

PFにおける全自動データ収集・処理システム開発

山田悠介^{1,3}、平木雅彦^{2,3}、松垣直宏^{1,3}、千田俊哉^{1,3}

¹高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 放射光科学研究施設/構造生物学研究センター、²高エネルギー加速器研究機構 共通基盤施設 機械工学センター、³総合研究大学院大学 高エネルギー加速器研究科

フォトンファクトリー(PF)のタンパク質 X 線結晶構造解析ビームラインでは、様々な技術開発を進めているが、そのなかでもビームラインで行われる回折実験の自動化に関する開発は大きな割合を占めている。回折実験の自動化は単に利用者の負担を軽減することだけでなく、限られたビームタイムの中で利用者が最大限の成果を創出する上でも極めて重要なテーマであると位置づけている。

ビームラインで行われる回折実験の工程はおおまかに、1)回折計上の試料の交換、2)試料のセンタリング、3)予備測定(スナップショット測定)による試料の評価および本測定(連続データセット測定)条件の決定、4)本測定の実施に分けられる。回折実験の自動化を行う上ではこれらのそれぞれ工程、および工程の流れを自動的に行うことが必要で、この開発を行ってきた。これまで、結晶交換ロボット PAM を用いた結晶交換、画像処理によるループ形状認識を基にしたループセンタリング、予め定められた条件での予備測定または本測定という方式を採用した全自動データ収集システムを開発し、ユーザー利用に供してきた。現在、このシステムをベースに LABELIT を用いた回折イメージの評価を付け加えて、試料の選別および測定条件の決定を行うソフトウェア開発を行い、試験運用を開始している。

データ測定の全自動化に伴い、1 ビームタイム中に取得されるデータセット数は飛躍的に増大する。このデータセットをどのように取り扱うかも測定の全自動化を極めて重要な問題である。この問題を解決すべく、我々は PReMo と呼ばれる実験データ管理システムを開発してきた。PReMo はビームラインで行われる実験の条件や結果を記録するデータベースであると同時に、それらの情報を基に、後のデータ処理や解析を管理する解析パイプラインとしての役割も果たしている。全自動データ収集システムを用いた実験でも、取得されたデータは全て PReMo 上に記録されると同時に、XDS や DENZO/SCALEPACK を用いたデータ処理も実行され、その結果もデータベースに記録される。データベースに記録された情報は Web インターフェースを通じて所内のみならず所外からも閲覧可能であり、測定された全ての試料についてその実験結果や処理結果を一覧表示したり、詳細したりすることが可能である。これを用いて、試料それぞれについて測定が正常に行うことが出来たか、どのような質のデータが取得出来たかなどを即座に確認することが可能である。

本発表では、これまで開発してきた全自動データ収集システム、及びデータ処理やそれらデータの管理システムに至るまでの全容や運用実績について紹介するとともに、現在の開発状況や今後の開発方針についても紹介し、その有用性等について議論を行いたい。