Korisničke aplikacije i knjižnice

- Modulefiles
- Prevodioci
  - Intel
  - Intel oneAPI
  - GCC
  - PGI
  - NVIDIA HPC SDK
- MPI
  - MVAPICH2
  - OpenMPI
- Intel MPI
- Korisničke aplikacije

Modulefiles

Na računalnom klasteru Isabella 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 programa za određeni alat, npr mpi:

```
module avail mpi
```

Akiviranje modula, odnosno postavljanje potrebnih varijable okoline:

```
module load ime_modula
```

Izmjena aktivne verzije modula:

```
module switch ime_modula nova_verzija
```

konkretan primjer izmjene MPI okoline:

```
# module load mpi/mvapich2-intel-2.2-x86_64
# which mpicc
/usr/lib64/mvapich2-intel-2.2/bin/mpicc
# module switch mpi mpi/openmpi3-intel-x86_64
# which mpicc
/usr/lib64/openmpi3-intel/bin/mpicc
```

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 isabella@srce.hr.

Prevodioci

Intel

U tablici su navedene dostupne verzije Intel prevodilaca i pripadni moduli. Preporuča se korištenje najnovije verzije - **Intel 2019**.

Verzija	Modul
Intel 2019	intel/2019
Intel 2018	intel/2018
Intel 2017	intel/2017

Za prevođenja programa koriste se:

- icc - prevodilac za C
- ifort - prevodilac za Fortran.

Instalirane su i matematičke knjižnice Intel MKL (engl. *Math Kernel Library*) koje se nalaze u $MKLROOT. Upute za korištenje knjižnica: MKL Developer Guide. Parametri za prevođenje u paralelnih aplikacija u Fortranu:

```
export FFLAGS="-i8 -I${MKLROOT}/include/intel64/ilp64 -I${MKLROOT}/include"
export FCFLAGS=$FFLAGS
export LIBS="${MKLROOT}/lib/intel64/libmkl_blas95_ilp64.a ${MKLROOT}/lib/intel64/libmkl_lapack95_ilp64.a -
L${MKLROOT}/lib/intel64 -lmkl_scalapack_ilp64 -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -
lmkl_blacs_intelmpi_ilp64 -lpthread -lm -ldl"
```

Koristan link za prevođenje aplikacija s korištenjem knjižnica Intel MKL: Intel MKL link advisor.

Intel oneAPI

Dostupne verzije Intel oneAPI prevodilacaU tablici su navedene dostupne verzije Intel oneAPI prevodilaca i pripadni moduli. Preporuča se korištenje najnovije verzije - **Intel 2019**.

Verzija	Modul
Intel oneAPI Compilers 2022	2022.0.2

Za prevođenja programa koriste se:

- icc - Intel(R) C++ Compiler Classic
- icpc - Intel(R) C Compiler Classic
- ifort - Intel(R) Fortran Compiler Classic
- icx - Intel(R) oneAPI C Compiler
- icpx - Intel(R) oneAPI C++ Compiler
- ifx - Intel(R) Fortran Compiler

- dpcpp - Intel(R) oneAPI DPC++ (Data Parallel C++)

Primjer:

```
module load oneAPI/intel-oneapi-compilers-2022.0.2
icx --version
```

GCC

Različite verzije GNU C i C++ prevodilaca su na klaster instalirane iz Software Collections repozitorija.

U tablici su navedene dostupne verzije GNU C i C++ prevodilaca i pripadni moduli.

Verzija	Modul
GCC 7.3.1	gcc/7
GCC 8.2.1	gcc/8
GCC 9.3.1	gcc/9

Primjer:

