

リモート実験の準備と実演 X線による結晶センタリング

京都大学 大学院理学研究科 藤橋雅宏

東京医科歯科大学 難治疾患研究所 沼本修孝

リモート測定・概要

それぞれの所属機関・家庭などから、PFでの実験を行うことが出来る

手順

あらかじめ凍結させた結晶をUni-Puckなどのカセットにセットする

宅配便などでビームラインに結晶を送る

PF外からビームラインを操作して、実験を行う

UGUISを使う全ての操作が可能

結晶交換ロボット(PAM)を利用する事が大前提

リモート測定の特長

リモート測定の実施環境を整備すると...

・旅費が節約できる

一般のG課題の場合

グループのうち1名はPFに行く必要がある

→on-siteでMBSを開いたり、ロボットに結晶を
装填したカセットをセットするため

創薬PFの場合はPFスタッフがon-siteでの作業を代行してくれる

将来的にはある程度のお金を払えば、PFスタッフがon-site作業を
代行してくれるかも...



節約したいね...

リモート測定の特長

リモート測定の実施環境を整備すると...

- ・旅費が節約できる

一般のG課題の場合
グループのうち1名はPFに行く必要がある



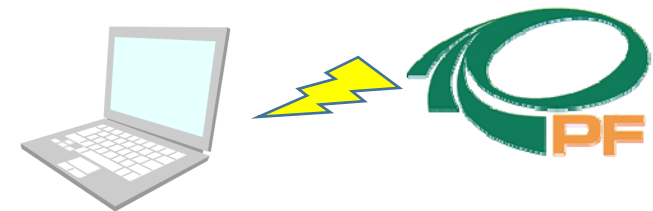
- ・結晶交換ロボットの利用が標準になる

ロボットの失敗率は人間より低い
慣れると便利で、手マウントには戻れなくなる
深夜時間帯、疲れてきたときなどは、人間より高精度
1Aの利用には必須



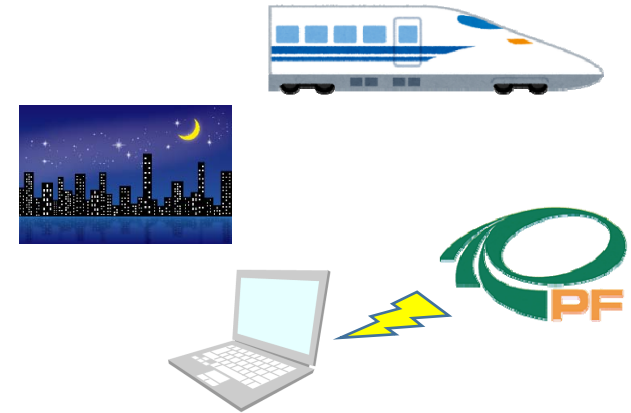
- ・所属機関などからPFにアクセスして、データをダウンロードできるようになる

全自動測定を行う際には、使えると非常に便利



リモート測定の特長とデメリット

- ・旅費が節約できる
- ・結晶交換ロボットの利用が標準になる
- ・所属機関などからPFにアクセスして、データをダウンロードできるようになる



- ・UGUISの機能外のことは出来ない

霜に液体窒素をかけることは出来ない
KEK内の放送は聞こえない (beam dumpなど)
MBSの操作はできない (PF-ARは自動で開く)
UGUIS以外の様々な画面は基本的に見えない

