



SPring-8でのSuperSINET利用計画

財団法人 高輝度光科学研究センター
利用研究促進部門 構造生物Grp
BL・技術部門 共通技術支援Grp 情報ネットワーク
Team
酒井久伸

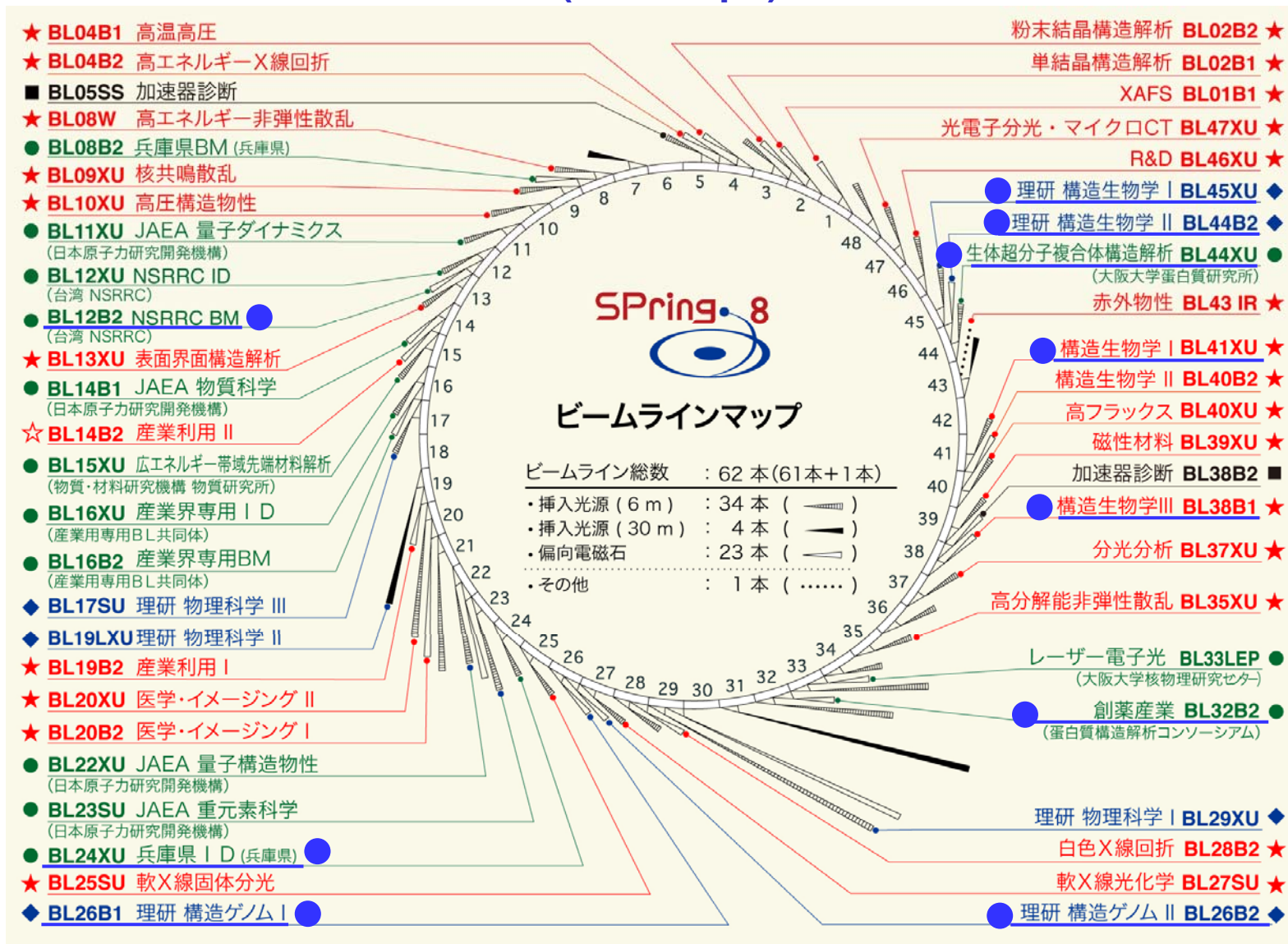
SPring-8

- 蓄積エネルギー : 8 GeV
- 蓄積リング周長 : 1436 m





SPRING-8のタンパク結晶構造解析用ビームライン (2003/Sep.-)





