

---

## Novas aplicacións instaladas

- Actualizado (07.12.2005)

Xa están a disposición dos usuarios do CESGA novas aplicacións: ARB MrBayes, R8S, EMAM, GMP, NAMD, CVS, FFTW, GRADS LAMMPS, NCARG, NETCDF.

### ARB (Nova instalación no hpc320)

ARB é un paquete gráfico que comprende varias ferramentas para o manexo de bases de datos de secuencias e análise de datos. En concreto, crea a árbore filoxenética dunha base de datos de secuencias procesadas (aliñadas) e calquera tipo de dato adicional relacionado coas mesmas.

Máis información pódese encontrar en: <http://www.arb-home.de>

A versión 2.5b desta aplicación encóntrase instalada no hpc320 ([sc.cesga.es](http://sc.cesga.es)) no directorio: `/opt/cesga/arb`

É necesario fixar a variable de ambiente ARBHOME a: `/opt/cesga/arb` co comando: `export ARBHOME=/opt/cesga/arb` e modificar a variable de contorno PATH para que inclúa a localización do arb co comando: `export PATH=$PATH:$ARBHOME/bin`

### MrBayes (Nova instalación no Superdome)

MrBayes é un programa para a estimación Bayesiana de filoxenese baseada nunha técnica de simulación chamada Markov chain Monte Carlo (ou MCMC).

O programa toma como entrada unha matriz de caracteres nun ficheiro en formato NEXUS. A saída son varios ficheiros cos parámetros que foron mostreados polo algoritmo MCMC xunto a un resumo desta información.

Máis información sobre este programa pode encontrarse en: <http://mrbayes.csit.fsu.edu/index.php>

Este programa encóntrase instalado no Superdome ([sd.cesga.es](http://sd.cesga.es)) no directorio: `/opt/cesga/mrbay`

USO: Hai dispoñible unha versión en serie e unha paralela en MPI.

Para a execución en serie: `/opt/cesga/mrbay/bin/mb [file.nex]`

Para a execución da versión paralela recoméndase o uso do seguinte comando: `mpirun -np nprocessors /opt/cesga/mrbay/bin/mb.mpi file.nex`

onde:

`nprocessors` : número procesadores a utilizar

`file.nex` : ficheiro con formato NEXUS que inclúe ademais os comandos de MrBayes a executar.

### R8S (Nova instalación no Superdome e no SVG)

---

Programa de análise de velocidades de evolución e tempos de diverxencia de árbores filoxenéticas.

Este programa le ficheiros en formato "NEXUS" (ASCII), o estándar usado por PAUP, MacClade, Component e algúns outros programas de análise filoxenética.

Pódese encontrar máis información así como o manual para o seu uso en: <http://ginger.ucdavis.edu/r8s>

A versión 1.7 deste programa encóntrase instalada no Superdome ([sd.cesga.es](http://sd.cesga.es)) e no SVG ([svgd.cesga.es](http://svgd.cesga.es)) no directorio: `/opt/cesga/r8s`

USO: Este programa pode executarse tanto en "batch" como en interactivo:

Interactivo (por defecto): `/opt/cesga/r8s/bin/r8s -f datafile`

Este comando le o ficheiro de datos e presenta un "prompt" á espera de comandos. "q" ou "quit" finalizar? o programa.

En batch: `/opt/cesga/r8s/bin/r8s -b -f datafile > outfile`

Este comando executará os comandos no ficheiro de datos, salvará a saída no ficheiro outfile e volverá ao "prompt" do sistema operativo.

## EMAM (Nova instalación no SVG)

EMAN é un paquete de software completo para a construción de modelos 3D desde un conxunto de imaxes de partículas orientadas aleatoriamente. Esta técnica úsase tipicamente xunto imaxes de moléculas individuais obtidas usando criomicroscopía electrónica. Esta técnica é capaz de determinar estruturas de partículas con resolución subnanométrica nun rango de 10-1000 nm.

A parte fundamental de EMAN é a librería científica de procesamentos de imaxes adecuada para o seu uso en Python. EMAN tamén incorpora un número de ferramentas para o "Docking" de estruturas cristalinas (procedentes de difracción de raios X) en mapas de densidade de baixa resolución.

Máis información pódese encontrar en: <http://ncmi.bcm.tmc.edu/homes/stevel/EMAN>

EMAN é un paquete de software completo para a construción de modelos 3D desde un conxunto de imaxes de partículas orientadas aleatoriamente. Esta técnica úsase tipicamente xunto imaxes de moléculas individuais obtidas usando criomicroscopía electrónica. Esta técnica é capaz de determinar estruturas de partículas con resolución subnanométrica nun rango de 10-1000 nm. A parte fundamental de EMAN é a librería científica de procesamentos de imaxes adecuada para o seu uso en Python. EMAN tamén incorpora un número de ferramentas para o "Docking" de estruturas cristalinas (procedentes de difracción de raios X) en mapas de densidade de baixa resolución. Máis información pódese encontrar en: <http://ncmi.bcm.tmc.edu/homes/stevel/EMAN>  
A versión 1.7 desta aplicación encóntrase instalada no SVG ([svgd.cesga.es](http://svgd.cesga.es)) no directorio: `/opt/cesga/eman`

Para o seu uso é necesario a execución do seguinte comando: `source /opt/cesga/eman/eman.bashrc`

NOTA: Actualmente só a versión serie deste programa está operativa aínda que se está a traballar na versión paralela deste programa.