- ・トラブル対応は通常と同じ

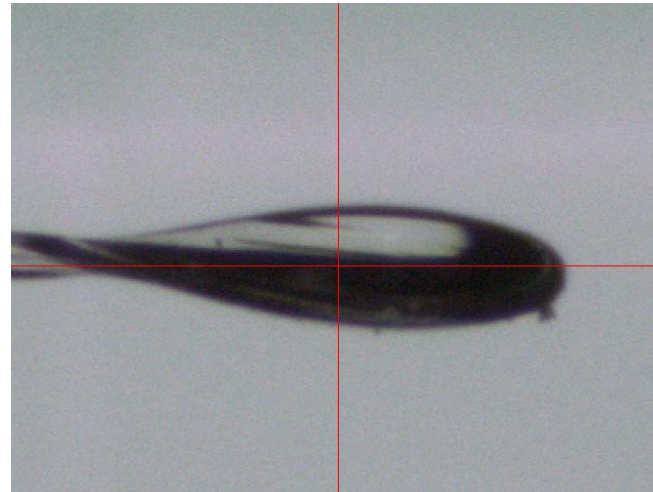
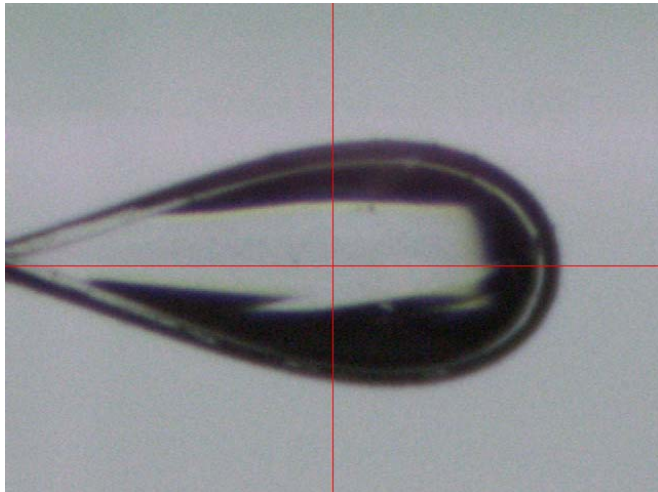
対応時間は平日24時間と休日の昼間
(特に休日夜間でグループメンバーがビームラインに
いない場合(創薬PF等)、トラブル解決が格段に難しくなる)

Summary

- ・リモート接続によるDiffraction centeringと結晶を並進させながらのデータ収集の**実演**
- ・リモート測定**の環境整備** (結晶の準備)
- ・リモートで撮ったデータのダウンロード**実演**
- ・リモート測定**の環境整備** (コンピューターの接続)
- ・リモートで撮ったデータの評価(PReMo)**実演**

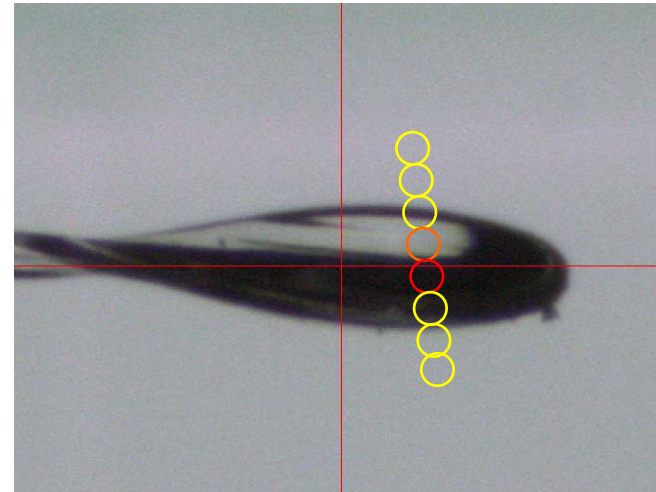
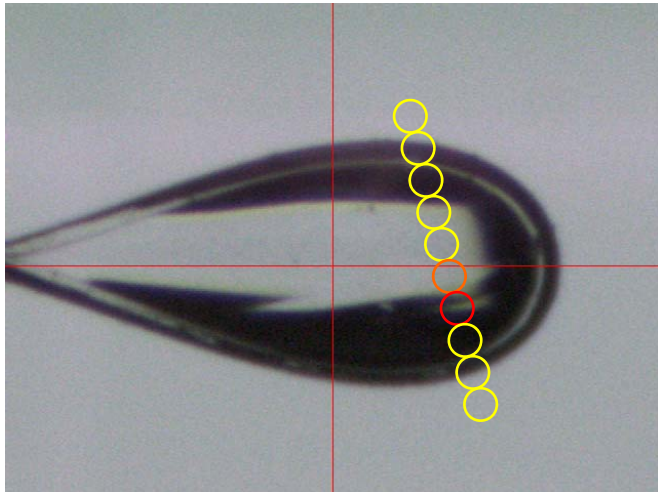
リモート操作の実演内容

