

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
Débogage	GNU Debugger	All
Profiling	GNU Profiler	All
Valgrind	Dynamic analysis tools	All
Intel® Trace Analyzer and Collector	Intel trace analyzer	Only Intel MPI
TAU	Parallel program analyzer	OpenMPI (icc, gcc)
Scalasca	MPI program analyzer	OpenMPI (icc, gcc)
HPCToolkit	MPI program analyzer	OpenMPI (icc, gcc)
Perfsuite	Performance Analysis	All
perf - Performance analysis tools for Linux	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	Utilisation
Open MPI	lb, SM, RDMA, eth	oui	Utilisation
Open MPI Java	lb, SM, RDMA, eth	oui	Utilisation

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	HDF5
Netcdf	yes	-
Paraview	no	-

Nom	Parallèle ?	Documentation
Salome	no	Salome à réinstaller
VMD	no	-
Visit	no	-
Hex	no	Hex



Please use

```
$ module avail tools lib
```

to list all available software.

Simulation et informatique

Nom	Parallèle ?	Documentation
SimGrid	non	SimGrid
Sage	non	Sage

Bio-Informatique

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








Please use

```
$ module avail bio
```


to list all available software.

Logiciels scientifiques

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

Logiciels GPGPU

Nom	Cuda/OpenCL	Documentation
Cusp	CUDA	Cusp
Thrust	CUDA	Thrust
pyCUDA	CUDA/python	PyCUDA
MAGMA	CUDA	MAGMA
TensorFlow	GPU	tensorflow
Caffe	GPU	caffe

 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	ANSYS Fluent
FDTD solutions	MPI	accès restreint	FDTD Solutions

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

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

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