2022年3月31日時点の情報です。それ以降は未更新です。
最新情報は「ファーストタッチオプション・クイックスタートガイド」をご覧ください。

「富岳」一般/産業 試行課題

ファーストタッチオプション 利用ガイド

ヘルプデスク
～ワンストップサービス窓口～
helpdesk@hpci-office.jp

利用の流れ

ファーストタッチオプションは「一般試行課題」または「産業試行課題」のいずれかを選択して申請します。
「一般試行課題」とは主として学術界による利用、「産業試行課題」とは産業界による利用を想定した課題種類です。

HPCI-ID登録	「HPCI申請支援システム」(Web)からHPCI-ID※1を登録します。 https://www.hpci-office.jp/entry/
申請	「HPCI申請支援システム」から参加者、利用目的、利用アプリケーションなどを入力して申請します※2。
通知	申請内容の審査があります。 申請から3営業日程度※3で審査結果がメールで通知されます。
準備	アカウント発行のため本人確認や必要書類の提出などの諸手続き※4を行います。
アカウント発行	「HPCIアカウント」と「「富岳」のローカルアカウント」が発行されます。 スーパーコンピュータ「富岳」スタートアップガイド※5に従い初期設定を行います。
「富岳」の利用	「富岳」はログインノードにログインして利用します。 自作のソースコードやデータは「富岳」にファイル転送して利用します。 「富岳」には利用者が無償で利用できるアプリケーションやライブラリがあります。 詳しくは『無償で利用できるアプリケーションやライブラリ』をご参照ください。
利用後	利用終了後は簡単なアンケート形式の利用報告書※6を提出します。

※1：既にHPCI-IDを登録している方は不要です。詳しい申請方法は
https://www.hpci-office.jp/materials/hpci-startguide.pdf#page=10 をご参照ください。
※2：申請時の入力項目は https://fugaku100kei.jp/industrial_user/fto.html をご参照ください。
※3：申請の処理状況により多少時間がかかることがあります。
※4：手続きの詳細は https://www.hpci-office.jp/pages/start_representative をご参照ください。
※5：スーパーコンピュータ「富岳」スタートアップガイドは
https://www.hpci-office.jp/fugaku/user-info/user-guide.pdf をご参照ください。
※6：利用者アンケートが含まれます。利用者アンケートへの回答は「富岳」の利便性向上に役立ててまいります。
利用報告書の入力項目は下記をご参照ください。
https://www.hpci-office.jp/materials/seika_form_first-touch_option_guide.pdf

「富岳」で動作することが確認された商用アプリケーション

下記の商用アプリケーションは「富岳」で動作することが確認されています※7。「富岳」で利用するにはライセンス購入とインストール作業が必要です※8。

- ■ 流体解析　：CONVERGE(★)、Cradle CFD | scFLOW(★)
- ■ 構造解析　：ESI Virtual Performance Solution(VPS)、LS-DYNA(★)
- ■ 電磁界解析：JMAG、Poynting(★)
- ■ 化学　　：Amber、Gaussian16(★)

※7：富士通株式会社による動作検証に基づき記載しています。（2021/11/15時点）
（出典：https://www.fujitsu.com/downloads/SUPER/topics/sc21/sc21-applications-for-primehpc-non-video.pdf）
※8：上記に(★)印のあるものは2022年度から「富岳」で利用いただける予定です。

無償で利用できるアプリケーションやライブラリ

「富岳」の利用者が無償で利用できるアプリケーションやライブラリです。（2022/3/9時点）
最新情報は下記ページからご確認ください。
https://www.hpci-office.jp/pages/hardware_software?tab=software

ライブラリ等
- ■ 分子動力学
  - GENESIS
  - GROMACS
  - LAMMPS
  - N2P2
- ■ 計算生物学分野
  - Improved-rdock
- ■ 流体解析分野
  - OpenFOAM
- ■ 量子化学
  - ABINIT-MP
  - NTChem
- ■ 気象／気候
  - SCALE
- ■ 物性物理分野
  - ALPS
  - CP2K(*)
  - Quantum ESPRESSO
- ■ 機械学習
  - Chainer
  - oneDNN
  - Horovod
  - Keras
  - PyTorch
  - scikit-learn
  - TensorFlow

