



A projektek az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósulnak meg.



SZÉCHENYI TERV



MAGYARORSZÁG MEGÚJUL

HPC-NVL: Szuperszámítógép, a nemzeti virtuális laboratórium

TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010

A HPC felhasználás gyakorlati lépései (demó)

Dr. Gál Zoltán, DE TEK

2013. április 26.



HPC-NVL: Szuperszámítógép, a nemzeti virtuális laboratórium

TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010

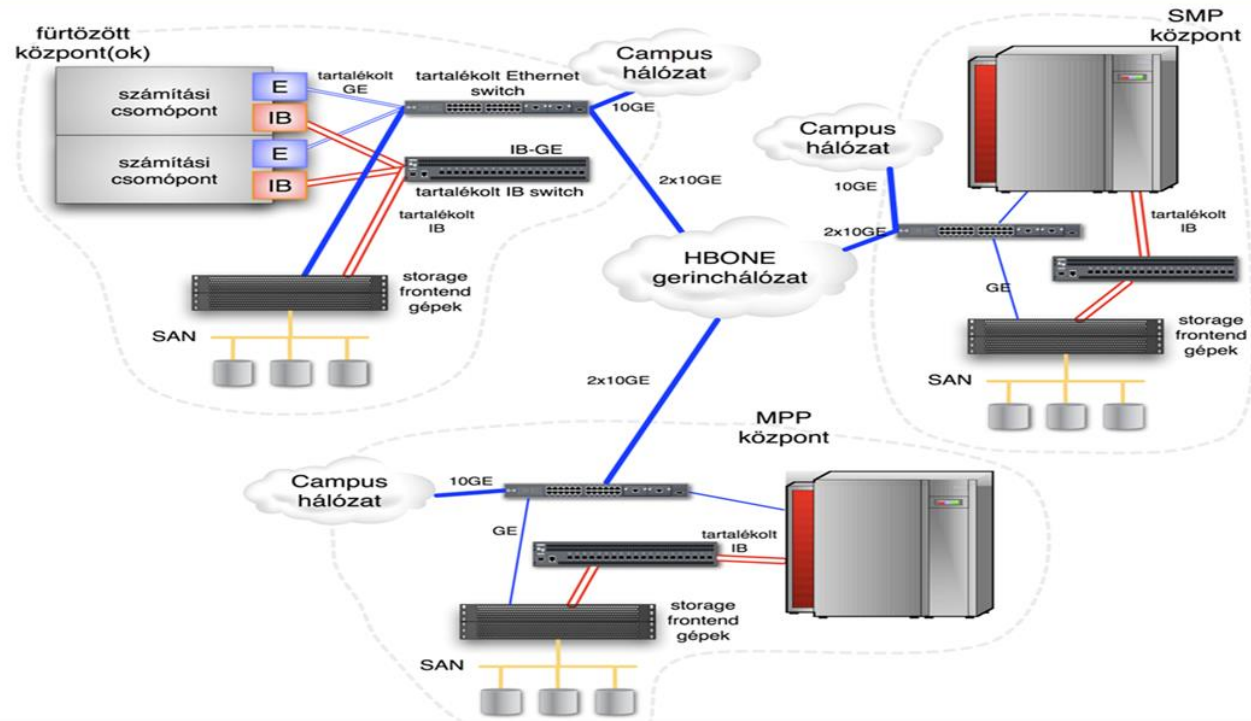


Tartalom

1. A projekt munka szervezése a Debreceni Egyetemen
2. Általános elérési címek és eszközök
3. Távoli bejelentkezés a HPC gépbe
4. Adatmozgatás a helyi gép és a HPC gép között
5. Programok futtatása a HPC gépen
6. HPC szoftverek

1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen

TÁMOP
4.2.2.C-11/1/
KONV

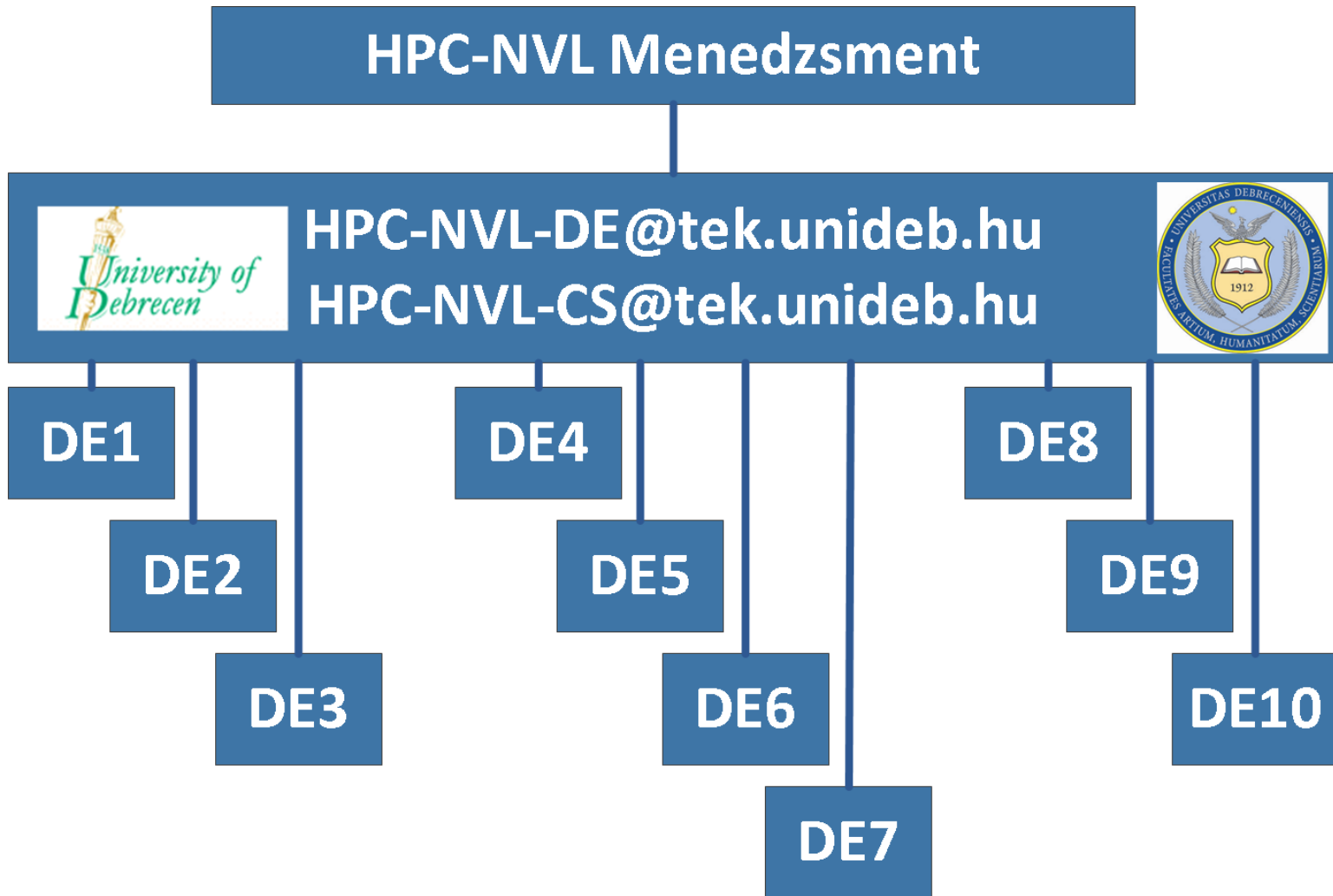


KMOP 4.2.1/A
TIOP 1.3.2



3. A projektmunka szervezése a DE-n

Eszközök: levelezési listák



1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen

DE csoportok összetétele

Csoport	Létszám	Alprojekt képviselő	
0. Menedzsment	3	Prof. Dr. Gaál István Dr. Gál Zoltán Rápolti Ida Pintér Arnold	vezető szakmai vezető asszisztens pénzügyi munkatárs
1. Informatika	1	Tajti Tibor	főiskolai tanársegéd
2. Meteorológia	4	Bíróné Dr. Kircsi Andrea	egyetemi adjunktus
3. Kémia	5	Dr. Purgel Mihály	tudományos segédmunkatárs
4. Matematika	15	Dr. Gaál István	egyetemi tanár
5. Fizika	7	Dr. Trócsányi Zoltán	egyetemi tanár, akadémikus
6. Biológia	6	Dr. Pecsenye Katalin	egyetemi docens
7. Műszaki	3	Dr. Szemes Péter Tamás	főiskolai docens
8. Nukleáris medicina	8	Dr. Balkay László	tudományos főmunkatárs
9. Biokémia	10	Dr. Fuxreiter Mónika	tudományos főmunkatárs
10. Orvostudomány	4	Dr. Hársfalvi Jolán	egyetemi docens
	65		

