

Robust and High Performance Quantum Machine Learning for Single-Base-Resolution Prediction of Mammalian Transcription Factor Bindings and Chromatin Accessibility in Immune Cells

松原, 太一

<https://hdl.handle.net/2324/7443278>

出版情報 : Kyushu University, 2025, 博士 (理学) , 課程博士
バージョン :
権利関係 :



氏 名	松原 太一			
論 文 名	Robust and High Performance Quantum Machine Learning for Single-Base-Resolution Prediction of Mammalian Transcription Factor Bindings and Chromatin Accessibility in Immune Cells (哺乳類の転写因子結合および免疫細胞におけるクロマチンアクセス性を単一塩基解像度で予測するための頑健かつ高性能な量子機械学習)			
論文調査委員	主 査	九州大学	教授	須山 幹太
	副 査	九州大学	教授	落合 博
	副 査	大阪大学	招へい准教授	針原 佳貴

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文は、深層学習によるゲノム機能予測の高度化を目的として、パラメータ化量子回路 (PQC) を畳み込み層として組み込んだ量子・古典ハイブリッド深層学習の枠組みを提案し、転写因子結合およびクロマチン状態という二つの代表的課題に適用して有効性を実証した研究である。

著者は、(1)大規模ゲノム配列から転写因子結合部位を予測する QTFPred、(2)免疫系 92 細胞種のクロマチンアクセシビリティを同時予測する Qhromformer、の二つのモデルを設計・実装し、学習手順、評価指標、比較実験、解釈解析を体系的に整備した。

QTFPred は 3 細胞株 49 転写因子の ChIP-seq データで高精度を示し、特に学習に用いるピーク数が限られる条件下で既存法を大きく上回る性能を示したことから、実験データが乏しい状況でも適用可能な実用性が認められる。また、既知モチーフの再現に加え、協調結合に関する距離制約を抽出する解析を行い、単なる予測に留まらず転写因子制御文法の理解に資する知見を導いた点は学術的価値が高い。

Qhromformer は免疫分化細胞の ATAC-seq を用いた多細胞種学習で既存法に対する優位性を示し、細胞種間で共有される配列特徴と細胞種特異的な調節情報を同時に学習できることを明確にした。さらに、マウス・ヒト間の転移可能性を検証し、種差を跨いだ一般化と応用可能性を具体例として提示した。

以上の成果は、量子計算フレームワークをバイオインフォマティクスの実問題に接続し、予測精度の向上のみならず解釈性の拡張にも踏み込んだ点で独創性が高い。加えて、PQC を用いた量子畳み込みが古典的畳み込みとは異なる特徴写像を与え得る点に着目し、回路のエンコーディングと測定に基づく表現を深層ネットワーク内で学習可能にしたことは、量子機械学習の方法論をゲノム解析へ具体的に橋渡しした点で意義深い。

実データに基づくベンチマークを通じて、性能・データ効率・解釈性の観点から利点と限界を整理しており、今後の量子計算資源の発展を見据えた指針を与えている。

以上より、学術的・技術的貢献は十分である。審査の結果、研究目的、方法、結果、考察はいずれも整合的で、提示された実験検証も妥当であると判断した。よって本論文は博士 (理学) の学位論文として十分な価値を有する。