

2017年度 量子ビームサイエンスフェスタ  
第35回PFシンポジウム

自動化の後ろ側

自動化の未来と教育

# パネリストの先生方

パネリスト：

佐藤 衛 先生（横浜市立大学）

中川 敦史 先生（大阪大学）

胡桃坂 仁志 先生（早稲田大学）

大友 季哉 先生（高エネルギー加速器研究機構）

宮口 郁子 先生（田辺三菱製薬株式会社）

仁谷 浩明 先生（高エネルギー加速器研究機構）

司会進行：

藤橋 雅宏（京都大学）

# 討論のトピック

- 何を自動化するか？
- 自動化によるメリット並びにデメリットとその克服
- 自動化について施設に望むこと

# 蛋白質結晶構造解析の どの工程を自動化するか？

蛋白質の発現・精製

クロマトグラフィー装置 (Aktaなど)

蛋白質の結晶化

結晶化溶液の混合をするロボット？

結晶化ドロップを作成するだけのロボットから、  
定期的に観察してくれるロボットまで

結晶からの  
データ収集・積分

←放射光施設が話題にする「自動化」  
に対してユーザーがイメージする領域

モデリングと  
構造精密化

様々なソフトウェアが出ており、一昔前  
と比べて、細かいパラメータを設定しな  
くても、そこそこの結果が出てくる

# あなたの考える自動化とは？

## ユーザーアンケートより

- 時間を短縮するための手段
- 実験の効率化による無駄な労働力の削減
- ロボットを利用した結晶マウント（現在の自動化で満足している）
- 凍結結晶を用意すれば、回折データ測定からモデリング/精密化までが行われる
- AIによる結晶に合わせた最適な測定条件の提案
- 実験者のニーズを反映した測定・解析を行い、人の手を介さずにその結果が得られる



# 討論のトピック

- ・ 何を自動化するか？
- ・ 自動化によるメリット並びにデメリットとその克服
- ・ 自動化について施設に望むこと

# 自動化によって得られたものは？

## ユーザーアンケートより

- 時間の節約による時間の有効活用
- 実験の効率化によるビームタイムの有効利用
- 客観的な指標の導入によるデータクオリティの統一
- 放射光利用の敷居の低下によるユーザーの拡大
  - X線結晶構造解析の一般化
- ヒューマンエラーの減少
- 旅費などのコスト削減



# 自動化によって失われたものは？

## ユーザーアンケートより

- 測定の自由度
- より良いデータを収集するために行う創意工夫
  
- 測定や解析の原理を学ぶ機会
- 専門的知識を持った人材の育成

## 自動化で測定がハイスループット化したため

- 1つの結晶にかける執念、1つのデータとトコトン向き合う機会
- データの妥当性の評価

# 自動化でユーザーから遠くなった 測定や解析の原理をどのように補うか？

## 補う

- 定期的な勉強会や講習会の開催
- どのプロセスが自動化されているかを理解できるような教育を行う
- 教育用に自動化されていないビームラインも利用する
- ビームラインへの人材の派遣

## 補わない

- 技術の進歩によるブラックボックス化はやむを得ない
- 測定や解析に使う時間は最低限にし、立体構造を吟味、活用することに時間を使う
- 自動測定でほとんど問題がないのであれば、普遍的な手法として深く理解する必要はない
- 学ぶ必要はないと割り切って、他のことに労力を費やす