1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen

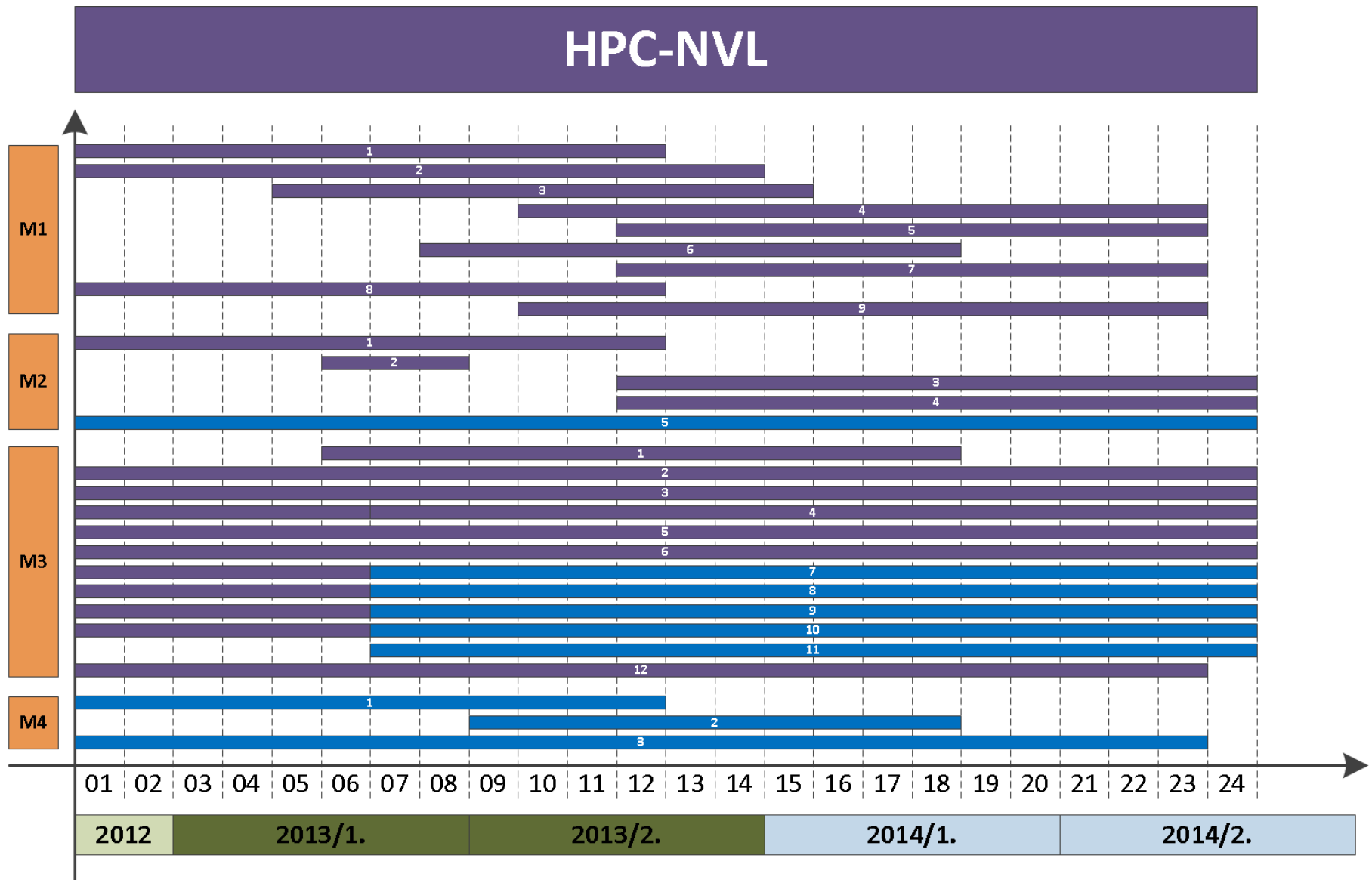
Eszközök: <http://hpctamop.niif.hu/>

The screenshot shows a web browser window displaying the 'hpctamop.niif.hu/debrecen/members' page. The browser's address bar shows the URL. The page has a yellow header with the text 'TÁMOP 4.2.2/C pályázat'. Below the header, there is a navigation bar with icons for 'Könyvtár', 'Minden felhasználó', 'Blokolt felhasználók', and 'Felhasználó létrehozása'. A 'Felhasználó létrehozása' button is also visible. The main content area displays a grid of user profiles, each with a small photo and a name. The profiles are arranged in four rows and four columns. The names and some details are as follows:

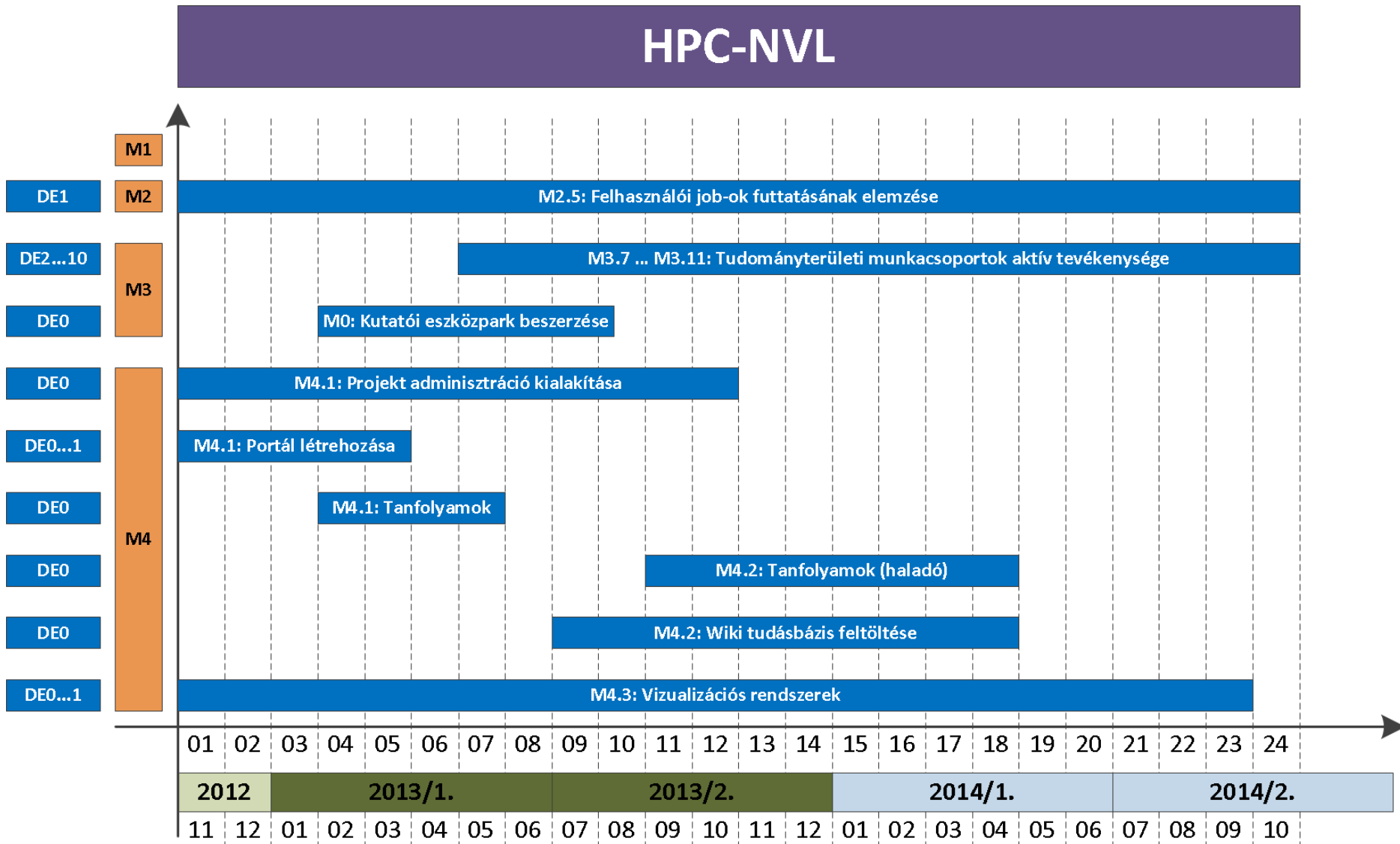
csiszarj	dombigy Dr. Dombi György	gilagy	
gyeheni Gyeviki Henrietta	hatvanics Hatvani Csaba	igaal	
ivanyip	Methos Müller László "Methos" adminisztrátor	rida	
sarkozij Sárközi Johanna	viskolczb Dr. Viskolcz Béla	zgal Dr. Gál Zoltán	

On the right side of the page, there is a section titled 'Létező felhasználó hozzáadása' (Add existing user). It contains a text input field labeled 'FELHASZNÁLÓNÉV:' and a button labeled 'Hozzáadás csoporthoz' (Add to group).

1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen

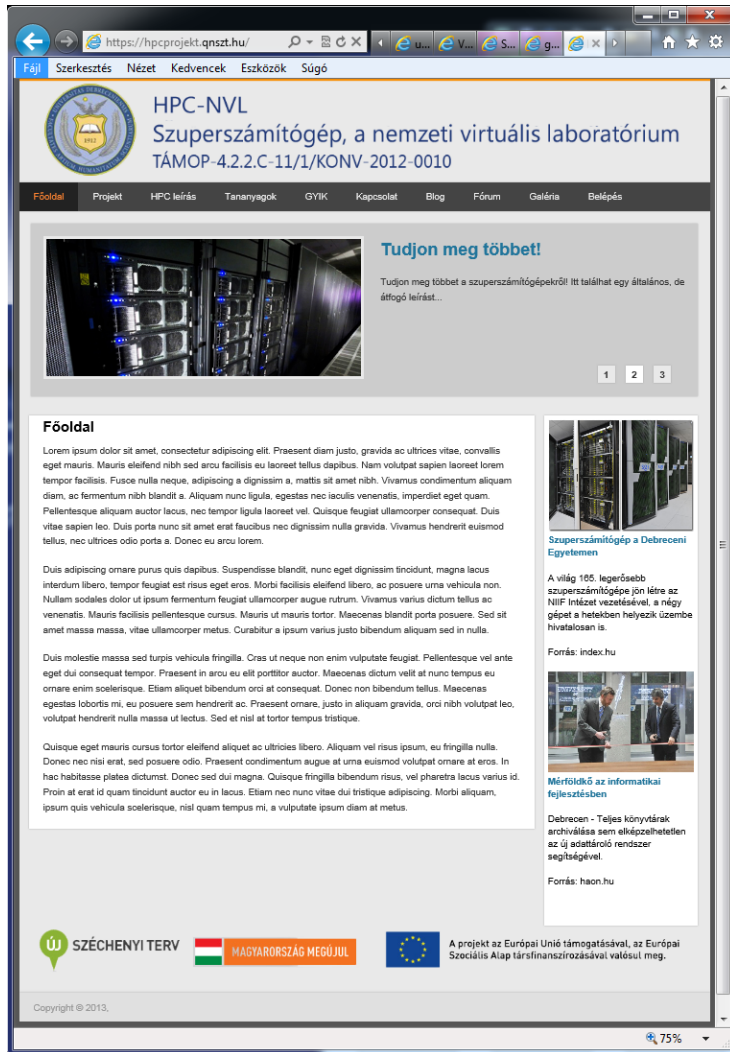


1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen



1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen

Szolgáltatás: <https://hpc-nvl.unideb.hu>



The screenshot shows the homepage of the HPC-NVL website. The header includes the university logo and the text "HPC-NVL Szuperszámítógép, a nemzeti virtuális laboratórium TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010". A navigation menu is located below the header. The main content area features a large image of server racks and a "Tudjon meg többet!" section. The footer contains logos for the Széchenyi Program, Hungary, and the European Union, along with project information and a copyright notice.



The screenshot shows the "Tananyagok" (Courses) page of the HPC-NVL website. The header is identical to the homepage. The main content area is titled "Tananyagok" and contains a table with the following data:

Dátum	Előadás címe	Előadó	Videó link
1. 2013.03.12.	Szuperszámítástechnika története	Dr. Stefán Péter Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Intézet	High, Middle, Low
2. 2013.03.19.	Overview and comparison of the SGI ICE and Ultra Violet HPC hardware architectures	Jiri Hlavac SGI, Co.	High, Middle, Low
3. 2013.03.22.	A HP által a SZTE-n és az NIIFI-nél telepített HPC rendszerek bemutatása	Varsányi András HP Magyarország Kft.	High, Middle, Low
4. 2013.04.02.	A Debreceni Egyetem Szuperszámítógép Központjának bemutatása	Dr. Gál Zoltán Debreceni Egyetem	High, Middle, Low
5. 2013.04.05.	PRACE, az EU kutatói HPC rendszere	Dr. Máray Tamás Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Intézet	High, Middle, Low
6. 2013.04.09.	Overview and usage of the SGI HPC softwares on the SGI ICE and SGI UV supercomputers	Dr. Rüdiger Wolff SGI, Co.	High, Middle, Low
7. 2013.04.16.	Hozzáférés a HPC-hez, kezdő lépések (előadás és demó)	Rőczei Gábor Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Intézet	High, Middle, Low
8. 2013.04.26.	A HPC felhasználás gyakorlati lépései (demó)	Dr. Gál Zoltán Debreceni Egyetem	High, Middle, Low

