

HPC-MARWAN : Liste des applications

Nom	Domaine	Description
Quantum ESPRESSO	Chimie	suite intégrée de codes permettant des calculs de structures électroniques, ainsi que des matériaux à échelle nanométrique.
AutoDock Vina	Chimie	Logiciel de docking moléculaire.
GROMACS	Chimie	Logiciel de simulation de la dynamique moléculaire.
blastn	BioInformatique	Outil de recherche dans une base de données de nucléotides en utilisant une requête de nucléotides.
SPAdes	BioInformatique	Logiciel d'assemblage de génome
MetaPhlan	BioInformatique	Outil informatique permettant de déterminer la composition de communautés microbiennes à partir de données de séquençage métagénomique.
SCILAB	Mathématique	Logiciel libre de calcul numérique multi-plateforme fournissant un environnement de calcul pour les applications scientifiques.
FFTW	Mathématique	Logiciel de résolution d'équations aux dérivées partielles par la méthode des éléments finis.
GEANT4	Physique	Plateforme logiciel pour la simulation du passage de particules à travers la matière, utilisée dans les domaines de la physique des hautes énergies, physique nucléaire, sciences médicale et sciences des matériaux
GATE	Sciences de la vie	Logiciel open source dédié à la simulation numérique de l'imagerie médicale et radiothérapie.
R	Générique	Logiciel libre destiné aux statistiques et à la science des données
GCC	Générique	GNU Compiler Collection, ensemble de compilateurs pour divers langages de programmation, dont C, C++, Objective-C, Java, Ada et Fortran.
ROOT	Générique	Une bibliothèque logicielle de programmation orientée objet développée par le CERN. Il a été à l'origine conçu pour l'analyse des données en physique des particules et contient plusieurs fonctions spécifiques à cette discipline, mais il possède d'autres applications, notamment en astronomie et en exploration de données.
Intel® Parallel Studio XE	Générique	Suite de compilateurs C/C++ et Fortran et leurs bibliothèques pour maximiser la performance des processeurs INTEL.
CUDA toolkit	Générique	Architecture de traitement parallèle développée par NVIDIA permettant de décupler les performances de calcul du système en exploitant la puissance des processeurs graphiques (GPU).
Anaconda	Générique	Plateforme de gestion de paquets en Open source, d'environnement et de distribution des langages de programmation R et Python.