パッケージプログラム状態一覧

最終更新: 2024/5/16

コンパイラ・ライブラリ

システム標準のものなどの一部を除き、/apl 以下に導入されています。

名前	バージョン	備考
GCC	8.5.0*	(システム標準)
	9.2.1	module: gcc-toolset/9 (gcc-toolset-9)
	10.3.1	module: gcc-toolset/10 (gcc-toolset-10)
	11.2.1	module: gcc-toolset/11 (gcc-toolset-11)
	12.1.1	module: gcc-toolset/12 (gcc-toolset-12)
	13.1.1	module: gcc-toolset/13 (gcc-toolset-13)
AOCC	4.2.0	module: aocc/4.2.0
	4.1.0	module: aocc/4.1.0
	4.0.0*	module: aocc/4.0.0
	3.2.0	module: aocc/3.2.0
AOCL	4.2.0	module: aocl/4.2.0-aocc4.2 (AOCC でビルド), aocl/4.2.0-gcc13.1 (GCC でビルド)
	4.1.0	module: aocl/4.1.0-aocc4.1 (AOCC でビルド), aocl/4.1.0-gcc13.1 (GCC でビルド)
	4.0	module: aocl/4.0-aocc4.0 (AOCC でビルド), aocl/4.0-gcc11.2 (GCC でビルド)
	3.2.0	module: aocl/3.2.0-aocc3.2 (AOCC でビルド), aocl/3.2.0-gcc11.2 (GCC でビルド)
Python [1]	3.9.18	
	3.6.8*	(/usr/bin/python3)
	2.7.18*	(/usr/bin/python2)
	3.10.13 (base) 3.12.2 (gpuenv)	miniforge3 環境(/apl/conda/20240305; conda_init.sh か conda_init.csh を source してください)
	3.10.9	miniforge3 環境(/apl/conda/20230214; conda_init.sh か conda_init.csh を source してください)
NVIDIA HPC SDK	24.3	module: nvhpc/24.3, nvhpc/24.3-byo, nvhpc/24.3-nompi
	23.9	module: nvhpc/23.9, nvhpc/23.9-byo, nvhpc/23.9-nompi
	23.5	module: nvhpc/23.5, nvhpc/23.5-byo, nvhpc/23.5-nompi
	22.11	module: nvhpc/22.11, nvhpc/22.11-byo, nvhpc/22.11-nompi
Intel oneAPI [2]	2024.1.0	compiler 2024.1.0 runtime (module: compiler-rt/2024.1.0)
		mkl 2024.1 (module: mkl/2024.1)
		mpi 2021.12 (module: intelmpi/2021.12)
	2024.0.1	compiler 2024.0.2 runtime (module: compiler-rt/2024.0.2)
		mkl 2024.0 (module: mkl/2024.0)
		mpi 2021.11 (module: intelmpi/2021.11)
	2024.0.0	compiler 2024.0 runtime (module: compiler-rt/2024.0)
		mkl 2024.0 (module: mkl/2024.0)
		mpi 2021.11 (module: intelmpi/2021.11)
	2023.2.0	compiler 2023.2.0 runtime (module: compiler-rt/2023.2.0)
		mkl 2023.2.0 (module: mkl/2023.2.0)
		mpi 2021.10.0 (module: intelmpi/2021.10.0)
	2023.1.0	compiler 2023.1.0 runtime (module: compiler-rt/2023.1.0)
		mkl 2023.1.0 (module: mkl/2023.1.0)
		mpi 2021.9.0 (module: intelmpi/2021.9.0)
		compiler 2023.0.0 runtime (module: compiler-rt/2023.0.0)