1. A projektmunka szervezése a Debreceni Egyetemen

Szolgáltatás: <https://hpc-nvl.unideb.hu>

- Jelszavas hozzáférés a portálhoz:
 - azonosító: “az ami a HPC-hez van”
 - jelszó:
 - első 5 karakter: **azono**sító@domain
“az az e-mail cím, ami a HPC-hez van megadva”
 - további 3 fix karakter: **.Hu**
 - 8 karakteres a jelszó: **azono.Hu**

2. Általános elérési címek és eszközök

Front-end gépek:

login.VÁROS.hpc.niif.hu

karakteres felület

vserver.VÁROS.hpc.niif.hu

grafikus gyorsító

Szolgáltató gép	Elérési cím
Debrecen HPC (MPP)	login.debrecen.hpc.niif.hu vserver.debrecen.hpc.niif.hu
Budapest HPC (Blade)	login.niif.hpc.niif.hu vserver.niif.hpc.niif.hu
Pécs HPC (SMP)	login.pecs.hpc.niif.hu vserver.pecs.hpc.niif.hu
Szeged HPC (Blade)	login.szeged.hpc.niif.hu vserver.szeged.hpc.niif.hu
HPC-re telepített szoftverek	http://www.niif.hu/hpc/szoftverek

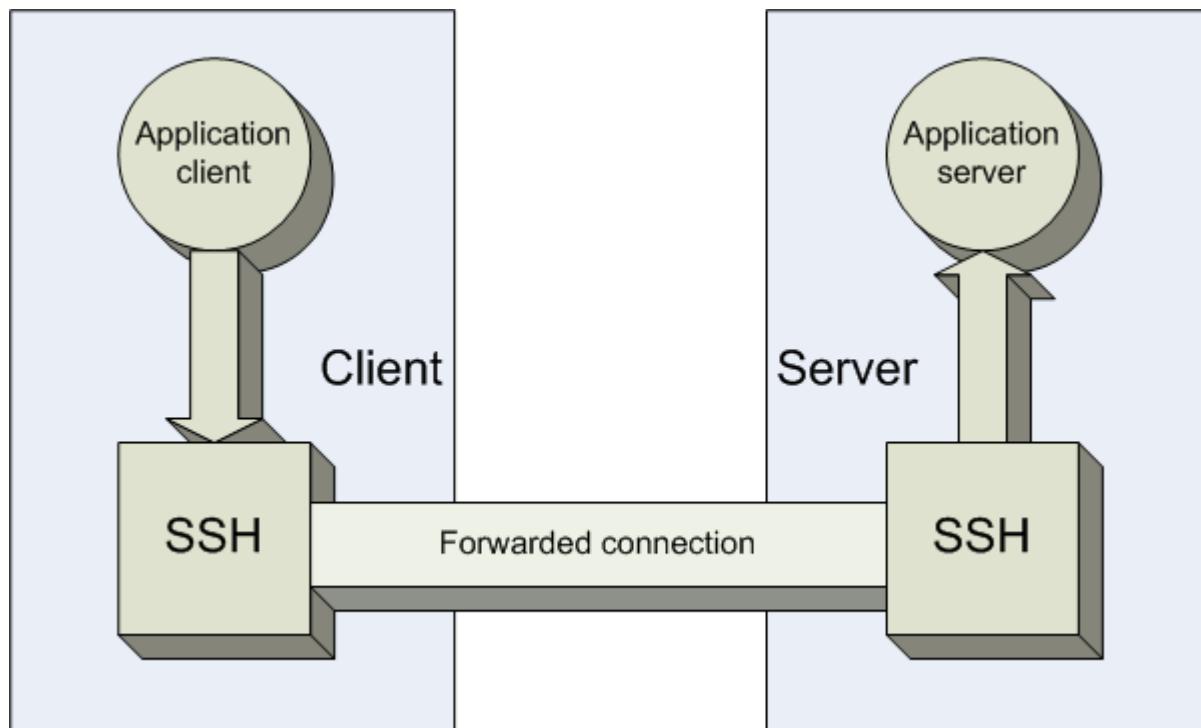
2. Általános elérési címek és eszközök

- Front-end gép: felhasználói hozzáférés
- Compute gép: felhasználói programot futtatása

Szolgáltatás	Szoftver eszköz neve
Távoli bejelentkezés (karakteres)	Linux: ssh Windows: putty
Távoli bejelentkezés (grafikus)	Linux: xterm Windows: Xming
Fájltvitel	Linux: scp Windows: WinSCP

2. Általános elérési címek és eszközök

- Privát kulcs: titkos, csak a tulajdonos ismeri!
- Publikus kulcs: a szolgáltató (is) ismeri
- Titkosított csatorna a felhasználó és a szolgáltató között: SSH
- A privát és a publikus kulcs egy párt képez és együtt szükségesek



2. Általános elérési címek és eszközök

- A privát és a publikus kulcs egy párt képez és együtt szükségesek
- Kulcspár generálás:

http://www.niif.hu/szolgáltatások/szuperszámítástechnika/ssh_kulcs_generálás

- Linux: `% ssh-keygen -t rsa` parancs
- Windows: `c:\> puttygen.exe` grafikus program

```
----- BEGIN SSH2 PUBLIC KEY -----  
Comment: "rsa-key-20111021"  
AAAAB3NzaC1yc2EAAAABJQAAAQBN3l+IMa  
BfJrRUQvUBf+STz9kxK5/Hxb1OfHNPiY2k  
qmha17ZFpJZZ6j5IadKnuS4jsI48xZz01b  
fpJovu+I1g0Q13kbG5EiduWA4+ADewZhkJ  
jH3mfX7Tf2kySLuCi37zxGtn4oXo9VuKj0  
fr6e7uEmrAj1c2EoSq4b4r0R1Ni2ZxLFpb  
----- END SSH2 PUBLIC KEY -----
```

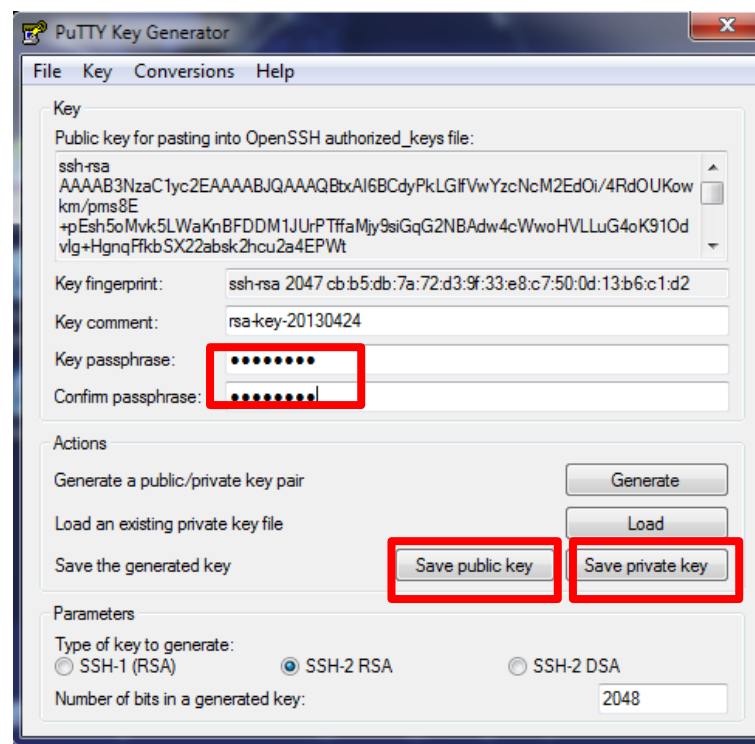
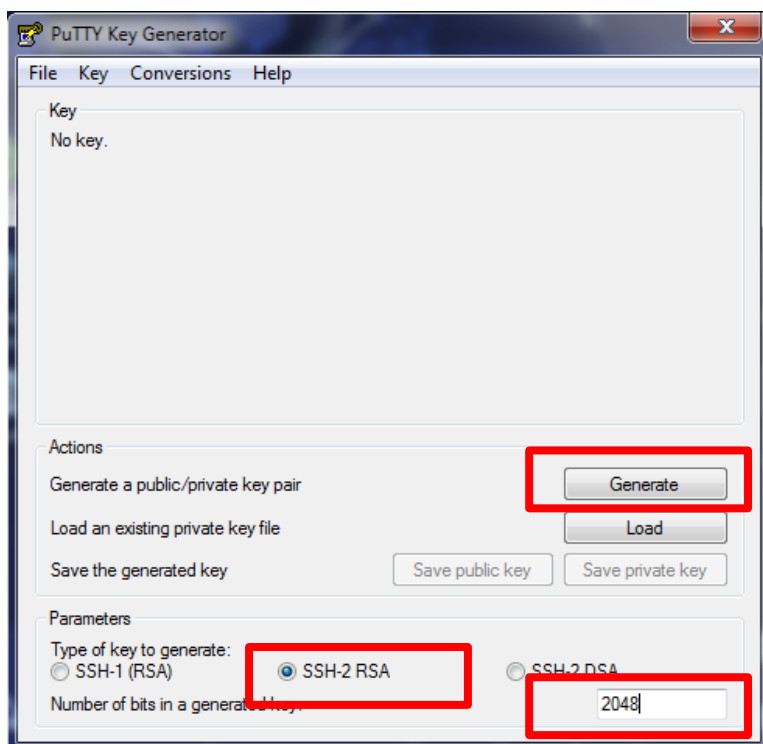
```
PUTTY-User-Key-File-2: ssh-rsa  
Encryption: aes256-ctr  
Comment: rsa-key-20111021  
Public-Lines: 6  
AAAAB3NzaC1yc2EAAAABJQAAAQBN3l+IMa  
BfJrRUQvUBf+STz9kxK5/Hxb1OfHNPiY2k  
qmha17ZFpJZZ6j5IadKnuS4jsI48xZz01b  
fpJovu+I1g0Q13kbG5EiduWA4+ADewZhkJ  
jH3mfX7Tf2kySLuCi37zxGtn4oXo9VuKj0  
fr6e7uEmrAj1c2EoSq4b4r0R1Ni2ZxLFpb  
Private-Lines: 14  
2ftyIXgrXPQiis/wXjmaFoN9L8tv06Hod  
pXJzyhFPDr0QmPvfnGN0WzbiP6EDx+blc  
iJUBpqwedyU86Jqs75HDocBFH8M0+bgbl  
A0BaGzd8MeLEmGHI7nfVLRrIB53zz8Fy0  
ayAoS5FD0q9XM+TNqzJBjs8xhAnj5JniH  
d4D0YuNvezaaHi4a8gEHEnniw6H88QJT  
K6CsW6EFwFiBkTTTTx1F64CwhQnMkZdIO  
k93LLr+pMUp5kwXkccj5PJHgKCOh/7/Vs  
dJz0NFgk0c8I6pa47hNW1SNLpvXwSz+z  
/1/wQuX7UdR1N4khKgiV/y1T9wtsIS1d0  
da1ISshE1k1XEfpSI1o/DiNJMdYTZd49  
nS1/d0pkjg026Gz4X2DVfsj1p4MmZFru  
5UCgE2XmHax5T5js00gN1N32uTebf5K2I  
SU28CYpH9CH8J/qyp4w4q+n1m5qlajDs-  
Private-MAC: 7e6e08792ce67e4f66d5
```

2. Általános elérési címek és eszközök

- Kulcspár generálás (Windows):