タンパク質結晶構造解析におけるSPring-8

構造決定可能な回折強度データの収集



1. 迅速構造解析

=全自動回折強度データ収集系の構築

2. 極限結晶構造解析

=難解結晶からの強度データ収集系の構築

—迅速回折強度測定—

全自動回折強度データ収集系
リモートアクセス

理研構造ゲノムビームライン (BL26B1 & B2)

建設目的： 構造ゲノム研究に貢献

→ **タンパク質結晶の回折データ迅速測定**

標準光学系： 偏向電磁石光源 + 標準2結晶分光器 + 集光ミラー

→ **X線の準備からデータ収集まで、一貫した自動化を実現**

試料交換の自動化： サンプルチェンジャー SPACE の導入

SPACE (SPring-8 Precise Automatic Cryo-sample Exchanger)

J. Appl. Cryst. (2004). 37, 867-873



BL26B1

2002年よりユーザ運転開始

BL26B2

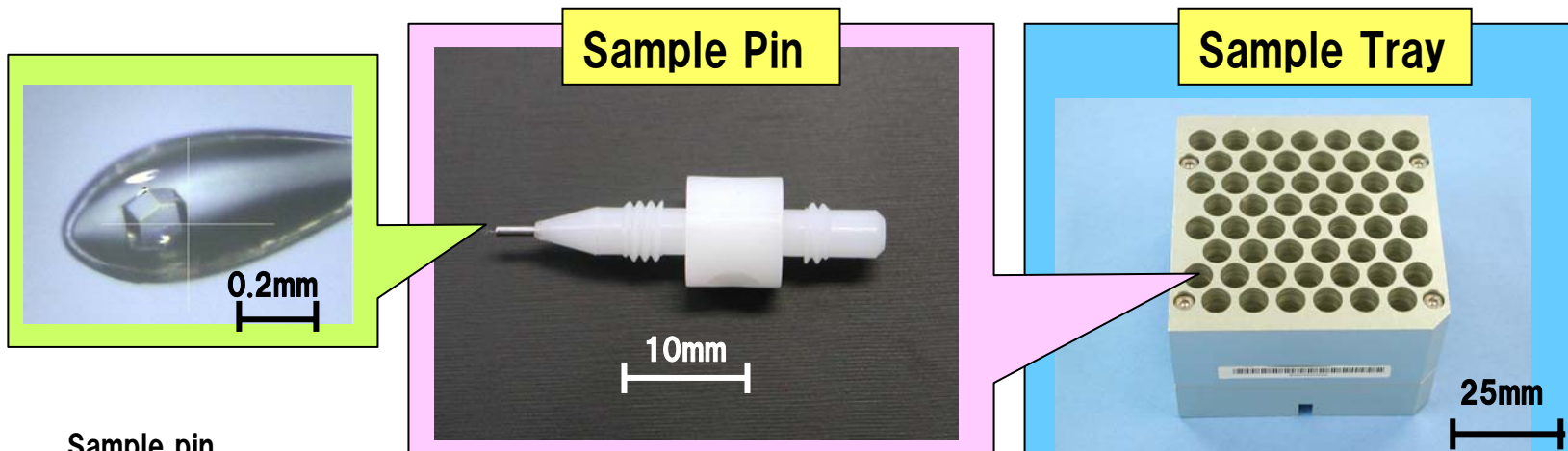
2003年より自動運転開始

CCD: 4096pix × 4096pix × 16bit

IP : 4000pix × 4000pix × 16bit

サンプルチェンジャー SPACE

専用ピン位置再現性 ($< 10\mu\text{m}$) を利用したサンプル自動交換



Sample pin

- length 25mm
- diameter 7mm
- material polyoxymethylene (polyacetal)

