

スーパーコンピュータシステム

令和6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6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、118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6年度は11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

2025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

高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	1
水素結合性有機半導体の物性解明	山内 光陽	2
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	3
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	4
酸非存在下におけるカルボカチオンの触媒的発生に基づいた結合形成反応	長尾 一哲	5
ラジカル共重合におけるモノマー反応性比のデータベース構築	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
非発光性ペンタアザフェナレンを高効率発光材料へ転換する分子設計	梶 弘典	8
界面の振動分光学	長谷川 健	9
界面の振動分光学	岡 昂徹	10
界面の振動分光学	荒木 泰介	11
界面の振動分光学	大貫 友椰	12
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	13
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	14
新規鉄触媒による触媒的パイ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	15
金属-硫黄クラスターの合成,反応,および生体関連機能の研究	谷藤 一樹	16
化学生命科学研究領域の研究報告	緒方 博之	17
高解像度系統ゲノム解析を用いた核細胞ウイルス門の種境界のマッピング	Neches Russell	19
微小真核生物とウイルスの沈降動態	楊 青偉	20
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	21
ヴァイロファージのトランスクリプトーム解析	陳 婧潔	22
深海に棲息する巨大ウイルスの生態	劉 文文	23
深海特異的的巨大ウイルスの発見と深海適応遺伝子の探索	長坂 孔明	24
真核生物のゲノムデータを用いた内在性ミルスウイルスの解析	趙 宏達	25
海洋プランクトン群集の網羅的死滅解析	菊矢 咲季	26
巨大ウイルスのゲノムに保存された制御配列の系統的解明	唐 威	27
SAR11細菌の単一細胞ゲノム解析	DanielShenbagan Shaanaav	28
真核生物 <i>Diphyllia rotans</i> におけるゲノムDNA中の内在性ウイルス様配列の探索	野澤 朋仁	29
ゲノム解析を通じた巨大ウイルスの種内多様性	孟 令傑	30
機械学習手法を使用した遺伝子のアノテーション付け	余 兆熙	31
異種ネットワークの構築によりウイルスとホストの関連の解明	欧陽 成州	32
メタオミクスを利用した海洋プランクトン動態に関する研究	江 思宇	33

生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	34
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	35
高効率なSn/Pb 混合ペロブスカイト太陽電池の開発	笹森 貴裕	37
湖沼に生息する微生物の環境ゲノム解析	岡崎 友輔	38
バイオインフォマティクスを用いた巨大ウイルスゲノムの解析	疋田 弘之	39
環境中の微生物およびウイルスを対象としたオミクス解析	遠藤 寿	40
海洋窒素固定生物に感染するウイルスの探索	佐藤 拓哉	41
巨大ウイルスの遺伝子獲得にはウイルス間の遺伝子転移が大きく寄与している	呉 君毅	42
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	43
微生物の表現型データベースの開発	藤吉 真生	44
巨大ウイルス翻訳機構研究	チョウ ルイシヤン	45
ペンタアザフェナレン誘導体 (5AP-N(C12) ₂) における逆転一重項-三重項励起状態	梶 弘典	46

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素材料の理論的研究	小島 崇寛	47
--------------	-------	-------	----

理学研究科

溶液中の核酸塩基の IR スペクトルの理解	Humeniuk Alexander	48
超高速分光による核酸塩基の光化学素過程の解明	Ghosh Srijon	50
Ptステップ面に吸着した水の構造	渡邊 一也	51
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	52
擬天然ペプチドの創製研究	大賀 充陽	53
典型元素を活用した有機合成法の創出	下川 淳	54
シグナル伝達タンパク質の構造解析	朽尾 豪人	55
結晶融解を示す配位高分子の機械特性の解析	堀毛 悟史	56
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	57

医生物学研究所

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	58
----------------------	--------	-------	----

薬学研究科

In silico手法を用いたシグナル伝達分子に対する化合物の選択性についての研究	平澤 明	59
---	------	-------	----

工学研究科

分子動力学シミュレーションによる潤滑油中添加剤の溶解性と潤滑効果の関係性に関する研究	谷 海洋	・・・	60
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	・・・	61
酵素応答性発光プローブの創製	三木 康嗣	・・・	62
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	・・・	63
電極材料の電子構造計算	宮崎 晃平	・・・	64
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	・・・	65
超分子ポリマーの精密合成	杉安 和憲	・・・	66
遠隔立体効果による銅(I)多核錯体の発光色スイッチング	渡邊 雄一郎	・・・	67
架橋部位に窒素原子を導入した環状分子の合成と特性評価	大谷 俊介	・・・	68
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫	・・・	69
銅触媒による二酸化炭素を用いた1,2-ジエンのボラカルボキシル化反応	藤原 哲晶	・・・	70
光・電気・磁気機能性有機分子の分子軌道計算	松田 建児	・・・	71
ミスト化学気相成長法の反応機構解析	若松 岳	・・・	72
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	・・・	73
キララ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	・・・	74

