



配布先: 文部科学記者会、科学記者会、名古屋教育記者会

2026年4月16日

報道機関 各位

糖鎖の全体構造を学習できる AI モデルを開発 不完全な配列も高精度に補完、創薬や疾患診断への展開に期待

【本研究のポイント】

- ・糖鎖^{注1)}の全体構造を学習できる事前学習済み AI モデル「GlycanGT(グリカンジーティ)」を開発。
- ・糖鎖を単糖と結合のグラフ^{注2)}構造として表現し、Transformer^{注3)}を用いて局所構造だけでなく枝分かれを含む全体の関係性まで捉えられるようにした。
- ・既存手法との比較で、8つのベンチマーク課題において高い性能を示した。
- ・構造が一部欠けた、あるいは曖昧な糖鎖配列に対しても、妥当な単糖や結合候補を高精度に提案。
- ・糖鎖データベースの整備支援、糖鎖機能の解明、疾患バイオマーカー探索、糖鎖創薬などへの展開が期待。

【研究概要】

名古屋大学糖鎖生命コア研究所 松井 佑介 准教授、木谷 晃広 特任助教、張 秉元 (ちょう へいげん) 特任助教、檜森 弘一 研究員らの研究グループは、糖鎖の構造情報を高精度に学習・表現できる新しい AI モデル「GlycanGT」を開発しました。

今回、研究グループは糖鎖を「単糖」と「糖同士の結合」から成るグラフとして表現し、自然言語処理で広く用いられる Transformer 技術を応用した Graph Transformer 型の事前学習モデル^{注4)}を構築しました。これにより、従来法が得意としてきた局所的な特徴だけでなく、糖鎖全体にまたがる構造的な関係性を学習できるようになりました。

開発した GlycanGT は、糖鎖の由来生物の分類、糖鎖のタイプ分類、免疫原性^{注5)}予測などの標準ベンチマーク課題で既存法と比較し、複数の課題で最先端レベルの性能を示しました。さらに、糖鎖の一部を意図的に隠して予測させる実験では、曖昧な糖鎖配列に対しても有力な候補を上位に提示できることを確認しました。これは、将来的に糖鎖データベース中の未確定構造の補完や、専門家の構造注釈作業の支援につながる可能性があります。

本研究成果により、糖鎖の複雑な構造を AI で扱うための基盤が大きく前進しました。今後は、糖鎖関連データベースの充実に加え、がんや神経変性疾患、感染症などにおける糖鎖異常の理解、さらには糖鎖を標的とした診断・創薬研究への応用が期待されます。

本研究成果は、2026年3月27日(日本時間)付で、Oxford University Press 刊行の学術誌『Bioinformatics』に掲載されました。

【研究背景と内容】

糖鎖は、タンパク質や脂質に結合して細胞表面などに存在し、細胞同士の認識、免疫応答、感染、発生、がん化など、さまざまな生命現象に関与しています[参考文献 1-2]。一方で糖鎖は、直線的な配列を持つ核酸やタンパク質とは異なり、複雑に枝分かれした立体的な構造をとるため、情報科学的に扱うことが難しい分子です。

近年は、糖鎖をグラフとして表現して機械学習に利用する研究が進んでいます[参考文献 3-4]が、従来のグラフニューラルネットワーク(GNN)は、近傍の局所情報を扱うことには優れる一方で、離れた枝同士の関係や分子全体の構造的な文脈を十分に捉えにくいという課題がありました。

そこで本研究では、糖鎖を構成する単糖を点(ノード)、糖同士の結合を線(エッジ)として表現し、それらを同時に扱う Graph Transformer[参考文献 5]型モデル「GlycanGT」を開発しました。さらに、多数の糖鎖配列を用いて、配列の一部を隠して元の構造を推定させる自己教師あり学習(masked language modeling^{注6)})により事前学習を行いました。これにより、ラベル付きデータが少ない場合でも、糖鎖の一般的な構造パターンをあらかじめ学習させることができます(図 1)。

評価では、糖鎖の由来生物分類、糖鎖タイプ分類、免疫原性予測の各課題において、既存の代表的手法と比較しました。その結果、GlycanGT は特に糖鎖全体の構造把握が重要な課題で高い性能を示しました(図 2a-c)。

また、実際の糖鎖データベースで見られるような「一部が不明」「結合情報が曖昧」といった状況を模した実験では、GlycanGT が欠損した単糖や結合の候補を高い確率で提示できることが分かりました。この性質は、糖鎖データベースの整備や、実験で完全には決定できなかった糖鎖構造の候補提示に有用と考えられます(図 3)。