- ・X線を使った結晶のセンタリング
 - ・結晶が小さくて見にくいとき、
 - ・Cryoprotectant等を載せすぎて光が屈折しループの裏と表で結晶の位置が一致しないとき
- ・結晶を並進させながらのデータ収集
 - ・細長い結晶の有効活用



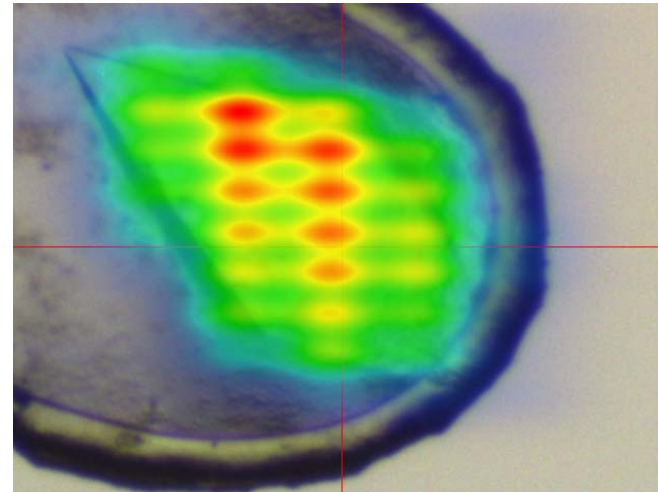
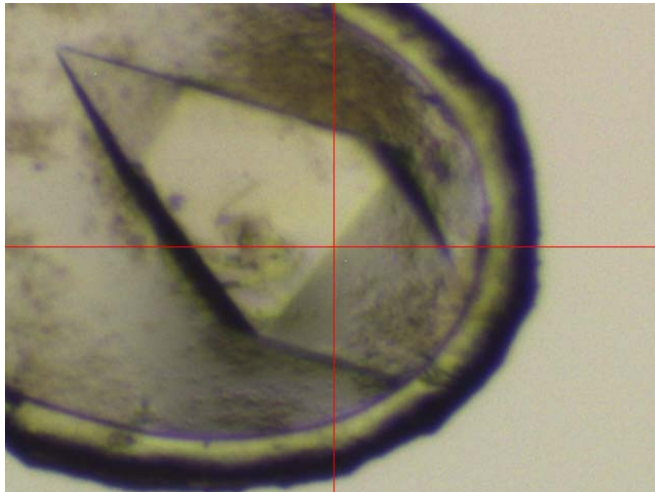
リモート操作の実演内容

- ・X線を使った結晶のセンタリング
 - ・結晶が小さくて見にくいとき、
 - ・Cryoprotectant等を載せすぎて光が屈折しループの裏と表で結晶の位置が一致しないとき
- ・結晶を並進させながらのデータ収集
 - ・細長い結晶の有効活用



リモート操作の実演内容

- ・X線を使った結晶のセンタリング
 - ・結晶が小さくて見にくいとき、
 - ・Cryoprotectant等を載せすぎて光が屈折しループの裏と表で結晶の位置が一致しないとき
- ・結晶を並進させながらのデータ収集
 - ・細長い結晶の有効活用



