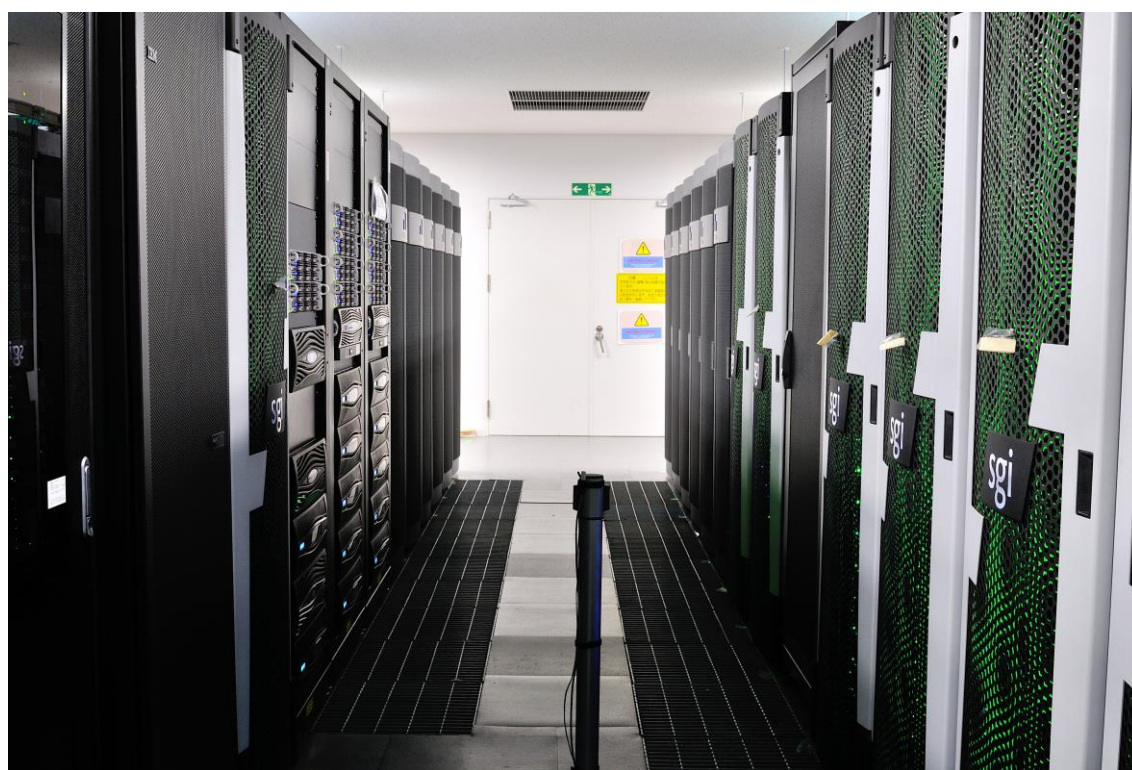


スーパーコンピュータシステム

平成 29 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。2016 年 1 月に導入されたシステムは、化学計算サーバとゲノムネット計算サーバとして SGI UV2000(総 CPU コア数 1,024)および SGI C2112(総 CPU コア数 3,000)を採用し、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 DELL PowerEdge R930(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 (<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 29 年度の 356 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、71 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、平成 29 年度は 7 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