名前	バージョン	備考
		mkl 2023.0.0 (module: mkl/2023.0.0)
		mpi 2021.8.0 (module: intelmpi/2021.8.0)
	2022.3.1	compiler 2022.2.1 runtime (module: compiler-rt/2022.2.1)
		mkl 2022.2.1 (module: mkl/2022.2.1)
		mpi 2021.7.1 (module: intelmpi/2021.7.1)
	2022.1.2	compiler 2022.0.2 runtime (module: compiler-rt/2022.0.2)
		mkl 2022.0.2 (module: mkl/2022.0.2)
		mpi 2021.5.1 (module: intelmpi/2021.5.1)
CUDA	12.4 Update 1	module: cuda/12.4u1
	12.2 Update 2	module: cuda/12.2u2
	12.1 Update 1	module: cuda/12.1u1
	12.0*	module: cuda/12.0
	11.6	module: cuda/11.6
	11.2	module: cuda/11.2
Open MPI	5.0.1	module: openmpi/5.0.1 (各コンパイラ向けのパッケージ有)
	4.1.6	module: openmpi/4.1.6 (各コンパイラ向けのパッケージ有)
	4.1.5	module: openmpi/4.1.5 (各コンパイラ向けのパッケージ有)
	3.1.6	module: openmpi/3.1.6 (各コンパイラ向けのパッケージ有)
HPC-X	2.16 (Open MPI 4.1.5)	module: openmpi/4.1.5-hpcx2.16 (各コンパイラ向けのパッケージ有)
	2.13.1 (Open MPI 4.1.5)	module: openmpi/4.1.5-hpcx (各コンパイラ向けのパッケージ有)
	2.11 (Open MPI 4.1.4)	module: openmpi/4.1.4-hpcx (各コンパイラ向けのパッケージ有)
MVAPICH	3.0	module: mvapich/3.0 (GCC, AOCC 向けパッケージ有り)
	2.3.7	module: mvapich/2.3.7 (各コンパイラ向けのパッケージ有)
Julia	1.10.0	module: julia/1.10.0
	1.8.5	module: julia/1.8.5
	1.6.7 (LTS)	module: julia/1.6.7
Apptainer/Singularity	1.3.0	(singularity もしくは apptainer で呼び出し可能)

*: デフォルトのバージョン
[1]: pip install (パッケージ名) --user のようにすることで、自身のホームディレクトリにパッケージを追加することもできます。完全な独自環境が欲しい場合には、miniforge 等での構築もご検討ください。なお、conda 環境の読み込みには時間がかかる場合があります(通常は初回読み込み時のみ; lustre ファイルシステムの仕様が原因で、解消は難しいです)。特定の少数パッケージが必要な場合は pip でホームディレクトリ以下に導入することを推奨します。
[2]: 共用領域にコンパイラ本体はインストールされていません。コンパイラが必要な場合は oneAPI Base Toolkit や oneAPI HPC Toolkit をご自身のディレクトリにインストールしてください。

アプリケーションパッケージ

以下のパッケージがインストールされています。(公式ページへのリンクが黒文字で表記されているものは、1/25 時点では未導入ですが、導入予定のものです)プログラムの詳しい使用法は公式のドキュメント等を参照してください。各計算ノードとログインサーバーの /apl 以下にインストールされています。ビルドに関する情報はこちらのページにまとめられています。

名前	内容
ABINIT-MP	A software for fast Fragment-Molecular-Orbital (FMO) calculations.
AlphaFold	AI program for predictions of protein structure.
AMBER	Package of molecular simulation programs.
CP2K	A quantum chemistry and solid state physics software package.
CRYSTAL	General-purpose programs for the study of crystalline solids.

名前	内容
DCDFTBMD	Huge-system quantum mechanical molecular dynamics simulation program
DFTB+	Fast and efficient versatile quantum mechanical simulation software package
DIRAC(注22)	Computes molecular properties using relativistic quantum chemical methods (named after P. A. M. Dirac).
GAMESS	General atomic and molecular electronic structure system.
Gaussian	Ab initio molecular orbital calculations.
GENESIS	Molecular dynamics and modeling software for bimolecular systems such as proteins, lipids, glycans, and their complexes.
GROMACS	Fast, Free and Flexible MD
GRRM	Automated Exploration of Reaction Pathways.
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.
OpenMolcas	Quantum chemistry software.
Molpro	Complete system of ab initio programs.
NAMD	Scalable molecular dynamics program.
NBO	Discovery tool for chemical insights from complex wavefunctions.
NTChem(注17)	Comprehensive new software of ab initio quantum chemistry made in Riken-RCCS from scratch.
NWChem	Computational chemistry tools that are scalable both in their ability to treat large scientific computational chemistry problems
ORCA	An ab initio quantum chemistry program package
PSI4	Open-source suite of ab initio quantum chemistry programs designed for efficient, high-accuracy simulations of a variety of molecular properties.
Quantum ESPRESSO	Integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale.
Reaction Plus	Program to obtain the transition state and reaction path along the user’s expected reaction mechanism.
SIESTA	Efficient electronic structure calculations and ab initio molecular dynamics simulations of molecules and solids
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	Viewer for Gaussian 09 / 16.
VMD	Molecular graphics viewer

