パッケージプログラム状態一覧(分子科学)

最終更新: 2025/8/6

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。
基礎生物学分野のパッケージについてはこちらのページをご参照ください。

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)
	12.2.1	module: gcc-toolset/12 (gcc-toolset-12)
	13.3.1	module: gcc-toolset/13 (gcc-toolset-13)
	14.2.1	module: gcc-toolset/14 (gcc-toolset-14)
AOCC	5.0.0	module: aocc/5.0.0
	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	5.0.0	module: aocl/5.0.0-aocc5.0 (AOCC でビルド), aocl/5.0.0-gcc13.2 (GCC でビルド)
	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]	3.6.8*	(/usr/bin/python3)
	2.7.18*	(/usr/bin/python2)
	3.11.11	(/usr/bin/python3.11)
	3.9.20	(/usr/bin/python3.9)
	3.12.9	miniforge3 環境(/apl/conda/20250310; conda_init.sh か conda_init.csh を source してください)
	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)

名前	バージョン	備考
NVIDIA HPC SDK	25.3	module: nvhpc/25.3, nvhpc/25.3-byo, nvhpc/25.3-nompi
	24.9	module: nvhpc/24.9, nvhpc/24.9-byo, nvhpc/24.9-nompi
	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 Compiler Runtime [2]	2025.2.0, 2025.1.1, 2025.1.0, 2025.0.4, 2025.0, 2024.2.1, 2024.2, 2024.1.0, 2024.0.2, 2024.0, 2023.2.0, 2023.1.0, 2023.0.0, 2022.2.1, 2022.0.2	module: compiler-rt/(version)
Intel MKL	2025.2.0, 2025.1.0, 2025.0.0.1, 2025.0, 2024.2, 2024.1, 2024.0, 2023.2.0, 2023.1.0, 2023.0.0, 2022.2.1, 2022.0.2	module: mkl/(version) 2025.0.0.1 => (major 2025, minor 0, update 0, patch 1; 2025.0.1 と表記すべき？)
Intel MPI	2021.16, 2021.15, 2021.14.1, 2021.14, 2021.13, 2021.12, 2021.11, 2021.10.0, 2021.9, 2021.8, 2021.7.1, 2021.5.1	module: intelmpi/(version)
CUDA	12.8 Update 1*	module: cuda/12.8u1
	12.6 Update 2	module: cuda/12.6u2
	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	5.0.6, 5.0.5, 5.0.1 4.1.8, 4.1.6, 4.1.5, 3.1.6	module: openmpi/(バージョン) (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	4.0, 3.0, 2.3.7	module: mvapich/(バージョン) (GCC, AOCC 向けパッケージ有り)
Julia	1.11.3, 1.10.0, 1.8.5, 1.10.8 (LTS), 1.6.7 (LTS)	module: julia/(version)
Apptainer/Singularity	1.3.6	(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]: pip3 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 pip3 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。

パッケージプログラム名	説明		
	バージョン	導入日	備考
ABCluster	クラスター構造の最適化や配座探索を行うソフト		
	3.0	○ (2023/11/28)	
ABINIT-MP	高速なフラグメント分子軌道法(FMO)ソフトウェア		
	v2r8	○ (2025/1/7)	
	v2r4	○ (2023/2/21)	
	v1r22	○ (2023/2/21)	
ADF(注9)		(入手不可)	
AlphaFold (version3) (version2)	配列情報からタンパク質立体構造予測を行うソフトウェア		
	3.0.0 (2025/1/16)	△ (2025/1/16)	推論部 GPU 必須。 モデルパラメータは各自で申請、 ダウンロードする必要有り
	3.0.0 (2024/11/26)	△ (2024/11/26)	(同上)
	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	生体系を主ターゲットとした分子動力学計算ソフト		
	24-update3 + AmberTools25	○ (2025/5/19)☆	
	24-update3	○ (2025/3/6)☆	module コマンドの挙動に注意; 導入詳細末尾のメモ参照 (AmberTools24-update8)
	24-update1	○ (2024/6/11)☆	(AmberTools24-update2)
	22-update4	○ (2023/8/25)☆	(AmberTools23-update4)
	22-update1	○ (2023/1/-)☆	(AmberTools22-update4)
	20-update13	○ (2023/1/-)☆	(configure でビルド)
AutoDock	自動ドッキングツール		
	4.2.6	○ (2023/11/24)	
AutoDock-GPU	AutoDock のアクセラレータ有効化版		
	1.5.3	○ (2023/11/24)☆	
AutoDock Vina	AutoDock の発展版		
	1.2.7	○ (2025/7/7)	
	1.2.5	○ (2023/11/24)	
CENSO	DFT レベルで構造アンサンブルを評価するプログラム		
	2.1.3	○ (2025/5/1)	ENSO 2.0.2 の anmr を手動追加
	1.2.0	○ (2024/5/22)	(バイナリ版) ENSO 2.0.2 の anmr と nmrplot.py を手動で追加
	配列情報からタンパク質立体構造予測を行うソフト		

