Anwendungen

Vorinstallierte Software

Hier werden (nach und nach) die Anwendungen, die vom HPC Team auf dem Cluster optimiert und bereitgestellt werden, aufgelistet. Dazu gibt es beispielhafte Job-Skripte.

Anleitungen

- Gaussian
- LAMMPS
- MATLAB
- OpenMolcas
- Python
- R
- Snakemake
- TurboMole

Software-Bereiche

- AI-DL-Applications
- Bioinformatics
- Computational Chemistry
- DNA-Tools
- MD-Simulations

Eigene Software

Development-Software

Compiler / SDK	Version(en)
Intel® Parallel Studio	XE2011, XE2013, XE2013, XE2015, XE2017, XE2019, XE2020.2
Intel® MPI Library	4.1.0.024, 5.0.2.044
The Portland Group compiler	14.4, 15.3
GCC, the GNU Compiler	4.4.7, 4.8.1, 5.3.0, 6.1.0, 6.4.0, 7.2.0, 7.3.0, 7.4.0, 8.1.0, 10.2.0, 10.5.0, 11.1.0, 11.4.0, 12.3.0, 13.1.0, 13.2.0
CUDA	6.5.14, 7.0.28, 7.5.18, 8.0.44, 9.0.176, 9.1.85, 10.0, 10.1, 10.2
MPICH	3.0.4, 3.1.3
TotalView Debugger	8.13.0-0, 8.14.1-8, 2020.1.13

Bitte IntelMPI benutzen

Wir empfehlen **nachdrücklich** für MPI-Programme die Intel-MPI-Lib zu verwenden! Das HPC-Team ist jederzeit bereit beim Übersetzen und Optimieren von Programmen zu helfen.

Skriptsprache	Version(en)
Python	2.7.5, 3.4.5, 3.6.5, 3.8.3, 3.8.17, 3.9.17, 3.10.5, 3.10.12, 3.11.3, 3.11.4, 3.11.5, 3.12.0
Perl	5.18.1, 5.32.1
Ruby	2.2.2
Java	1.8.0, 11.0.3

CUDA-Software

Von Nvidia gibt es eine Liste mit Software welche nach CUDA und damit auf GPU-Nutzung portiert wurde.