<http://the.earth.li/~sgtatham/putty/latest/x86/puttygen.exe>

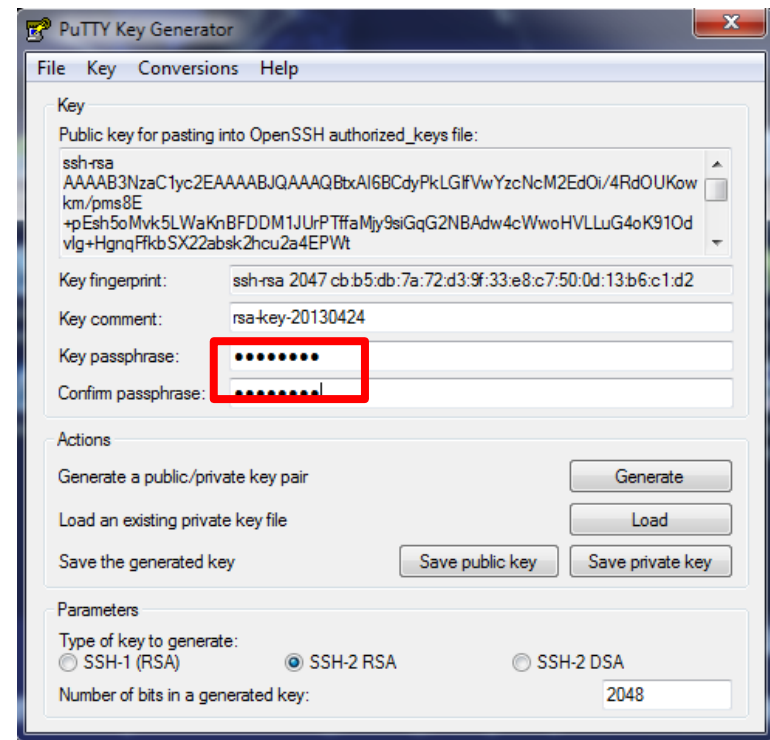
- a **puttygen.exe** program letöltődik és automatikusan indul



- Generált fájlok: **user_pub.ppk** és **user_pri.ppk**

2. Általános elérési címek és eszközök

- Privát kulcs: titkos, csak a tulajdonos ismeri! **user_pri.ppk**
 - **Key passphrase** (titkos kulcs titkosítása), **meg kell jegyezni!**
 - ha nem használunk “Key passphrase”-t, akkor a kapcsolat automatikus
- Publikus kulcs: a szolgáltató (is) ismeri **user_pub.ppk**
- Csak ezt juttatjuk el az NIIFI-hez!



3. Távoli bejelentkezés a HPC gépbe

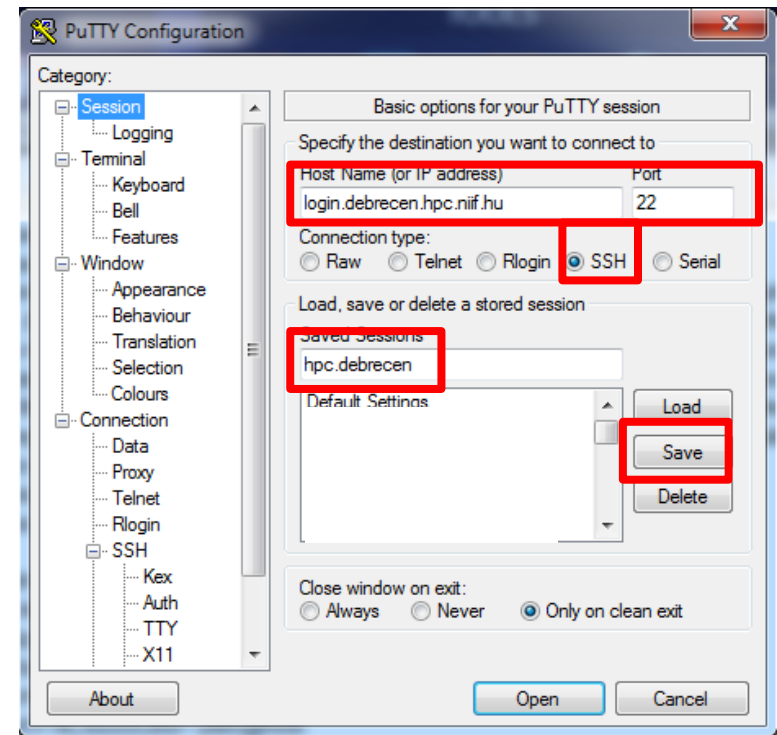
- **Putty.exe** program letöltése és konfigurálása

<http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/download.html>

- a **putty.exe** program letöltő oldala:!

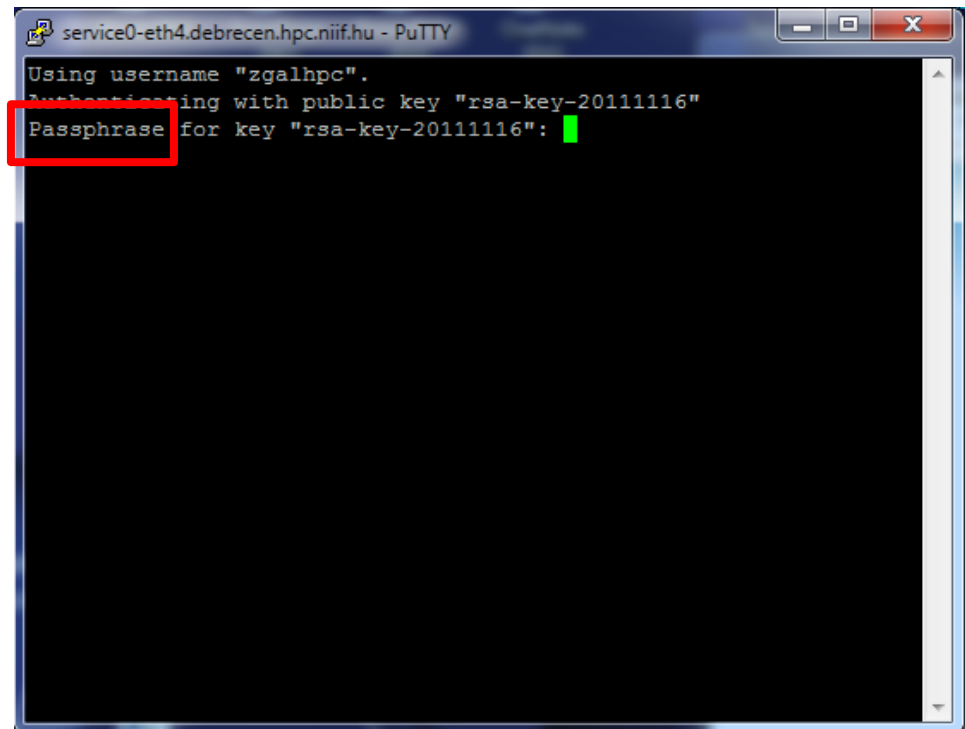
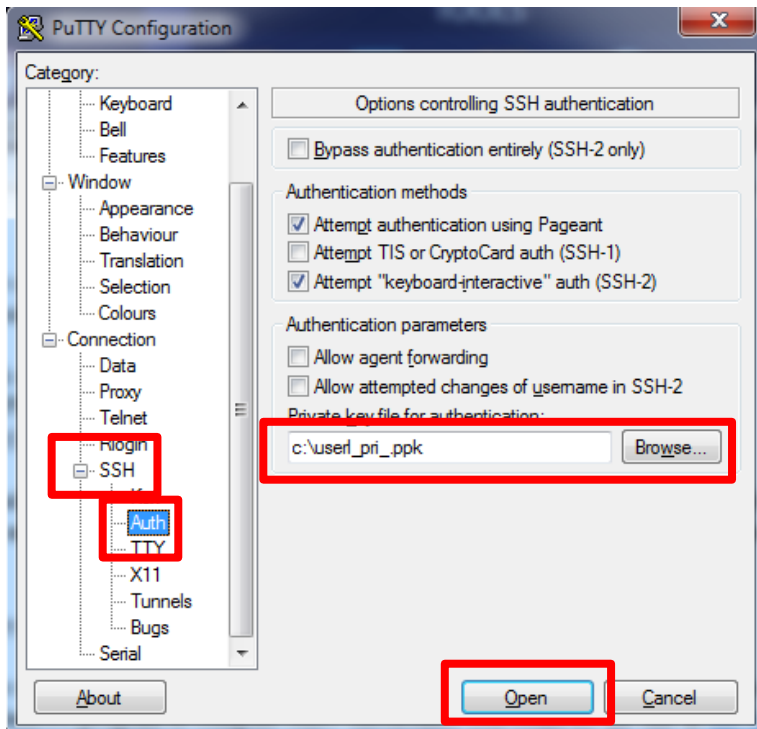
For Windows on ~~Intel~~ x86

PuTTY:	putty.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)
PuTTYtel:	puttytel.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)
PSCP:	pscp.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)
PSFTP:	psftp.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)
Plink:	plink.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)
Pageant:	pageant.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)
PuTTYgen:	puttygen.exe	(or by FTP)	(RSA sig)	(DSA sig)



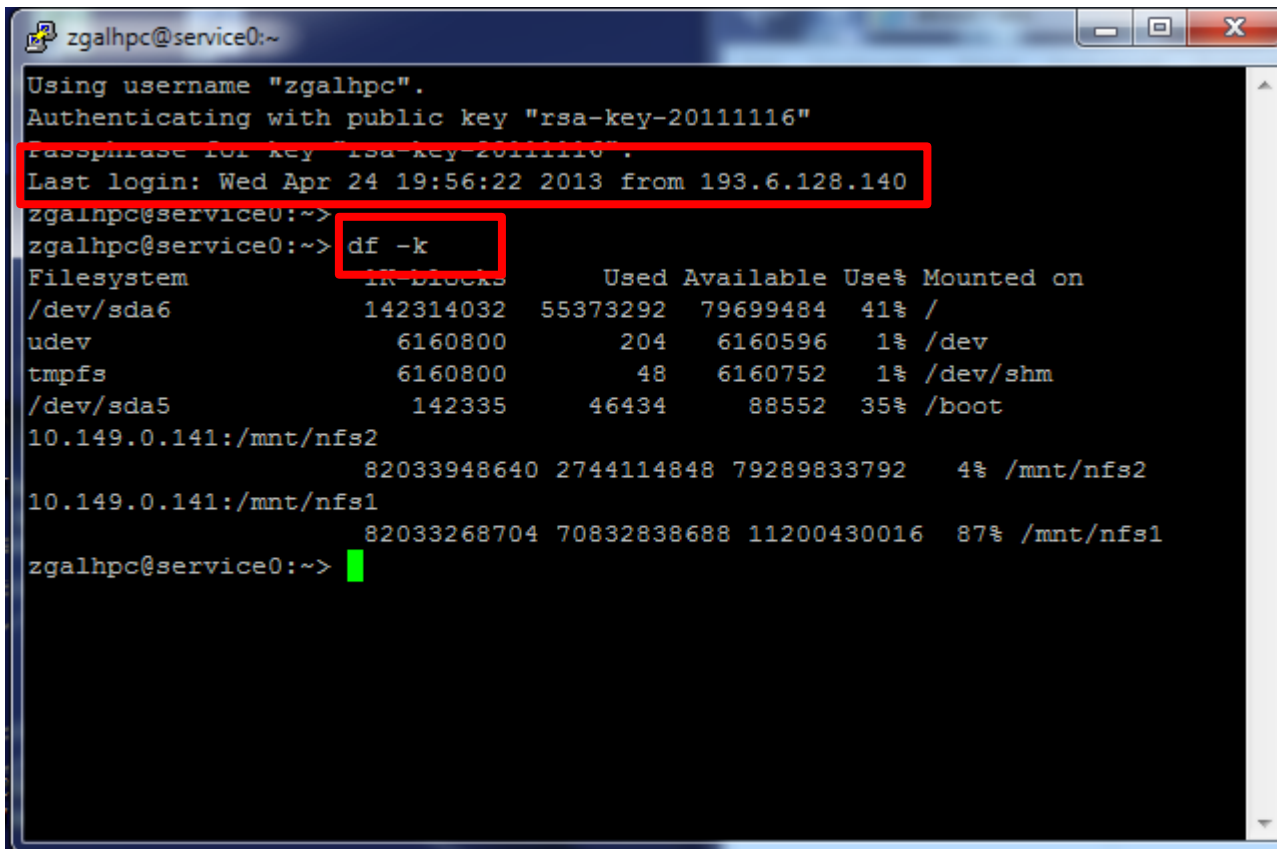
3. Távoli bejelentkezés a HPC gépbe

- **Putty.exe** program letöltése és konfigurálása
 - megadjuk a helyi gépen lévő privát kulcs elérési útvonalát
 - belépéshez megadjuk a “Key passphrase” jelszót