2018 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
高周期典型元素を含む新規結合様式の創出	水畑 吉行		2
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	郭 晶東		3
第三元素添加による新奇規則合金相Fe-Pdナノ粒子の創製	松本 憲志		4
リビングラジカル重合法を用いたヤヌス型ボトルブラシの合成と高次構造の創製	榊原 圭太		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
環状 π 共役分子の合成とその物性	茅原 栄一		7
サイズの異なるシクロパラフェニレンを用いたホスト-ゲスト化学の研究	橋本 士雄磨		8
新規ラジカル重合の開発	藤田 健弘		9
有機デバイスの基礎科学と高機能化	梶 弘典		10
EELSスペクトルの計算機シミュレーション	根本 隆		11
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		12
遷移金属錯体の構造探索	竹内 勝彦		13
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	エルナンデス ロドリゴ		14
生物情報ネットワークの解析と制御	阿久津 達也		15
X線管からのスペクトル解析	正岡 聖		16
多官能基性化合物の位置選択的分子変換	上田 善弘		17
巨大DNAウィルスゲノムの解析	緒方 博之		18
海洋性プランクトン群の進化と生態についての研究	Blanc-Mathieu Romain		20
メタゲノミクスを利用した海洋プランクトン生態系に関する研究	遠藤 寿		22
ウィルスゲノムの解析	吉川 元貴		23
16SrRNA遺伝子を標的としたアンプリコン配列の解析によるパンクレリパーゼ投与マウスの腸内細菌叢の解析	西山 拓輝		24
ゲノムデータに基づく知識発見	黒西 愛		26
メガウイルス科の DNA ポリメラーゼ遺伝子を標的とするアンプリコン解析	李 岩沢		27
隠れマルコフモデルによるホモロジー検索に基づくタンパク質機能推定法	荒巻 拓哉		28
共起ネットワーク解析に基づく腸内細菌のメタゲノム解析	加藤 恭崇		29
海洋微生物生態系における種間相互作用の研究	金子 博人		30
新規な結合様式を持つ高周期典型元素化合物の性質解明	鈴木 裕子		31
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		32

エネルギー理工学研究所

ナノ炭素細線物質に関する理論計算	中江 隆博		33
------------------	-------	------	----

理学研究科・理学部

ソフトマターの相転移ダイナミクス	荒木 武昭		34
分子性導電・磁性材料の設計と理論的解析	中野 義明		35
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		36

工学研究科・工学部

近赤外色素を用いる光音響腫瘍イメージング	三木 康嗣		37
半導体光触媒を用いた高効率水分解システムの開発	東 正信		38
触媒有機化学に関する研究	辻 康之		39
電極触媒の電子状態解析	宮崎 晃平		40
振電相互作用に関する理論的研究	佐藤 徹		41
化学反応と電子物性に関する理論的研究	笛野 博之		42
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		43
HOPG基板上における分子配列のモデリング	廣瀬 崇至		44
HOPG基板上における分子配列のモデリング	西谷 暢彦		45
多孔性配位高分子の合成と性質	植村 卓史		46
吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討	鈴木 哲夫		47
多孔性配位高分子の吸着誘起構造転移	田中 秀樹		48
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		49
Ti表面上へのN ₂ 吸着エネルギーの計算	小林 洋治		50
酸水素化物への表面吸着と反応	唐 亜		51
キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存性らせん反転の構造解明	長田 裕也		52

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		53
軽金属・合金の力学特性	馬淵 守		54
多孔質金属の表面特性	袴田 昌高		55

農学研究科・農学部

変調磁場による微結晶の三次元配向	木村 史子		56
ウイルスは海洋生物多様性を創生・維持する素粒子か？	吉田 天士		57
極限環境における微生物ゲノム解析	中川 聡		58

人間・環境学研究科

硫黄を含むジペプチド保護体のCO ₂ 吸着状態の解析	津江 広人		59
長残光蛍光体における電子トラップ準位の解析	上田 純平		60

高等研究院

有機構造体を用いたイオン伝導体合成	堀毛 悟史		61
-------------------	-------	-------	----

産官学連携本部

蓄電池材料の構造と物性	湊 丈俊		62
電池材料のラマンスペクトルの計算	山中 俊朗		63

学際融合教育研究推進センター

高分子溶液の相分離に関する大規模なシミュレーション	吉元 健治		64
---------------------------	-------	-------	----

京都大学以外

生体分子情報データベースの開発	五斗 進		65
グラフ理論に基づく新規進化解析手法の開発	松井 求		66
ヒト腸内菌叢のメタゲノム解析	上田 敦史		67
ウイルスゲノムの多様性に関する研究	西村 陽介		68
典型元素を活用した機能性材料の開発	吾郷 友宏		69
規則性合金の触媒作用に関する理論的研究	古川 森也		70
カロテノイドデータベース化学フィンガープリントを用いたカロテノイドの生合成パスウェイの再構築	藪崎 純子		71
密度汎関数法を用いたNO還元用代替触媒探索	蒲池 高志		72
ゲノム解読	半田 佳宏		73
菌類の系統解析	齋藤 勝晴		74

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		75
京都大学化学研究所WWWサービスの利用状況	西川 和嗣		80
ゲノムネットサービス利用統計	西川 和嗣		82
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		100
平成29年度研究課題一覧			105

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>