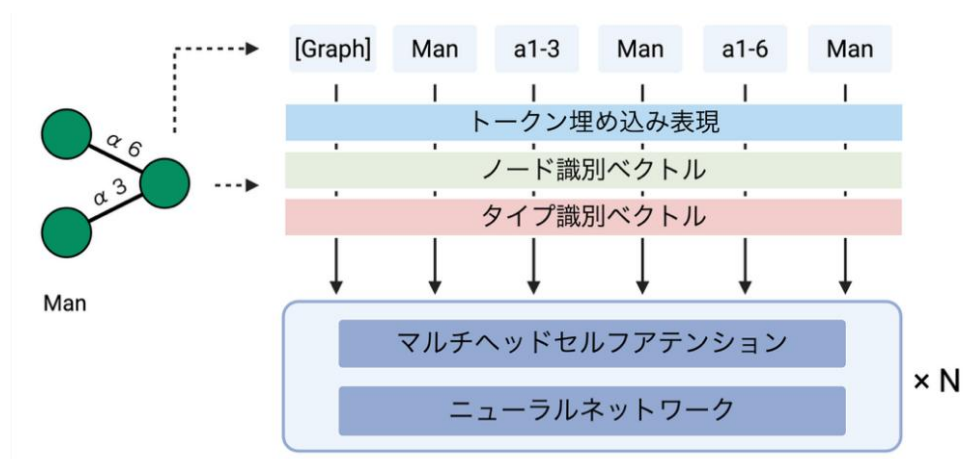


図 1. GlycanGT の概要:糖鎖を構成する単糖をノード、糖同士の結合をエッジとするグラフとして表現し、グラフトランスフォーマーで学習する。各トークンには、トークン情報、ノード識別情報、タイプ別情報を組み合わせた表現を与え、糖鎖全体の構造を捉える。