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	・・・	75
陽極酸化被膜とめっき金属の複合層におけるアンカー効果	袴田 昌高	・・・	77
リチウム金属電池の性能向上のためのイオン液体におけるアニオン駆動型の配位構造	黄 珍光	・・・	78

農学研究科

植物アレルゲンの構造	丸山 伸之	・・・	79
無水キトサン結晶の熱挙動解析	大川 一路	・・・	80
セルロース微結晶の分散液中における構造	小林 加代子	・・・	81
微生物の分子育種に関する研究	澤山 茂樹	・・・	82
一酸化炭素酸化菌と水圏ウイルス、原生動物の分子生物学的研究	吉田 天士	・・・	83
一酸化炭素酸化菌と水圏ウイルス、原生動物の分子生物学的研究	吉田 天士	・・・	84

人間・環境学研究科

気体吸着状態の結晶構造解析を簡便化する新規結晶マウントの独自開発	津江 広人	・・・	87
----------------------------------	-------	-----	----

生命科学研究所

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	・・・	88
--------------------------------	-------	-----	----

生物群集の多重安定性	東樹 宏和	・・・	89
魚類腸内細菌における機能多様性の解明	藤田 博昭	・・・	90
土壌原核生物の個体群動態安定性と代謝機能の関係に関する研究	景山 拓矢	・・・	91
真菌群集の多重安定性	野口 幹仁	・・・	92
微生物群集の安定性解析	島 玄太	・・・	93

地球環境学堂

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	・・・	94
----------------------------	--------	-----	----

高等研究院

多能性細孔物質の深化	大竹 研一	・・・	95
安定な超分子集合体の合成	古川 修平	・・・	97
自己集合を利用したタンパク質のカプセル化	藤田 大士	・・・	98
脂質動態を介した食食の分子機構	大和 勇輝	・・・	99

福井謙一記念研究センター

振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹	・・・	100
-----------------	------	-----	-----

成長戦略本部

二次電池材料の微細構造解析	堀 博伸	・・・	101
---------------	------	-----	-----

京都大学以外の大学・研究機関・企業・NPO法人・個人等

ゲノム情報を用いた微生物・ウイルスの生態と進化の研究	西村 陽介	・・・	102
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	・・・	103
合金触媒の作用機構に関する理論的研究	古川 森也	・・・	104
合金材料の触媒作用に関する理論的研究	中谷 勇希	・・・	105
密度汎関数法を用いたNO還元代替触媒探索	蒲池 高志	・・・	106
高次高調波によるアト秒X線パルスの増幅	Carles Serrat	・・・	107
スギゲノムの解読と解析	藤野 健	・・・	108
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	・・・	109
生物システムの系統進化・群集生態	鈴木 誉保	・・・	111
生命システム進化の法則解明・未来予測	今野 直輝	・・・	112
高分子溶液の相分離に関する大規模シミュレーション	吉元 健治	・・・	113

凝集誘起発光についての理論的研究	山本 典史	・・・	114
代謝ネットワーク構造とその発展性の探求	平井 颯	・・・	115
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	・・・	116
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	・・・	117
マウス腸内微生物の機能解析	森永 花菜	・・・	118
分子クラスターモデルを用いた結晶相励起状態ダイナミクスの量子化学解析	鯉渕 領	・・・	119
DNA配列空間に新規機能を予測する情報技術	大前 公保	・・・	120
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	・・・	121
計算化学を利用した天然物の構造解析と合成	深谷 圭介	・・・	122
ゲノム情報に隠された新奇微生物酵素遺伝子群の探索	井上 真男	・・・	123
沿岸域における水産生物に関するバイオインフォマティクス解析	伴 広輝	・・・	124
海洋性動物プランクトンの分子生態学	平井 惇也	・・・	125
赤潮原因藻感染性ウイルスに関する研究	船岳 祐作	・・・	126
<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 大久保 宏一 上原 英也	・・・	127
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣	・・・	133
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣	・・・	134
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	・・・	170
令和6年度研究課題一覧		・・・	176

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>