

# AI(深層強化学習)を用いた X 線結晶構造解析の可能性 Potential of structure determination on X-ray crystallography using AI(DQN)

篠田 晃<sup>1</sup>

1 KEK-物質構造科学研究所

X 線結晶構造解析の分野では結晶化したタンパク質サンプル測定の自動化とハイスループット化が世界的に進められており PF、PF-AR でも昨年からユーザーへの全自動測定ビームタイムの提供を開始し、数分から数十分に一つのタンパク質結晶サンプルの測定を行っている。測定したデータセットは解析を行いタンパク質の立体情報を得るが一日に 1 つのビームラインだけで百を超えるデータセットの収集が可能であるため構造解析の効率化が望まれる。

X 線結晶構造解析の位相決定には分子置換法と実験的位相決定法である短波長異常散乱法(SAD法)が頻繁に利用されている。その中でも手作業による試行錯誤を多く要する S-SAD 法に対して深層強化学習を用いた自動的な構造解析の可能性について考察する。S-SAD 法はタンパク質中に存在する硫黄原子の異常散乱シグナルを用いて位相決定を行う手法であり、解析ソフトウェアの 1 つに SHELX C/D/E<sup>1</sup> がある。特に SHELX D を用いて解析する際に硫黄原子の数と分解能のパラメータを試行錯誤する必要であり、この過程を深層強化学習で効率的に行えるかを検証した。

強化学習は試行錯誤を行いながら学習する機械学習の一種であり上記のような試行錯誤と相性が良く、深層学習のニューラルネットワークと組み合わせた深層強化学習は近年注目されている。深層強化学習では AlphaGo による囲碁の対局が広く知られており、また最近ではリアルタイムストラテジーゲーム StarCraft II でプロゲーマーに勝利した AlphaStar<sup>2</sup> が話題となっており研究が盛んである。複雑な状況の中から適切な次の一手の判断を学習により獲得する深層強化学習の手法を X 線結晶構造解析にも用いる事ができるか試みた。

謝辞: 解析環境を提供して頂いた KEK-SBRC の山田様と解析用データを提供して頂いた KEK-SBRC の原田様に感謝します。

1 Sheldrick, G.M. (2010). *Acta Cryst.* **D66**, 479-485.

2

<https://deepmind.com/blog/alphastar-mastering-real-time-strategy-game-starcraft-ii/>