GCC 8

```
module load gcc/8
gcc -v
Using built-in specs.
COLLECT_GCC=gcc
COLLECT_LTO_WRAPPER=/opt/rh/devtoolset-8/root/usr/libexec/gcc/x86_64-redhat-linux/8/lto-wrapper
Target: x86_64-redhat-linux
Configured with: ../configure --enable-bootstrap --enable-languages=c,c++,fortran,lto --prefix=/opt/rh
/devtoolset-8/root/usr --mandir=/opt/rh/devtoolset-8/root/usr/share/man --infodir=/opt/rh/devtoolset-8/root/usr
/share/info --with-bugurl=http://bugzilla.redhat.com/bugzilla --enable-shared --enable-threads=posix --enable-
checking=release --enable-multilib --with-system-zlib --enable-__cxa_atexit --disable-libunwind-exceptions --
enable-gnu-unique-object --enable-linker-build-id --with-gcc-major-version-only --with-linker-hash-style=gnu --
with-default-libstdcxx-abi=gcc4-compatible --enable-plugin --enable-initfini-array --with-isl=/builddir/build
/BUILD/gcc-8.2.1-20180905/obj-x86_64-redhat-linux/isl-install --disable-libmpx --enable-gnu-indirect-function --
with-tune=generic --with-arch_32=x86-64 --build=x86_64-redhat-linux
Thread model: posix
gcc version 8.2.1 20180905 (Red Hat 8.2.1-3) (GCC)
```

PGI

Dostupan je i PGI Community Edition Version 19.10 prevodioc.

Verzija	Modul
PGI Community Edition Version 19.10	pgi/19.10

Za prevođenja pograma koriste se:

- pgcc - prevodilac za C
- pgc++ - prevodilac za C++
- pgfortran - prevodilac za Fortran.

Primjer:

PGI 19.10

```
module load pgi/19.10
pgcc --version
pgc++ --version
pgfortran --version
```

NVIDIA HPC SDK

Knjižnice i prevodioci za NVIDIA GPU-ove. Više informacija možete pronaći na adresi: https://developer.nvidia.com/hpc-sdk.

	Verzija	Modul
NVIDIA HPC SDK	20.7	nvhpc/20.7
	21.5	nvhpc/21.5
	22.2	nvhpc/22.2
NVIDIA HPC SDK bez prevodioca	20.7	nvhpc-byo-compiler/20.7
	21.5	nvhpc-byo-compiler/21.5
	22.2	nvhpc-byo-compiler/22.2
NVIDIA HPC SDK bez MPI	20.7	nvhpc-nompi/20.7
	21.5	nvhpc-nompi/21.5
	22.2	nvhpc-nompi/22.2

Za prevođenja programa koriste se:

- nvc - prevodilac za C
- nvc++ - prevodilac za C++
- nvfortran - prevodilac za Fortran.

MPI

U tablici su navedene dostupne verzije knjižnica MPI i pripadni moduli. Preporuča se korištenje verzija pripremljenih s Intel prevodiocima.

Verzija	Prevodilac	Modul
MVAPICH2 2.0	GNU 4.8.5	mpi/mvapich2-2.0-x86_64 mpi/mvapich2-x86_64
MVAPICH2 2.2	GNU 4.8.5	mpi/mvapich2-2.2-x86_64
MVAPICH2 2.3	GNU 4.8.5	mpi/mvapich23-x86_64
MVAPICH2 2.0	Intel 2017	mpi/mvapich2-intel2017-2.0-x86_64 mpi/mvapich2-intel2017-x86_64
MVAPICH2 2.2	Intel 2017	mpi/mvapich2-intel2017-2.2-x86_64
MVAPICH2 2.2	Intel 2017, CUDA 9.0	mpi/mvapich2-intel2017-cuda90-2.2-x86_64
MVAPICH2 2.0	Intel 2018	mpi/mvapich2-intel2018-x86_64 mpi/mvapich2-intel2018-2.0-x86_64
MVAPICH2 2.2	Intel 2018	mpi/mvapich2-intel2018-2.2-x86_64

