

6G-4

プロテオーム研究のためのオープンソース化した 実験情報管理システムの開発

森澤 拓[†]、廣田三佳子[†]、櫻井洋子[†]、中村 愛[†]、戸田年総[†]

[†] 東京都老人総合研究所 老化ゲノムバイオマーカー・老化プロテオーム

1 はじめに

創薬、臨床応用に大きな期待が集まっているプロテオーム研究は、最新の分析機器を用いた実験プロセスが必要であり、その解析データの迅速な情報処理が求められている。そのため、実験情報管理システム(Laboratory information management system : LIMS)の必要性が認識されている。インターネット上では、公開プロテオームデータベースの構築、運用が進行し、[2][3][4]HUPO(Human Proteome Organization)によりプロテオームデータ形式の標準化が行われるなか[5]、それらの影響を受けながら大学、企業等でプロテオーム研究用 LIMS の開発が行われている[6][7]。しかしながら、2次元電気泳動画像(2-D PAGE Image)解析、レーザー質量分析など日進月歩に進化する分析機器の解析結果を効果的に管理し、便利に活用できる LIMS を開発するには、進化に適確に対応する柔軟性と継続性が必要であり、オープンな思想による開発が必要と思われる。筆者らの東京都老人総合研究所では、産学公連携プロテオーム共同研究センターを立ち上げ、バイオ関連企業、大学等との広く開かれた共同研究を行っており、その中で、プロテオーム研究のためのオープンソースとして実験情報管理システムの開発を行った。特に単純で、改良が容易で、公開データベースとリンク可能なことを開発の目的とした。

2 方法と結果

開発したシステムは、Apache+PHP+PostgreSQLシステムで、オープンソースを用いた改良しやすいシステムを目指した。PC サーバー上に Redhat Linux 9 をインストールし、研究所内 LAN のクライアント PC から LIMS の閲覧、検討、入力作業が行えるよう Web インターフェースの開発

*Development of a Open Source LIMS for Proteomics

Hiraku Morisawa[†], Mikako Hirota[†], Yoko Sakurai[†], Megumi Nakamura[†], Tosifusa Toda[†]

[†] Proteomics Collaboration Research Group, Tokyo Metropolitan Institute of Gerontology



図1 2-D PAGE法によるプロテオミクス研究手順

を行った。開発したLIMSは、質量分析用ソフトウェアKompact 2.4.0 (made by Kratos Analytical Ltd.)の出力ファイル、pdfファイル、画像などをラージオブジェクトとして格納し、ブラウザソフトにヘルパーアプリケーションを登録することで、ブラウザソフトからデータ閲覧が行える。ラージオブジェクトを多用することは、構造を単純化し、入力作業を簡単するが、データマイニング、データ変換を困難にする。

システムは、ユーザー単位でのセキュリティを実現し、実験手順に沿ったグラフィカルな入力画面を整備した。図1に、2次元電気泳動を



図2 2次元電気泳動データのLIMSへの登録 --Web画面遷移--

図3
質量分析データ、消化手順データのLIMSへの登録
--Web画面遷移--



用いた代表的なプロテオミクス研究手順を示した。開発したLIMSでは、各研究手順に対応したWeb入力画面を作成した。図2には、2次元電気泳動画像解析データのLIMSへのWeb入力画面を示した。図3には、質量分析データ、消化手順のLIMSへの登録画面を示した。各登録画面では、公開2DPAGEデータベースで利用されているようにクリックマッピング機能を使い入力をサポートした。各研究手順をグラフィカルにすることで次の入力手順の実験計画を視覚的にサポートし、実験ノートとしての役割を実現している。キーワード検索画面用意し、ユーザー名、パスワードの入力を促しながら各解析結果、手順の情報を表示する画面や、解析結果をグラフ化したデータ表示するよう開発した。さらに、東京都老人総合研究所がインターネット上に公開しているプロテオームデータベース、TMIG-2DPAGE databaseのフォーマットに変換するインターフェースをLIMSに用意した。

3. 考察

HUPOは、XML形式によるデータ標準化を推進しており、そのフォーマットは階層が深く、複雑になっている。開発したLIMSは、実験手順に沿ったデータ構造を優先し、そのフォーマットと互換性を考慮せずに構築している。そのため、データ交換等でHUPOによる形式が一般化した際には、別に専用の変換ソフトを開発する必要がある。また、LIMSとしての機能をさらに高めるためには、分析ソフトの出力結果を自動的にLIMSに取り込むようなソフトウェアの開発が必要となる。セキュリティを維持しつつ多様な分析機器からの入力自動化ソフトを開発することが求められる。本LIMSは、スクリプト等をインターネット上で公開し、GNU General Public License

により配布する予定である。多くのプロテオーム研究者に利用していただき、ご助言をいただき、プロテオーム研究促進の一助になるよう努力したい。

4. 参考文献

- [1]McDowall RD : An update on laboratory information management systems. J Pharm Biomed Anal. 1993 Nov-Dec;11(11-12):1327-30.
- [2]Hoogland C, Mostaguir K, Sanchez JC, Hochstrasser DF, Appel RD : SWISS-2DPAGE, ten years later. Proteomics. 2004 Aug;4(8):2352-6.
- [3]Toda T : Proteome Database for Aging Research. the INABIS '98 Symposium, 1998.
- [4]Morisawa H, Hisatomi H, Hirota M, Toda T : Collaborative proteomics framework with XML databases and an integrated XML viewer for 2DPAGE. J Electrophoresis 2005 ; 49 :35
- [5]Orchard S, Hermjakob H, Binz PA, Hoogland C, Taylor CF, Zhu W, Julian RK Jr, Apweiler R : Further steps towards data standardisation: the Proteomics Standards Initiative HUPO 3(rd) annual congress, Beijing 25-27(th) October, 2004. Proteomics. 2005 Feb;5(2):337-9.
- [6]Cho SY, Park KS, Shim JE, Kwon MS, Joo KH, Lee WS, Chang J, Kim H, Chung HC, Kim HO, Paik YK : An integrated proteome database for two-dimensional electrophoresis data analysis and laboratory information management system. Proteomics. 2002 Sep;2(9):1104-13.
- [7]L. Esterling and B. Overgaard : Sierra Proteomics LWS-a flexible LIMS for managing complex experimental data . http://www1.amershambiosciences.com/aptrix/upp01077.nsf/Content/lsn_online_article_050704_c?OpenDocument&hometitle=lsn_online
- [8]Garden P, Alm R, Hakkinen J : PROTEIOS: an open source proteomics initiative. Bioinformatics. 2005 May 1;21(9):2085-7.