Sample tray

- size 75x75x50 mm³
- weight 500g
- material aluminum
- 52 samples can be mounted

SPACE

- Three axis robot and XY stage for sample storage.
- Up to two trays (104 samples) can be stored.
- Automatic LN2 supply

SPACE



BL26でのデータ測定スケジュール



mode1 : 結晶評価

Mount crystal

Manual centering

Diffraction check
XAFS spectrum

mode2 : 自動連続測定

Mount crystal

Automatic centering

Data collection
180~360 images

SPACEによる結晶試料ハンドリング

ビームライン

SPACE @ Beamline



ホームラボ

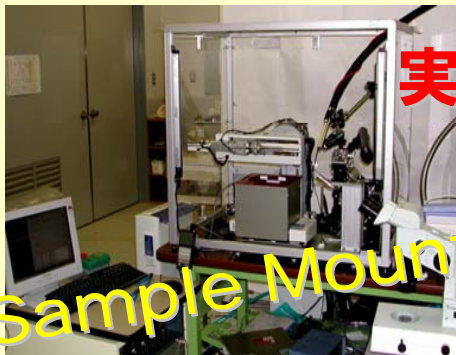
SPACE @ X-ray generator



サンプルトレイ
IDをバーコード管理



SPACE @ Laboratory

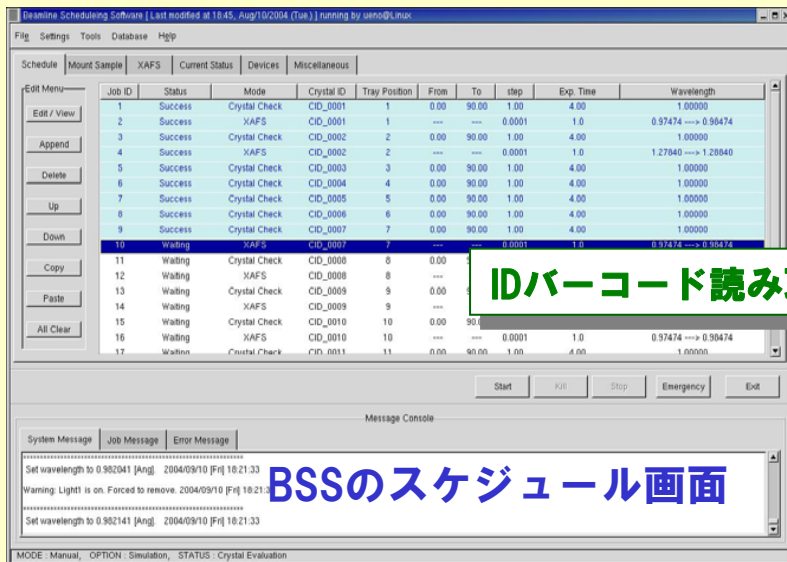


複数試料の実験スケジュール管理

BL制御ソフト

BSS (Beamline Scheduling Software)

- 実験スケジュール作成、取得
- ビームライン機器一括制御
- Native/ MADデータ収集、XAFS測定
- + サンプル交換

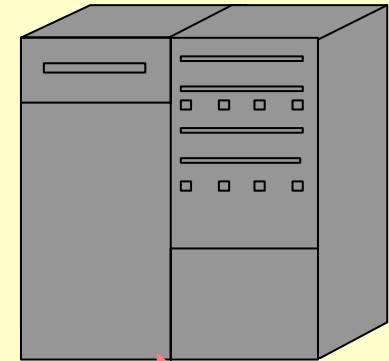


IDバーコード読み取り

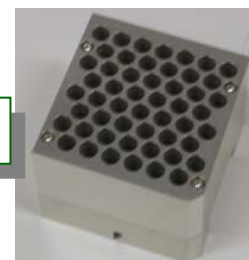
BSSのスケジュール画面

結晶試料データベース

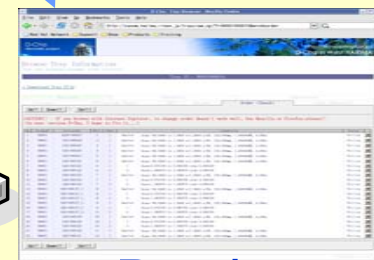
トレイID、結晶ID、位置、
実験条件、順序 etc.



