

パッケージプログラム状態一覧

コンパイラ・ライブラリ

2021/4/6時点の状態です。システム標準のものなどの一部を除き、/local/apl/lx 以下に導入されています。

名前	バージョン	備考
Intel Parallel Studio XE	2020 update 2	icc 19.1.2
		icpc 19.1.2
		ifort 19.1.2
		impi 2019.0.8 (2019.8.254)
	2019 update 5	icc 19.0.5
		icpc 19.0.5
		ifort 19.0.5
		impi 2019.0.5 (2019.5.281)
	2019 update 1	icc 19.0.1.144
		icpc 19.0.1.144
		ifort 19.0.1.144
		impi 2019 Update 1 (2019.1.144)
	2018 update 4*	icc 18.0.5
		icpc 18.0.5
		ifort 18.0.5
		impi 2018.0.4
	2018 update 2	icc 18.0.2
		icpc 18.0.2
		ifort 18.0.2
		impi 2018.0.2
	2017 update 8	icc 17.0.8
		icpc 17.0.8
		ifort 17.0.8
		impi 2017.0.4
	2017 update 4	icc 17.0.4
		icpc 17.0.4
		ifort 17.0.4
		impi 2017.0.3
2015 update 1	icc 15.0.1	
	icpc 15.0.1	
	ifort 15.0.1	
	impi 5.0 Update 2	
GCC	4.8.5*	
	9.3.1	Devtoolset-9 Software Collections ^[2]
	8.3.1	Devtoolset-8 Software Collections ^[2]
	7.3.1	Devtoolset-7 Software Collections ^[2]
	6.3.1	Devtoolset-6 Software Collections ^[2]
	5.3.1	Devtoolset-4 Software Collections ^[2]
	4.9.2	Devtoolset-3 Software Collections ^[2]
PGI Compilers and Tools	20.4-0*	
	18.1-1	
	17.5-0	
	16.5-0	
CUDA	11.1.105*	
	10.1.243	
	9.1.85	
	8.0.61	
	3.6.8	(python3のデフォルトバージョン)
	3.4.10	
	2.7.5*	

名前 ^[1]	バージョン	備考
	3.7.7 (Anaconda3-2020.02)	
	3.7.3 (Anaconda3-2019.03)	
	2.7.16 (Anaconda2-2019.03)	
Julia	1.5.3	/local/apl/lx/julia-1.5.3/bin/julia
	1.3.1	/local/apl/lx/julia-1.3.1/bin/julia
Open MPI	4.0.2	(mpi1, cxx サポート有り)
	4.0.0	(cxx サポート有り)
	3.1.0	
	2.1.3	
Singularity	3.7.1	

*: 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、[Anaconda](#)の導入も考慮するべきかもしれません。Anaconda を使った場合のアクセスの遅さ(ファイルシステムの仕様に依存しています)を避けた場合は miniconda の利用をご検討下さい。

[2]: /opt/rh/devtoolset-(数字) 以下に実体があります。module load scl/devtoolset-6 のように読み込むと(devtoolset-6; gcc-6.3.1 の場合)、比較的簡単に利用できます。

アプリケーションパッケージ

2021/8/23現在、以下のパッケージがインストールされています。プログラムの詳しい使用法は、ドキュメント等を参照してください。各演算ノードとフロントエンドの/local/apl/lx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	Package for material science within density functional theory, using a plane wave basis set and pseudopotentials.
AlphaFold	AI program for predictions of protein structure.
AMBER	Package of molecular simulation programs.
AutoDock	Suite of automated docking tools.
CP2K	A quantum chemistry and solid state physics software package.
CRYSTAL	General-purpose programs for the study of crystalline solids.
DIRAC	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/NBOView	Discovery tool for chemical insights from complex wavefunctions.
NTChem ^(注17)	Comprehensive new software of ab initio quantum chemistry made in AICS 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
SMASH	Scalable Molecular Analysis Solver for High performance computing systems
TURBOMOLE	One of the fastest programs for standard quantum chemical applications.
GaussView	Viewer for Gaussian 09 / 16.
Luscus	A portable GUI for MOLCAS and other quantum chemical software.
Molden	Visualization program of molecular and structure.
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
ABINIT	8.8.3	© (2018/7/10)	
	7.8.2	-	