## GMP (Nova instalación no Superdome)

---

GMP é unha librería gratuíta en C/C++ para aritmética de precisión arbitraria capaz de operar con enteiros con signo, números racionais e números de coma flotante. Non hai un límite práctico na precisión exceptuando o derivado da memoria dispoñible na máquina onde GMP se executa. GMP presenta un rico conxunto de funcións todas elas cun interface regular.

As principais aplicacións nas que GMP pode ser usada son criptografía, seguridade en internet, investigación en algebra computacional, etc.

GMP foi deseñada coidadosamente para ser o máis rápida posible independentemente do tamaño dos operandos. A velocidade é conseguida usando palabras decatas como tipo aritmético básico, algoritmos rápidos e códigos altamente optimizados en ensamblador.

GMP é a librería "bignum" máis rápida actualmente o cal se reflicte sobre todo cando se incrementa o tamaño do operando xa que GMP usa algoritmos máis rápidos asintoticamente.

Máis información sobre esta librería pódese encontrar en: <http://www.swox.com/gmp>

Esta librería encóntrase instalada no Superdome ([sd.cesga.es](http://sd.cesga.es)) e no SVG ([svgd.cesga.es](http://svgd.cesga.es)):

Directorio instalación Versión  
Superdome /opt/cesga/gmp 4.1.4  
SVG Propia do sistema 4.1.2

No Superdome o directorio de instalación presenta a seguinte árbore:

/opt/cesga/gmp/include Directorio dos ficheiros include  
/opt/cesga/gmp/lib/hpux32 Versión de 32bits  
/opt/cesga/gmp/lib/hpux64 Versión de 64bits

Nota: GMP no Superdome foi compilada cos compiladores nativos de HP co que se recomenda o uso destes nas aplicacións con GMP.

NAMD (Nova instalación no hpc320)

NAMD é un código de dinámica molecular paralelo deseñado para conseguir un alto rendemento na simulación de grandes sistemas biomoleculares.

A súa programación está baseada en obxectos paralelos Charm++ (<http://charm.cs.uiuc.edu>) e escala ata centos de procesadores en plataformas paralelas de alto rendemento e ata decenas de procesadores en clusters comúns con gigabit ethernet.

NAMD utiliza o popular programa de gráficos moleculares VMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd>) para a posta a punto da simulación así como para a análise das traxectorias, pero tamén é compatible con AMBER, CHARMM, e X-PLOR.

Para máis información sobre esta aplicación así como acceder a FAQs e tutoriais on-line consultar: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd>

NAMD (versión 2.6b1) actualmente só está dispoñible no HPC320 ([sc.cesga.es](http://sc.cesga.es)) no directorio: /opt/cesga/NAMD e a súa utilización só require fixar a variable de contorno PATH adecuadamente mediante o comando: export

---

PATH=/opt/cesga/NAMD/Tru64-Alpha-MPI-CC:\$PATH

CVS (Nova instalación no Superdome)

Concurrent Versions System é o sistema de control de versións dominante na actualidade non desenvolvemento software no comercial.

Permite tanto a xestión do software de pequenos proxectos individuais como grandes proxectos distribuídos entre moitas localizacións, grazas a súa arquitectura cliente-servidor. Permite o acceso ao código dende calquera parte a través de Internet, evitando conflitos non desenvolvemento de software. CVS é empregado por coñecidos proxectos de código aberto como Mociña, GIMP, XEmacs, KDE, e GNOME.

Usuarios pontenciais: Todo tipo de usuarios de computación que desenvolvan programas ou macros para outros programas e necesiten unha xestión eficiente do código, tanto de forma individual como en colaboracións internacionais.

Máis Información: <http://www.cvshome.org/>

Instalada a versión 1.1.20 de CVS no Supedome (sd.cesga.es), no directorio: /opt/cesga/cvs-1.11.20

USO: Executar:

/opt/cesga/cvs-1.11.20/bin/cvs-1.11.20-HP [cvs-options] command [command-options-and-arguments]

Especificar --help para ver unha lista das opcións e comandos

FFTW (Nova instalación no Superdome, o HPC320 e o SVG)

FFTW é unha librería de subrutinas C para calcular a transformada discreta de Fourier (DFT) nunha ou máis dimensións, de tamaño arbitrario, tanto para datos reais como complexos.

Ademais, por ser gratuito, cremos que será a librería FFT que escollan a maioría das aplicacións.

Segundo algunhas probas realizadas polo fabricante en varias plataformas, o rendemento de FFTW é xeralmente superior ao doutras librerías ou software para calcular a FFT, e é competitivo coas de pagamento. Ademais FFTW é portable: o mesmo programa pódese executar en moitas arquitecturas sen modificación.

