

ディープラーニングを用いた タンパク質結晶画像の自動判別 Classification of X-ray Protein Crystallization Using Deep Learning

三浦 佑晟¹、櫻井 鉄也¹、加藤 龍一²、山田 悠介²

1 筑波大学 人工知能科学センター、2 KEK 物構研 構造生物学研究センター

近年、ディープラーニングが幅広い分野に対して適用されており、社会に大きな影響を及ぼしている。タンパク質の X 線構造解析において、ディープラーニングの一種である畳み込みニューラルネットワークを用いた画像認識手法がシステムの高度化に貢献するようになった。一方で、高性能なディープラーニングには学習コストや計算コストが大きくなる傾向を持つ。タンパク質結晶画像に対する認識では、性能を出すために数十万もの画像を用意するなどといった負担が大きいなどの課題を残していた。本手法では、ディープラーニングがもたらす性能の向上だけでなく、ディープラーニングを導入する上で必要なコストの軽減にも取り組んだ。タンパク質結晶画像に対して、少ない学習データ数でも高精度な認識を行うモデルを提案し、その性能について示す。本発表では、KEK との共同研究について触れながら、今後の量子ビームとディープラーニングの関わりについても論じる。