3. Távoli bejelentkezés a HPC gépbe

- **Putty.exe** programmal belépés
 - Unix parancsértelmező: pl. diszk terület lekérdezése



```
zgalhpc@service0:~  
Using username "zgalhpc".  
Authenticating with public key "rsa-key-20111116"  
Passphrase for key "rsa-key-20111116":  
Last login: Wed Apr 24 19:56:22 2013 from 193.6.128.140  
zgalhpc@service0:~>  
zgalhpc@service0:~> df -k  
Filesystem            Inodes      Used Available Use% Mounted on  
/dev/sda6             142314032   55373292  79699484   41% /  
udev                  6160800     204      6160596    1% /dev  
tmpfs                 6160800     48      6160752    1% /dev/shm  
/dev/sda5             142335      46434    88552      35% /boot  
10.149.0.141:/mnt/nfs2  
82033948640 2744114848 79289833792    4% /mnt/nfs2  
10.149.0.141:/mnt/nfs1  
82033268704 70832838688 11200430016   87% /mnt/nfs1  
zgalhpc@service0:~>
```


4. Adatmozgatás a helyi gép és a HPC gép között

- Titkosított adatátviteli kapcsolat: SCP - Secure Copy Protocol
- WinSCP program letöltése

<http://winscp.net/eng/download.php>

Downloading WinSCP

WinSCP 5.1.4

Installation package (4.8 MiB; 595,882 downloads to date)

Portable executables (3.7 MiB; 131,715 downloads to date)

.NET assembly / COM library (0.1 MiB; 8,476 downloads to date)

Source code (4.3 MiB; 5,102 downloads to date)

[\[Release Notes, Checksums\]](#) [\[What's New\]](#) [\[Release Notifications\]](#)

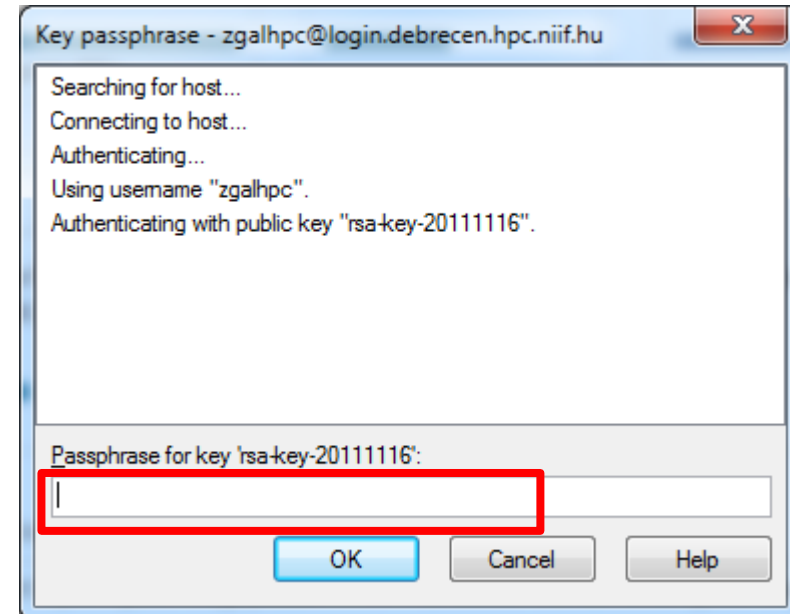
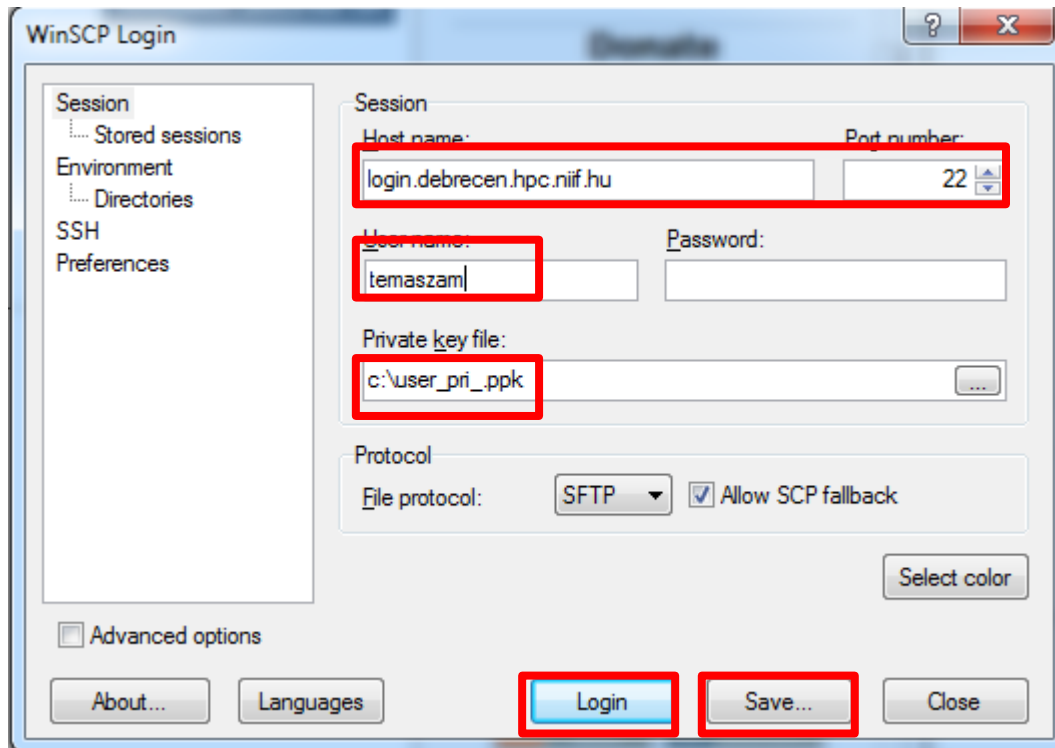
Advertisements

4. Adatmozgatás a helyi gép és a HPC gép között

- WinSCP program konfigurálása és indítása

<http://winscp.net/eng/download.php>

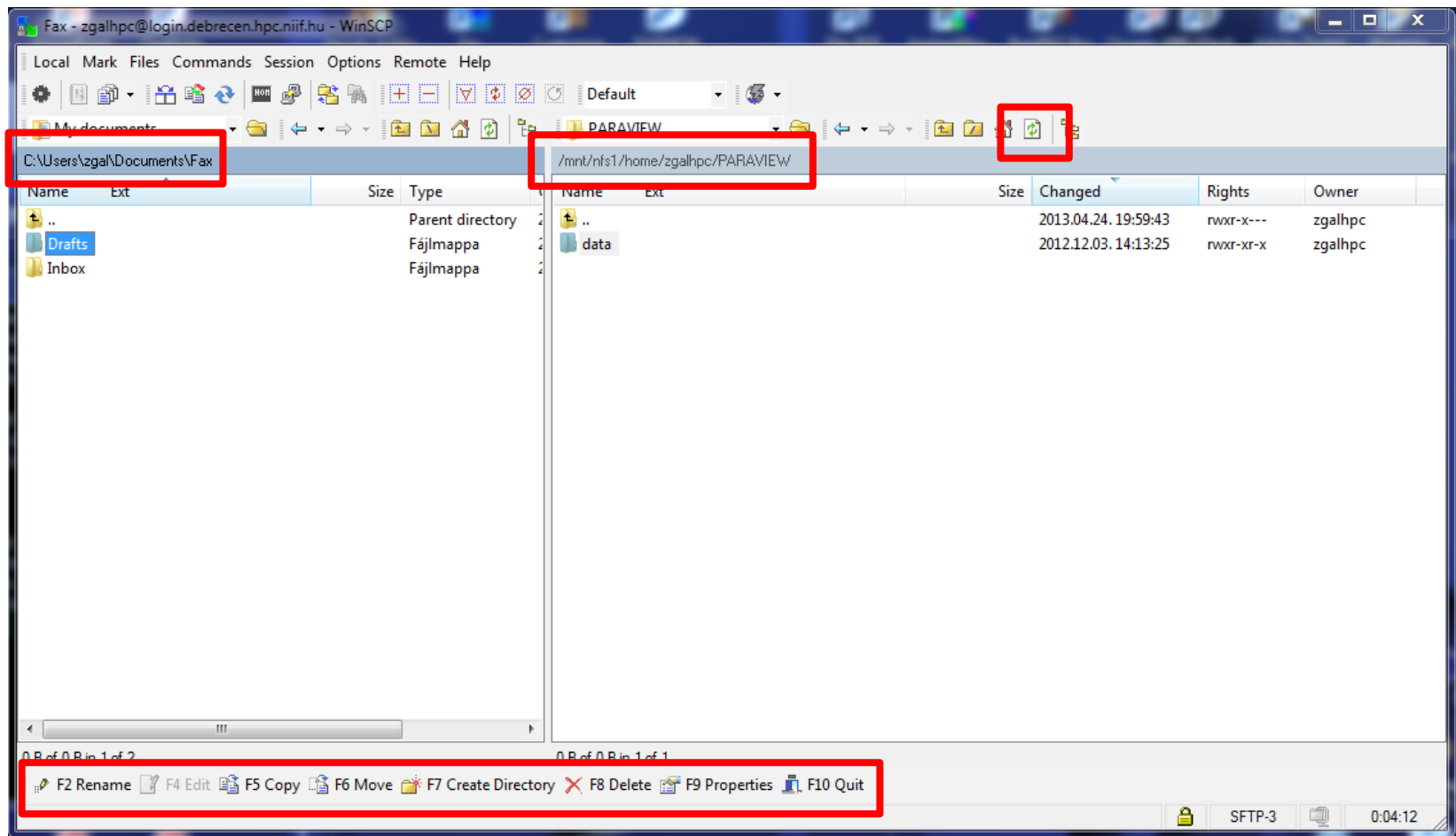
- saját HPC **témaszám** és **“Key Passphrase”** szükséges



