

スーパーコンピュータシステム

平成 24 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。2012年1月に導入された現在のシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとしてSGI UV1000（総CPUコア数3072）を、ゲノムネットウェブサーバとゲノムネット開発サーバとしてSun Fire X4800（総CPUコア数768）を採用しています。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、新しい研究環境を必要とする京都大学内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 (<http://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、平成24年度の346名の登録利用者の中から電子メールだけの利用者や、特に報告する内容のなかった利用者を除き、63件の研究成果報告をまとめたものです。また、システム稼働状況、化学研究所WWWサーバ利用状況、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。

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お寄せくださいますようお願い申し上げます。

2013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
<http://www.bic.kyoto-u.ac.jp/>
スーパーコンピュータシステム
<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/>

目次

化学研究所

新規な低配位典型元素化合物の合成とその性質	笹森 貴裕	・・・ 1
典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行	・・・ 2
特異な光・電子物性を有する新規ヘテロ π 共役系典型元素化合物の創製	吾郷 友宏	・・・ 3
特異な構造をもつ有機分子の電子的性質	村田 靖次郎	・・・ 5
精密合成反応の設計	山子 茂	・・・ 7
多角形有機金属錯体を前駆体とした環状共役 π 分子の新しい合成法の開発	岩本 貴寛	・・・ 11
含歪み π 共役化合物の合成とその物性評価	茅原 栄一	・・・ 13
ガラスの構造研究	横尾 俊信	・・・ 15
酵素阻害剤の設計と合成研究	渡辺 文太	・・・ 19
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典	・・・ 21
水を主役としたATPエネルギー変換	松林 伸幸	・・・ 25
溶液および界面の振動分光	下赤 卓史	・・・ 28
第一原理計算によるスペクトルの解析	根本 隆	・・・ 30
タンパク質のX線結晶構造解析	山内 貴恵	・・・ 31
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖	・・・ 32
高効率クロスカップリング反応を可能とする新規鉄錯体の設計と合成	中村 正治	・・・ 34
遷移金属錯体に関する理論計算	中島 裕美子	・・・ 37
遷移金属錯体の構造探索	中島 裕美子	・・・ 39
生体分子情報データベースの開発	五斗 進	・・・ 41
教師あり学習による遺伝子ネットワーク推定エンジンの開発	小寺 正明	・・・ 45
RCLASSデータベースおよび反応オントロジーを用いた植物代謝産物の生合成に用いられる反応パターンの分類	時松 敏明	・・・ 47
ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析	清水 祐吾	・・・ 50
薬剤標的タンパク質と副作用の関連分析のための統計手法	水谷 紗弥佳	・・・ 52
Plasmodium抗原変異性遺伝子ファミリーにおける変異発生に関する解析	平糠 和志	・・・ 54
後生動物におけるイントラジェニックmiRNAと宿主遺伝子の機能関連解析	西村 陽介	・・・ 57
メタゲノムデータからの生物種系統特異的な機能モジュールの抽出	張 晨	・・・ 59
ゲノム配列を用いた短いメタゲノム配列フラグメントのアノテーション評価	金 昭	・・・ 61
代謝経路から酵素反応連続パターンの検出	武藤 愛	・・・ 63
新規オーソログクラスタデータベースKEGG OCの構築	守屋 勇樹	・・・ 67
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也	・・・ 69
条件付き確率場を用いたタンパク質RNA間残基塩基相互作用予測	林田 守広	・・・ 71

ブーリアンネットワークによる遺伝子制御ネットワークの解析	田村 武幸 73
生物ネットワークのデータマイニング	Hancock P. Timothy 75
機械学習アプローチに基づく生物学データ解析法に関する研究	烏山 昌幸 78
データマイニングによるヒストンの機能解析	夏目 やよい 81

生存圏研究所

生体高分子の分子シミュレーション	田中 文男 83
------------------	-------	----------

防災研究所

高速地すべりの運動機構	福岡 浩 85
-------------	------	----------

理学研究科

金属酸化物表面における吸着構造	松本 吉泰 87
ゼオライトのカチオンサイトにおける分子吸着状態の解明	渡邊 一也 89
固体プロトニクスに基づく物性化学の展開	北川 宏 91
造岩鉱物の拡散の異方性について	三宅 亮 93

薬学研究科

ドラッグライクテンプレートの開発研究	大野 浩章 95
ケモインフォマティクスおよびバイオインフォマティクスを活用したケミカルバイオロジー研究	掛谷 秀昭 99

工学研究科

触媒有機化学に関する研究	辻 康之 100
パイ共役系の電子物性に関する理論的研究	佐藤 徹 102
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之 104
光合成モデル化合物の合成	梅山 有和 105
多孔性配位高分子の合成と性質	植村 卓史 107
ライセニンとスフィンゴミエリンの相互作用の分子動力学を用いた解析	池ノ内 順一 109
分離プロセスの量子化学的研究	田門 肇 110
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫 111
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移	田中 秀樹 112
クラスターイオンと固体表面の相互作用	龍頭 啓充 114

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 116
マグネシウム合金における第一原理計算	馬淵 守 118

鉄系材料の破壊機構	楠田 啓	120
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高	122
ナノ複合材料の特性探究	浜 孝之	124
ポーラス金属の機能解明	陳 友晴	126
<u>農学研究科</u>			
変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子	128
生理活性物質の構造活性相関	赤松 美紀	130
<u>人間環境学研究科</u>			
リチウムイオン電池の正極界面反応の機構解明	折笠 有基	133
多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明	森 拓弥	134
<u>スーパーコンピュータシステム</u>			
システム稼働状況	中神 光眞 福本 淳司 大久保 宏一 上原 英也 西川 和嗣	135
京都大学化学研究所 WWWサービスの利用状況	中神 光眞	139
ゲノムネットサービス利用統計	中神 光眞	141
スーパーコンピュータシステム講習会等開催履歴		158
平成24年度研究課題一覧		162

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

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