パッケージ/プログラム名	説明		
	バージョン	導入日	備考
	1.5.5	○ (2024/2/16)	ローカル DB を使用
CP2K	第一原理分子動力学計算可能な量子化学計算ソフト		
	2024.3	○ (2024/10/24)	
	2024.2	○ (2024/8/22)	
	2023.1	○ (2023/4/6)	
	9.1	○ (2023/1/-)	
CREST	DFT レベルでの配座探索等を行うプログラム		
	3.0.1	○ (2024/5/21)	
CRYSTAL	周期系向けの量子化学計算ソフト		
	23-1.0.1	○ (2024/7/19)	(注21)
	17-1.0.2	○ (2023/1/-)	
Dalton	様々な分子特性を計算可能な量子化学ソフトウェア		
	2020.1	○ (2024/11/8)	
DFTB+	DFTB 法を用いた高速高効率な汎用量子化学計算ソフト		
	23.1	○ (2023/7/19)☆ MPI / OpenMP	MPI 版と OMP 版を用意
DIRAC(注22)	相対論効果の直接的な取り扱い可能な量子化学計算ソフト		
	23.0	○ (2023/5/8)	
	19.0	○ (2023/1/27)	
GAMESS	分子系向けの汎用量子化学計算ソフト		
	2024-R2(Jul15)	○ (2024/10/31)	(NBO 7.0.10 有効)
	2023-R2(Sep30)	○ (2023/12/7)	(NBO 7.0.10 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	様々な系で利用可能な量子化学計算ソフト		
	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	生体系向けの分子動力学計算ソフト		
	2.1.4	○ (2025/1/10)☆ CPU / GPU	
	2.1.2	○ (2024/1/16)☆ CPU / GPU	
	2.0.3	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	
	高速計算向け分子動力学計算ソフト		
	2025.2	○ (2025/5/27)☆ CPU / GPU	NNP enabled (libtorch 2.7.0)
	2024.5	○ (2025/1/27)☆ CPU / GPU	
	2024.4	○ (2024/11/5)☆ CPU / GPU	
	2024.2	○ (2024/5/16)☆ CPU / GPU	
	2023.5	○ (2024/5/7)☆ CPU / GPU	

パッケージプログラム名	説明		
	バージョン	導入日	備考
GROMACS	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	化学反応自動探索ソフト		
	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)	
LAMMPS	柔軟で拡張性が高い分子動力学計算ソフト		
	22Jul2025	○ (2025/8/6)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	29Aug2024 Update 4	○ (2025/7/29)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	29Aug2024 Update 3	○ (2025/7/15)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	29Aug2024 Update 2	○ (2025/4/18)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	29Aug2024 Update 1	○ (2025/2/21)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	29Aug2024	○ (2024/9/6)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	
	2Aug23	○ (2023/10/16)☆ CPU(GCC,INTEL) / GPU	Intel MPI
	23Jun22 Update 2	○ (2023/1/-)☆ CPU / GPU	(netcdf off)
		○ (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	低分子リガンドに結合する配列設計のためのソフト		
		△ (2024/3/27)☆	2024/3/27 最新コード
	電子相関や多参照計算向けの量子化学計算ソフト		
	2025.1.0	△ (2025/3/14)	
	2024.3.0	△ (2024/11/15)	
	2024.2.0	△ (2024/9/9)	

パッケージプログラム名	説明		
	バージョン	導入日	備考
Molpro	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	超並列計算向け分子動力学計算ソフト		
	3.0.1	○ (2024/10/31)☆ MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0	○ (2024/7/5)☆ MPI / SMP / SMP+CUDA	
	3.0b7	○ (2024/5/23)☆ MPI / SMP / SMP+CUDA	
	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	Natural Bond Orbital (NBO) プログラム		
	7.0.10	△ (2023/2/14)	
	7.0.7	△ (2023/1/-)	
NTChem(注17)	大規模複雑系のための量子化学計算ソフト		
	2013.13.0.0	○ (2023/4/28)	
NWChem	超並列計算対応の汎用量子化学計算ソフト		
	7.2.3	○ (2025/2/27) GCC / IntelClassic	
	7.2.2	○ (2024/3/5)☆ CPU / GPU	
	7.0.2	○ (2023/3/6)	
	6.8	○ (2023/1/-)	ReactionPlus 向け
OmegaFold	タンパク質立体構造予測ソフトウェア		
	1.1.0	○ (2024/6/12)☆	
OpenBabel	化学データの様々な表現の変換に対応可能なツールボックス		
	3.1.1	○ (2025/3/10)	
OpenMM	分子シミュレーション用のツールキット		
	8.2.0	○ (2025/3/6)	
	8.1.0	○ (2023/12/5)	
OpenMolcas	電子状態計算ソフト Molcas のオープンソース版		
	24.10	○ (2024/11/18)	
	23.06	○ (2023/7/25)	
	22.10	○ (2023/3/6)	
	21.10	○ (2023/3/6)	
	多様な計算方法に対応した量子化学計算ソフト		
	6.1.0	○ (2025/6/18)	

