

令和 8年 4月23日

理事長 殿

2025年度 特定課題研究費研究報告書

研究代表者	所属	情報通信工学コース	職	准教授	氏名	平野 敏行
研究分担者	所属		職		氏名	
	所属		職		氏名	
	所属		職		氏名	
研究課題名	(和文) タンパク質電子構造データベースの開発					
	(英文) Development of electronic structure database in protein					
研究種目	スタートアップ研究					
研究実績の概要						
従来の量子化学計算では、計算時間が分子サイズに対して膨大に増大するため、タンパク質のような巨大分子系への適用は困難とされてきた。我々はこの課題に対し、タンパク質を領域分割せずにまるごと直接扱う正準（カノニカル）分子軌道計算システム「ProteinDF」を独自に開発している。ProteinDFはMPIとOpenMPによるハイブリッド並列化に対応し、GPUを用いた高速化も実装済みであり、小規模なPCクラスタからスーパーコンピュータ（HPC）まで幅広い計算環境での稼働実績を有する。 これまでに確立した大規模分子の正準分子軌道計算の実績を基盤として、正準分子軌道法に基づく「タンパク質電子構造データベース (DB)」の開発を進めている。タンパク質の精密な電子構造情報は究極のバイオインフォマティクスであり、DB化とデータの蓄積によって機械学習やAIとの連携が可能となる。この成果は、創薬や酵素改良の効率化に貢献するだけでなく、あらゆるソフトマテリアルにおける汎用的な分子設計基盤技術として社会に広く波及することが期待される。 今年度はDB結果を手軽に表示・確認できる手段として、Webブラウザ上で動作するGUIのプロトタイプを開発した。PythonのStreamlitとpy3Dmolを基盤技術として採用し、数万原子を含むタンパク質の3D構造や、分子軌道・静電ポテンシャルなどの計算結果を高速かつ直感的に可視化することに成功している。これにより、難解なCUIコマンドに不慣れなユーザーでも容易にタンパク質電子状態計算結果を体験できるようになり、教育分野での活用や、地理的に離れた研究者間での共同研究の促進が可能となった。						
研究発表（論文、著書、講演等）						
1. 平野敏行, "タンパク質量子化学計算のためのグラフィカルユーザーインターフェースの開発", 東京都立産業技術高等専門学校 研究紀要, 20, 55 (2026).						
その他（教育活動・OPCへの貢献、特許等）						