スケジュール

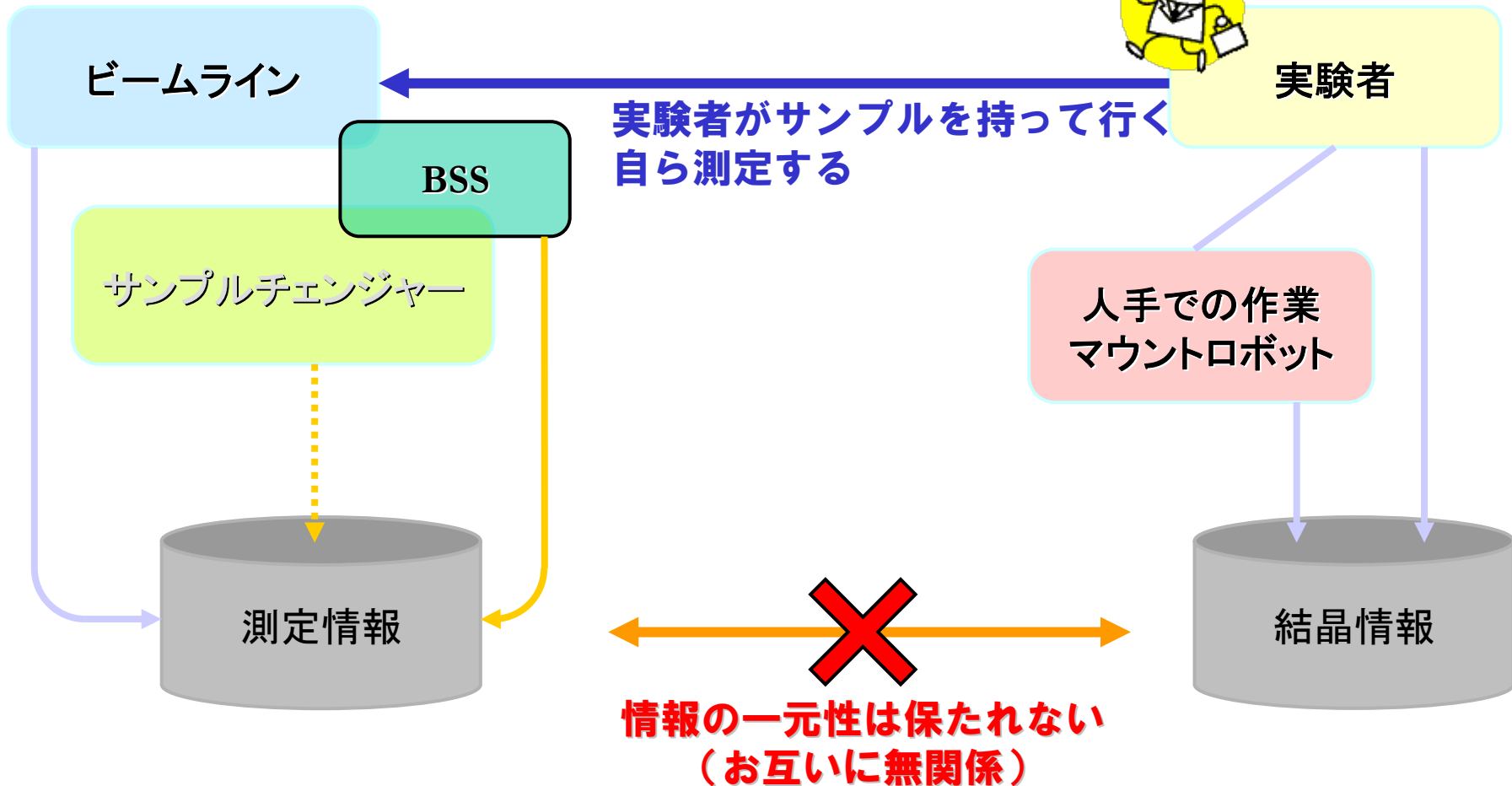


ユーザ



D-cha

従来のビームラインでの測定



メールインシステムによる遠隔実験

