々の施設における実験は、3つの一般的な「クラス」に分類される：

1. 確立された技術と測定の使用、例えば MX、bio-SAXS、標準マイクロトモグラフィー、標準粉末回折など。これらは、標準的な BL 装置を使用した、さまざまなユーザーグループが同様の測定を繰り返すことで構成される。
2. たとえば、その場での実験やオペランド実験、またはその他の複雑なサンプルやサンプル環境など、概念が複雑で、特定のユーザーの要求がある実験（測定ではない）、これらはユーザーグループごとに異なる傾向があるが、通常 BL に設置されている機器を利用する。
3. 「1回限り」に近い実験、つまり、ユーザーが自分の装置を持ち込んで、BL に適合させる必要がある等、複雑で、高度な要求を伴うもの。

「クラス-1」の標準測定では、パンデミック前、多くの場合施設はリモートアクセスを提供していた。放射光/ FEL データの恩恵を受ける研究者は多いが、施設スタッフの十分なトレーニングや実験後のサポートなしでは、彼ら自身で測定することができない研究者も多い。リモートアクセスの確立と拡大とともに、トレーニングの改善は、研究者に優れた新しい機会を提供する。

さらに複雑な実験である「クラス-2」、「クラス-3」の場合、アジア、アメリカ、ヨーロッパからの参加者を含む、世界規模のオンラインコラボレーションが可能となり、オンサイトでのユーザーチームの参加者は最小限にすることができ、加えて、他の方法ではアクセスできないコミュニティ、例えば従来のアクセス方法ではそれらを利用するためのリソースが不足しているコミュニティにも実験を開放することができる。

科学的成果を最大化するために必要なこと：

- 全てのクラスの実験において：標準データプロトコルに基づいた解析ソフトのさらなる開発が必須である。一般的には、高品質のデータ解析は、データ科学者との緊密なコラボレーションと、高性能計算施設の利用が必要であることを認識することが重要である。
- 「クラス-1」の実験では、メールインとリモートアクセスが可能であり、「経験不足」のユーザーに実験を任せるよりも、より賢明で効果的かもしれない。「クラス-1」の作業に必要なのは、MX コミュニティで追及、達成されたように、サンプルホルダー/サイズと実験ワークフローの標準化である。さらに、リモートユーザーが実験を操作できるようにするには、迅速なデータ評価が必要である。
- より複雑な「クラス-2」、「クラス-3」の実験については、実験の遂行に直接関与する分野に精通したユーザーを現場に置くことが必要である。彼らは実験の目的、サンプル、装置に関する専門知識を持っており、これらは施設のスタッフからは入手できず、割り当てられた実験時間を効果的に使用するために極めて重要である。しかし、これらの場合でも、データ解析や、実験に参加/サポートするために、出張せずに、ユーザーグループの追加メンバーをリモートで参加させることが推奨される。もちろん、迅速なオンラインデータ解析は実験を遂行するために非常に重要であり、この解析は多くの場合、オフサイトのチームによってリモートで実行される。

リモートアクセスおよびメールインスキームの大幅な増加は、同等のユーザー主導型のオンサイトでの作業よりも、多くの施設スタッフが必要になることにも注意しなければならない。これは、施設スタッフがオンサイトユーザーにより実行されていた作業を実行する必要があり、リモートアクセスおよびメールインスキームを実現するために必要なデータおよび制御インフラを開発し、保守する追加のスタッフが必要なためである。昨年経験に基づいて、これらの新しいアクセスモードの大幅な増加を実行する最初のフェーズでは、BLの運用とサポートスタッフを20%増やす必要があると考えられる。

多くの実験では、リモートアクセスでオンサイトのユーザーを完全に置き換えることはできない。オンサイトユーザーは、施設の将来的健全性と科学的影響力を維持するためには不可欠である。

オンラインでのユーザーの役割：

- ・最も影響力のある実験を促進する。
- ・新しい実験に関するアイデアは、施設内でのユーザーとスタッフとの非公式なディスカッションから生まれることが多い。
- ・ユーザーは、実験を思いついた時やビームタイムを申請する際に、その BL で何が出来るのかを知っていなければならないが、メールインやリモートアクセスでは、ユーザーと BL グループ間で必要なやり取りやトレーニングを行うことができない。
- ・オンラインおよび実験における彼らの存在は、将来のユーザーまたは施設のスタッフとなる、次世代の X 線科学者や技術者の教育やトレーニングに大きく貢献する。今日の世界の X 線施設におけるイノベーションと進歩を保証するために、これらの局面により育成することが不可欠である。

これらの理由から、ユーザーフリーの施設を目指すことは、科学の進歩を著しく阻害することになる。新しいリモートアクセスツールのメリットは明らかだが、科学の進歩を維持、強化するためには、施設における科学的交流の精神を維持する必要がある。

新しいリモートアクセスの機会、イノベーションと社会に貢献するための X 線科学の発展、次世代の X 線科学者、技術者の育成には、世界の放射光や X 線自由電子レーザーにおいて生み出される最先端の X 線を最大限に活用するための、慎重かつバランスの取れたアプローチが必要である。X 線施設から最大限の利益を確保するために、幅広い科学的コミュニティが簡単にアクセスできるツールの開発に向けたコラボレーションの強化が必要である。

したがって、我々は、施設として幅広いコラボレーションの努力を続けて行くことを約束する：

- ・社会的に有益な影響を与える研究へのアクセスを可能な限り効率的かつ効果的にするための基準を確立することを目的とした、必要とされる新しいツールを開発すること。
- ・将来のユーザーやスタッフとなる若手研究者のコミュニティを育成すること。

代表者：