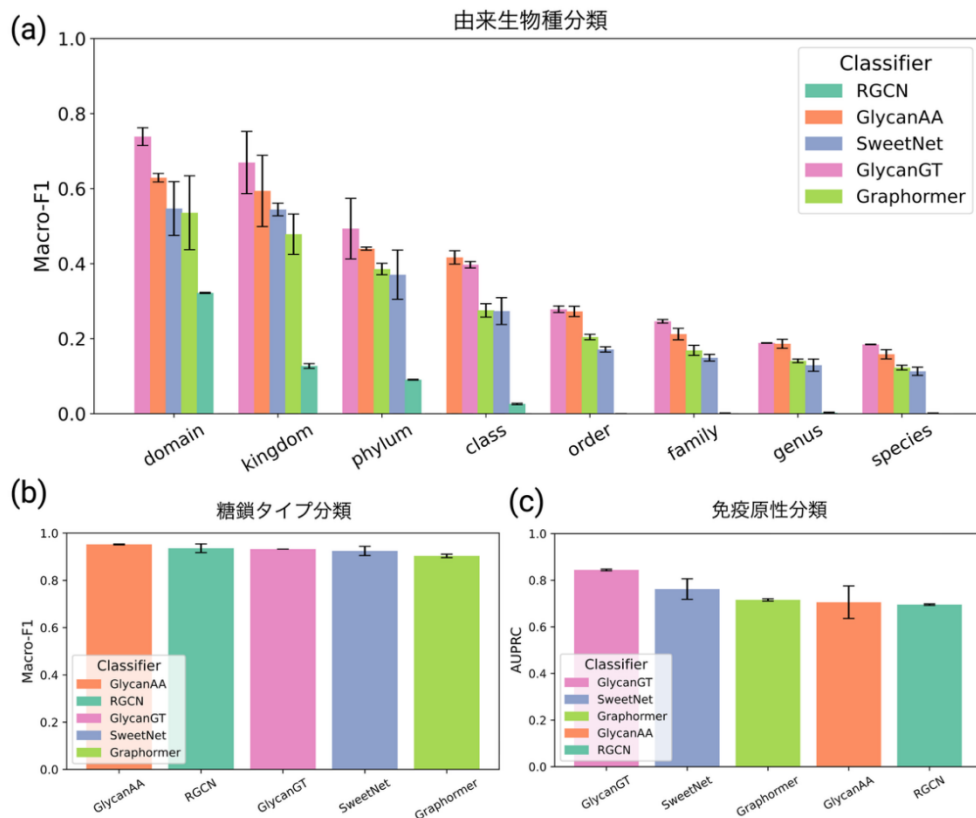


図 2. GlycanGT と既存手法の性能比較:分類および機能予測において高い精度を示した。
(a)生物分類、(b)糖鎖タイプ分類、(c)免疫原性予測。

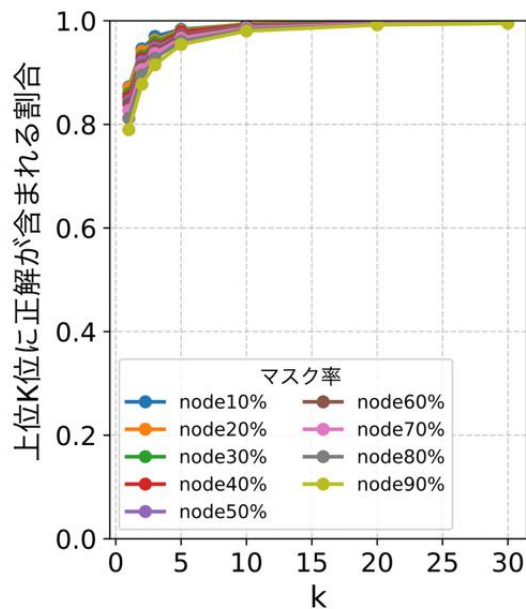


図 3. 曖昧な糖鎖に対する予測性能:糖鎖構造の一部を隠した場合でも、GlycanGT は単糖を高精度に予測できることを示した。

【成果の意義】

本研究の意義は、糖鎖という複雑で扱いにくい生体情報を、AI で汎用的に扱うための基盤的なモデルを示した点にあります。糖鎖研究では、構造決定の難しさやデータの不完全さが長年の課題でしたが、GlycanGT はその両方に対して計算科学的な解決策を与える可能性があります。

第一に、糖鎖の機能予測や分類に利用できる再利用可能な事前学習モデルを提供したことで、糖鎖 AI 研究の基盤整備が進みます。第二に、不完全な糖鎖配列に対して候補を提示できるため、糖鎖データベースの拡張や注釈作業の効率化につながることを期待されます。第三に、将来的には糖鎖異常が関与するがん、神経疾患、感染症などの病態解明や、診断・創薬への応用にもつながる可能性があります。

本研究は、2021 年度から始まった文部科学省『ヒューマングライコムプロジェクト』の支援のもとで行われたものです。

【用語説明】

注 1)糖鎖:

単糖が複数つながってできた生体分子。タンパク質や脂質に結合して存在し、細胞認識や免疫などに関わる。

注 2)グラフ:

点(ノード)と線(エッジ)から成るデータ構造。本研究では単糖をノード、糖同士の結合をエッジとして糖鎖を表現した。

注 3)Transformer:

自然言語処理などで広く使われる AI モデル。入力全体の関係性を同時に捉えることができる。

注 4)事前学習モデル:

大量データからあらかじめ一般的な特徴を学習したモデル。少量データの課題にも応用しやすい。

注 5)免疫原性:

物質が免疫系に認識され、免疫応答を引き起こす性質。

注 6)masked language modeling:

入力の一部を隠し、その内容を周囲の文脈から予測させる学習法。本研究では糖鎖の単糖や結合の一部を隠して学習した。

【参考文献】

- [1] He,M. et al. (2024) Glycosylation: mechanisms, biological functions and clinical implications. Signal Transduct. Target. Ther., 9, 194
- [2] Hao,C. et al. (2025) Effect of glycosylation on protein folding: From biological roles to chemical protein synthesis. iScience, 28, 112605
- [3] Burkholz,R. et al. (2021) Using graph convolutional neural

networks to learn a representation for glycans. Cell Rep., 35, 109251.
[4] Xu,M. et al. (2025) Modeling all-atom glycan structures via hierarchical message passing and multi-scale pre-training. arXiv [cs.LG].
[5] Kim,J. et al. (2022) Pure Transformers are Powerful Graph Learners. arXiv [cs.LG].

【論文情報】

雑誌名:Bioinformatics

論文タイトル:GlycanGT: A Pretrained Graph Transformer Framework for Glycan Graph Representation and Generative Learning

著者:

木谷 晃広

名古屋大学 糖鎖生命コア研究所 特任助教

張 秉元

名古屋大学 糖鎖生命コア研究所 特任助教

檜森 弘一

名古屋大学 糖鎖生命コア研究所 研究員

松井 佑介

名古屋大学 糖鎖生命コア研究所 糖鎖ビッグデータセンター 数理解析部門 准教授

大学院医学系研究科 准教授

DOI:10.1093/bioinformatics/btag147



東海国立大学機構は、岐阜大学と名古屋大学を運営する国立大学法人です。
国際的な競争力向上と地域創生への貢献を両輪とした発展を目指します。

東海国立大学機構 HP <https://www.thers.ac.jp/>

