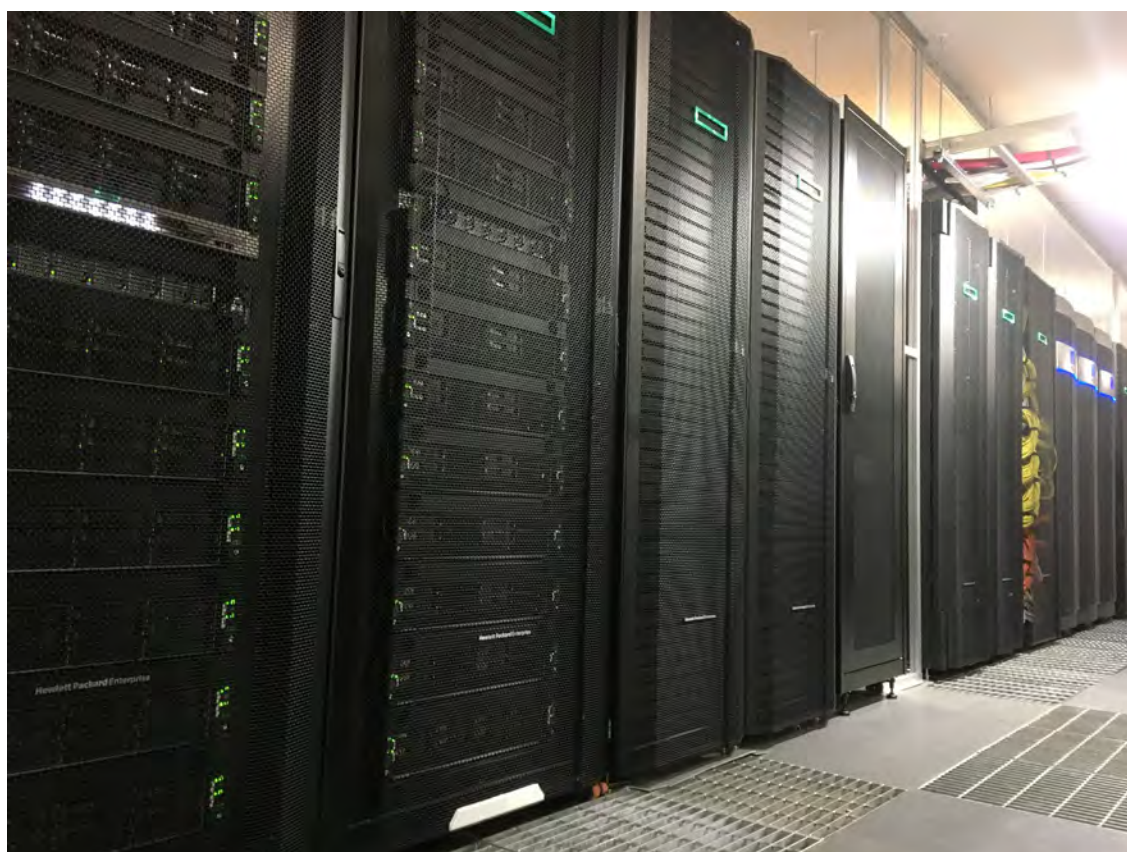


スーパーコンピュータシステム

令和3年度

研究成果報告書



京都大学化学研究所

はじめに

京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは、1992年1月より運用を開始した京都大学の研究設備で、複数のスーパーコンピュータが高速ネットワークで結ばれたネットワークスーパーコンピューティングシステムを提供しています。2020年1月に導入されたシステムは、ゲノムネット計算サーバシステム A として HPE Superdome Flex(総 CPU コア数 1,152)、ゲノムネット計算サーバシステム B および化学計算サーバとして HPE Apollo 2000(総 CPU コア数 5,680)、ゲノムネット公開サーバとゲノムネット開発サーバとして HPE ProLiant DL560(総 CPU コア数 640)を採用しました。化学研究所スーパーコンピュータシステムは、分子シミュレーションをはじめとする計算化学関連の応用ソフトウェア、ゲノム解析やバイオインフォマティクス研究で必要となる分子生物学関連のデータベースとソフトウェアが整備されており、こうした分野の研究環境をサポートすることを目的に、学内外の研究者に広く開放されています。また、分子生物学関連のデータベースとソフトウェアはゲノムネットデータベースサービス (<https://www.genome.jp/>) として、広く国内外の研究者に提供しています。