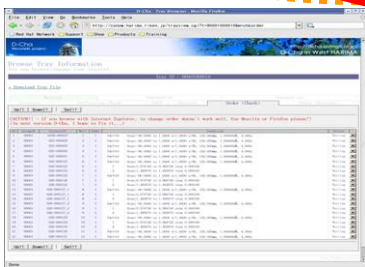
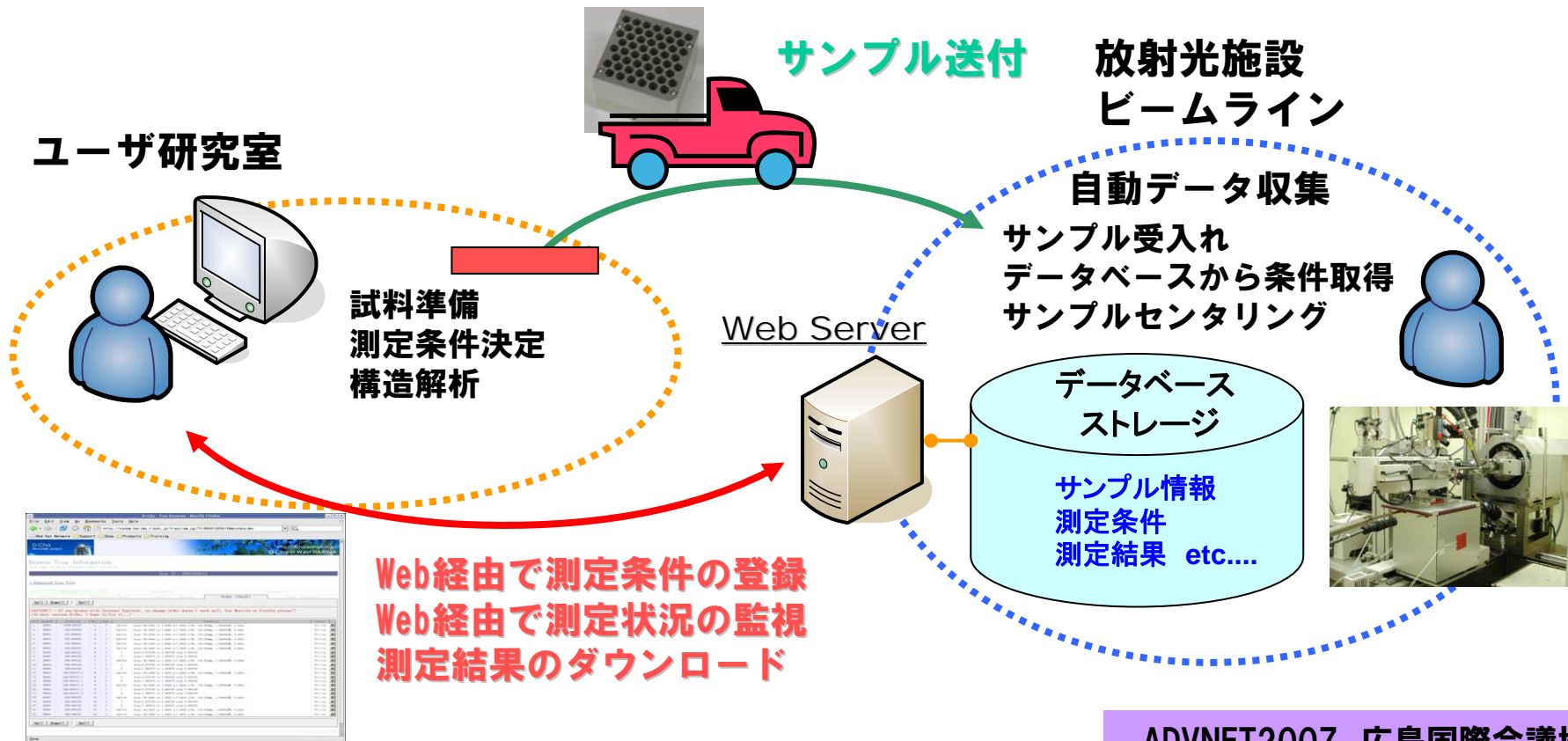
BLオペレータ補助による遠隔回折データ収集