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
ADF(注9)		(入手不可)	
AlphaFold	2 (20210819)	○ (2021/8/23) [☆]	(2021/8/19 最新)
	2 (20210720)	○ (2021/7/26) [☆]	(2021/7/20 最新)
Amber	20-update9	○ (2021/2/24) [☆]	P100, V100 対応
	20-update0	○ (2020/6/9) [☆]	P100, V100 対応
	18-bugfix16	◎ (2019/9/10) [☆]	P100, V100 対応
	18-bugfix12	○ (2019/2/14) [☆]	P100, V100 対応
	18-bugfix11-volta	○ (2019/2/14) [☆]	V100 対応
	18-bugfix1	○ (2018/6/4) [☆]	P100, V100 対応
	16-bugfix15	○ (2018/7/25) [☆]	P100 対応
	16-bugfix10	○ (2017/10/01) [☆]	P100 対応
	14-bugfix11	○ (2015/7/21)	
	12-bugfix21	○ (2013/12/10)	
AutoDock	4.2.6	-	
CP2K	8.2.0	○ (2021/6/22)	ELPA, COSMA 無し
	8.1.0	(導入見送り)	前バージョンと比較して明確に速度が出ない。 (COSMA を外した条件でも10-20%(gcc)/3割程度(インテル)遅い)
	7.1.0	◎ (2020/2/27) intel/gnu	
	6.1.0	○ (2018/11/22) [☆] intel/gnu	P100, V100 対応
CRYSTAL	17-1.0.2(注21)	○ (2020/1/27)	
	14-1.0.4(注18)	○ (2016/5/11)	
DIRAC(注19)	19.0	○ (2021/5/19)	
	18.0	◎ (2019/5/14)	
GAMESS	2021-R1(Jun30)	○ (2021/8/19) [△]	
	2020-R1(Jun30)	◎ (2020/8/19) [△]	
	2019-R2(Sep30)	○ (2019/12/13) [△]	
	2018-Sep30	○ (2018/11/9) [▲]	
	2018-Feb14	○ (2018/3/19) [▲]	
	2017-Npv11	○ (2017/12/15)	
	2017-Apr20	○ (2017/10/1)	exam13.inpのテストを並列実行するとFailedとなります。 並列計算時に高次のElectrostatic Momentsが結果不正となるバグ(開発元に報告済み)が原因です。
Gaussian	16.C.01	◎ (2019/8/2) ^{☆▲△}	P100, V100 対応
	16.B.01	○ (2018/3/12) ^{☆▲}	P100 対応
	16.A.03	○ (2017/2/13) [▲]	
	09.E.01	◎ (2015/12/24)	
	09.D.01	○ (2013/7/25) [▲]	
	09.C.01	○ (2012/2/1)	
	09.B.01	○ (2012/2/7)	
	1.6.0	◎ (2020/12/28) [☆] cpu/gpu	P100, V100 [★] 対応
	1.4.0	○ (2019/11/21) [☆] cpu/gpu	P100, V100 [★] 対応

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
	1.3.0	○ (2018/9/4) [☆] cpu/gpu	P100, V100 [★] 対応
	1.1.6	○ (2017/12/13) [☆] cpu/gpu	P100, V100 [★] 対応
	1.1.5	○ (2017/8/4)	
GROMACS	2021.2	○ (2021/5/13) [☆] GNU: cpu/gpu Intel: cpu/gpu	P100, V100 対応
	2020.6	◎ (2021/3/8) [☆] Intel: cpu/gpu GNU: cpu/gpu	P100, V100 対応
	2020.4	○ (2020/10/12) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2020.2	○ (2020/5/13) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2019.6	○ (2020/3/5) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2019.4	○ (2019/10/8) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2019.2	○ (2019/4/18) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2018.8	○ (2019/10/8) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2018.7	○ (2019/7/19) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2018.6	○ (2019/3/27) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2018.3	○ (2018/9/4) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2018.1(注14)	○ (2018/4/17) l:c/G:c	GPU版はインテル版、GCC版の両方について、一部のテストでエラーが発生するため、インストールしていません。(エラー内容はそれぞれ別です)
	2016.6	○ (2019/2/22) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 対応
	2016.5	○ (2018/4/17) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 [★] 対応
	2016.4	○ (2017/10/01) [☆]	P100, V100 [★] 対応
	2016.3	○ (2017/3/16) [☆]	P100, V100 [★] 対応
	2016.1	○ (2017/2/2) [☆]	P100, V100 [★] 対応
	5.1.5	○ (2018/4/17) [☆] l:c/l:g/G:c/G:g	P100, V100 [★] 対応 インテルコンパイラ版では微妙な数値誤差の影響で SelectionCollectionDataTest.HandlesCharge ユニットテストが失敗します。
	5.1.4	○ (2018/1/19) [☆]	P100, V100 [★] 対応
	4.5.5	○ (2012/6/12) [☆]	
GRRM (注5)	17	◎ (2021/1/27)	(マルチノード並列対応)
	14	○ (2015/7/29)	
	11	○ (2012/9/26)	
LAMMPS	29Oct20	◎ (2021/3/5) [☆] cpu/gpu	P100, V100 [★] 対応
	7Aug19	○ (2019/11/14) [☆] cpu/gpu	P100, V100 [★] 対応
	22Aug18	○ (2018/11/6) [☆]	P100 対応(imp_rccs_gpu) V100 対応(imp_rccs_volta)
	16Mar18(注15)	○ (2018/5/10) [☆] Intel: cpu/gpu GNU: cpu/gpu	(2018/7/4 更新), P100 対応
Molcas	8.2	(2020/1/30 公開停止)	