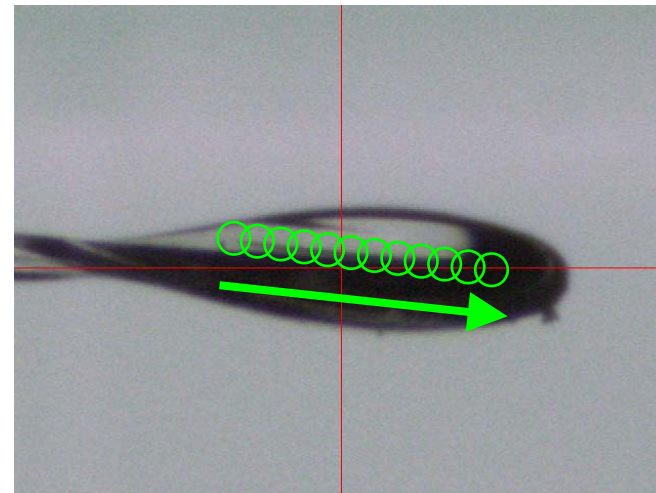
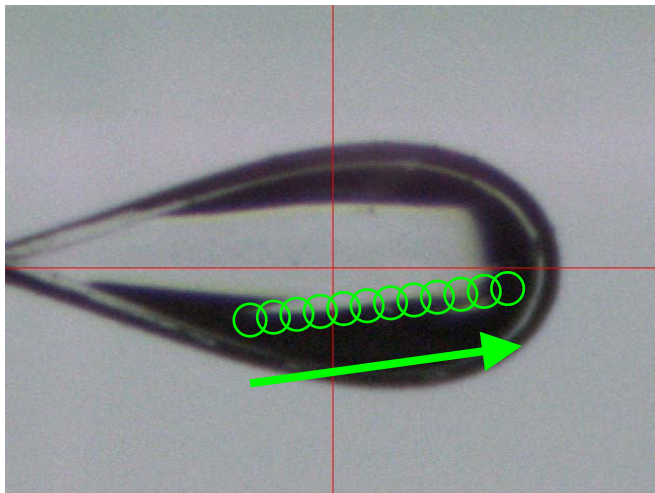
リモート操作の実演内容

- ・X線を使った結晶のセンタリング

- ・結晶が小さくて見にくいとき、
- ・Cryoprotectant等を載せすぎて光が屈折しループの裏と表で結晶の位置が一致しないとき

- ・結晶を並進させながらのデータ収集

- ・細長い結晶の有効活用



リモート操作の実演内容

結晶を装填したカセットは、あらかじめ
ビームラインのロボットにセットしてあります

1. PAMによる結晶のマウント
2. 結晶のセンタリング
3. スナップショットの撮影
4. diffraction スキャンによる結晶位置の探索
5. 結晶を並進させながらのデータ収集
6. PReMoによる簡単なチェック
7. データのダウンロード(一部)

実演

リモート測定の実環境整備

概ね次の二つの準備が必要

結晶の準備

結晶のUni-Puckへの装填

Uni-Puckに装填した結晶の輸送

リモート接続

VPN (Virtual Private Network)による
ビームラインへの接続

結晶の準備

結晶を凍結し、Uni-Puckに装填する

Uni-Puck



液体窒素で冷やしたカセットの
各穴に結晶を装填していく



結晶の準備

結晶を装填したカセットのシンクロトンへの輸送

カセットを
キャニスターに装着



ドライシッパーに
入れる



結晶の準備

ドライシッパーからは液体窒素を抜きましょう

ドライシッパーから
液体窒素を抜く



PFへ輸送



ドライシッパーは1週間程度なら液体窒素温度を保てます。
安全のため、液体窒素は必ず抜きましょう。

Uni-Puck関係の基本的なツール



Uni-Puck関係の基本的なツール

Crystal Positioning Systems社の定価 → 結構高い



Uni-Puckの価格

アメリカでは少なくとも二社で取り扱いがある



Crystal Positioning Systems社

| | |
|-----------|---------------------|
| 1 Puck: | \$350 |
| 7 Pucks: | \$2415 (\$345 each) |
| 10 Pucks: | \$3400 (\$340 each) |

Molecular Dimensions社

| | |
|-----------|---------------------|
| 1 Puck: | \$350 |
| 7 Pucks: | \$2300 (\$329 each) |
| 10 Pucks: | \$2860 (\$286 each) |

為替レートなどにもよるが、US\$1=JPY115で、
1個6万円, 7個40万円, 10個60万円程度が目安

Uni-Puck収容ケーンの価格



Crystal Positioning Systems社

\$850

Molecular Dimensions社

\$750

為替レートなどにもよるが、14万円前後

廉価版Uni-Puck収容キャニスター



左: 一般的なUni-Puck用キャニスター

どのカセットにも自由にアクセスできる

Crystal Positioning Systems社: \$850

(One-Piece Puck Shelved Shipping Cane, CP-111-065)

Molecular Dimensions社: \$750

(Puck Shelved Shipping Cane, MD7-603)

右: 廉価版Uni-Puck用キャニスター

上からしかアクセスできない

Crystal Positioning Systems社: \$375

(Puck Shipping Canister, CP-111-034)

