

|             |   |
|-------------|---|
| Title       | 表紙・目次ほか   |
| Author(s)   |   |
| Citation    | 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究<br>成果報告書 (2014), 2013                                   |
| Issue Date  | 2014-03   |
| URL         | <a href="http://hdl.handle.net/2433/186418">http://hdl.handle.net/2433/186418</a> |
| Right       |   |
| Type        | Others  |
| Textversion | publisher   |

# スーパーコンピュータシステム

平成 25 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25年度の355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、64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。

2014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/>

## 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 $\pi$ 共役系典型元素化合物の創製                    | 吾郷 友宏  | ・・・ 5  |
| 特異な構造をもつ有機分子の電子的性質  | 村田 靖次郎 | ・・・ 7  |
| 分子内にカルボキシレートを持つ求核触媒の創製と触媒活性                               | 古田 巧   | ・・・ 9  |
| キラル特性を有する高分子高次構造の創製                                       | 榊原 圭太  | ・・・ 11 |
| 精密合成反応の設計   | 山子 茂   | ・・・ 13 |
| 多角形有機金属錯体を前駆体とした環状共役 $\pi$ 分子の新しい合成法の開発                   | 岩本 貴寛  | ・・・ 14 |
| 含歪み $\pi$ 共役化合物の合成とその物性評価                                 | 茅原 栄一  | ・・・ 16 |
| ガラスの構造研究  | 横尾 俊信  | ・・・ 17 |
| 水を主役としたATPエネルギー変換   | 松林 伸幸  | ・・・ 20 |
| 溶液および界面の振動分光学   | 下赤 卓史  | ・・・ 22 |
| 有機分子集合体の電子構造の研究   | 吉田 弘幸  | ・・・ 24 |
| 高強度フェムト秒レーザープラズマ相互作用のPICシミュレーションによる解析                     | 畑 昌育   | ・・・ 26 |
| EELSスペクトルの計算機シミュレーション                                     | 根本 隆   | ・・・ 28 |
| タンパク質のX線結晶構造解析  | 山内 貴恵  | ・・・ 29 |
| 高効率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  | ・・・ 30 |
| 遷移金属錯体の構造探索   | 脇岡 正幸  | ・・・ 34 |
| 生体分子情報データベースの開発   | 五斗 進   | ・・・ 36 |
| KEGG Chemical Function 形式を応用した化学部分構造データの生成と代謝パスウェイ再構築への応用 | 小寺 正明  | ・・・ 39 |
| 高精度植物アノテーション情報を利用した植物代謝経路構築                               | 時松 敏明  | ・・・ 41 |
| ポリケチド合成酵素ファミリーの包括的解析                                      | 清水 祐吾  | ・・・ 43 |
| 薬剤の有害反応に関する薬剤疫学解析   | 水谷 紗弥佳 | ・・・ 45 |
| 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  | ・・・ 48 |
| 基質・生成物ペアの構造に基づく代謝酵素遺伝子の予測                                 | 守屋 勇樹  | ・・・ 50 |
| 生物情報ネットワークの解析と制御  | 阿久津 達也 | ・・・ 52 |
| タンパク質ドメイン構造に基づくプロテオーム圧縮                                   | 林田 守広  | ・・・ 54 |
| タンパク質立体構造および相互作用の情報解析手法                                   | 阮 佩穎   | ・・・ 56 |
| 遷移金属触媒反応開発を支援する統計有機化学分野の開拓                                | 山口 滋   | ・・・ 58 |
| 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  | ・・・ 59 |
| 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 | ・・・ 61 |
| X線管からのスペクトル解析   | 正岡 聖   | ・・・ 63 |