4. Adatmozgatás a helyi gép és a HPC gép között

- WinSCP program konfigurálása és indítása

<http://winscp.net/eng/download.php>



5. Programok futtatása a HPC gépen

- Hasznos UNIX/Linux alap parancsok (sok opció létezik)

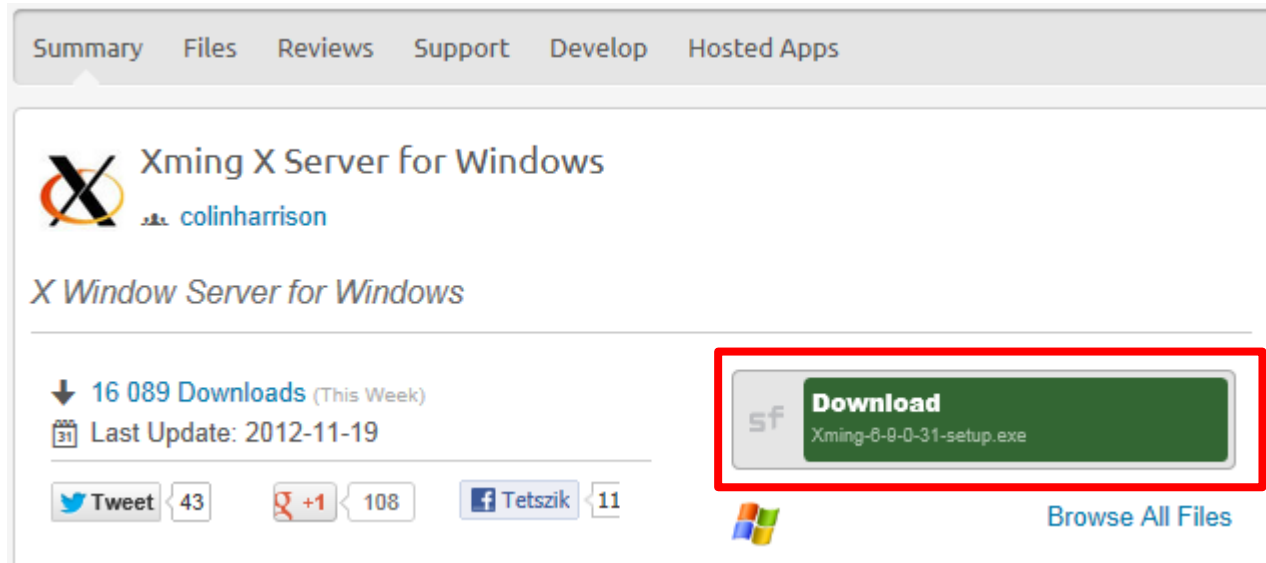
Parancs	Tevékenység
user@service0:~> ls user@service0:~> ls -als	Fájlok nevének listázása Fájlok részletes paramétereinek listázása
user@service0:~> cp <i>forrás cél</i>	Másolás <i>forrás</i> fájlt <i>cél</i> néven
user@service0:~> rm <i>fájlnev</i>	<i>fájlnev</i> nevű állomány törlése
user@service0:~> md <i>könyvtárnév</i>	<i>könyvtárnév</i> nevű alkönyvtár létrehozása
user@service0:~> rd <i>könyvtárnév</i>	<i>könyvtárnév</i> nevű alkönyvtár törlése
user@service0:~> cd <i>könyvtárnév</i>	Váltás <i>könyvtárnév</i> -re
user@service0:~> head <i>fájlnev</i>	<i>fájlnev</i> nevű állomány eleje
user@service0:~> tail <i>fájlnev</i>	<i>fájlnev</i> nevű állomány vége
user@service0:~> vi <i>fájlnev</i>	<i>fájlnev</i> nevű állomány editálása
user@service0:~> man <i>parancs</i>	Help a <i>parancs</i> -ről
user@service0:~> mc	Egyszerű, hasznos fájlkezelő

5. Programok futtatása a HPC gépen


- Grafikus program futtatása
 - X-Windows (X11)
 - X szerver program a PC-n fut
 - X kliens a HPC front-end szerveren fut (pl. xterm)
 - X11 paraméterek beállítása szükséges a putty.exe-nél
 - X szervert kell telepíteni a PC-re (Windows esetén)
 - X szervert nem kell telepíteni PC-re (Linux esetén)
 - VNC (TurboVNC)
 - vserver (99 darab párhuzamos grafikus gyorsító mindegyik PHC városban)
 - TurboVNC klienst kell telepíteni a PC-re (Windows és Linux esetén egyaránt)

5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- X-Windows szerver telepítése (csak Windows) PC-re: **Xming**
<http://sourceforge.net/projects/xming/>







Summary Files Reviews Support Develop Hosted Apps


 Xming X Server for Windows
by colinharrison

X Window Server for Windows

↓ 16 089 Downloads (This Week)
Last Update: 2012-11-19

 Tweet 43  +1 108  Tetszik 11

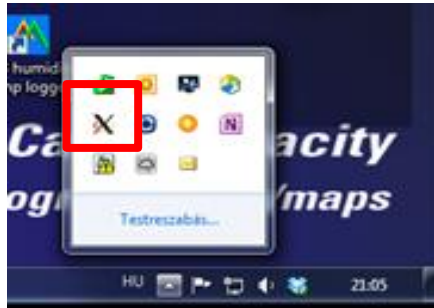
 **Download**
Xming-8-9-0-31-setup.exe

 [Browse All Files](#)



5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- X-Windows szerver telepítése (csak Windows) PC-re: **Xming**

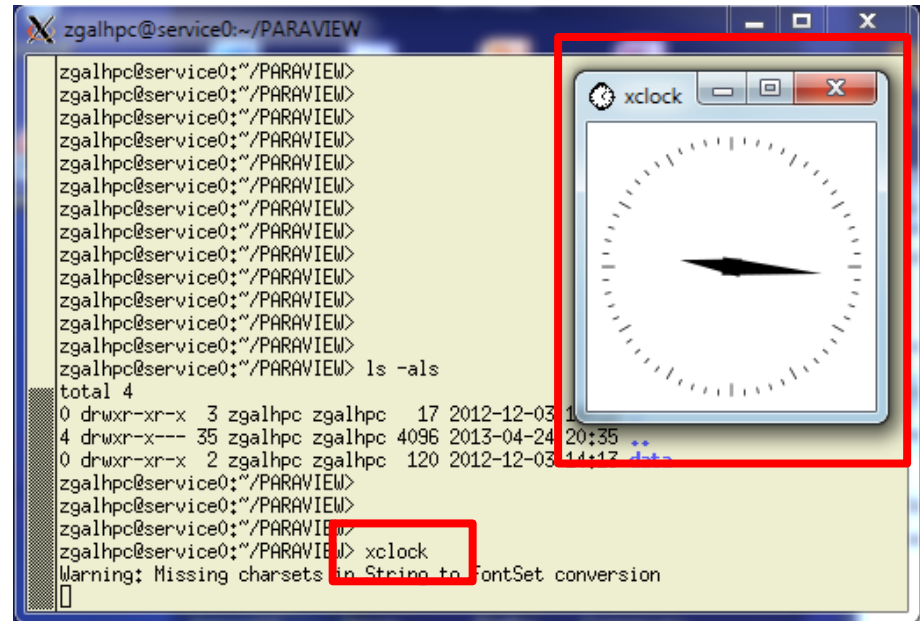
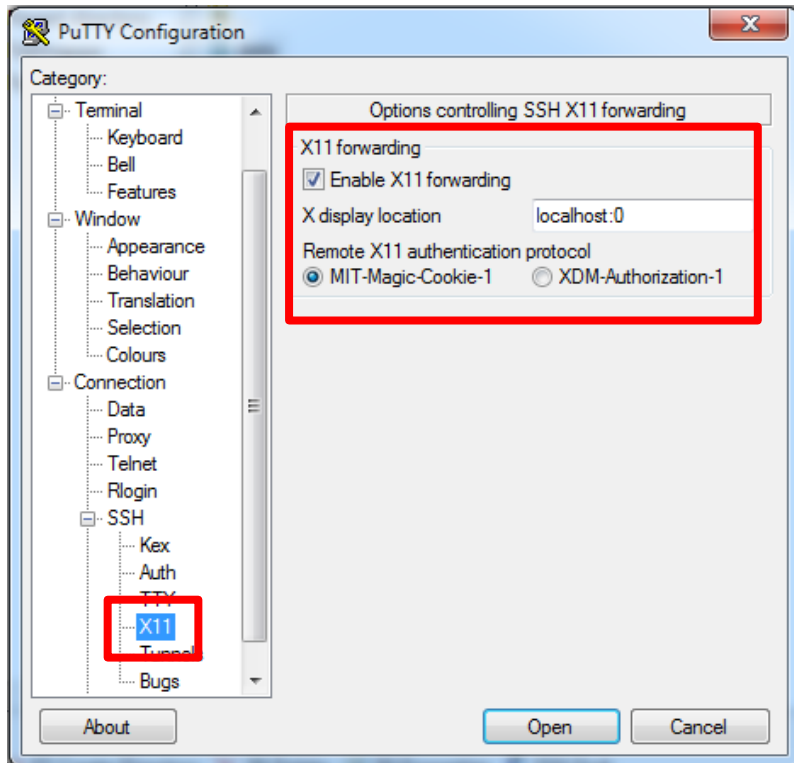


```
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$  
zgalhpc@service0:~$ xterm &  
[3] 29329  
zgalhpc@service0:~$ Warning: Cannot convert string "nil2" to type FontStruct  
xterm: unable to open font "-misc-fixed-medium-r-semicondensed-*-13-120-75-  
75-c-60-iso10646-1", trying "fixed"....  
[1] Done xterm  
[3]+ Done xterm  
zgalhpc@service0:~$ xterm &  
[3] 29373
```

```
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW> ls -als  
total 4  
0 drwxr-xr-x 3 zgalhpc zgalhpc 17 2012-12-03 14:13 .  
4 drwxr-x--- 35 zgalhpc zgalhpc 4096 2013-04-24 20:35 ..  
0 drwxr-xr-x 2 zgalhpc zgalhpc 120 2012-12-03 14:13 data  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>  
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
```

