

操作系统



GNU 商标



Linux 吉祥物Tux

GNU，或者说GNU/Linux。

GNU和Linux的关系，请看<https://blog.csdn.net/icycolawater/article/details/77921688>

简单来说：

GNU计划原本要做一个类似Unix的操作系统，本着这样的初衷，他们把操作系统需要的软件、底层框架的构建都完成得差不多了，还剩下一个内核，这时候，Linux出现了，且发现GNU+Linux正好能够实现GNU计划的目标。现在我们一般说的Linux系统，实际上是GNU/Linux。

module (模块) :Environment Module

模块，是实现独立功能的代码，也可以是一个软件。

试想SISSA计算中心（管理者），有了硬件：超级计算机。那管理者要把这个计算中心进行有序管理且用于SISSA中所有的人（使用者）。管理者：

通常会安装有不同版本的多种编译器和其他软件等，如常用的编译器有 intel 和 gnu，常用的 MPI 并行库包括 intel mpi, openmpi, mpich2 等，而且对于同一软件，还包含不同的版本或采用不同编译设置得到的可执行程序 and 链接库等。在使用这些程序时，经常需要对环境变量进行修改。并且由于程序编译时会调用不同类型编译器或第三库，这时程序之间还存在着依赖关系。这使得当执行某个特定版本的程序时，环境变量的修改变得十分复杂。

用户：

Environment Modules 包是一个简化 shell 初始化的工具，它允许用户在使用 modulefiles 进行会话期间轻松修改其环境。每个模块文件都包含为应用程序配置 shell 所需的信息。模块文件可以由系统上的许多用户共享，并且用户可以拥有自己的集合来补充或替换共享模块文件。

(来源<https://blog.csdn.net/banana1006034246/article/details/99416442>)

module: 基本操作

module avail # 可用 module

module load MODULE_NAME # 装载某个module

module add MODULE_NAME # 和load功能类似, 可在 slurm、python脚本使用

module list # 列出加载的module

1. module unload MODULE_NAME # 卸载某个module

2. module switch OLD_MODULE NEW_MODULE # 切换模块switch

模块命名规则

软件名/MPI库/编译器/版本

(https://blog.csdn.net/RHEL_admin/article/details/45368177)

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。

1. 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。

2. 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。

3. 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。

作业编译和提交: PBS

在集群或者超级计算机平台上, 一般不能随意地直接以 mpiexec 或 mpirun 运行我们的并行计算程序, 而必须通过其上提供的作业管理系统来提交计算任务。

PBS (Portable Batch System) 作业管理系统会根据一个集群上的可用计算节点的计算资源管理和调度所有计算作业 (无论是批处理作业还是交互式作业) 。

PBS详细使用命令参照:

1. <https://blog.csdn.net/ZuoShifan/article/details/80472681>

2. <https://www.cnblogs.com/yqsun/p/5433070.html>

这个网站罗列常用的命令及其格式

(<https://www.cnblogs.com/yqsun/p/5433070.html>)非常有用，看！

说明：附件中有PBS的使用说明。此外，install cosmomc的文章上也写到过。

注意现在作业需要提供walltime，这个是最大作业时间。

用下面的命令来查看某JobID的walltime，在SISSA的HPC上默认是00: 01: 00，就是1分钟

```
qstat -f [JobID] | grep Resource_List.walltime
```

然后下面的指令是用于设置walltime的：

```
1 #PBS -l walltime="\$QSUBTIME", 其中\$QSUBTIME改成自己估算的时间
```