* 编译器

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 编译器 | 软件信息 | |
| GNU编译器 | 软件版本 | 4.8.5 |
| 安装路径 | /usr |
| 调用方式 | C: gcc c++: g++ F77: gfortran F90: gfortran |
| GNU编译器 | 软件版本 | 7.3.1 |
| 安装路径 | /opt/rh/devtoolset-7/root/usr |
| 调用方式 | C: gcc c++: g++ F77: gfortran F90: gfortran |
| intel-2017 | 软件版本 | 2017.5.239 |
| 安装路径 | /public/software/compiler/intel/intel-compiler-2017.5.239 |
| 调用方式 | C: icc c++: icpc F77: ifort F90: ifort |

* MPI

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 软件名称 | MPI | |
| Intel MPI | 说明 | **Intelmpi（推荐）** |
| 软件版本 | Intelmpi 2017.4.239 |
| 安装路径 | /public/software/mpi/intelmpi/2017.4.239 |
| 环境变量配置文件 | module load mpi/intelmpi/2017.4.23 |
| openmpi | 说明 | openmpi |
| 软件版本 | 4.0.2 |
| 安装路径 | /opt/hpc/software/mpi/openmpi/4.0.2/gcc-7.3.1 |
| 环境变量配置文件 | module load mpi/openmpi/4.0.2/gcc-7.3.1 |
| openmpi | 说明 | hpcx openmpi |
| 软件版本 | hpcx-2.4.1 |
| 安装路径 | /opt/hpc/software/mpi/openmpi/4.0.2/gcc-7.3.1 |
| 环境变量配置文件 | module load mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1 |

* 数学库

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 软件名称 | 软件信息 | |
| Intel MKL | 说明 | Intel MKL，包含BLAS、LAPACK、FFT、ScaLAPACK、BLACS等 |
| 软件版本 | Intel Compiler 2017.5.239自带版本 |
| 安装路径 | /public/software/compiler/intel/intel-compiler-2017.5.239/mkl/lib |
| 环境变量配置文件 | /etc/profile.d/mklvarsem64t.sh |
| 调用方式 | ifort/icc ... -L/ /public/software/compiler/intel/intel-compiler-2017.5.239/mkl/lib/intel64/ -lmkl\_intel\_lp64 -lmkl\_sequential -lmkl\_core |
| FFTW3-float | 说明 | FFTW单精度库 |
| 软件版本 | 3.3.4 |
| 安装路径 | /public/software/mathlib/fftw/intelmpi/3.3.4\_float |
| 环境变量配置文件 | /public/software/profile.d/mathlib\_fftw-intelmpi-3.3.4\_float.sh |
| FFTW3-double | 说明 | FFTW双精度库 |
| 软件版本 | 3.3.7 |
| 安装路径 | /public/software/mathlib/fftw/intelmpi/3.3.7\_double |
| 环境变量配置文件 | /public/software/profile.d/mathlib\_fftw-intelmpi-3.3.7\_double.sh |
| hpcx | 说明 | hpcx |
| 软件版本 | 2.4.1 |
| 安装路径 | /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.4.1 |
| 环境变量配置文件 | module load mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1-dcudirect mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1-internal-pmix mpi/hpcx/2.4.1/intel-2017.5.239等 |
| hpc包 | 说明 | blas/ fftw/ hdf5/ jasper/ libpng/ netcdf/ zlib/ |
| 软件版本 | 2.4.1 |
| 安装路径 | /opt/hpc/software/mathlib |
| 环境变量配置文件 |  |

* 应用

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 软件名称 | 软件信息 | |
| Cmake | 说明 |  |
| 软件版本 | 3.15.4 |
| 安装路径 | /public/software/apps/cmake-3.15.4 |
| 环境变量配置文件 |  |
| 调用方式 | /public/software/apps/cmake-3.15.4/bin/cmake |
| gromacs | 说明 | gromacs |
| 软件版本 | 2018.3/4.5.6 |
| 安装路径 | /public/software/apps/gromacs/2018.3 /public/software/apps/gromacs/4.5.6 |
| 环境依赖 | compiler/intel/2017.5.239 mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1 mathlib/fftw/intelmpi/3.3.7\_double |
| lammps | 说明 | lammps |
| 软件版本 | 3-Mar-20 |
| 安装路径 | /public/software/apps/lammps-3Mar20 |
| 环境变量配置文件 | mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1 |
| vasp | 说明 | vasp |
| 软件版本 | 5.4.4 |
| 安装路径 | /public/software/apps/vasp.5.4.4-intelmpi |
| 环境变量配置文件 | compiler/intel/intel-compiler-2017.5.239 mpi/intelmpi/2017.4.239 |
| CMAQ | 说明 | CMAQ |
| 软件版本 |  |
| 安装路径 | 用户自编 |
| 环境变量配置文件 |  |
| WRF | 说明 | WRF |
| 软件版本 |  |
| 安装路径 | 测试集群安装 |
| 环境变量配置文件 |  |

slurm作业脚本参考~/slurm\_template下脚本