# 討論のトピック

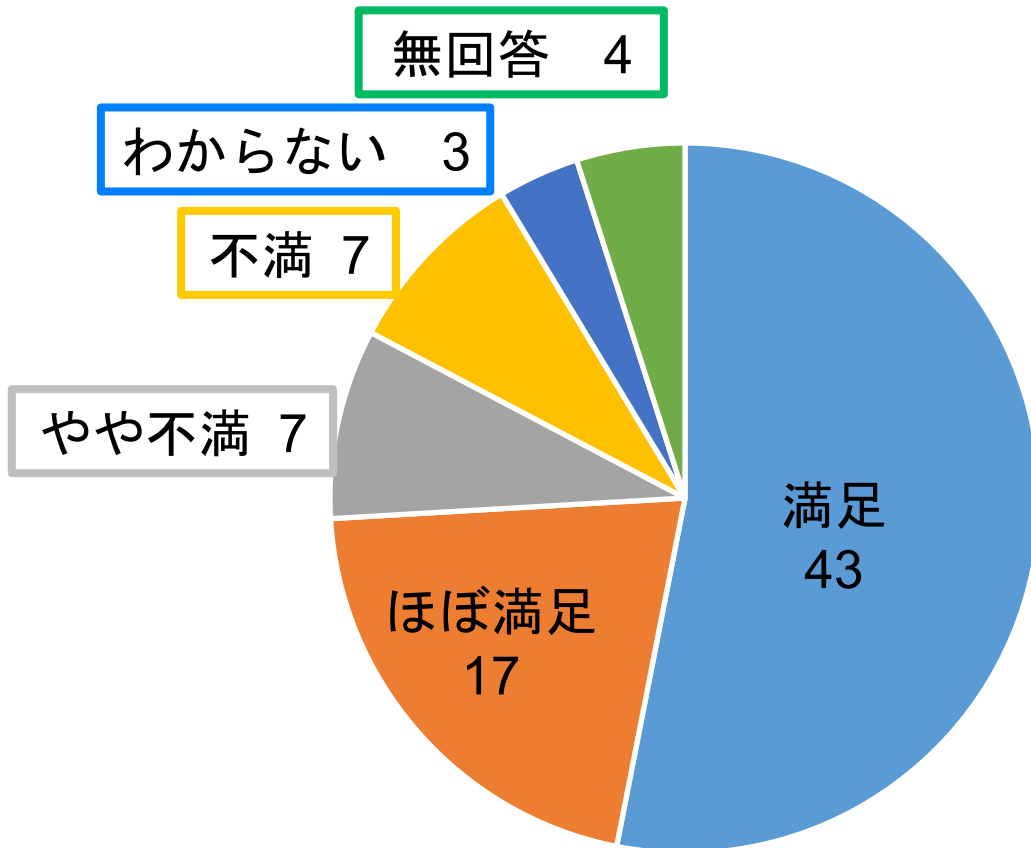
- 何を自動化するか？
- 自動化によるメリット並びにデメリットとその克服
- 自動化について施設に望むこと

# 自動化に関して施設に期待すること

## ユーザーアンケートより

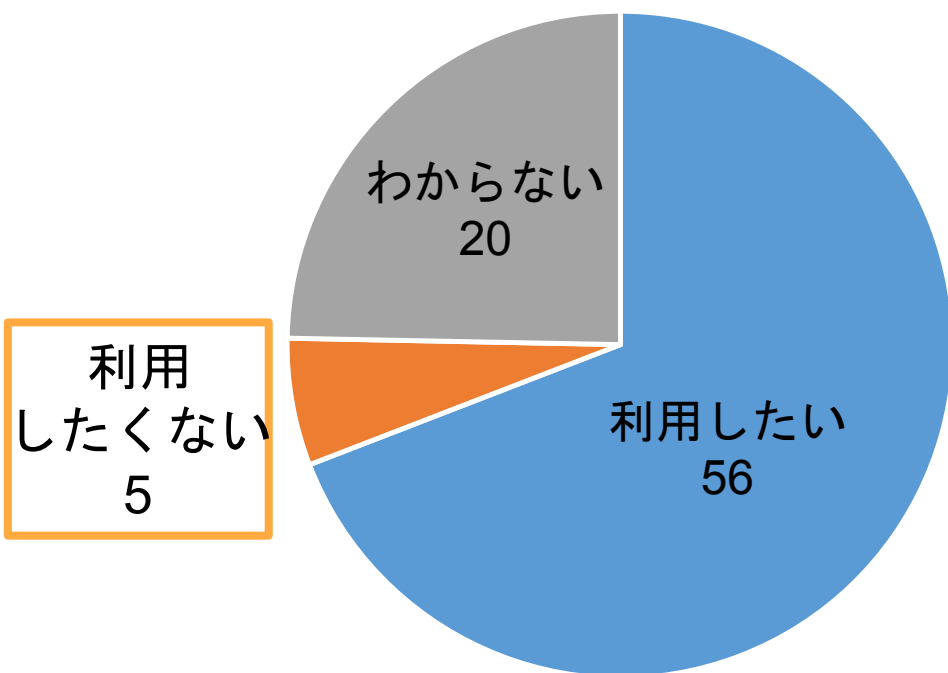
- 自動測定と手動測定のバランスが取れた運営
- Snapshotやdiffraction scanの結果から最適な測定条件を提示してくれるシステム (AI)
- 放射光実験がブラックボックス化しないような教材の開発
- 手動測定が可能なビームラインを残してほしい
- 全ユーザーが利用できるメールインサービス
- 随時ビームタイム利用制度の導入