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
ABCluster	3.0	○ (2023/11/28)	
ABINIT-MP	v2r4	○ (2023/2/21)	
	v1r22	○ (2023/2/21)	
ADF(注9)		(入手不可)	
AlphaFold	2.3.2	△ (2024/2/8)☆	
	2.3.1	△ (2023/2/6)☆	
	2.2.0	△ (2022/3/14)☆	
	2.1.1	△ (2021/11/8)☆	
	2.1.0	△ (-/-/-)☆	
	2.0.0 (2021/8/19)	△ (2021/8/23)☆	
	2.0.0 (2021/7/20)	△ (2021/7/26)☆	
Amber	22-update4	○ (2023/8/25)☆	(AmberTools23-update4)
	22-update1	○ (2023/1/-)☆	(AmberTools22-update4)
	20-update13	○ (2023/1/-)☆	(configure でビルド)
AutoDock	4.2.6	○ (2023/11/24)	

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
AutoDock-GPU	1.5.3	○ (2023/11/24)☆	
AutoDock Vina	1.2.5	○ (2023/11/24)	
ColabFold	1.5.5	○ (2024/2/16)	ローカル DB を使用
CP2K	2023.1	○ (2023/4/6)	
	9.1	○ (2023/1/-)	
CRYSTAL	17-1.0.2(注21)	○ (2023/1/-)	
DFTB+	23.1	○ (2023/7/19)☆ MPI / OpenMP	MPI 版と OMP 版を用意
DIRAC	23.0	○ (2023/5/8)	
	19.0	○ (2023/1/27)	
GAMESS	2023-R2(Sep30)	○ (2023/12/7)	(NBO 7.0.7 有効)
	2022-R2(Sep30)	○ (2023/1/-)	(NBO 7.0.7 有効)
	2021-R1(Jun30)	○ (2023/1/-)	(NBO 7.0.7 有効)
Gaussian	16.C.02	○ (2022/3/14)☆	(NBO 7.0.10 有効)
	16.C.01	○ (2019/8/2)	(NBO 7.0.10 有効)
	16.B.01	○ (2018/3/12)	
	09.E.01	○ (2015/12/24)	
GENESIS	2.1.2	○ (2024/1/16)☆ CPU / GPU	
	2.0.3	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	
GROMACS	2024.2	○ (2024/5/16)☆ CPU / GPU	
	2023.5	○ (2024/5/7)☆ CPU / GPU	
	2023.4	○ (2024/1/26)☆ CPU / GPU	
	2023.2	○ (2023/8/9)☆ CPU / GPU	
	2022.6	○ (2023/7/12)☆ CPU / GPU	
	2022.4	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	
	2021.7	○ (2023/4/14)☆ CPU / GPU	
	2021.6	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	
	2021.4	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	
GRRM	23	○ (2024/1/11)	利用には申請が必要です。 (マルチノード並列対応)
	17(注5)	○ (2021/1/27)	(マルチノード並列対応)
	14	○ (2015/7/29)	
	2Aug23	○ (2023/10/16)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	Intel MPI
		○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	(netcdf off)

