## パッケージプログラム状態一覧(分子科学)

最終更新: 2025/8/29

## 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)<br>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) |
| | | |

| 名前 | バージョン | 備考 |
|---|---|---|
| | 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 | 25.7, 25.3<br>24.9, 24.3<br>23.9, 23.5<br>22.11 | module: nvhpc/(version), nvhpc/(version)-byo, nvhpc/(version)-nompi |
| Intel oneAPI Compiler Runtime [2] | 2025.2.1, 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)<br><br>2025.0.0.1 =><br>(major 2025, minor 0, update 0, patch 1; 2025.0.1 と表記すべき？) |
| Intel MPI | 2021.16.1, 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 | 12.9 Update 1 | module: cuda/12.9u1 |
| | 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 | 5.0.8, 5.0.6, 5.0.5, 5.0.1<br>4.1.8, 4.1.6, 4.1.5,<br>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,<br>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<br><br>(version3)<br>(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<br>(2025/1/16) | △ (2025/1/16) | 推論部 GPU 必須。<br>モデルパラメータは各自で申請、<br>ダウンロードする必要有り |
| | 3.0.0<br>(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 +<br>AmberTools25 | ○ (2025/5/19)☆ | |
| | 24-update3 | ○ (2025/3/6)☆ | module コマンドの挙動に注意;<br>導入詳細末尾のメモ参照<br>(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)<br>ENSO 2.0.2 の anmr と<br>nmrplot.py を手動で追加 |
| ColabFold | 配列情報からタンパク質立体構造予測を行うソフト | | |
| | 1.5.5 | ○ (2024/2/16) | ローカル DB を使用 |
| | 第一原理分子動力学計算可能な量子化学計算ソフト | | |

| パッケージプログラム名 | 説明 | | |
|---|---|---|---|
| | バージョン | 導入日 | 備考 |
| CP2K | 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)☆<br>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)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2.1.2 | ○ (2024/1/16)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2.0.3 | ○ (2023/1/-)☆<br>CPU / GPU | |
| | 高速計算向け分子動力学計算ソフト | | |
| | 2025.2 | ○ (2025/5/27)☆<br>CPU / GPU | NNP enabled (libtorch 2.7.0) |
| | 2024.6 | ○ (2025/8/25)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2024.5 | ○ (2025/1/27)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2024.4 | ○ (2024/11/5)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2024.2 | ○ (2024/5/16)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2023.5 | ○ (2024/5/7)☆<br>CPU / GPU | |

| パッケージプログラム名 | 説明 | | |
|---|---|---|---|
| GROMACS | バージョン | 導入日 | 備考 |
| | 2023.4 | ○ (2024/1/26)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2023.2 | ○ (2023/8/9)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2022.6 | ○ (2023/7/12)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2022.4 | ○ (2023/1/-)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2021.7 | ○ (2023/4/14)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2021.6 | ○ (2023/1/-)☆<br>CPU / GPU | |
| | 2021.4 | ○ (2023/1/-)☆<br>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。<br>(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)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | |
| | 29Aug2024 Update 4 | ○ (2025/7/29)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | |
| | 29Aug2024 Update 3 | ○ (2025/7/15)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | |
| | 29Aug2024 Update 2 | ○ (2025/4/18)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | |
| | 29Aug2024 Update 1 | ○ (2025/2/21)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | |
| | 29Aug2024 | ○ (2024/9/6)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | |
| | 2Aug23 | ○ (2023/10/16)☆<br>CPU(GCC,INTEL) / GPU | Intel MPI |
| | 23Jun22 Update 2 | ○ (2023/1/-)☆<br>CPU / GPU | (netcdf off) |
| | | ○ (2023/4/18)☆<br>CPU / GPU | Intel MPI |
| | 29Sep21 Update 3 | ○ (2023/4/18)☆<br>CPU / GPU | Intel MPI |
| | 29Sep21 | ○ (2023/1/-)☆<br>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)☆<br>MPI / SMP / SMP+CUDA | |
| | 3.0 | ○ (2024/7/5)☆<br>MPI / SMP / SMP+CUDA | |
| | 3.0b7 | ○ (2024/5/23)☆<br>MPI / SMP / SMP+CUDA | |
| | 3.0b6 | ○ (2024/3/6)☆<br>MPI / SMP / SMP+CUDA | |
| | 3.0b2 | ○ (2023/4/10)☆ | (GPU 版のみ) |
| | 2.14 | ○ (2023/1/-)☆<br>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)<br>GCC / IntelClassic | |
| | 7.2.2 | ○ (2024/3/5)☆<br>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) | |
| | 6.0.1 | ○ (2024/11/6) | |

| パッケージプログラム名 | 説明 | | |
|---|---|---|---|
| | バージョン | 導入日 | 備考 |
| | 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)☆<br>CPU / GPU | |
| | 7.4 | ○ (2025/1/24)☆<br>CPU / GPU | |
| | 7.3 | ○ (2024/2/6)☆<br>CPU / GPU | |
| | 7.2 | ○ (2023/4/11)☆<br>CPU / GPU | |
| | 6.8 | ○ (2023/1/26)☆<br>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)<br>OpenMPI / IntelMPI | Open MPI 版と Intel MPI 版を用意 |
| | 5.0.0 | ○ (2024/5/29)<br>OpenMPI / IntelMPI | Open MPI 版と Intel MPI 版を用意 |
| | 4.1.5 | ○ (2023/1/-)<br>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 |