|   |       |         |
|---|-------|---------|
| 有機デバイスの基礎科学と高機能化                            | 梶 弘典  | ・・・ 65  |
| ブーリアンモデルによる遺伝子制御ネットワークの解析                   | 田村 武幸 | ・・・ 69  |
| XAFS分光法によるガラス材料の構造解析                        | 梅咲 則正 | ・・・ 71  |
| <u>エネルギー理工学研究所</u>                          |       |         |
| 原子力材料挙動のモデリング研究                             | 森下 和功 | ・・・ 73  |
| <u>生存圏研究所</u>                               |       |         |
| 生体高分子の分子シミュレーション                            | 田中 文男 | ・・・ 75  |
| <u>理学研究科</u>                                |       |         |
| 金属酸化物表面における吸着構造                             | 松本 吉泰 | ・・・ 77  |
| <u>薬学研究科</u>                                |       |         |
| 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 | ・・・ 79  |
| <u>工学研究科</u>                                |       |         |
| パイロフィライト中のナノポアにおけるメタンの流動現象                  | 澤 侑乃輔 | ・・・ 80  |
| 触媒有機化学に関する研究                                | 辻 康之  | ・・・ 82  |
| パイ共役系の電子物性に関する理論的研究                         | 佐藤 徹  | ・・・ 86  |
| 化学反応と電子物性に関する理論的研究                          | 笛野 博之 | ・・・ 88  |
| 光合成モデル化合物の合成                                | 梅山 有和 | ・・・ 89  |
| 多孔性配位高分子の合成と性質                              | 植村 卓史 | ・・・ 91  |
| HOPG基板上における分子配列のモデリング                       | 廣瀬 崇至 | ・・・ 92  |
| HOPG基板上における分子配列のモデリング                       | 横山 創一 | ・・・ 93  |
| 分離プロセスの量子化学的研究                              | 田門 肇  | ・・・ 95  |
| 吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討                        | 鈴木 哲夫 | ・・・ 96  |
| 多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移                           | 田中 秀樹 | ・・・ 97  |
| クラスターイオンビームと固体表面の相互作用                       | 龍頭 啓充 | ・・・ 99  |
| <u>エネルギー科学研究科</u>                           |       |         |
| エネルギー機能材料の電子構造と光物性                          | 蜂谷 寛  | ・・・ 102 |
| マグネシウム合金における第一原理計算                          | 馬淵 守  | ・・・ 104 |
| 鉄系材料の破壊機構                                   | 楠田 啓  | ・・・ 106 |
| 多孔質金属の表面特性                                  | 袴田 昌高 | ・・・ 108 |
| 金属粒界・相境界の原子シミュレーション                         | 浜 孝之  | ・・・ 110 |
| ポーラス金属の機能解明                                 | 陳 友晴  | ・・・ 112 |

## 農学研究科

|                       |       |         |
|-----------------------|-------|---------|
| 植物種子タンパク質の構造と機能       | 丸山 伸之 | ・・・ 114 |
| 変調磁場を用いて作製した擬単結晶の構造解析 | 木村 史子 | ・・・ 116 |

## 人間・環境学研究科

|                         |       |         |
|-------------------------|-------|---------|
| 有機微粉末結晶のab initio結晶構造解析 | 津江 広人 | ・・・ 119 |
| 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 | ・・・ 120 |
| 多価カチオン二次電池正極材料の反応機構解明   | 森 拓弥  | ・・・ 122 |

## 物質-細胞統合システム拠点

|                                 |       |         |
|---------------------------------|-------|---------|
| 高次元マクロ構造を持つ配位高分子/酸化物複合体の合成手法の確立 | 古川 修平 | ・・・ 124 |
|---------------------------------|-------|---------|

## iPS細胞研究所

|                            |       |         |
|----------------------------|-------|---------|
| 三次元分子設計による蛋白質応答型RNAスイッチの設計 | 齊藤 博英 | ・・・ 125 |
|----------------------------|-------|---------|

## 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<br>福本 淳司<br>大久保 宏一<br>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                             | ・・・ 131 |
| ゲノムネットサービス利用統計         | 西川 和嗣                             | ・・・ 133 |
| 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                             | ・・・ 152 |
| 平成25年度研究課題一覧           |                                   | ・・・ 156 |

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>