

スーパーコンピュータシステム

令和5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あり、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。2024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 および HPE DL380G11(総 CPU コア数 6,400、搭載 GPU 数 18)、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5年度の292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、99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5年度は10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

2024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

前駆体法を利用した拡張パイ共役分子の開発	松尾 恭平	1
平面二次元シートに埋め込まれた低次元ケイ素材料の理論設計と動作原理の探求	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
構造制御された高分子の解析	登阪 雅聡	4
非平面環状 π 共役分子の理論計算	茅原 栄一	5
界面の振動分光学	長谷川 健	6
細菌による細胞外膜小胞への選択的タンパク質輸送機構の解析	川本 純	7
粗視化分子動力学シミュレーションによる環状高分子とその同族体のレオロジーの研究	佐藤 健	8
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆	9
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	10
新規鉄触媒による触媒的 π - π 平面活性化を活用した炭素-ヘテロ原子結合形成反応の開発	道場 貴大	11
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	12
全球海洋メタゲノム解析を通じた巨大ウイルスの多様性と進化の解明	孟 令傑	13
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	14
うつ病とその症状の生物学的背景を解明するための機械学習アルゴリズムの開発	Petschner Peter	15
高性能ペロブスカイト太陽電池作成に有効な高活性酸化スカベンジャーの開発	笹森 貴裕	16
立方体型 $[\text{Mo}_3\text{S}_4\text{Pd}]$ クラスターを触媒とするプロトン還元反応機構解析	Sameera W.M.C.	17
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	18
湖沼に生息する微生物の環境ゲノム解析	岡寄 友輔	19
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	20
重いアリアルアニオンを基軸とした新規骨格構築反応の開発	西野 龍平	21
化学生命科学研究領域の研究報告	緒方 博之	22
巨大ウイルス翻訳機構研究	チョウ ルイシヤン	24
深い湖での最先端のロングリードシーケンシングによる巨大ウイルスの包括的な調査	張 利雯	25
ヴァイロファージのトランスクリプトーム解析	陳 婧潔	26
深海特異的的巨大ウイルスの遺伝子解析	長坂 孔明	27
海洋プランクトン群集の網羅的死滅解析	菊矢 咲季	28

巨大ウイルスのプロモーターの配列解析	唐 威	29
藻類発生期の自然環境における巨大ウイルス群集の継続的な遺伝的・発現的適応	夏 駿	30
深海に棲息する巨大ウイルスの生態	劉 文文	31
海洋窒素固定生物に感染するウイルスの探索	佐藤 拓哉	32
パルマ藻のオミクスデータ解析	伴 広輝	33
巨大ウイルスの遺伝子獲得にはウイルス間の遺伝子移動が大きく寄与している	呉 君毅	34
マルチスケールシミュレーションを用いた有機非晶膜における電荷トラップの分子レベル解析	梶 弘典	35
バイオインフォマティクスを用いた巨大ウイルス感染戦略の研究	疋田 弘之	36
項間交差より高速な逆項間交差を有する新規有機発光材料の開発	梶 弘典	37
<u>エネルギー理工学研究所</u>			
ナノ炭素材料の理論的研究	小島 崇寛	38
<u>理学研究科</u>			
溶液中の核酸塩基の IR スペクトルの理解	Humeniuk Alexander	39
疾患治療を目的としたピロロール-イミダゾールポリアミドの開発	廣瀬 優希	40
コンフォメーション変化により二重発光特性を示す化合物の網羅探索	齊藤 尚平	41
Ptステップ面に吸着した水の構造	渡邊 一也	42
銅表面に吸着したホルメート種の電子状態計算	小坂谷 貴典	43
典型元素を活用した有機合成法の創出	下川 淳	44
液体-液体転移を示す配位高分子の構造解析	堀毛 悟史	45
密度汎関数理論を用いた金属表面吸着分子のポテンシャル曲面解析	倉重 佑輝	46
シグナル伝達タンパク質の構造解析	朽尾 豪人	47
<u>医生物学研究所</u>			
生殖系列サイクルのゲノム安定性の制御機構	中馬 新一郎	48
<u>薬学研究科</u>			
水移動型反応を活用した有機合成化学の開拓	中 寛史	49
アルコールの脱酸素化を可能とする新規レドックス補助基の開発	竹本 佳司	50
<u>工学研究科</u>			
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	51