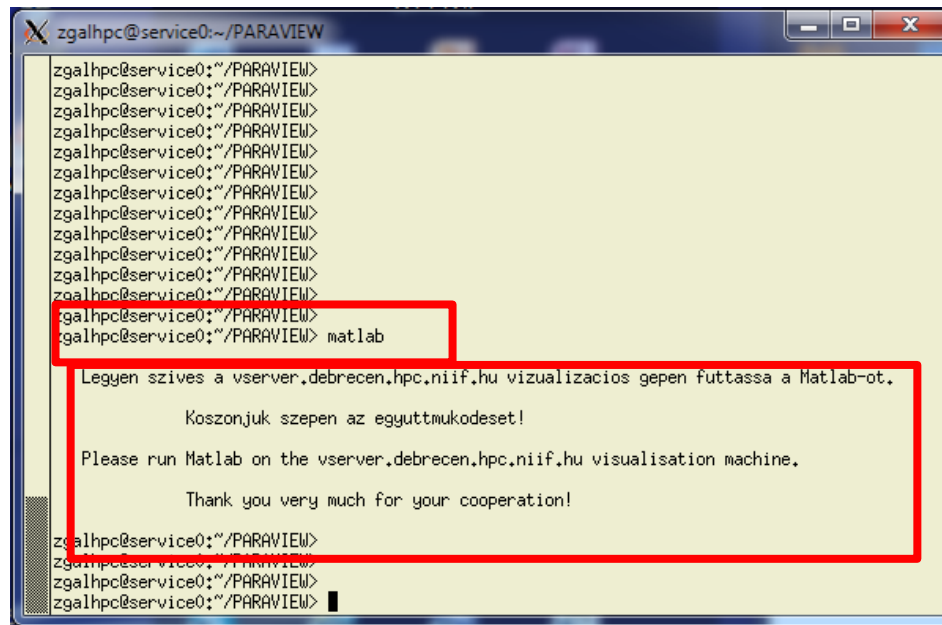
5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- X-Windows szerver telepítése (csak Windows) PC-re: **Xming**
- Xming indítás után a putty.exe programnál speciális beállítás szükséges a kapcsolódáshoz



5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- A grafikus rendszerek (pl. Matlab) futtatása csak grafikus gyorsító mellett lehetséges (pl. vserver.debrecen.hpc.niif.hu)



```
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW> matlab
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
zgalhpc@service0:~/PARAVIEW>
```

Legyen szives a vserver.debrecen.hpc.niif.hu vizualizacios gepen futtassa a Matlab-ot.

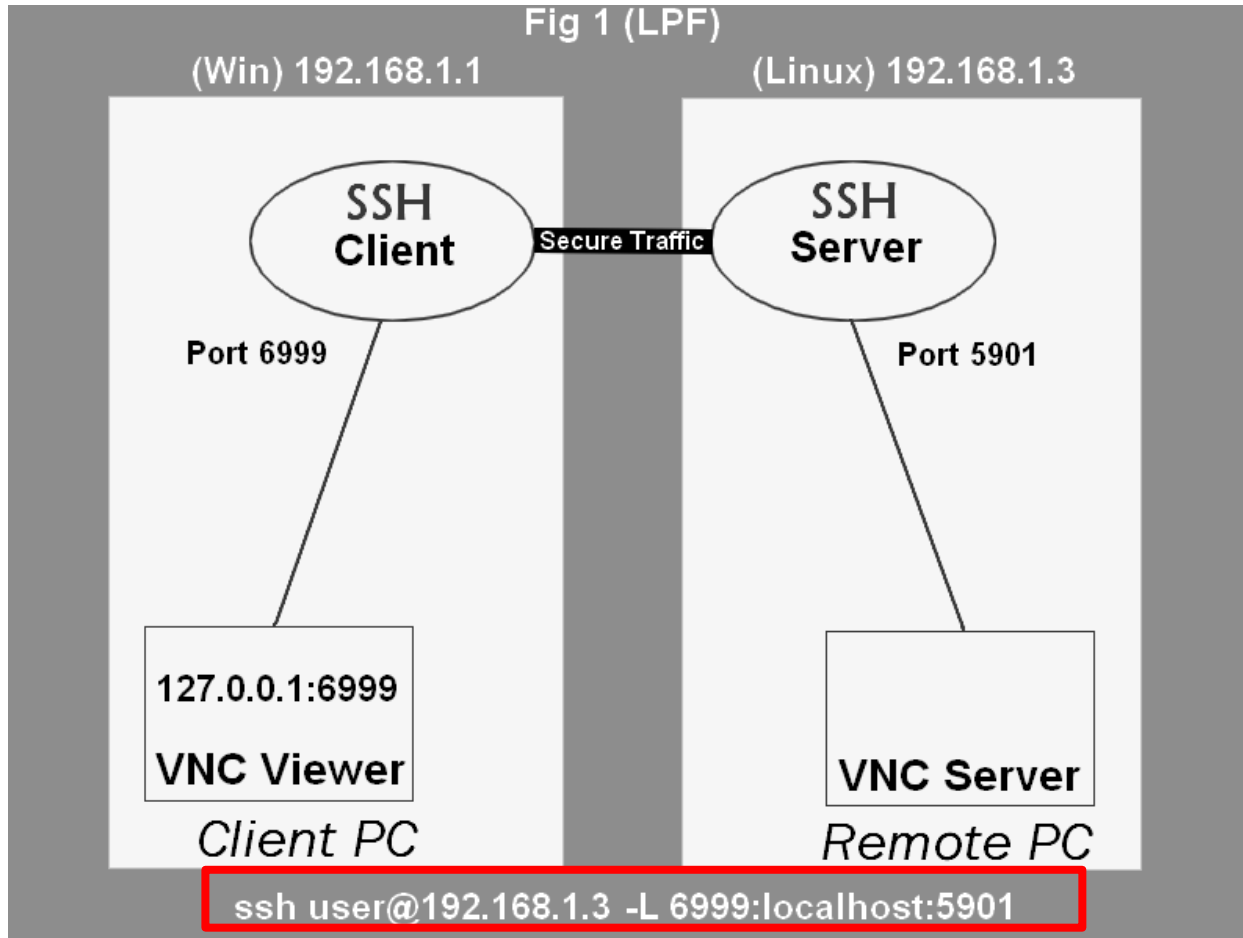
Koszonjuk szepen az egyuttmukodeset!

Please run Matlab on the vserver.debrecen.hpc.niif.hu visualisation machine.

Thank you very much for your cooperation!

5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- Port átirányítás SSH-val



5. Programok futtatása a HPC gépen

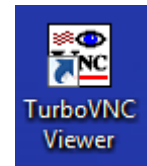
- Grafikus program futtatása
- Grafikus gyorsítós program telepítése PC-re: **TurboVNC Viewer**
<http://www.virtualgl.org/Downloads/TurboVNC>

Summary Files Reviews Support Develop Tracker Mailing Lists Forums Code

Looking for the latest version? [Download TurboVNC-1.1.95.exe \(1.8 MB\)](#)

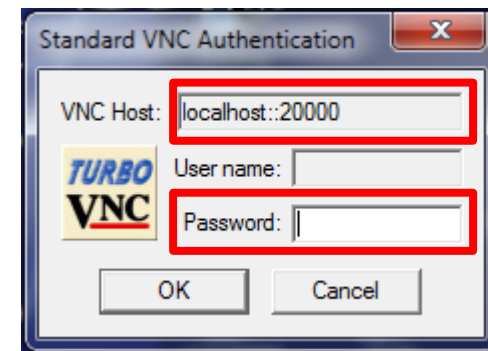
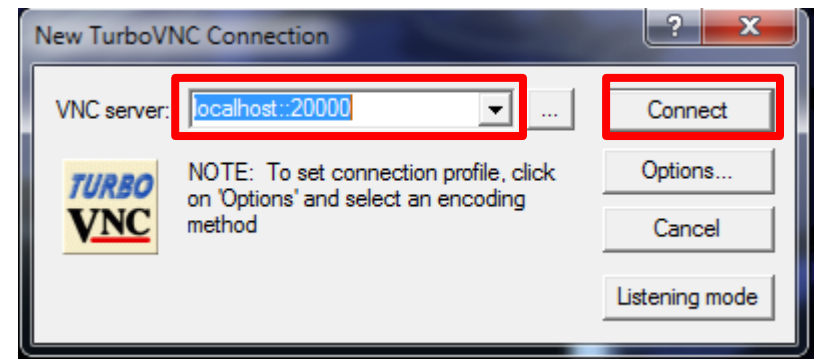
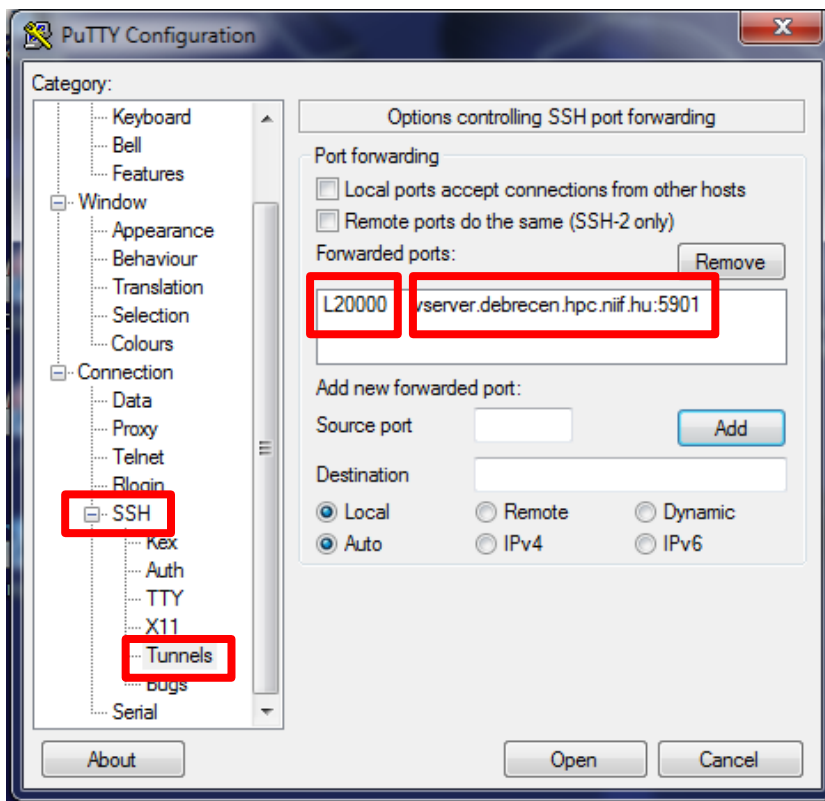
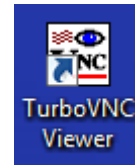
Home / TurboVNC

Name ▾	Modified ▾	Size ▾	Downloads ▾
↑ Parent folder			
1.1.95 (1.2rc)	2013-03-25		
1.1.90 (1.2beta1)	2013-02-20		
1.1	2012-05-24		



5. Programok futtatása a HPC gépen

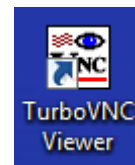
- Grafikus program futtatása
- Kapcsolódás **TurboVNC Viewer** programmal
- TurboVNC Viewer program indítása a PC-n



