

「富岳」にプリインストールされた商用アプリケーション

(1) ライセンス購入不要で利用可能なソフトウェア (2024/ 1現在)

No	分野	ソフトウェア名	説明	提供企業等	備考
1	化学	Gaussian	汎用第一原理量子化学パッケージ。1ノード内での並列実行のみ可能。利用申請が必要。プリポスト環境では「GaussView」が利用可能。	Gaussian, Inc	
2	汎用 可視化	AVS/Express	汎用可視化ソフトウェア。プリポスト環境（リモートでの実行）またはユーザーPC環境（ローカルでの実行）において利用可能。	サイバネットシステム株式会社	
3	性能分析	Vampir	並列アプリケーションの性能解析と可視化のためのフレームワーク。ログインノード、プリポスト環境においてアカデミックライセンスのVampirが利用可能（商業利用は不可）。利用申請が必要。	GWT-TUD GmbH	

(2) ライセンス購入することで利用可能なソフトウェア (2024/ 1現在)

No	分野	ソフトウェア名	説明	提供企業等	備考
4	流体解析	CONVERGE	熱流体解析プログラム。	Convergent Science (販売代理店：株式会社IDAJ)	
5		Cradle CFD scFLOW	熱流体解析ソフトウェア「Cradle CFD」の非構造格子系熱流体解析システム「scFLOW」ソルバー。	株式会社ソフトウェアクレイドル	
6		COLMINA CAE 粒子法鋳造解析	粒子法を用いた高精度な鋳造解析ソフトウェア。	富士通株式会社	
7		Simcenter STAR-CCM+	統合マルチフィジックスソリューション。	Siemens Digital Industries Software	
8	構造解析	Ansys LS-DYNA	陽解法および陰解法ソルバーが実装された汎用の衝撃・構造解析ソフトウェア。	Ansys, Inc.	
9	電磁界 解析	Poynting	有限差分時間領域法を用いた電磁波解析ソフトウェア。	富士通株式会社	
10		COLMINA CAE 磁界シミュレータ	大規模マルチスケール磁界シミュレータ。	富士通株式会社	
11	化学	Amber	生体分子の分子動力学(MD)計算のための力場群と、これらの力場をシミュレーションするためのMDプログラム群。	University of California, San Francisco	
12		VASP	擬ポテンシャルと平面波基底を用いた第一原理電子状態計算ソフトウェア。	VASP Software GmbH	
13	数式処理	MATLAB	科学技術計算のための数値解析ソフトウェア環境。富岳フロントエンドサーバー向けに、インストール済みのMATLAB環境(Intel版)を用意。既にライセンスを所有されている方は、利用申請とライセンスのアクティベーションをすれば利用可能。	MathWorks, Inc.	

「富岳」にて無償で利用できるソフトウェア

「富岳」で無償で利用できるソフトウェアです（2024/1/24時点）。
ソフトウェアは随時整備されるため**最新情報は下記の「ソフトウェア検索」※のページをご参照ください。**

<p>シミュレーション</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 分子動力学 <ul style="list-style-type: none"> GENESIS GROMACS LAMMPS MODYLAS N2P2 NAMD ■ 量子化学 <ul style="list-style-type: none"> ABINIT-MP Gaussian(*1) GaussView(*1) NTChem NWChem SMASH 	<p>データサイエンス</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 機械学習 <ul style="list-style-type: none"> Chainer Horovod Keras oneDNN PyTorch scikit-learn TensorFlow 	<p>アプリソフト</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 汎用可視化ソフトウェア <ul style="list-style-type: none"> AVS/Express(*1) GMT gnuplot GrADS ImageMagick matplotlib ParaView POV-Ray pymol Seaborn 	<p>ライブラリ等</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ MPI通信 <ul style="list-style-type: none"> MPICH-Tofu 富士通MPI 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 数式処理 <ul style="list-style-type: none"> MATLAB(*2) 	<p>開発環境</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ コンパイラ/インタプリタ <ul style="list-style-type: none"> GNUコンパイラ Julia LLVM Omni XcalableMP OpenJDK Python Ruby Rust 富士通コンパイラ ■ その他の開発環境 <ul style="list-style-type: none"> CMake Dask gnome3 GNU Global Kokkos screen tmux 	
<ul style="list-style-type: none"> ■ 物性物理 <ul style="list-style-type: none"> ABINIT AkaiKKR ALAMODE CP2K CPMD HΦ mVMC OpenMX PHASE/0 Phonopy Quantum ESPRESSO SALMON SIESTA 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 流体解析 <ul style="list-style-type: none"> FDS FFVHC-ACE FFX FrontFlow/blue OpenFOAM 	<ul style="list-style-type: none"> ■ バイオインフォマティクス <ul style="list-style-type: none"> bcftools bedtools2 biobambam2 BWA dspp mapsplice2 Picard Pysam SAMtools Star 	<ul style="list-style-type: none"> ■ メッシュ操作 <ul style="list-style-type: none"> METIS ParMETIS 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 数値計算 <ul style="list-style-type: none"> Batched BLAS BLAS cblas Eigen EigenExa FFTW LAPACK Libxc Lis mptensor PETSc PFAPACK SC-SUMMA-25D ScaLAPACK z-Pares 富士通数値計算ライブラリ 	<ul style="list-style-type: none"> ■ データ形式 <ul style="list-style-type: none"> h5py h5z-zfp HDF5 htslib NetCDF phdf5 	<ul style="list-style-type: none"> ■ Python関連 <ul style="list-style-type: none"> Hypothesis mpi4py NumPy pip pytest scipy xarray
<ul style="list-style-type: none"> ■ 気象/気候 <ul style="list-style-type: none"> SCALE WRF 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 構造/衝突解析 <ul style="list-style-type: none"> FrontISTR ■ 電磁界解析 <ul style="list-style-type: none"> OpenFDTD ■ 計算生物学 <ul style="list-style-type: none"> rDock 	<ul style="list-style-type: none"> ■ ケモインフォマティクス <ul style="list-style-type: none"> RDKit 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 統計解析/データ分析 <ul style="list-style-type: none"> pandas PyDMD R 	<ul style="list-style-type: none"> ■ 画像処理 <ul style="list-style-type: none"> Kombyne(*1) Mesa 	<ul style="list-style-type: none"> ■ その他のライブラリ等 <ul style="list-style-type: none"> adios2 Boost Git LFS RAJA Spglib 	<p>性能分析</p> <ul style="list-style-type: none"> Darshan TAU Darshan-util Vampir(*1)(*3) <p>システム基盤</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ OS <ul style="list-style-type: none"> Red Hat Enterprise Linux <p>【凡例】 (*1) 「富岳」にインストール済みで無償で利用可能な商用ソフトウェア (*2) ユーザ所有のライセンスをアクティベーションすれば利用可能な商用ソフトウェア (*3) アカデミックライセンスで商業利用は不可</p>

※最新情報は右記の「ソフトウェア検索」のページを参照 https://www.hpci-office.jp/using_hpci/hardware_software

※上記以外に利用したいアプリがあれば、高度化支援により移植を支援します。