パッケージプログラム名	バージョン	導入日	備考
Molpro(注2,注8)	2021.1.0	○ (2021/5/21)	(最新commit: 2021/5/12 17:52:32 +0100)
	2020.1.2	◎ (2020/10/20) gnu/intel	(pdf 化した公式マニュアル@2020/11/12)
	2019.2.3	○ (2019/12/10)	
	2019.1.2	○ (2019/4/16)	
	2018.2	○ (2018/12/20)	
	2015.1-44	○ (2021/7/14)	
	2015.1-33	○ (2018/6/12)	
	2015.1-27	○ (2017/12/14)	
	2015.1-19	○ (2017/10/1)	
	2012.1-37	○ (2016/4/19)	
NAMD	2.13	◎ (2018/12/7) ☆ cpu/gpu	P100, V100 対応
	2.11	○ (2017/10/1) ☆	P100, V100 ☆ 対応
NBO	7.0-7	◎ (2020/1/6)	
	7.0-2	○ (2019/1/23)	
	6.0-18	◎ (2018/3/16)	
	6.0-15	○ (2018/2/6)	
NTChem(注17)	2013.12.1.1	○ (2021/6/3)	
	2013.5.0	◎ (2015/4/20)	
NWChem	6.8	◎ (2018/1/22)	
OpenMolcas	20.10	◎ (2020/12/7)	
		○ (2019/6/7)	2019/6/4 時点の最新
ORCA(注20)	4.2.1	○ (2020/1/8)	
Parallel CONFLEX(注9)			
PSI4	1.1	◎ (2018/1/12)	
Quantum ESPRESSO	6.7	◎ (2021/1/5) ☆ cpu/gpu	P100, V100 対応
	6.5	○ (2020/7/9)	
	6.3	○ (2018/12/17)	
	6.1	○ (2017/9/14)	
	5.4	○ (2018/12/17)	
	5.1.2	○ (2015/4/8)	
ReactionPlus	1.0	◎ (2018/1/22)	
SIESTA	4.0.2	◎ (2019/3/14)	
	3.1(注16)	○ (2012/8/16)	
SMASH	2.2.0	○ (2017/5/16)	
TURBOMOLE(注3)	7.5	◎ (2020/7/30)	
	7.4.1	○ (2020/3/2)	
	7.4	○ (2019/8/20)	
	7.3	○ (2018/7/23)	
	7.2.1	○ (2017/12/12)	
	7.2	○ (2017/8/4)	
VASP(注4)		(入手不可)	

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	/local/apl/lx/g16b01/gv/gview.sh	○ (2017/2/2)
	5.0.9	gview5	◎ (2013/3/13)
Luscus	0.8.6	/local/apl/lx/luscus086/bin/luscus	◎ (2019/6/10)
Molden	5.7	/local/apl/lx/molden/bin/molden	◎ (2016/11/22)
NBOView2	2	/local/apl/lx/nbview2/nbview2	◎ (2018/2/6)
VMD	1.9.3	/local/apl/lx/vmd193/bin/vmd	◎ (2018/2/19)

◎: インストール済み。g16のような別名が設定されています。

○: インストール済み。g16a03のように指定する必要があります。

▲: NBO 6.0 対応

△: NBO 7.0 対応

☆: GPU版有

★: ビルド時にネイティブ対応をしていません。バージョン間の互換性を利用しているため、十全な性能が出ないかもしれません。

||: GCC版とインテルコンパイラ版が利用可能

注意事項

(注2) molproは、2022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。2022年1月にライセンス失効する。毎年更新予定。

(注4) [VASP](#)は小規模の研究グループをライセンス単位としているため、本センターでは導入できません。(ライセンスを確認の上、ユーザーが独自にインストールして利用していただくことになります。)

(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/GRRM11用](#))についてもご覧ください。

(注8) SMILES (a package for molecular integrals with Slater functions)を有効にしてコンパイルしてあります。

(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15) 各バージョンのパッケージリストやテスト内容については以下のリンクからご確認ください([CPU\(intel\)](#) / [GPU\(intel\)](#) / [CPU\(gcc\)](#) / [GPU\(gcc\)](#))

(注16) SIESTA 3.x を使った計算を論文にする場合は以下の論文を引用してください。

1. “Self-consistent order-N density-functional calculations for very large systems”, P. Ordejón, E. Artacho and J. M. Soler, Phys. Rev. B (Rapid Comm.) 53, R10441-10443 (1996).
2. “The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation” J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sánchez-Portal, J. Phys.: Condens. Matt. 14, 2745-2779 (2002).

(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。



マニュアルとチュートリアルは、会話処理ノードの/local/apl/lx/ntchem/doc/以下にもあります。

(注18) CRYSTAL14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。郵送等で同意書がRCCSに届いた後、CRYSTAL14が利用可能になります。

(注19) 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。

(注20) ORCA を利用するためにはユーザ登録の必要があります。詳細については[このページ](#)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。

添付	サイズ
 CRYSTAL14のライセンス同意書	281.59 KB
 CRYSTAL17のライセンス同意書	255.88 KB