

京都大学化学研究所

スーパー コンピュータ システム

新規利用者受付中!

化研スパコンシステム

本システムは、実験系研究者を含め、幅広い研究者がスパコンを手軽に利用できる環境を提供することを目指した、京都大学の研究施設です。以下の研究を促進する環境が提供されています。

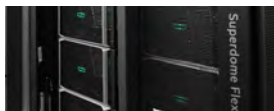
バイオインフォマティクス

計算化学

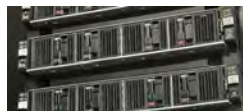
学外の方も
利用可能

システム構成

令和6年1月から新システム稼働



大規模共有メモリシステム
HPE Superdome Flex(576core/24TB)
×2 ノード



大規模計算クラスシステム
HPE Apollo 2000(56core/256GB,512GB,1TB)
×104 ノード
HPE DL380G11(64core/1TB/H100x2*)
×9 ノード

*) NVIDIA H100 80GB PCIe

200を超えるバイオツールと バイオデータベース

利用可能なバイオツール

配列解析ツール	• BLAST+ • AlphaFold2 • GHOSTX	• DIAMOND • LocalColabFold • MUMmer	• MAFFT • HMMER • dRep
アセンブリツール	• SPAdes	• Trinity	• MEGAHIT
メタゲノム解析	• metaWRAP	• QIIME2	• CheckM
統合DB検索システム	• DBGET/LinkDB		等

利用可能なデータベース

• GenBank	• RefSeq	• UniProt	• PDB
• nr-nt	• nr-aa	• NCBI-nr	• NCBI-nt
• mgenes	• Pfam	• NCBI/CDD	• Prosite
• Silva	• PR2	• RDP	• RefGene

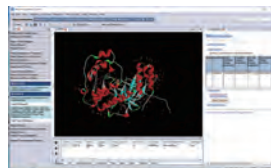
利用可能な機械学習・ディープラーニング

• PyTorch	• TensorFlow/Keras	• scikit-learn	• pandas
• LightGBM	• CatBoost	• XGBOOST	• cudf

計算化学を中心とした 豊富なアプリケーション

利用可能なアプリケーション・データベース

計算化学統合パッケージ	• Materials Studio	• Discovery Studio	• Materials Science Suite
量子化学計算	• ADF • GAMESS	• Gaussian/GaussView • Q-Chem	• Molpro • QUANTUM ESPRESSO
分子動力学計算	• Amber	• Gromacs	• LAMMPS
化合物データベース	• CSD		
その他	• VMD	• Mathematica	• R



一部のアプリケーションについてはライセンスの都合上、利用者を制限しています。詳しくは以下の URL をご参照ください。

https://www.scl.kyoto-u.ac.jp/Appli/Appli_index.html

利用 対象者

京都大学教職員 / 学生だけでなく、学外（アカデミック・企業）の方も利用可能です。

利用 負担金

- 1,000 円 / 月から利用可能（クラウドサービス含む）
- 8coreを1週間使用された場合には1万円程度の負担金*
- 学内では運営費の他、受託研究費での支払いが可能
- 学外は請求書を発行します。

*) 支払責任者の所属に応じてCPU利用負担金には上限が設定されています

お問い合わせ先

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
E-mail : spradm@scl.kyoto-u.ac.jp <https://www.scl.kyoto-u.ac.jp>



京都大学 化学研究所

<https://www.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>