Uni-Puck関係の基本的なツール



CPS社:
\$115each

MD社: \$125
(bent typeのみ)



両社とも
\$300



両社とも
\$275



CPS社: \$140
MD社: \$150

CPS社: Crystal Positioning Systems社
MD社: Molecular Dimensions社

ツールを安く手に入れるには

少しでも

- ・輸入品なので、直輸入できる業者に頼むと安く出来る可能性が高い
- ・出入り業者が、日本国内で在庫を持っている別の業者から取り寄せると高くなる
- ・PAMが対応するUni-PuckはCrystal Positioning System (CPS)社が製造したのみ。Molecular Dimensions (MD)社はCPS社製のもので販売しているので問題ない
- ・Hampton社販売品等、CPS社製でないPuckにPAMは対応していない
- ・少なくともCPS社とMD社の二社が取り扱っている事を業者に伝えた方が、業者としてもより安いルートを探しやすい



ツールを安く手に入れるには

少しでも

- ・輸入品なので、直輸入できる業者に頼むと安く出来る可能性が高い
- ・出入り業者が、日本国内で在庫を持っている別の業者から取り寄せると高くなる
- ・Dry shipperについては、数社から見積もった感じでは日本国内の代理店を通したほうが、個別輸入の経費より安そう

ツール類の貸出をさせて頂いています

<http://www2.kek.jp/imss/pfweis/manual/ja/uni-puck.html>



数個



概ね3ヶ月



概ね1週間

ビームライン備え付けのツール



Uni-Puckを取り扱うのに必要な一通りの道具は準備されている

リモート接続の実演内容

結晶を装填したカセットは、あらかじめ
ビームラインのロボットにセットしてあります

1. PAMによる結晶のマウント
2. 結晶のセンタリング
3. スナップショットの撮影
4. diffraction スキャンによる結晶位置の探索
5. 結晶を並進させながらのデータ収集
6. PReMoによる簡単なチェック
7. データのダウンロード(一部)

実演 (データのダウンロード)