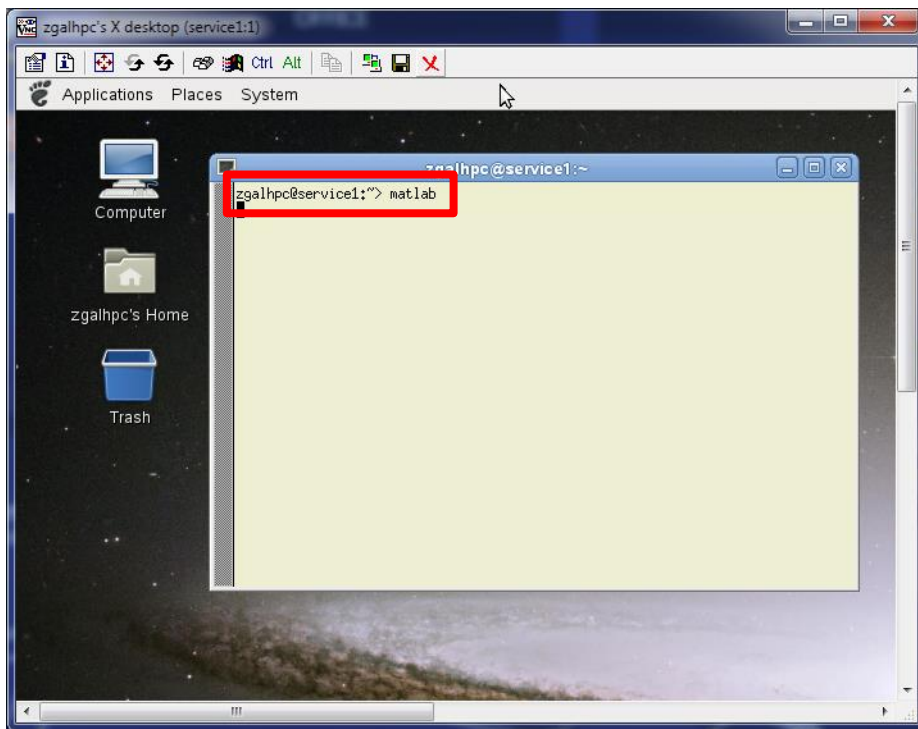
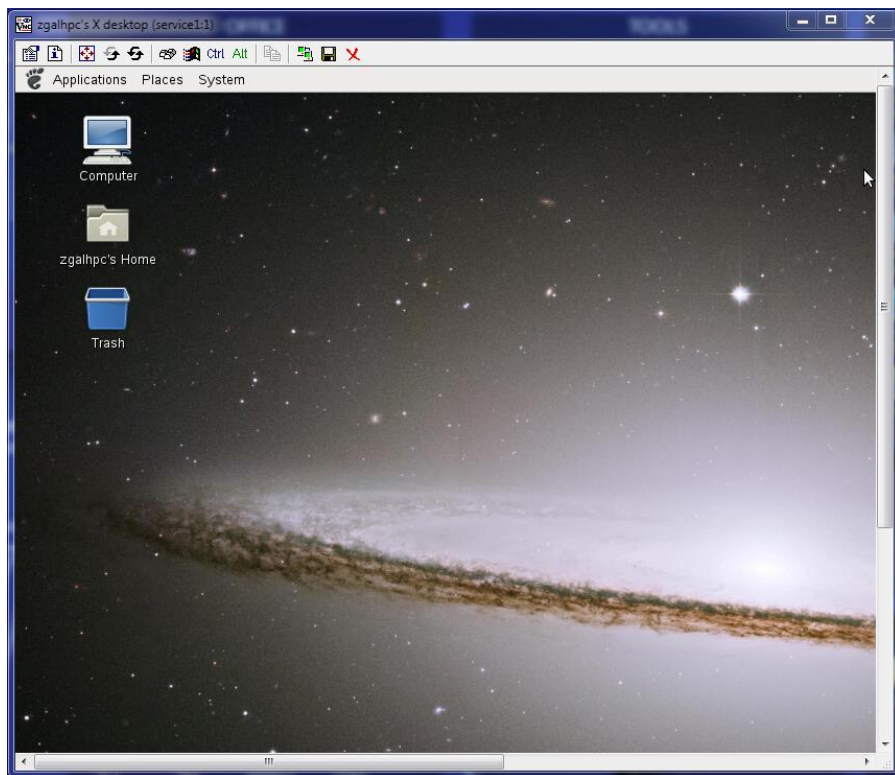
Jelszó: saját, ami a vncserver-nél volt

5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- Kapcsolódás **TurboVNC Viewer** programmal



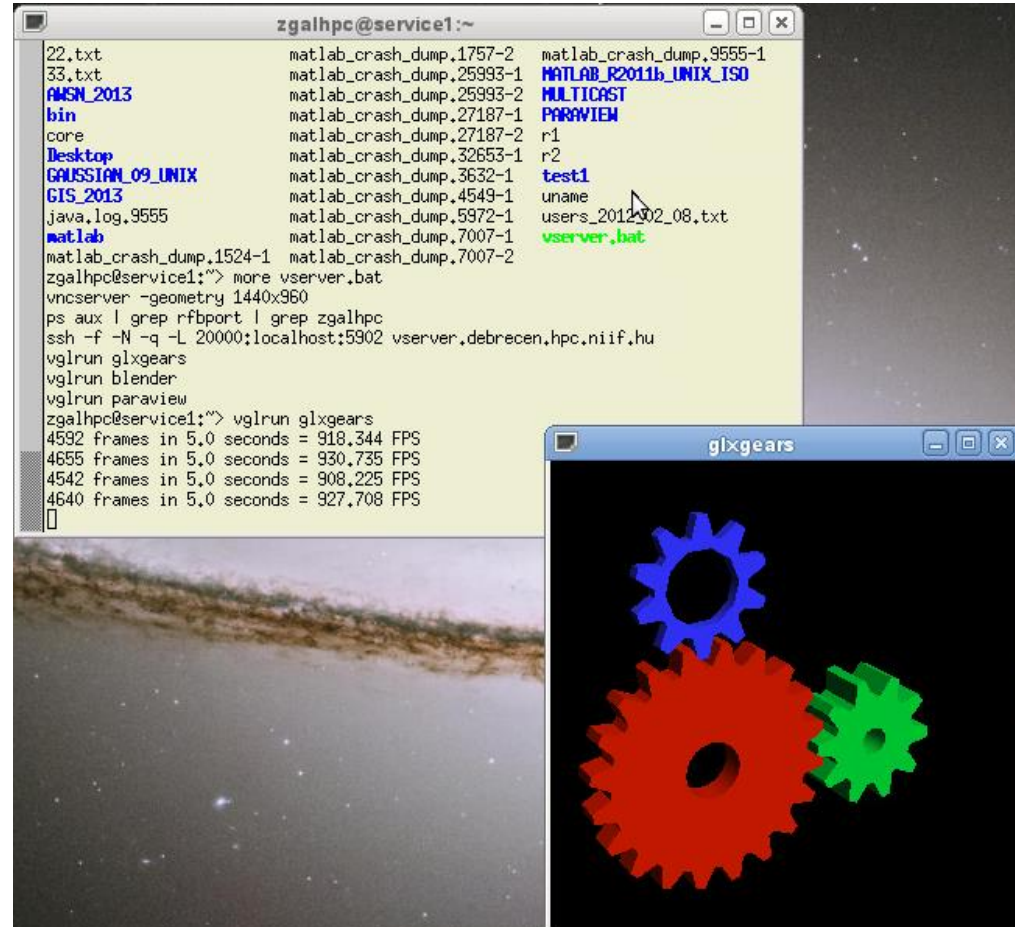
Applications -> System -> Terminal -> XTerm



5. Programok futtatása a HPC gépen

- Grafikus program futtatása
- Unix/Linux parancsok használata grafikus felületről (Xterm)
- Grafikus gyorsító használata:

vglrun glxgears



6. HPC szoftverek

HPC-re telepített szoftverek, alkalmazások és függvénykönyvtárak

<http://www.niif.hu/hpc/szoftverek>

Szoftver komponens	Debrecen	Pécs	Szeged	Budapest
1. Fejlesztő környezet (fordító, debugger, profiler)				
AMD fordítók (opencc, openf90, openf95) Matematikai könyvtár: ACML HP-s gépeken (Budapest , Szeged) ezt ajánlott használni				4.2.4
GDB		7		7.0.1
GNU fordítók (gcc, g++, gfortran)	4.3	4.1.2		4.1.2, 4.4.4
Gprof		2.2		2.17
Intel fordítók (icc, ifort) Matematikai könyvtár: Intel MKL MKL linkeléssel kapcsolatos weblap SGI-s gépeken (Debrecen , Pécs) ezt ajánlott használni	12.1.5 (composerxe-2011 Update 11)	12.1.5 (composerxe-2011 Update 11)		-
Oprofile				0.9.4

6. HPC szoftverek

HPC-re telepített szoftverek, alkalmazások és függvénykönyvtárak

<http://www.niif.hu/hpc/szoftverek>

Szoftver komponens	Debrecen	Pécs	Szeged	Budapest
2. Párhuzamosításhoz felhasználható függvénykönyvtárak				
LAM-MPI	-		7.1.2	
MPICH2	1.4		1.2	
OpenMP	2.5 (GNU), 3.0 (Intel)		2.5 (GNU), 2.5 (AMD)	
OpenMPI	1.4.2	1.3.2	1.4.3	
PVM	3.4.5			
SGI-MPI (MPT)	2.04		-	

6. HPC szoftverek

HPC-re telepített szoftverek, alkalmazások és függvénykönyvtárak

<http://www.niif.hu/hpc/szoftverek>

Szoftver komponens	Debrecen	Pécs	Szeged	Budapest
3. Tudományos számításokhoz felhasználható függvénykönyvtárak				
Atlas	3.8.3			
BLACS	1.1 (OpenMPI, MPICH2)			
BLAS	3.2.2		3	
Boost	1.36		1.33	
FFTW	3.1.2		3.2.2	
Gromacs	4.5.4		4.5.5	
GUILE	1.8.5		-	
HDF5	1.8.7		-	
Lapack	3.2.2		3	
Maple	-		15	
Matlab	7.13.0 (R2011b)		-	
NumPy	1.3		1.5.1	
Octave	3.4		3.0.5	
Qt	3.3.8b, 4.6.2		3.3.6	
R	2.8.1		-	
Scalapack	1.7.5			
Scilab	5.3.2		-	
Sun JRE	1.6		-	
Gaussian	-	09_REV_C.01		-

6. HPC szoftverek

HPC-re telepített szoftverek, alkalmazások és függvénykönyvtárak

<http://www.niif.hu/hpc/szoftverek>

Szoftver komponens	Debrecen	Pécs	Szeged	Budapest
4. Köztesrétegek				
ARC grid köztesréteg	1.0.1 (A-REX, ARIS, MGMT, kliensek)		1.1.1 (A-REX, ARIS, kliensek)	
5. Egyéb szoftverek				
Emacs	22.3		21.4	
GNU Plot	4.2.3		4	
ImageMagick	6.4.3		6.2.8	
Turbo VNC	1.1			
Blender	2.49		-	
VirtualGL	2.3.2		-	
Paraview	3.14.1		-	

6. HPC szoftverek

HPC-re telepített szoftverek, alkalmazások és függvénykönyvtárak

- Egyéni felhasználói licenszeket igénylő alkalmazásokat (például: [VASP](#), [CPMD](#), stb.) egy belső NIIF policy miatt központilag nem telepítenek.
- Ezeket minden felhasználónak saját magának kell lefordítania. Ezen a levelezőlistán nyújtanak felhasználói támogatást az alkalmazások lefordításához: hpc-forum@listserv.niif.hu
- Feliratkozni ezen a címen lehet: <https://listserv.niif.hu/mailman/listinfo/hpc-forum>



Köszönöm a figyelmüket!