- タンパク3000プロジェクトで開発したビームライン自動運転技術の活用
- 放射光施設にタンパク質結晶サンプルを送付
- Web経由による実験手順の登録・実験状況の監視・測定結果の入手

初心者 → オペレータによる補助

エキスパート → 解析技術・知識を反映

高難度タンパク質結晶からの最適なデータ収集



オンラインデータ転送の必要性

ロボット化による実験効率の改善



一日の運転期間中に複数のユーザー利用



**測定データの仕分けは誰の仕事？
仕分け作業にミスがあっても大変**

**自分のことは自分で・・・
利用者自身の操作でデータを取得する**

対象組織

- 国内大学
- 国公立研究機関
- 民間企業

約50拠点 100～グループ

当然といえばそうですが……

開発初頭から、実験データはHTTPでダウンロードされている

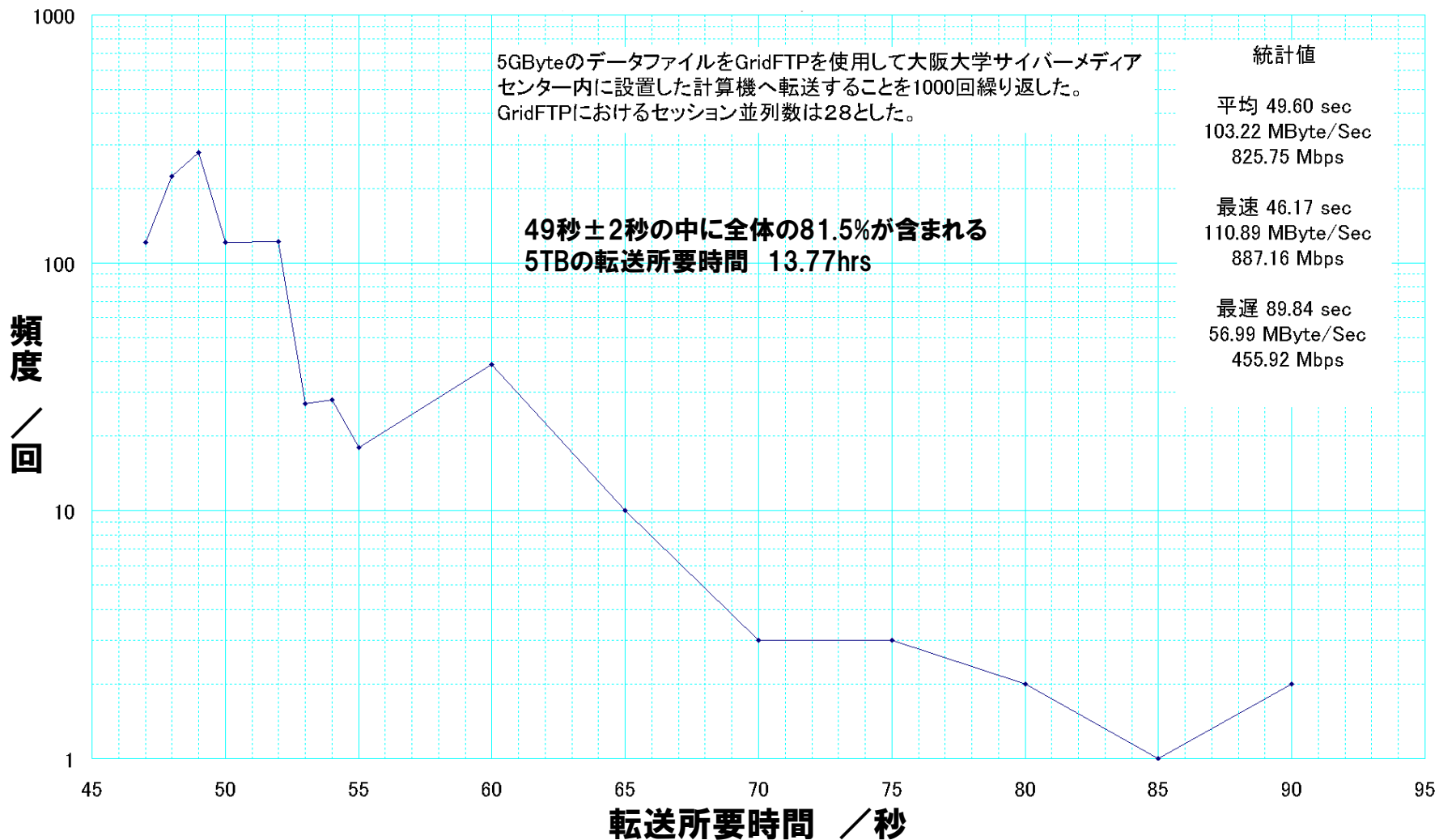
- **スループットが出ない**
 - Spring-8 – 横浜理研間で4Mbps程度
- **途中でセッションが切れてしまう**
 - 小さめの5GBのデータセットで、2.8時間
 - 大きめの15GBのデータでは、8.5時間