リモート測定の実環境整備

概ね次の二つのパートに分かれる

結晶の準備

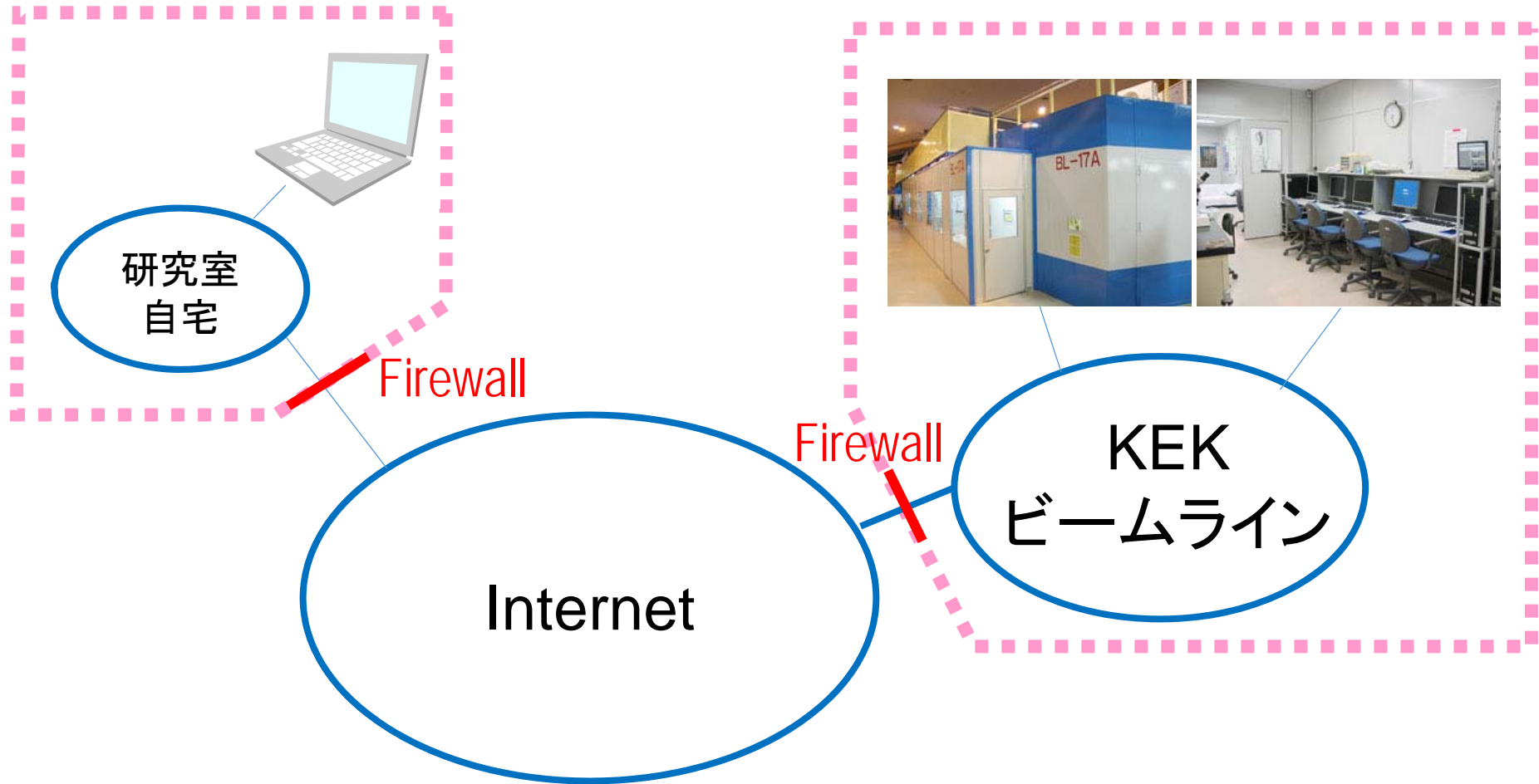
結晶のUni-Puckへの装填

Uni-Puckに装填した結晶の輸送

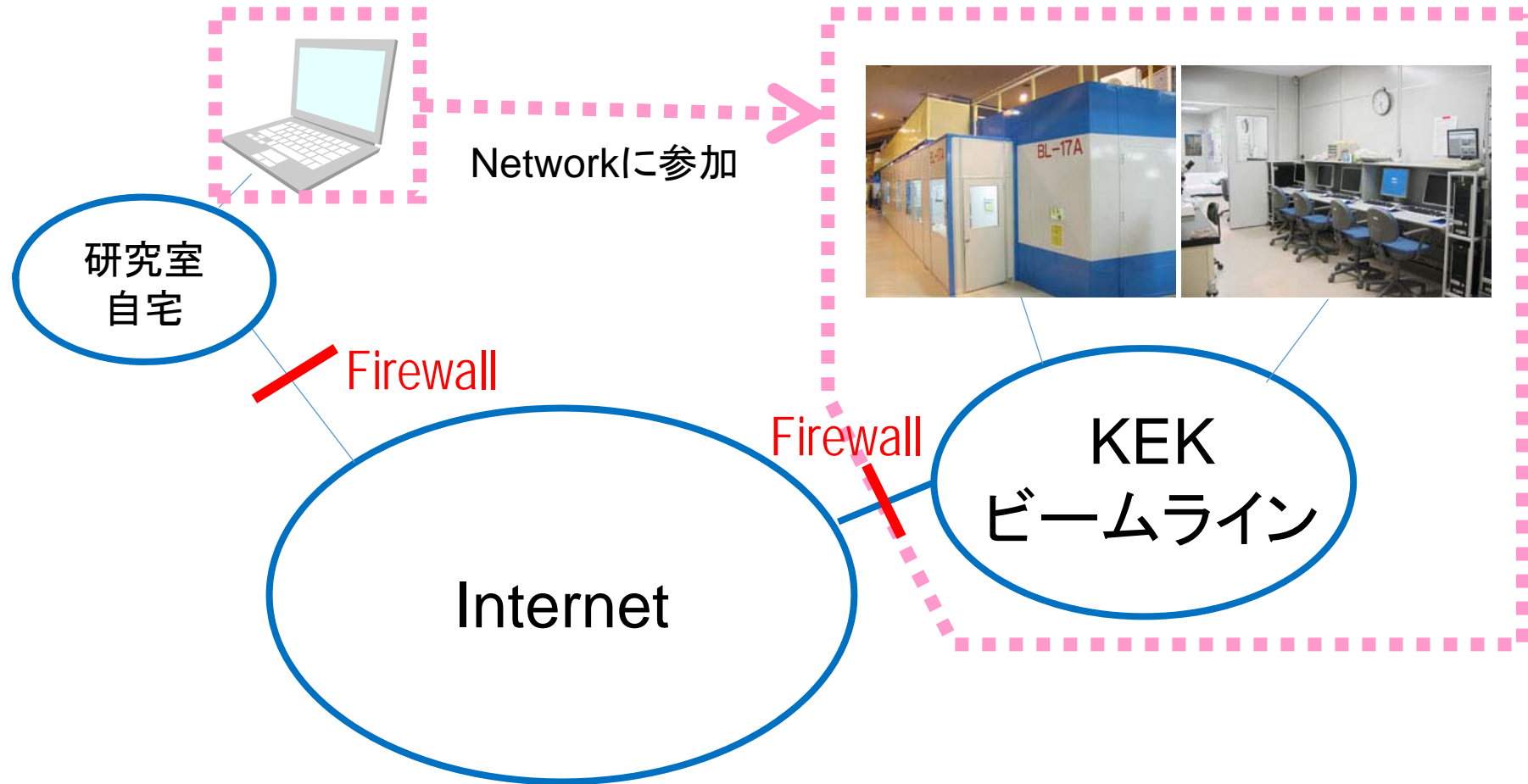
リモート接続

VPN (Virtual Private network)による
ビームラインへの接続

ビームラインへの接続



