

測定自動化の現在と未来

篠田 晃

北海道大学大学院先端生命科学研究院

放射光施設でのタンパク質結晶の測定には「ルーチンで行える測定」と「高難易度結晶の測定」がある。そのうちルーチンで行える測定については自動化が望まれているが、「結晶のセンタリング」など、人間にとっては簡単であっても機械にとって難易度が高い処理の存在が人間に迫る高精度での全自動測定の実現を妨げてきた。

しかし、近年の演算装置 (GPU) の演算速度の目覚ましい向上と画像処理技術の活用により、これまでは困難であった結晶センタリングを人間に迫る精度で達成できる可能性が出てきた。結晶センタリングで人間とソフトウェアの大きな違いは、人間が複数の方位からループを観察して統合的に判断するのに対して、これまでのソフトウェアは基本的に一枚一枚の画像を個別に処理して特徴量だけを比較していた事にあり、複数の方向から撮影した画像からループを立体的に認識することでソフトウェアも人間に近い認識や判断が可能であると考えられる。そのため、ループを立体認識するソフトウェアの開発を行った。これらの技術を用いた最近のループ認識と、それを用いた自動センタリングの現状について紹介する。

また、現在の放射光施設ではマイクロフォーカス（や十分に小さな）ビームを利用できるビームラインが増えており、小さなビームに対応したセンタリングを行うために、ループの見た目だけではなくグリッドスキャンを用いたセンタリングが日常的に行われるようになってきている。自動測定でもグリッドスキャンへの対応が必要であり、ループ認識とグリッドスキャンを組み合わせたシステムの開発を行った。

本講演では、上記の技術を組み合わせた全自動測定システムによって自動的に測定が行われる様子を紹介すると共に、今後これらの技術がどのように発展していき、ユーザーにとって測定がどの様に変わっていくかについて、予測される未来展望の一つを紹介する。