

# Logiciels installés

Voici les logiciels actuellement disponibles sur le cluster de calcul :

Dans le cas où vous seriez intéressé par un logiciel non présent dans cette liste, n'hésitez pas à prendre contact avec l'équipe mésocentre.



Pour voir la liste de tous les logiciels installés sur le cluster, tapez :

```
$ module avail
```

## Compilateurs


- [Intel Cluster toolkit](#) : 5 jetons, accessibles à tous
- [Compilateurs GNU](#)
- [Compilateur PGI](#)
- [UPC](#)

### Misc

- How to use [Make file](#) tool
- How to use a higher version of [GLIBC](#)

## Debuggers et outils d'analyse

Outil	Description	Applications
<a href="#">Débogage</a>	GNU Debugger	All
<a href="#">Profiling</a>	GNU Profiler	All
<a href="#">Valgrind</a>	Dynamic analysis tools	All
<a href="#">Intel® Trace Analyzer and Collector</a>	Intel trace analyzer	Only Intel MPI
<a href="#">TAU</a>	Parallel program analyzer	OpenMPI (icc, gcc)
<a href="#">Scalasca</a>	MPI program analyzer	OpenMPI (icc, gcc)
<a href="#">HPCToolkit</a>	MPI program analyzer	OpenMPI (icc, gcc)
<a href="#">Perfsuite</a>	Performance Analysis	All
<a href="#">perf - Performance analysis tools for Linux</a>	Performance Analysis	All

 Please use

```
$ module avail perf
```

to list all available software.

## Bibliothèques de passage de messages


Nom	Fabrics	Intégration SGE	Utilisation
Intel MPI	lb, SM, RDMA, eth	oui/non	<a href="#">Utilisation</a>
Open MPI	lb, SM, RDMA, eth	oui	<a href="#">Utilisation</a>
Open MPI Java	lb, SM, RDMA, eth	oui	<a href="#">Utilisation</a>

lb : Infiniband

SM : Shared Memory

RDMA : Remote Dierct Memory Access

eth: ethernet

 Please use

```
$ module avail mpi
```

to list all available software.

## Bibliothèques scientifiques

- [Lapack](#)
- [Scalapack](#)
- [Blacs](#)
- [Blas](#)
- [PETSc](#)
- [SLEPc](#)
- [FFTW](#)
- [Intel MKL](#)
- [Trilinos](#) 
- [Numpy - Python](#)
- [Scipy - Python](#)

- [GNU Scientific Library](#)
- [ParMETIS/METIS](#)
- [GetFEM++](#)
- ...

## Misc

- [Benchmark MKL vs LAPACK](#)



Please use

```
$ module avail numlib
```

to list all available libraries.

## Langages de scripts

- [R](#)
- [Python](#)
- [Anaconda](#)
- [Jupyter Notebook](#)



Please use


```
$ module avail lang
```

to list all available languages.

## Bibliothèques de visualisation et I/O

Nom	Parallèle ?	Documentation
HDF5	yes	<a href="#">HDF5</a>
Netcdf	yes	-
Paraview	no	-

Nom	Parallèle ?	Documentation
Salome	no	<a href="#">Salome</a> à réinstaller
VMD	no	-
Visit	no	-
Hex	no	<a href="#">Hex</a>



Please use

```
$ module avail tools lib
```

to list all available software.

## Simulation et informatique

Nom	Parallèle ?	Documentation
SimGrid	non	<a href="#">SimGrid</a>
Sage	non	<a href="#">Sage</a>

## Bio-Informatique

Nom	Parallèle ?	Documentation
EMBOSS	non	<a href="#">EMBOSS</a>
Fasta	MPI	<a href="#">Fasta</a>
Scalablast	MPI	<a href="#">Scalablast</a>
IGV	non	<a href="#">The Integrative Genomics Viewer-IGV</a>
Exabayes	MPI et séquentiel	<a href="#">Exabayes</a>
MrBayes	MPI et séquentiel	<a href="#">MrBayes</a>
PhyloBayes	MPI et séquentiel	<a href="#">PhyloBayes</a>
T-coffee	non	<a href="#">T-Coffee</a>
RAxML	MPI, OpenMP	<a href="#">RAxML</a>
Sumatra	OpenMP	<a href="#">Sumatra</a>
MCL	OpenMP	<a href="#">MCL a cluster algorithm for graphs</a>
Ray	MPI	<a href="#">Ray</a>
Bamtools	non	<a href="#">BamTools</a>
Bcftools	OpenMP	<a href="#">Bcftools</a>
Bwa	OpenMP	<a href="#">Bwa</a>
Samtools	OpenMP	<a href="#">Samtools</a>
cdhit	OpenMP	<a href="#">cdhit</a>
MIRA	OpenMP	<a href="#">MIRA</a>
DWGSIM	-	<a href="#">DWGSIM</a>








Please use

```
$ module avail bio
```


to list all available software.