この報告書は、令和3年度の353名の登録利用者の中から、電子メールだけの利用者、特に報告する内容のなかった利用者、特許出願などの理由で研究成果を非公開としたい利用者を除き、93件の研究成果報告をまとめたものです。システム稼働状況、化学研究所 WWW サービスの利用状況、ゲノムネットデータベースサービス利用状況についても報告しています。

また、当システムは化学研究所共同利用・共同研究拠点の共通設備として利用され、令和3年度は9件の採択課題(バイオ情報学分野)推進に利用されました。

今後とも、スーパーコンピュータシステムをより良いものにしていくために、皆さまのご意見やご要望を以下のメールアドレスまでお寄せくださいますようお願い申し上げます。

送付先メールアドレス : spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

2022年3月

京都大学化学研究所 バイオインフォマティクスセンター
<https://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>
スーパーコンピュータシステム
<https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

目次

化学研究所

新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の反応解析	時任 宣博	1
平面シリセンナノリボンの理論設計と新しい動作原理の探求	高橋 まさえ	2
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	3
ポルフィリンの構造的特徴を活用した金錯体および金ナノクラスターの物性制御	鈴木 航	4
精密合成反応の設計	山子 茂	5
透過型電子顕微鏡による高分子結晶の高分解能観察	登阪 雅聡	6
非平面環状 π 共役分子の理論計算	茅原 栄一	7
高性能有機EL発光材料の開発	梶 弘典	8
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	9
界面の振動分光学	長谷川 健	10
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	11
タンパク質のX線結晶構造解析	藤井 知実	12
効率的有機分子変換反応を可能とする新規金属触媒の設計と合成	中村 正治	13
機能性高分子合成を指向した遷移金属錯体触媒の開発	脇岡 正幸	14
淡水湖に生息するCPRバクテリアの代謝機能解析	平井 颯	15
Interplay between planktonic interactions and climate change	劉 文文	16
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	17
数理モデルによる生体ネットワーク制御手法の開発	田村 武幸	18
マルチスケールシミュレーションによるドーパ系有機EL発光層の電荷輸送解析	梶 弘典	19
湖沼に生息する細菌・ウイルスのメタゲノム解析	岡寄 友輔	20
多官能基性化合物の位置選択的分子変換	上田 善弘	21
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	22
化学生命科学研究領域の研究報告	緒方 博之	23
環境中の微生物およびウイルスを対象としたゲノム・メタゲノム解析	遠藤 寿	25
ウイルス—宿主データベースの入力	朱 梦迪	26
植物プランクトン由来のゲノムおよびメタトランスクリプトーム解析	時 継宇	27
海洋微生物コミュニティにおける種間ネットワークの研究	金子 博人	28
巨大ウイルスのトランスクリプトーム解析	チョウ ルイシヤン	29
バイオインフォマティクスによる微生物学・進化学の研究	木島 壮一郎	30
バイオインフォマティクスを用いた生命生態・進化の解明	井出 詩菜	31
ViPTreeの修復及び機能追加による利便性向上並びに、ゲノムアライメント可視化機能に特化した新ツールの開発	山田 航平	32

ネットワークに基づく巨大ウイルスと真核生物の関心の発見	孟 令傑	33
巨大ウイルス間のHGTイベント	呉 君毅	34
巨大ウイルスの進化過程に関する研究	張 利雯	35
巨大ウイルスゲノムのアッセンブリ手法評価	疋田 弘之	36

エネルギー工学研究所

ナノ炭素材料の理論的研究	小島 崇寛	37
--------------	-------	-------	----

防災研究所

SSEに伴う海面地殻変動の推定	井上 智裕	38
-----------------	-------	-------	----

理学研究科

環状ピロール-イミダゾールポリアミドの合成と評価	廣瀬 優希	39
非天然ヌクレオシドの開発	平島 眞吾	40
シグナル伝達タンパク質の構造解析	朽尾 豪人	41
ピレン骨格をもつ柔軟な光機能分子の電子構造と光物性の解明	山角 拓也	42
典型元素を活用した有機合成法の創出	下川 淳	43
量子化学計算と固体NMRを用いた新規無機物質の構造解析	野田 泰斗	44

