使用Environment module(环境模块)设置应用环境

上海交通大学高性能计算中心<http://hpc.sjtu.edu.cn>

2013年11月8日 更新

"Environment module"(环境模块)是一组环境变量设置的集合。 module可以被加载(load)、卸载(unload)、切换(switch)，这些操作会改变相应的环境变量设置，从而让用户方便地在不同环境间切换。 相比与将环境变量设置写入/etc/profile或者~/.bashrc，Environment module操作只影响当前用户的当前登录环境，不会因错误配置造成全局持续的破坏。 普通用户也可以自己编写module，具有很好的定制性。

# 基本命令

## module命令列表

$ module

或者，

$ module -h

## 查看可用模块avail

$ module avail

## 查看已加载模块list

$ module list

## 加载模块load

$ module load MODULE\_NAME

## 卸载模块unload

$ module unload MODULE\_NAME

## 切换模块switch

$ module switch OLD\_MODULE NEW\_MODULE

等价于：

$ module unload OLD\_MODULE; module load NEW\_MODULE

## 卸载所有已加载的模块purge

$ module purge

## 显示模块说明whatis

$ module whatis MODULE\_NAME

## 显示该模块内容display

$ module display MODULE\_NAME

# Pi集群module功能说明

集群预设了如下module:

$ module avail ----------------- /lustre/utility/modulefiles ----------------compiler-default mpi-defaultfftw/impi/3.3.3 fftw/openmpi/gcc/3.3.3 icc/13.1.1 cuda/5.0 fftw/mpich2/gcc/3.3.3 fftw/openmpi/icc/3.3.3 impi/4.1.1.036cuda-default fftw/mpich2/icc/3.3.3 gcc/4.8.1 mkl/11.0.3 openmpi/gcc/1.6.4 mpich2/gcc/1.4.1p1 pgi/13.9openmpi/icc/1.6.4 mpich2/icc/1.4.1p1

模块命名规则是：

软件名/MPI库/编译器/版本

其中"MPI库"和"编译器"是命名时的可选项。 譬如，fftw/mpich2/gcc/3.3.3模块表示版本号为3.3.3的FFTW库，这个库支持在MPICH2上并行执行，FFTW和MPICH2库都使用GCC生成。 又如，openmpi/gcc/1.6.4模块表示版本号为1.6.4的OpenMPI库，这个库使用GCC生成。

这些模块按功能大致可分为编译器、MPI环境、工具库等，下面分别予以说明。

## 编译器

集群上可以使用的编译器包括：GNU编译器(GCC)、Intel编译器、PGI编译器。 GCC-4.4.6编译器安装在操作系统目录下，能直接使用，不需要加载模块。 GCC-4.8.1、Intel编译器和PGI编译器需要加载相应模块。 编译器模块信息如下：

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 模块 | 编译器版本 | C编译器 | C++编译器 | F77编译器 | F90编译器 |
| gcc/4.4.6(默认) | 4.4.6 | gcc | g++ | g77 | gfortran |
| gcc/4.8.1 | 4.8.1 | gcc | g++ | g77 | gfortran |
| icc/13.1.1 | 13.1.1 | icc | icpc | ifort | ifort |
| pgi/13.9 | 13.9 | pgcc | pgc++ | 无 | 无 |

集群上的Nvidia CUDA开发环境版本为5.0，使用前请加载模块cuda-default或者cuda/5.0。

## MPI环境

集群可用的MPI库比较丰富，包括Intel MPI(IMPI)、MPICH2和OpenMPI。 按照mpicc、mpicxx、mpif77和mpif90使用的后端编译器，MPICH2与OpenMPI还可以再细分为不同版本。

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 模块 | 版本 | mpicc | mpicxx | mpif77 | mpif90 |
| impi/4.1.1.036 | 4.1.1 | gcc | g++ | g77 | gfortran |
|  |  | (mpiicc uses icc) | (mpicpc uses icpc) |  |  |
| mpich2/icc/1.4.1p1 | 1.4.1p1 | icc | icpc | ifort | ifort |
| mpich2/gcc/1.4.1p1 | 1.4.1p1 | gcc | g++ | g77 | gfortran |
| openmpi/icc/1.6.4 | 1.6.4 | icc | g++ | g77 | gfortran |
| openmpi/gcc/1.6.4 | 1.6.4 | gcc | g++ | g77 | gfortran |

## 工具库

集群上的工具库模块包括：mkl(Intel数学函数库)、fftw（FFTW快速傅里叶变换库）。 用户可根据需要，载入响应模块。

# 在编译和提交作业时使用module

在集群上使用编译器和特定软件库时，往往需要在启动脚本中设置复杂的环境变量。 让用户手工维护这些设置不仅容易出错，而且用户到另一个集群工作时，又需要针对新环境逐一修改变量。 使用Environment module后，将环境准备的工作交给管理员，用户按需加载模块，用同一组命令就能在不同集群上完成环境设定的工作。

下面以Intel MPI程序的编译和提交为例，说明module的作用。

### 编译时使用module

Intel 编译器/MPI环境的设定包括一系列复杂的环境变量设定，需要运行脚本完成配置。 典型过程如下：

$ source /lustre/utility/intel/composer\_xe\_2013.3.163/bin/compilervars.sh intel64$ source /lustre/utility/intel/mkl/bin/intel64/mklvars\_intel64.sh$ source /lustre/utility/intel/impi/4.1.1.036/bin64/mpivars.sh$ mpiicc -o mpihello mpihello.c

使用module可以使环境设定的过程更清晰：

$ module load icc/13.1.1 $ module load mkl/11.0.3$ module load impi/4.1.1.036 $ mpiicc -o mpihello mpihello.c

### LSF提交作业时使用module

使用LSF提交作业时，作业控制脚本中通常也会包含一系列环境设定脚本，譬如：

source /lustre/utility/intel/composer\_xe\_2013.3.163/bin/compilervars.sh intel64source /lustre/utility/intel/mkl/bin/intel64/mklvars\_intel64.shsource /lustre/utility/intel/impi/4.1.1.036/bin64/mpivars.sh

这部分也可以用module指令替代。 *注意，LSF默认使用/bin/sh解析作业脚本指令(没有module功能)，且不传递$HOME、$USER、$SHELL、$LONGNAME以外的环境变量。 若要在LSF作业脚本中使用module，我们需要指定一个带有module功能的Shell(如/bin/bash)，并正确设定MODULEPATH变量。* 下面这个LSF作业片段供参考：

#BSUB -L /bin/bashMODULEPATH=/lustre/utility/modulefiles:$MODULEPATHmodule load icc/13.1.1 module load mkl/11.0.3module load impi/4.1.1.036

# 编写自定义module

用户可根据modulefile规则，自己编写所需的module。 用户自定义module的目录，加入MODULEPATH变量后方能生效。

# 参考资料

* "Environment Module" <http://modules.sourceforge.net/>
* "Environment Module: Manual Page" <http://modules.sourceforge.net/man/module.html>
* "Modules Software Environment" <https://www.nersc.gov/users/software/nersc-user-environment/modules/>