

Znanstvene aplikacije

Modulefiles

Na računalnim klasterima Supek i Padobran koristi se alat Modulefiles za podršku instalacije više različitih verzija istih programa. Za svaku verziju dostupnog programa pripremljen je modul u kojem je definirano koje varijable okoline se postavljaju prilikom aktivacije modula.

Osnovna naredba za rad s Modulefiles je **module**. Sve izmjene nad varijablama okoline odnose se isključivo za aktivnu sesiju, odnosno za pokrenuti posao. Stoga je module potrebno aktivirati kod svakog podnošenja posla.

Popis dostupnih modula može se dobiti naredbom:

```
module avail
```

Ili popis verzija za određenu aplikaciju:

```
module avail scientific/gromacs
```

Aktiviranje modula, odnosno postavljanje potrebnih varijable okoline:

```
module load ime_modula
```

Izmjena aktivne verzije modula:

```
module switch ime_modula nova_verzija
```

Pregled svih aktivnih modula za koje je prethodno izvedena naredba load ili koji su učitani od strane drugog modula:

```
module list
```

Deaktivacija modula, odnosno uklanjanje varijabli okoline postavljenih od određenog modula:

```
module unload ime_modula
```

Deaktivacija svih modula:

```
module purge
```

Pregled akcija nad varijablama okoline koje određeni modul izvršava:

```
module show ime_modula
```



Svaki znanstveni softver koji je besplatan dostupan je akademskoj i znanstvenoj zajednici. Korisnici mogu zatražiti zahtjev za njegovu instalaciju putem kontakta computing@srce.hr

Aplikacije

- [ABINIT](#)
- [adcirc](#)
- [Alphapulldown](#)
- [Amber](#)
- [Astral](#)
- [AutoDock Vina](#)
- [Avogadro](#)
- [BAGEL](#)

- [bbtols](#)
- [bcftools](#)
- [Beast](#)
- [bedops](#)
- [bedtools](#)
- [blobtools](#)
- [bowtie2](#)
- [BUSCO](#)
- [bwa-mem2](#)
- [CASTEP](#)
- [cd-hit](#)
- [cdo](#)
- [CENSO](#)
- [ClustalOmega](#)
- [Corset](#)
- [cp2k](#)
- [CREST](#)
- [Dalton / LSDalton](#)
- [Dask](#)
- [deepARG](#)
- [DIAMOND](#)
- [Dorado](#)
- [DPR](#)
- [EggNOG-Mapper](#)
- [EUKulele](#)
- [FaNDOM](#)
- [fastp](#)
- [FastQC](#)
- [GAMESS](#)
- [gatk4](#)
- [Gaussian](#)
- [Geant4](#)
- [Gemma](#)
- [gmx_MMPBSA](#)
- [Golem](#)
- [Grid2Op](#)
- [GROMACS](#)
- [hmmer](#)
- [IQmol](#)
- [iqtree](#)
- [jellyfish](#)
- [Mathematica](#)
- [MATLAB Parallel Server](#)
- [MCL](#)
- [METABOLIC](#)
- [MMseqs2](#)
- [MOKIT](#)
- [Molden](#)
- [MrBayes](#)
- [MultiQC](#)
- [Multiwfn](#)
- [Muscle](#)
- [NAMD](#)
- [NCBI-BLAST+](#)
- [ncview](#)
- [OpenFOAM](#)
- [OpenMolcas](#)
- [OpenQuake](#)
- [ORCA](#)
- [OrthoFinder](#)
- [Pal2nal](#)
- [PAML](#)
- [PHITS](#)
- [Phonopy](#)
- [Pilgrim](#)
- [Plink](#)
- [Prank](#)

- [PWgui](#)
- [PyTorch](#)
- [Q6](#)
- [Q-Chem](#)
- [Qiime2](#)
- [Quantum ESPRESSO](#)
- [RAxML](#)
- [Ray](#)
- [RELION](#)
- [RSEM](#)
- [salmon](#)
- [Salvus](#)
- [Samtools](#)
- [seqkit](#)
- [seqtk](#)
- [SHARC](#)
- [SIESTA](#)
- [SortMeRNA](#)
- [sra-tools](#)
- [STACKS](#)
- [STAR](#)
- [Structure threader](#)
- [TensorFlow](#)
- [TeraChem](#)
- [TransDecoder](#)
- [Transrate](#)
- [trimAl](#)
- [Trimmomatic](#)
- [Trinity](#)
- [TURBOMOLE](#)
- [VESTA](#)
- [VMD](#)
- [WRF](#)
- [XCrySDen](#)
- [xTB](#)