データサイエンス
- ■ バイオインフォマティクス
  - bcftools
  - bedtools2
  - biobambam2
  - BWA
  - dssp
  - mapsplice2
  - Picard
  - Pysam
  - SAMtools
  - Star
  - TopHat(*)
- ■ 統計解析/データ分析
  - pandas
  - PyDMD
  - R

プリポスト
- ■ 汎用可視化ソフトウェア
  - GrADS
  - matplotlib
  - Openrasmol(*)
  - ParaView
  - POV-Ray
  - pymol(*)
  - Seaborn
- ■ メッシュ操作
  - METIS
  - ParMETIS

ライブラリ等
- ■ MPI通信
  - 富士通MPI
- ■ 数値計算
  - 2.5D-PDGEMM(*)
  - Batched BLAS(*)
  - BLAS
  - cblas
  - EigenExa
  - FFTW
  - itensor(*)
  - Kevd(*)
  - LAPACK
  - Lis
  - mptensor
  - PETSc
  - PFAPACK
  - ScaLAPACK
  - 富士通数値計算ライブラリ
- ■ データ形式
  - h5py
  - h5z-zfp(*)
  - HDF5
  - htslib
  - NetCDF
  - phdf5
- ■ Python関連
  - mpi4py
  - NumPy
  - pip
  - Python
  - scipy
  - xarray
- ■ その他のライブラリ等
  - adios2
  - Boost

開発環境
- ■ コンパイラ/インタプリタ
  - Julia
  - Omni XcalableMP
  - OpenJDK
  - Ruby
  - 富士通コンパイラ
  - Python
  - LLVM
- ■ その他の開発環境
  - CMake
  - Dask
  - gnome3
  - Kokkos
  - Process-in-Process
  - screen
  - tmux

システム基盤
- ■ OS
  - McKernel(*)
  - Red Hat Enterprise Linux 8

【凡例】：(*)提供予定のソフトウェア

サポートサービス

ヘルプデスクはワンストップのサービス窓口です。あらゆる相談に対応します。お気軽にお問合せください。
メール：helpdesk@hpci-office.jp

申請前の事前相談例
- ・利用申請手続きについての相談
- ・利用方法についての相談
- ・課題申請の記入方法についての相談
- ・計算機環境（ハードウェア・ソフトウェア）についての問合せ

利用相談例
- ・利用時の技術相談
- ・利用時のトラブル相談
- ・コンパイルエラー、実行時エラー等の相談
- ・他システムからの移行の相談
- ・ライブラリ、ツール等についての相談
- ・性能情報採取方法についての相談

ファーストタッチオプションご利用後

- ファーストタッチオプションは何度でも利用が可能です。1,000ノード時間以下の計算資源で引き続きアプリケーションの動作・性能確認やお試し計算などを行う場合は、再申請してください。
- アプリケーションの動作・性能確認を目的として1,000～10万ノード時間の計算資源が必要な場合は、ファーストタッチオプションではない「一般試行課題」「産業試行課題」を申請してください。
- 小規模で、機動的な利用により成果の創出を狙う課題を行う場合は、年4回審査のある「一般機動的課題」「若手機動的課題」「産業機動的課題」を申請してください。
- 大規模で、「富岳」の機能・性能を有効に活用する課題を行う場合は、年2回募集のある「一般課題」「若手課題」「産業課題」を申請してください。
- 有償で優先利用や利用報告書を非公開にできる「一般有償課題」「一般有償試行課題」「産業有償課題」「産業有償試行課題」もあります。
- 各課題種類の応募条件・詳細はHPCIポータルサイトに掲載されている募集要領をご確認ください。
  https://www.hpci-office.jp/pages/project_categories