## Logiciels scientifiques

Nom	Parallélisme	Documentation
Abinit	MPI	<a href="#">ABINIT</a>
CP2K	MPI	<a href="#">CP2K à réinstaller</a> 
Fenics	MPI	<a href="#">FEniCS</a>
FreeFem++	MPI	<a href="#">FreeFem++</a> 
Gamess	MPI	<a href="#">GAMESS</a>
Gaussian 2009	Mémoire partagée	<a href="#">Gaussian 09</a>
Gromacs	MPI et séquentiel	<a href="#">GROMACS</a>
LAMMPS	MPI	<a href="#">LAMMPS</a>
Magma Computational Algebra System	séquentiel	<a href="#">Magma CAS</a>
Meep	MPI	<a href="#">Meep à réinstaller</a> 
Molpro	MPI et MPP	<a href="#">Molpro à réinstaller</a> 
NAMD	MPI	<a href="#">NAMD</a>
NWChem	MPI	<a href="#">NWChem</a>
OpenMX	MPI	<a href="#">OpenMX</a>
QUANTUM ESPRESSO	MPI	<a href="#">Quantum ESPRESSO</a>
Scilab	séquentiel	<a href="#">Scilab</a>
VASP	MPI	Groupe d'utilisateurs (Nous contacter) <a href="#">vasp</a>
Gate	séquentiel	<a href="#">Gate</a>
Zebulon	-	<a href="#">Zebulon</a>
Elk	MPI	<a href="#">Elk à réinstaller</a> 
Crystal	MPI	<a href="#">Crystal</a>
Cast3M	-	<a href="#">Cast3M</a>
Siesta	MPI	<a href="#">Siesta</a>
JDFTX	MPI	<a href="#">JDFTX</a>
ORCA	MPI-Serial	<a href="#">ORCA</a>
MicMac	OpenMP	<a href="#">micmac</a>
Octave	OpenMP	<a href="#">octave</a>
Towhee MCCC	MPI et séquentiel	<a href="#">towhee</a>
Ansys mechanical	Parallel	<a href="#">ansys</a>

## Logiciels GPGPU

Nom	Cuda/OpenCL	Documentation
Cusp	CUDA	<a href="#">Cusp</a>
Thrust	CUDA	<a href="#">Thrust</a>
pyCUDA	CUDA/python	<a href="#">PyCUDA</a>
MAGMA	CUDA	<a href="#">MAGMA</a>
TensorFlow	GPU	<a href="#">tensorflow</a>
Caffe	GPU	<a href="#">caffe</a>

 Please use

```
$ module avail gpu
```

to list all available software.

## Software running within Singularity container

 [What's Singularity container ?](#)

- [MBT](#)
- [TensorFlow](#)
- [Hex](#)

## Logiciels Xeon PHI

Nom	Version	Documentation
XX	XX	XX

## Logiciels commerciaux

Nom	Parallélisme	Toolkit	Documentation
Ansys/Fluent	MPI	accès restreint	<a href="#">ANSYS Fluent</a>
FDTD solutions	MPI	accès restreint	<a href="#">FDTD Solutions</a>

Nom	Parallélisme	Toolkit	Documentation
Altair Hyeprworks	MPI, mémoire partagée	accès restreint	<a href="#">Altair HyperWorks</a>
Comsol	mémoire partagée	<b>2 jetons</b> : COMSOL Multiphysics, Structural Mechanics Module, SUBSURFACEFLOW (1j), MEMS (1j), MICROFLUIDICS (1j)	<a href="#">Comsol</a>
Matlab	mémoire partagée	<b>10 jetons</b> : Simulink, Image Processing Toolbox, Optimization Toolbox, Signal Processing Toolbox, Symbolic Math Toolbox, Statistics Toolbox, Neural Network, Compilateur 2 jetons, Distrib_Computing_Toolbox 1 jeton	<a href="#">Matlab</a>
Gurobi	mémoire partagée	licence nominative et accès restreint à la file d'attente gurobi.q	<a href="#">gurobi</a>

## Voir aussi

- [Utilisation des modules](#)
- [Utilisation SGE](#)

From:

<http://mesowiki.univ-fcomte.fr/dokuwiki/> - **Wiki Utilisateurs - Mésocentre de calcul de Franche-Comté**

Permanent link:

[http://mesowiki.univ-fcomte.fr/dokuwiki/doku.php/logiciels\\_installes](http://mesowiki.univ-fcomte.fr/dokuwiki/doku.php/logiciels_installes)

Last update: **2020/10/07 13:18**