MVAPICH2 2.2	Intel 2018, CUDA 10.0	mpi/mvapich2-intel2018-cuda-2.2-x86_64
MVAPICH2 2.0	Intel 2019	mpi/mvapich2-intel-2.0-x86_64 mpi/mvapich2-intel-x86_64
MVAPICH2 2.2	Intel 2019	mpi/mvapich2-intel-2.2-x86_64
MVAPICH2 2.2	Intel 2019, CUDA 10.1	mpi/mvapich2-intel2019-cuda101-2.2-x86_64
OpenMPI 1.10	GNU 4.8.5	mpi/openmpi-x86_64
OpenMPI 3.0	GNU 4.8.5	mpi/openmpi3-x86_64
OpenMPI 3.1	GNU 4.8.5	mpi/openmpi31-x86_64
OpenMPI 4.1	GNU 4.8.5	mpi/openmpi41-x86_64
OpenMPI 1.10	Intel 2019	mpi/openmpi-intel-x86_64
OpenMPI 1.10	Intel 2019, CUDA 10.0	mpi/openmpi-intel-cuda-x86_64
OpenMPI 2.1	Intel 2017	openmpi21-intel-x86_64
OpenMPI 3.0	Intel 2019	mpi/openmpi3-intel-x86_64
OpenMPI 3.0	Intel 2019, CUDA 10.0	mpi/openmpi3-intel-cuda-x86_64
OpenMPI 3.1	Intel 2019	mpi/openmpi31-intel-x86_64
OpenMPI 4.1	Intel 2019	mpi/openmpi41-intel-x86_64
OpenMPI 3.1	PGI Community Edition Version 19.10	mpi/openmpi31-pgi-x86_64
Intel MPI 2021.5	Intel MPI 2021	oneAPI/intel-oneapi-mpi-2021.5.1

MVAPICH2

Primjer pokretanja aplikacije prevedene s MVAPICH2 2.2:

```
module load mpi/mvapich2-intel-2.2-x86_64
mpirun_rsh -np $NSLOTS -hostfile $TMPDIR/machines -export-all applikacija
```

OpenMPI

Primjer pokretanja aplikacije prevedene s OpenMPI 3:

```
module load mpi/openmpi3-intel-x86_64
mpirun -np $NSLOTS -machinefile $TMPDIR/machines applikacija
```

Intel MPI

Primjer pokretanja aplikacije prevedene s Intel MPI:

```
module load oneAPI/intel-oneapi-mpi-2021.5.1 mpirun -np $NSLOTS -hosts applikacija
```

Korisničke aplikacije

Informacije o korisničkim aplikacijama koje održava Srce možete pronaći na stranicama:

- Abinit
- ABySS
- AIMAll
- Alphafold2
- Amber
- ASTRAL
- Bagel
- bcftools
- Beast
- Bedtools
- Bioconductor
- Bionano Solve
- Busco
- bwa-mem2
- CAMx
- CAP3
- CASTEP
- CD-HIT
- CDO
- CHARMM
- Clustal Omega
- Clustal W
- Conda
- Corset
- cp2k
- Critic2
- cutadapt
- Dalton
- Dask
- deepARG
- Detonate
- DFTB+
- DIAMOND
- DP_GP_Cluster
- eggNOG mapper
- eT
- EUKulele
- FaNDOM
- fARGene
- fastp
- FastQC
- fineSTRUCTURE
- g_mmpbsa
- GAMESS (US)
- GAP
- Gatk4
- Gaussian
- Geant4
- Goatools
- GPAW
- Grid2Op
- Gromacs
- Gromacs w/ cp2k
- HISAT2
- Horovod
- HTSeq
- HyPhy
- IGV
- Interproscan
- IQTree
- kgec
- LAMMPS
- Megalodon
- METABOLIC
- Microsoft .NET
- MIRA
- MITObim

- MitoZ
- MMseqs2
- Mothur
- MrBayes
- MultiQC
- Muscle
- NAMD
- NCBI BLAST+
- NOVOPlasty
- Nvidia NGC kontejneri
- NWChem
- OBITools
- OMSV
- OpenFOAM
- OpenQuake
- OPM
- ORCA
- OrthoFinder
- Pal2Nal
- PAML
- Parallelfold
- PHITS
- PHYLIP
- Picard
- Plink
- Plumed
- Python
- PyTorch
- Q6
- QIIME2
- Quantum Espresso
- Quantum Espresso GPU
- R
- Rapids
- RAxML
- Ray
- Rcorrector
- Repeat Tools
- RGI
- RSEM
- Salmon
- Sambamba
- Samtools
- SeqKit
- SHARC
- SIESTA
- SortMeRna
- SPAdes
- spatpg
- SPECFEM3D Cartesian
- Stacks
- STAR
- Structure_threader
- SUMO
- TensorFlow
- TOGA
- TransDecoder
- TransPi
- Transrate
- treemix
- TrimAl
- Trinity
- tRNAscan-SE
- USEARCH
- VCFtools
- Velvet
- VMD

- VSEARCH
- WRF
- XCrySDen
- XTB