工学研究科

計算化学的手法による有機物・無機物の熱物性・輸送特性予測	松本 充弘	45
刺激応答性プローブの創製	三木 康嗣	46
層状アンチモン化合物の構造シミュレーション	新井 一功	47
可視光応答型光触媒を用いる高効率水分解システムの開発	鈴木 肇	48
有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価	筒井 祐介	49
13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明	伊藤 峻一郎	50
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	51
ポリオール類の水素化反応用銅系触媒の開発	藤墳 大裕	52
らせん高分子の立体配座の解析	山本 武司	53
らせん高分子の非結合性相互作用に基づいたキラルシフト試薬の開発	藤江 峻也	54
光・電気・磁気機能性分子有機分子の分子軌道計算	松田 建児	55
ロジウム触媒によるカルベン挿入反応におけるカルボキシラート配位子の立体効果	藤原 哲晶	56
琵琶湖水中におけるウイルスメタゲノム解析	沈 尚	57
カイラル分子における電子カイラリティの相対論的量子化学計算	黒田 直也	58

エネルギー科学研究科

エネルギー機能材料の電子構造と光物性	蜂谷 寛	59
生体系物質の原子・電子解析	馬淵 守	60
材料界面・表面と生体分子の相互作用分析	袴田 昌高	61
生体系タンパク質の動的解析	陳 友晴	62
<u>農学研究科</u>			
植物アレルゲンの構造	丸山 伸之	63
磁場配向を利用した固体NMR解析手法の開発	久住 亮介	64
一酸化炭素資化菌と水圏ウイルスの分子生物学的研究	吉田 天士	65
微細藻類等の分子育種に関する研究	澤山 茂樹	66
<u>人間・環境学研究科</u>			
フルオロベンゼンと二酸化炭素との分子間相互作用の解析	津江 広人	67
タングステン酸塩化合物の固体電子構造と光物性	上田 純平	68
ハラタケ綱菌類における外生菌根菌の進化と多様化	佐藤 博俊	69
<u>生態学研究センター</u>			
細菌群集ネットワークの動態予測	藤田 博昭	70
<u>高等研究院</u>			
多能性細孔物質の深化	大竹 研一	71
金属錯体ソフトマテリアルの創成	古川 修平	73
CO ₂ を原料とした多孔性配位高分子の合成とCO ₂ 吸着材としての応用	堀毛 悟史	74
自己集合を利用したタンパク質のカプセル化	藤田 大士	75
<u>福井謙一記念研究センター</u>			
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	76
<u>産官学連携本部</u>			
電池材料のラマンスペクトルの計算	山中 俊朗	77
<u>大学・研究機関・企業・NPO法人・個人等</u>			
遺伝子情報を用いた海洋生態学研究	西村 陽介	78
グラフに基づく分子系統解析手法の開発と適用	松井 求	79
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也	80

密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索	蒲池 高志	81
高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅	Carles Serrat	82
スギゲノムの解読と解析	藤野 健	84
真核生物の細胞内共生後のアミノアシルtRNA合成酵素の進化	浜口 悠貴	85
DNA配列空間に新規機能を予測する情報技術および一酸化炭素デヒドロゲナーゼ保有微生物の分子生態	大前 公保	86
対偶遺伝学とメタエピゲノミクスによる微生物ダークマターの機能解析	富永 賢人	87
計算化学を活用した天然物の合成研究	占部 大介	88
重い元素を含む有機無機化合物	笹森 貴裕	89
凝集誘起発光についての理論的研究	山本 典史	90
高活性遷移金属錯体の合成による新反応開拓	岩本 貴寛	91
新規抗菌薬の開発を目標とした病原性細菌由来タンパク質の立体構造予測	森 茂太郎	92
酵素模倣型[Mo ₃ S ₄ Fe]クラスター錯体によるN ₂ 還元反応の理論計算	Sameera W.M.C.	93
新規ナノ物質の設計に向けた第一原理計算研究	飯田 健二	94
複数種の赤潮の消長過程におけるウイルス叢遷移様態の網羅的解析	高橋 迪子	95
ゲノム・メタゲノム情報を利用した新奇微生物酵素の探索	井上 真男	96

スーパーコンピュータシステム

システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也	97
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	103
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	104
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴	福本 淳司	140
令和3年度研究課題一覧		146

京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム

〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄

TEL 0774-38-3265

spradm@scl.kyoto-u.ac.jp

<https://www.scl.kyoto-u.ac.jp>