ビームラインへの接続



VPN (Virtual Private Network)

ビームラインへの接続

VPN (Virtual Private Network)

Manual:

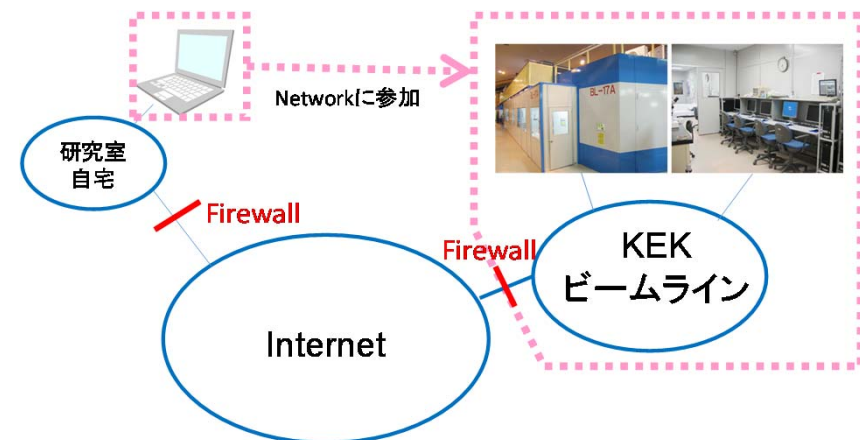
http://pfweis.kek.jp/protein/manual/ja/remote_connect_setup.html

(PFリモートアクセス で検索)