パッケージプログラム名	説明		
ORCA	バージョン	導入日	備考 (利用前に登録が必要です)
	6.0.1	○ (2024/11/6)	
	5.0.4	○ (2023/3/20)	
	5.0.3	○ (2022/2/22)	
	4.2.1	○ (2020/1/8)	
Parallel CONFLEX(注9)			
ProteinMPNN	与えられた主鎖構造からアミノ酸配列予測を行うソフト		
		△ (2023/10/26)☆	2023/10/25 最新コード
PSI4	柔軟な設定可能な量子化学計算ソフト		
	1.9.1	○ (2024/3/5)	
	1.7	○ (2023/1/30)	
Quantum ESPRESSO	固体物性解析向けの量子化学計算ソフト		
	7.4.1	○ (2025/2/12)☆ CPU / GPU	
	7.4	○ (2025/1/24)☆ CPU / GPU	
	7.3	○ (2024/2/6)☆ CPU / GPU	
	7.2	○ (2023/4/11)☆ CPU / GPU	
	6.8	○ (2023/1/26)☆ CPU / GPU	
ReactionPlus	反応経路探索ソフト		
	1.0	○ (2018/1/22)	
RFdiffusion	AI を用いた主鎖構造生成ソフトウェア		
		△ (2023/10/26)☆	2023/10/25 最新コード
RFDiffusion AA	生体分子全般のモデリングと設計を行うソフト		
		△ (2024/3/27)☆	2024/3/27 最新コード
SIESTA	大規模固体表面系を得意とする量子化学計算ソフト		
	5.2.2	○ (2025/2/19)	
	5.0.1	○ (2024/7/4) OpenMPI / IntelMPI	Open MPI 版と Intel MPI 版を用意
	5.0.0	○ (2024/5/29) OpenMPI / IntelMPI	Open MPI 版と Intel MPI 版を用意
	4.1.5	○ (2023/1/-) MPI / OpenMP	MPI 版と OMP 版を用意
TURBOMOLE	汎用高速量子化学計算ソフト		
	7.9	○ (2024/12/12)☆	
	7.8.1	○ (2024/11/12)☆	
	7.8	○ (2023/12/18)☆	
	7.7	○ (2023/7/18)☆	
	7.6	○ (2021/12/23)	
VASP(注4)		(入手不可)	
xTB	Extended tight binding 計算のためのソフト		
	6.7.1	○ (2025/3/5)	
	6.7.0	○ (2024/5/7)	
	6.5.1	○ (2024/5/22)	

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。

あるいは、Open OnDemand のデスクトップ環境を使えば、OS に依らずブラウザ上でこれらアプリを起動できます。(Open OnDemand の利用開始方法はこちら)

名前	説明		
	バージョン	起動コマンド	導入日
GaussView	Gaussian 用ビューア		
	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	Molpro の GUI 環境		
	1.0.1	/apl/imolpro/1.0.1/bin/imolpro-*	○ (2024/3/8)
Luscus	Molcas の GUI 環境		
	0.8.6	/apl/luscus/0.8.6/bin/luscus	○ (2023/10/4)
Molden	種々の量子化学計算ソフト対応のビューア		
	7.2.1	/apl/molden/7.2.1/bin/molden	○ (2023/2/6)
VMD	汎用分子ビューア		
	1.9.4 alpha (2022/4/27)	/apl/vmd/1.9.4a57/bin/vmd	○ (2023/1/-)
XCrySDen	結晶や分子構造の可視化ソフト		
	1.6.2	module load xcrysden/1.6.2 実行後に xcrysden	○ (2024/8/23)

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

注意事項

(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) CRYSTALを使用するためにはバージョン、ユーザー毎にライセンス同意書に署名が必要です。CRYSTAL17で登録済みの場合でもCRYSTAL23を使うためには別途登録が必要です。郵送等で同意書がRCCSに届いた後、CRYSTAL23 or/and CRYSTAL17が利用可能になります。(CRYSTAL23ライセンス同意書) (CRYSTAL17ライセンス同意書)
(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
CRYSTAL23のライセンス同意書	314 KB