分子動力学シミュレーションによる潤滑油中添加剤の吸着エネルギーの算出	平山 朋子	52
プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析	占部 継一郎	53
酵素応答性蛍光プローブの創製	三木 康嗣	54
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	55
銀ナノ粒子を配置したMoS ₂ 薄膜のラマンスペクトルの理論解析	杉山 佳奈美	56
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	57
ケイ素で架橋した環状分子の合成と特性評価	大谷 俊介	58
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	59
キラルらせん高分子の側鎖設計にもとづく新規機能開拓	良永 裕佳子	60
光・電気・磁気機能性有機分子の分子軌道計算	松田 建児	61
亜鉛触媒によるシリルボランを用いたアルデヒドのシリル化反応	藤原 哲晶	62
金属錯体多面体の集積による多孔性分子結晶の創成	徳田 駿	63

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	64
--------------------	------	-------	----

農学研究科

セルロース微結晶の分散液中における構造	小林 加代子	66
一酸化炭素酸化菌と水圏ウイルス、原生生物の分子生物学的研究	吉田 天士	67
一酸化炭素酸化菌と水圏ウイルス、原生生物の分子生物学的研究	吉田 天士	69
微生物の分子育種に関する研究	澤山 茂樹	70
植物アレルゲンの構造	丸山 伸之	71

人間・環境学研究科

有機結晶の気体吸着状態についての理論的解析	津江 広人	72
-----------------------	-------	-------	----

生命科学研究科

基部陸上植物苔類ゼニゴケにおける活性型ジベレリンの単離と同定	下川 瑛太	73
--------------------------------	-------	-------	----

地球環境学

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	74
----------------------------	--------	-------	----

高等研究院

金属錯体ソフトマテリアルの創成	古川 修平	75
脂質動態を介した食の分子機構	大和 勇輝	76
多能性細孔物質の深化	大竹 研一	77
<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	79
<u>京都大学以外の大学・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	80
琵琶湖流域を対象とした薬剤耐性遺伝子の分布図の作成	沈 尚	81
合金材料の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也	82
高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅	Carles Serrat	83
スギゲノムの解読と解析	藤野 健	85
対偶遺伝学法を利用した海洋微生物の遺伝子の機能解明	富永 賢人	86
生物システムの系統進化・群集生態	鈴木 誉保	87
スペクトラルグラフ理論に基づく新規系統解析手法の開発	松井 求	88
微生物の表現型データベースの開発	藤吉 真生	89
環境DNAの解析	朱 涛	90
生命システム進化の法則解明・未来予測	今野 直輝	91
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	92
計算化学を活用した天然物の合成研究	占部 大介	93
凝集誘起発光についての理論的研究	山本 典史	94
テトラフェニルエチレンの凝集誘起発光ダイナミクスに関する理論的解析	與五澤 蓮	95
高活性遷移金属錯体の合成による新反応開拓	岩本 貴寛	96
代謝ネットワーク構造とその発展性の探求	平井 颯	97
化学エネルギー変換に関わる反応活性種の構造反応性相関	太田 雄大	98
多孔質金属錯体内における分子拡散の分子動力学シミュレーション	細野 暢彦	99
マングローブおよび周辺水圏に生息する微生物のメタゲノム・メタトランスクリプトーム解析	長谷川 万純	100
マウス腸内微生物由来膜小胞の機能解析	森永 花菜	101
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	102
水圏環境におけるウイルス・バクテリオファージのゲノム解析	高橋 迪子	103
微生物ゲノム情報を利用した新奇代謝遺伝子群の探索	井上 真男	104
<u>スーパーコンピュータシステム</u>			
システム稼働状況	西川 和嗣 福本 淳司	105

大久保 宏一
上原 英也

京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況
ゲノムネットサービス利用統計
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴
令和5年度研究課題一覧

西川 和嗣 110
西川 和嗣 111
福本 淳司 147
..... 154

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>