最近の研究動向

PF 構造生物学研究ビームラインにおけるデータベース開発

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 構造生物学研究センター 山田悠介

Yusuke YAMADA: Development of Database System for Structural Biology Beamlines in the Photon Factory

1. はじめに

構造生物学研究において放射光利用は身近なものである。タンパク質結晶構造解析においては、今日ではほとんどの回折データ測定が放射光ビームラインにおいて行われているといっても過言ではなく、また近年、溶液構造解析の重要性が再認識され、溶液散乱ビームラインの需要も高まってきている。これらのビームラインでは、ビーム性能の向上、検出器を始めとした測定機器の高性能化、そして試料交換システムに代表される測定の自動化によって、利用者が測定する試料数やそこから得られるデータの数は膨大となり、それらをデータベース化し管理するシステムが重要となってくる。本稿では高エネルギー加速器研究機構の構造生物学研究センター (SBRC) におけるこれらデータベース開発について述べる。

2. PXビームラインの実験データベース PReMoの開発

2.1 PReMo開発の背景

PReMoとはPF Remote Monitoring systemの略称で、その名が示すとおり、PFのタンパク質結晶構造解析 (PX) ビームラインにおいて行われる実験をほぼリアルタイムで所外から閲覧できることを目的に2006年頃より開発が始められた。そのなかで所外から実験を閲覧する手段として、Webを用いることが適切であるとの考えから、PXビームラインで行われる実験の条件および結果をデータベース上に登録し、それを研究者がWebで閲覧するという構成が採用された。これがPFのタンパク質結晶構造解析ビームラインにおけるデータベース開発の始まりである。

PXビームラインで行われる実験をすべてデータベース上に記録させるため、ビームライン制御にかかわる通信をモニターし、実験が行われる度に装置の状態、実験条件などの情報がダンプされる。そして、ダンプされた情報に実験データが付加されデータベースへと取り込まれ、これらの情報がWebを介して閲覧することができる (図1左)。¹⁾

2.2 XMLデータベースの採用

PReMoはRCM System (<https://www.i4s.co.jp/rcm/rcmabs.html>) と呼ばれるミドルウェアを用いて開発されている。このミドルウェアの大きな特徴はバックエンドのデータベースとしてXMLが用いられていることである。XMLはさまざまな情報を階層的に表現することを得意とする。一方でビームラインにおける実験も、例えば図2左のように、あるビームタイムにスナップショット測定や回折データセット測定といった測定を実施した。各測定において一次処理として、スナップショット測定では回折イメージの評価を行い、データセット測定では回折イメージの評価とデータ処理 (指数付け、強度積分/補正) を行った。さらにデータ処理については二次処理として位相決定を行った。というように階層的に表すことができる。したがって、実験の情報はXMLを用いることで自然に表すことが可能である (図2右)。さらにXMLデータベースはリレーショナルデータベースのようにあらかじめデータベース構造を設計する必要もなく、データベース運用中にデータベース仕様を変更することも可能で、柔軟な運用が可能である。例えば、PReMoの場合、開発当初は測定中に試料を並進させるようなグリッドスキャン、ヘリカルデータ測定のような実験が存在しな

図1 PReMo (左) および PXS-PReMo (右) の Web 閲覧画面. (Web interface of PReMo (left) and PXS-PReMo (right).)

図2 実験の階層構造 (左) と XML での表現例 (右).
(Example of a hierarchy of beamline experiments
(left) and its XML expression (right).)

かったため、試料位置は固定されていることを仮定したデータベース構造であった。しかしながら、その後のピクセルアレイ型検出器の導入などにより、試料並進を伴う測定が一般的となりデータベースとしても対応が必要となったが、これまで蓄積を続けてきたデータベースの運用を止めることなく、データベース構造の変更を行うことができた。このように実験データを直感的に取り扱え、さらに運用後も柔軟に仕様を変更することが可能な XML データベースによって、筆者のようなデータベースに関する知識に乏しい非専門家でも十分に実用的なデータ管理システムを構築することが可能であった。

2.3 PReMo による回折データ自動処理

RCM System のもう 1 つの大きな特徴は登録されたデータに応じて外部コマンドを実行する機能を有していることである。PReMo ではこの機能を使用して回折データの自動処理を行っている。スナップショット測定時は LABELIT²⁾ を用いた回折イメージの評価、データ測定時は XDS³⁾ を用いた指数付け、強度積分と各種補正が行われる。XDS による自動処理でも通常数分で完了するが、これら処理結果もデータベースに登録され、Web から閲覧であるため、ビームタイム中に測定したデータの妥当性を確認しながら実験を進めることが可能である。

3. 結晶化データベースの開発

PF 構造生物学研究センターでは、大規模な結晶化スクリーニングが可能な全自動結晶化観察システム (PXS) の開発も行っている。このシステムは 96 穴の結晶化プレートへの結晶化ドロップを作成する分注部、結晶化プレートを一定温度下で静置保管するインキュベータ部、複数の観察システムから構成される定期的な結晶化ドロップ観察を行う観察部、からなるが、この PXS の作成する結晶化プレートの分注情報および観察画像は PXS-PReMo と呼ばれるデータベースシステムで管理されている。この PXS-PReMo も RCM System を用いて開発さ