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
LAMMPS	23Jun22 Update 2	○ (2023/4/18)☆ CPU / GPU	Intel MPI
	29Sep21 Update 3	○ (2023/4/18)☆ CPU / GPU	Intel MPI
	29Sep21	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	(netcdf off)
LigandMPNN		△ (2024/3/27)	2024/3/27 最新コード
Molpro(注2)	2024.1.0	△ (2024/3/11)	
	2023.2.0	△ (2023/10/11)	
	2023.1.0	△ (2023/9/19)	
	2022.3.0	△ (2023/1/-)	(HPC-X)
		△ (2023/5/18)	(MVAPICH)
	2022.2.2	△ (2023/1/-)	
	2021.3.1	△ (2023/5/10)	
	2015.1-44	△ (2023/1/-)	
NAMD	3.0b6	○ (2024/3/6)☆ MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0b2	○ (2023/4/10)☆	(GPU 版のみ)
	2.14	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	
NBO	7.0.10	△ (2023/2/14)	
	7.0.7	△ (2023/1/-)	
NTChem	2013.13.0.0	○ (2023/4/28)	
NWChem	7.2.2	○ (2024/3/5)☆ CPU / GPU	
	7.0.2	○ (2023/3/6)	
	6.8	○ (2023/1/-)	ReactionPlus 向け
OpenMM	8.1.0	○ (2023/12/5)	
OpenMolcas	23.06	○ (2023/7/25)	
	22.10	○ (2023/3/6)	
	21.10	○ (2023/3/6)	
ORCA	5.0.4	○ (2023/3/20)	(利用前に登録が必要です)
	5.0.3	○ (2022/2/22	
	4.2.1	○ (2020/1/8)	
Parallel CONFLEX(注9)			
ProteinMPNN		△ (2023/10/26)	2023/10/25 最新コード
PSI4	1.9.1	○ (2024/3/5)	
	1.7	○ (2023/1/30)	
Quantum ESPRESSO	7.3	○ (2024/2/6)☆ CPU / GPU	
	7.2	○ (2023/4/11)☆ CPU / GPU	
	6.8	○ (2023/1/26)☆ CPU / GPU	
ReactionPlus	1.0	○ (2018/1/22)	
RFdiffusion		△ (2023/10/26)	2023/10/25 最新コード
RFDiffusion AA		△ (2024/3/27)	2024/3/27 最新コード

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
SIESTA	4.1.5	○ (2023/1/-) MPI / OpenMP	MPI 版と OMP 版を用意
TURBOMOLE(注3)	7.8	○ (2023/12/18)	
	7.7	○ (2023/7/18)	
	7.6	○ (2021/12/23)	
VASP(注4)		(入手不可)	

X11 転送が可能であれば以下の GUI アプリケーションもログインサーバーで利用可能です。X11 転送は Windows ならば MobaXterm が一番手軽かと思います。(WSLg, Xming, VcXsrv なども使えるかもしれません。) mac ならば XQuartz を導入、起動した上で ssh に -XY オプションを追加した上で接続すれば利用できます。

名前	バージョン	起動コマンド	導入日
GaussView	6.1.1	gview6	△ (2019/10/29)
	6.0.16	/apl/gaussian/16b01/gv/gview.sh	△ (2017/2/2)
	5.0.9	gview5	△ (2013/3/13)
iMolpro	1.0.1	/apl/imolpro/1.0.1/bin/imolpro-*	○ (2024/3/8)
Luscus	0.8.6	/apl/luscus/0.8.6/bin/luscus	○ (2023/10/4)
VMD	1.9.4 alpha (2022/4/27)	/apl/vmd/1.9.4a57/bin/vmd	○ (2023/1/-)

○: module 有り
△: 対応する module 無し
☆: GPU版有

注意事項

(注2) molproは、2024年9月15日にライセンス失効します。毎年更新予定。
(注3) 国内にいる非営利ユーザーのみ利用可能。2024年1月にライセンス失効する。毎年更新予定。
(注4) 本センターでは導入できません。ユーザーが独自にインストールすることは可能です。
(注5) 公式マニュアルや計算科学研究センター作成の「GRRM実行サンプル解説」(GRRM14用)についてもご覧ください。
(注9) ADF, Parallel CONFLEX はライセンス費用が高額であるため、本センターでは導入できません。

(注17) NTChemを用いて得た成果を発表するときには引用義務があります。詳しくは公式ページや公式マニュアルをご覧ください。
(注21) CRYSTAL17を使用するためにはユーザー毎にライセンス同意書に署名が必要です。CRYSTAL14で登録済みの場合でも別途登録が必要です。郵送等で同意書がRCCSに届いた後、CRYSTAL17が利用可能になります。
(注22) DIRAC を使った計算を論文にする場合、このページに示されたリファレンスの引用義務があります。

添付	サイズ
CRYSTAL17のライセンス同意書	255.58 KB