3種類の接続が準備されている

- ・PF構造生物ビームライン(SBRC)専用VPN接続
- ・KEK計算科学センターのVPN接続
- ・TeamViewerを使ったリモートアクセス

それぞれ、各研究室・大学に設置された
Firewall等との相性が異なるようです。
ビームラインスタッフに相談しましょう。



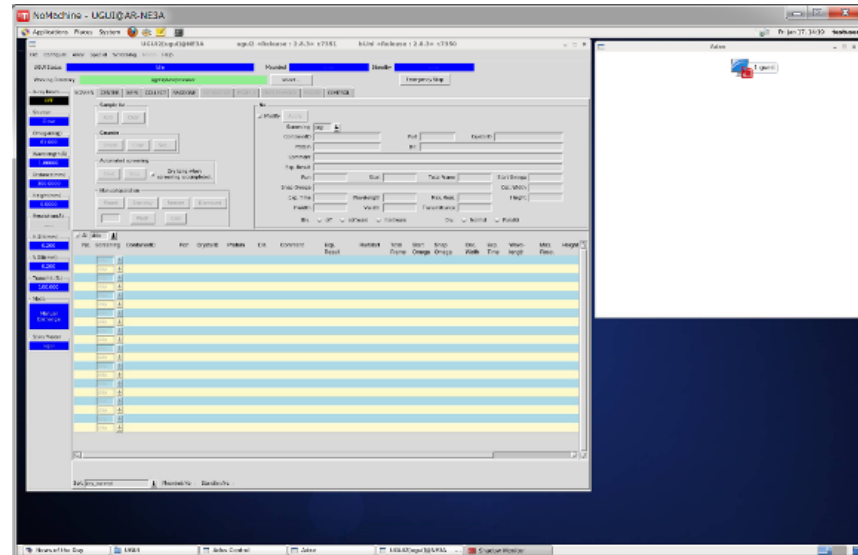
ビームラインの制御

- ・VPN接続が確立されたら
No Machineというソフトを自分の操作するPCで立ち上げ、
自分のPCから、ビームライン制御PCのUGUISを操作する

これにより

- ・ロボットによる結晶のマウント
- ・結晶のセンタリング、写真撮影
- ・Snapshot
- ・Data collection

が可能になる。



Point

- ・ビームラインには画素数の多いモニタが設置されている
 - ・Full-HDクラス (出来ればWUXGAクラス以上)のモニタがあると快適
 - ・画素数の少ないモニタだと、UGUISの画面を一度に表示できない

データのダウンロード

- ・VPN接続された状態で
sbgfs.kek.jp (データ保存サーバ)にftpでログインする
撮影したイメージデータ等をダウンロードできる



VPN接続した
PC



構造生物ビームラインの
データサーバー

- ・sshでビームラインの計算機にログインして、データ処理も
行えます

データのダウンロード

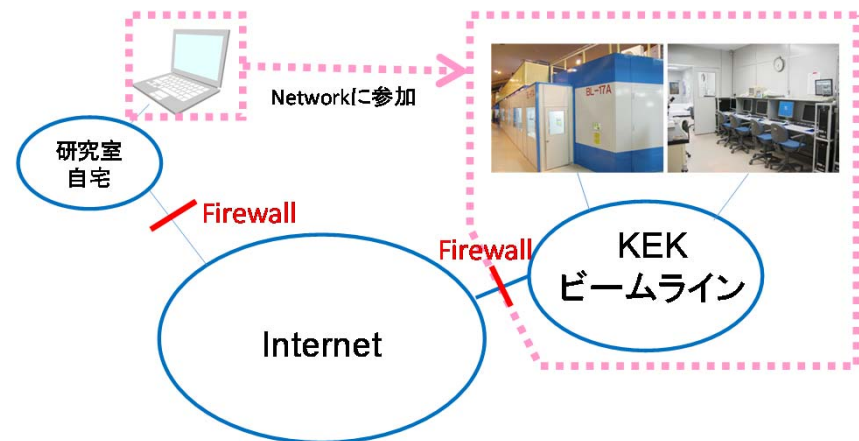
- ・VPN接続された状態で
sbgfs.kek.jp (データ保存サーバ)にftpでログインする

京都大学からは概ね1MB/secでダウンロード出来ました。

自宅(京都郊外, フレッツ光)からは概ね2MB/secで
ダウンロード出来ました。

- ・例えばNE3A(1枚あたり3MB)で、360枚
のデータを撮ると1MB/secの回線では
20分ぐらいでダウンロード出来ます

- ・夜の12時間かければ、NE3Aのイメージ
なら 15000枚ほどダウンロード出来ます。



リモート接続の実演内容

結晶を装填したカセットは、あらかじめ
ビームラインのロボットにセットしてあります

1. PAMによる結晶のマウント
2. 結晶のセンタリング
3. スナップショットの撮影
4. diffraction スキャンによる結晶位置の探索
5. 結晶を並進させながらのデータ収集
6. PReMoによる簡単なチェック
7. データのダウンロード(一部)

実演(PReMo)

Acknowledgements

高エネルギー加速器研究機構 山田悠介博士

発表と連動するリモート操作の実演を行って頂きました