A versión 3.0.1 desta librería encóntrase instalada no Superdome (sd.cesga.es), no SVG (svgd.cesga.es) e no HPC320 (sc.cesga.es), nas tres máquinas no directorio: /opt/cesga/fftw-3.0.1

USO: Para utilizar esta librería debe incluírse no código fonte o ficheiro: /opt/cesga/fftw-3.0.1/include/fftw3.h (ou fftw3.f dependendo da linguaxe de programación do noso código)

O programa debe ser linkado coa librería libfftw3.a (-lfftw3) que se encontra no seguinte directorio (para engadir coa opción -L)

Directorio librería:

---

Superdome /opt/cesga/fftw-3.0.1/lib (32 bits)  
Superdome /opt/cesga/fftw-3.0.1/fftw3-64/lib (64 bits)  
SVG e HPC320 /opt/cesga/fftw-3.0.1/lib

## GRADS (Nova instalación no SVG)

GrADS, Grid Analyse and Display System, é unha ferramenta interactiva usada para acceder, manipular e visualizar datos de Ciencias da Terra. Acepta datos en diferentes formatos: binarios, GRIB, NetCDF ou HDF-SDS (Scientific Data Sets).

GrADS usa un contorno 4D: lonxitude, latitude, nivel vertical e tempo. Interpreta datos maiados regulais, espaciados de forma non linear, gaussianos ou de resolución variable. Vos datos de diferentes fontes decoten ser superpostos, ca información espacial e temporal correcta. Permite ademais diferentes sistemas de visualización: gráficos de líñas e varras, contornos suavizados, vectores de vento, etc. Inclúe ademais unha linguaxe de script para realizar anais máis sofisticados, que engaden funcionalidades suficientes para facer anais en batch.

Máis Información: <http://grads.iges.org/grads/>

A versión 1.8sl11 instalouse no SVG ([svgd.cesga.es](http://svgd.cesga.es)) no directorio: /opt/cesga/grads-1.8sl11/

USO: Diversos executables atópanse no directorio: /opt/cesga/grads-1.8sl11/bin

## LAMMPS (Nova instalación no Superdome)

Molecular Dynamics Simulator.

LAMMPS pode correr en máquinas monoprocesador ou en paralelo utilizando técnicas de pase de mensaxes e unha descomposición do dominio de simulación. O código está deseñado para que poida ser doadamente modificado ou engadirle novas funcionalidades.

Distribúese como "open source" baixo os termos da licenza GPL.

Máis Información: <http://www.cs.sandia.gov/~sjplimp/lammps.html>

Instalouse a versión 17Jan05 no Superdome ([sd.cesga.es](http://sd.cesga.es)) no directorio: /opt/cesga/lammps-17Jan05

Os executables para a execución paralela encóntranse no directorio: bin/ da aplicación:

Imp\_hpsuperdome.Mlib.32 (versión 32 bits)

Imp\_hpsuperdome.Mlib.64 (versión 64 bits)

USO: `mpirun -np < n_procesadoresw < executable > << ficheiro_entrada >.indent`

O Manual pode consultarse en: /opt/cesga/lammps-17Jan05/doc/Manual.html (tamén versión PDF)

## NCARG (Nova versión no SVG e nova instalación no Superdome)

NCARG é unha librería gráfica de representación de datos científicos.

---

Usuarios habituais: Uso interno do CESGA, en proxectos de climatoloxía.

Usuarios potenciais: Usuarios que precisen representacións de datos científicos en xeral, e datos meteorolóxicos, climatolóxicos e resultados sobre coordenadas habitualmente utilizadas en meteoroloxía (planas, sigma, esféricas, etc).

Máis Información en: <http://ngwww.ucar.edu/>

Instalouse a versión 4.4.0 no SVG ([svgd.cesga.es](http://svgd.cesga.es)) no directorio: `/opt/cesga/ncarg-4.4.0` e a versión 4.4.1 no Superdome ([sd.cesga.es](http://sd.cesga.es)) no directorio: `/opt/cesga/ncarg-4.4.0`.

Os executables da aplicación encóntranse no directorio `bin/` de ditos directorios.

#### NETCDF (Nova versión no SD)

NetCDF é unha librería para o manexo do formato de datos estándar netCDF, utilizado por un gran número de paquetes gráficos.

Usuarios habituais: Uso interno do CESGA, para o manexo de datos climáticos e do medio

Usuarios potenciais: Científicos ou técnicos que xeren os seus propios resultados sobre o VPP e desexen visualizalos con ferramentas gráficas nas súas propias máquinas.

A versión 3.6.0-p1 foi instalada no Superdome ([sd.cesga.es](http://sd.cesga.es)) no directorio:

`/opt/cesga/netcdf-3.6.0-p1` (versión 32 bits)

`/opt/cesga/netcdf-3.6.0-p1/hpux64/lib` (versión 64 bits)

USO: para a utilización da librería debe incluírse no noso programa ou ficheiro: `include/netcdf.h` do directorio de instalación correspondente. O programa debe ser linkado coa librería `libnetcdf.a` (`-lnetcdf`) que se atopa no directorio `lib/` do directorio de instalación.