れており、PReMo 同様に PXS 利用者は Web を介して各ウェルの結晶化条件や観察結果などを閲覧することが可能となっている。さらに、PReMo と PXS-PReMo との間でデータの相互参照が可能であり、現在は BL17A での *In-situ* 回折計を用いた結晶化プレート上の結晶からの直接 X 線回折測定について、その条件や回折イメージを PXS-PReMo から閲覧することが可能となっている。現在 SBRC では PXS によって結晶化スクリーニングを行い、得られた結晶について *In-situ* 測定で評価を行うというサービスを施設利用や創薬等先端技術支援基盤プラットフォームの支援課題へ提供しているが、この実現には上述のデータベース連携が必要不可欠なものであった。

4. 国内外の状況

SPRING-8 ではメールイン測定のため Web データベース D-Cha が開発されている。⁴⁾ D-Cha は実験結果の閲覧のみならず、メールイン測定のための実験条件を細かに設定できることが特徴の 1 つとして挙げられる。

国外の放射光施設では多くのビームラインでデータベース開発が行われている。ヨーロッパでは ISPyB⁵⁾ と呼ばれるデータベースが ESRF を中心に開発がなされている。Soleil, DLS, MAX IV, BESSY, DESY, ALBA といった主要放射光施設でも採用されヨーロッパでのデファクトスタンダードとなりつつある。自動データ処理のフレームワークである EDNA⁶⁾ と強固な連携が取れているほか、BioSAXS でも使用されている⁷⁾ のが大きな特徴と言える。アメリカでは各施設それぞれでデータベース開発が行われている。その中でも NSLS-II では Bluesky⁸⁾ と呼ばれるビームライン制御とデータベースとが統合されたフレームワークが施設共通基盤として整備されており、PX や BioSAXS 以外のほかのビームラインでも使用されている。

5. データベース開発の今後

現在、われわれ構造生物学研究センターでは新しいデータベースシステムの開発に取り組んでいる。新しいシステムではこれまで培った経験を基に、より簡便かつ柔軟性に富んだデータベース構築が可能となることを目的としている。そして今後 Bio-SAXS を始めとするさまざまな構造生物学実験もデータベース化し、データベース間の連携を取ることで、蓄積されたデータの活用も視野に入れた統合的な環境を構築していきたい。

文 献

- 1) Y. Yamada, et al.: *J. Phys. Conf. Ser.* **425**, 012017 (2013).
- 2) N. K. Sauter, et al.: *J. Appl. Cryst.* **37**, 399 (2004).
- 3) W. Kabsch: *Acta Cryst.* **D66**, 125 (2010).
- 4) N. Okazaki, et al.: *J. Synchrotron Radiat.* **15**, 288 (2008).
- 5) S. Delageniere, et al.: *Bioinformatics*, **27**, 3186 (2011).
- 6) M. F. Incardona, et al.: *J. Synchrotron Radiat.*, **16**, 872 (2009).
- 7) A. D. M. Antolinos, et al.: *Acta Cryst.* **D71**, 76 (2015).
- 8) <https://nsls-ii.github.io/bluesky/>

最近の研究動向 プロフィール

親水性一次元ナノ細孔中の水クラスターの抜けやすい水

田所 誠 Makoto TADOKORO
東京理科大学理学部第一部化学科
Department of Chemistry, Faculty of Science, Tokyo University of Science
〒162-0826 東京都新宿区市谷船河原町 12-1
12-1 Ichiyafunegawaramachi, Shinjuku-ku, Tokyo 162-0826, Japan
e-mail: tadokoro@rs.kagu.tus.ac.jp
最終学歴：九州大学大学院理学研究科化学専攻博士後期課程
専門分野：錯体物性科学, 水素結合科学, 水クラスター化学
現在の研究テーマ：水クラスター, 固体 PCET, 分子性導体, 分子マシンなど
趣味：釣り, 酒遊, 街歩き

AI 基 I 相準結晶の近似結晶の基本構造：擬マッケイクラスター (pseudo Mackay Cluster)

志村 玲子 Rayko SIMURA
東北大学 多元物質科学研究所
Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University
〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1
2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, Miyagi 980-8577, Japan
最終学歴：東京大学大学院理学系研究科博士課程修了
専門分野：結晶材料科学, 岩石・鉱物学

X線分光法による価数揺動現象およびそれを起源とする量子臨界現象の機構解明

水牧 仁一朗 Masaichiro MIZUMAKI
Japan Synchrotron Radiation Research Institute
1-1-1 Kouto Sayo-cho Sayo-gun, Hyogo, Japan
TEL: 0791-52-0802
e-mail: Mizumaki@spring8.or.jp
最終学歴：博士 (工学)
専門分野：X線分光学, 固体物理
現在の研究テーマ：強相関電子系

PF 構造生物学研究ビームラインにおけるデータベース開発

山田 悠介 Yusuke YAMADA
高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
High Energy Accelerator Research Organization, Institute of Materials Structure Science
〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1
1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan
e-mail: yusuke.yamada@kek.jp
最終学歴：総合研究大学院大学 数物学研究科
専門分野：放射光タンパク質結晶構造解析
現在の研究テーマ：放射光ビームラインにおけるタンパク質結晶構造解析実験の自動化
趣味：バスケットボール