# チームタイム供給量について



供給量には満足しているが。。。  
・チームタイム配分決定時期に不満。  
・運転している期間が短い。  
・必要なときに測定できるようにしてほしい。

# 完全自動測定システムの利用について



## 利用したい

- ・ 結晶のスクリーニングに利用したいから。
- ・ 移動の負担の軽減や出張費用の削減ができるから。
- ・ 結晶が出たらすぐに測定したいから。

## 利用したくない

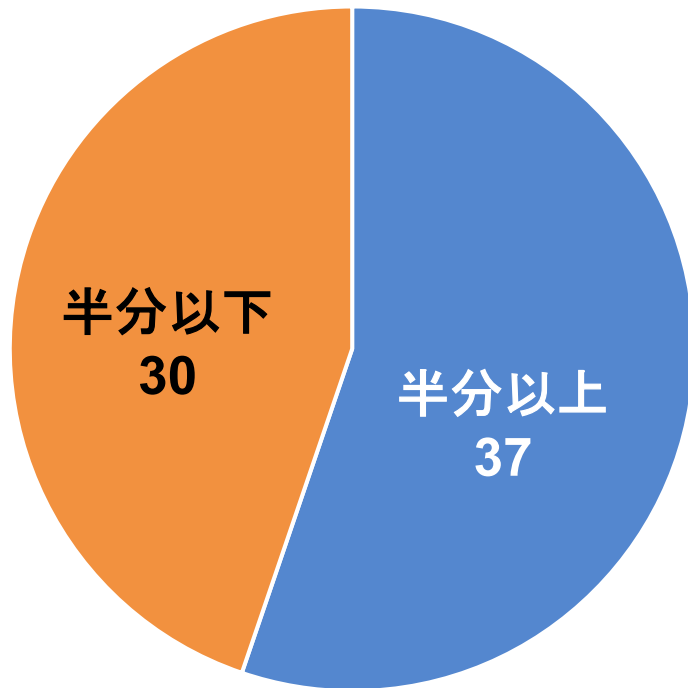
- ・ 結晶の輸送手続きに手間がかかるから。
- ・ 自動測定よりもラピッドアクセスサービスを利用したい。
- ・ 金額次第。

## わからない

- ・ センタリングの精度などに不安があるから。
- ・ 制度の詳細が不明。

# 完全自動測定システムの利用について

完全自動測定は全測定時間の  
どのぐらいの割合を  
占めることになりそうか？



## 意見

- 結晶のスクリーニングは自動測定で行いたい。
- 手動測定と自動測定を併用したい。
- 割合は、測定がどの程度機能するかによって決める。



# 自動化の将来像

AIが急速に発展しています



世界チャンピオンより強い  
碁のプログラム

そのほかにも

パンの自動認識

顔認識

...etc

---

一枚のスナップショットをとることで、  
その結晶に対しての部分的なデータが集まります

また現在、様々な結晶から得た膨大なデータが蓄積されています。

これらの情報を統合すれば、一枚のスナップショットから  
最適と思われるデータ測定条件が提案できるようになるか  
もしれません。施設側は、そのようなプログラム開発を  
目指すべきだと思いませんか？