高速転送技術の導入

- ノーマル状態では実用にならないほど遅いし、トラブルも多数。
- いろいろ試した結果、手っ取り早く結果も良好なものはGridFTP
- 現在のところ阪大CMC相手に、5GByteの転送所要時間が50秒



GridFTPを利用した転送試験



課題1 人

- **阪大のケースは非常に幸運**
 - オンライン転送を行ないたい利用者、CMCセンター長、SPRING-8側担当者の全員が旧知の仲だったため、非常にスムーズに事が運んだ
- **ネットワーク担当者に協力を要請することを躊躇う利用者も**
 - 忙しそうだから、手を煩わせるようなことは頼みにくい
 - 言っても聞いてくれないと思っている？
 - 周りに迷惑になるのでは？
- **太い回線さえあれば簡単にできると思っている**

課題2 機器・線

- **学内LANラスト1マイル問題**
 - フロアまでは、Gigaが来ていても……
 - 建物まではGigaがきていても……
 - 実はイエローケーブル……
- **ディスクが遅い**
 - OS上で書込みスループットを測定してみるとネットワークのほうが早かったり

やっぱりひと

- **基本は、組織と組織の間の通信なので関係者全員が風通しの良い関係を構築できることが必要**
 - 生粋のネットワーク担当者がいないので、横のつながりを作っていかなければ・・・
 - 人間のバックアップもほしい
- **一度禁止されたことは、解除したつもりでも**
 - SPring-8では、対外接続が1Mbpsだった頃、オンラインでのデータ転送を禁止した。1 Gbpsになった現在でも禁止が生きている

**1 Gbps程度の通信速度であれば
最もの障壁は人間である**

断念?! した技術

- **平木メソッド（巨大Window & PSPacer）**
 - 阪大CMCとは良好だったが、それなりに相手をしてあげないと、駄々をこねる
 - 相手先が増えてくると、高速転送が可能な状態を継続させる労力が増大しそう
 - シングルセッションのアプリに有効なので捨てがたいのだが

- **RIKEN BL (BL26s)**
*M.Yamamoto, G.Ueno, A.Nisawa,
K. Hirata, T.Shimizu, H.Murakami,
R.Hirose, K.Hamada (PharmAxess Inc.)*

- **JASRI BL (BL38&BL41)**
*N.Shimizu, M.Kawamoto, H.Sakai, K.Hasegawa,
N.Okazaki, M.Yamamoto*



ご清聴ありがとうございました

酒井 久伸