

Linux module 使用



目录

01

module介绍

02

自定义modulefile

03

module常用命令

目录

- 01 module介绍
- 02 自定义modulefile
- 03 module常用命令

module介绍

- module 是一个专门管理环境变量的工具，全称是module environment，一般应用于软件或运行库等设备有多个版本，且需要分别配置这些环境变量

- module工具的官网

<https://modules.readthedocs.io/en/latest/index.html>

- module工具可以使用二进制编译安装，也可以使用yum/apt快速安装

- ① module工具，依赖tcl工具，因此首先要安装tcl工具

- ② 安装tcl之后，就可以安装module工具

目录

01

module介绍

02

自定义modulefile

03

module常用命令

自定义modulefile

- 以下是modulefile文件，可以参考去自定义modulefile

```
#%Module1.0

#set fn      $ModulesCurrentModulefile
#set fn      [file normalize $ModulesCurrentModulefile]
#
prereq       compiler/devtoolset/7.3.1
conflict     mpi/hpcx
set hpcx_dir /public/software/mpi/hpcx/v2.6.0
set hpcx_mpi_dir $hpcx_dir/gcc-7.3.1
set ucx_dir  $hpcx_dir/gcc-7.3.1/ucx-1.8.0
set hcoll_dir $hpcx_dir/hcoll/4.5.3043
module-whatis Mellanox HPC-X toolkit
setenv HPCX_DIR $hpcx_dir
setenv HPCX_HOME $hpcx_dir

setenv HPCX_UCX_DIR $ucx_dir
#setenv HPCX_SHARP_DIR $sharp_dir
setenv HPCX_HCOLL_DIR $hcoll_dir
```

预制条件

版本号冲突检查，一个模块只能有一个版本号

设置具体得环境变量值

自定义modulefile

常用标识符	说明
Module1.0	识别这个文件为modulefile的，没有他这个文件不会被识别
proc	帮助文件，可以要，也可以不要
setenv	需要的环境变量配置到系统中
prereq	预置条件
conflict	冲突检查，同一个模块只能有一个版本

自定义modulefile

- 预制条件，如果没有提示错误

```
prereq          compiler/devtoolset/7.3.1
#conflict      mpi/hpcx
set hpcx_dir    /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.11.0
set hpcx_mpi_dir $hpcx_dir/gcc-7.3.1
set ucx_dir     $hpcx_dir/ucx_without_rocm
set hcoll_dir  $hpcx_dir/hcoll
set sharp_dir  $hpcx_dir/sharp

module-whatis   Mellanox HPC-X toolkit

setenv HPCX_DIR      $hpcx_dir
setenv HPCX_HOME     $hpcx_dir
```

```
[root@j13r2n00 2.11.0]# module load mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1
mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1(14):ERROR:151: Module 'mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1' depends on one of the module(s) 'compiler/devtoolset/7.3.1'
mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1(14):ERROR:102: Tcl command execution failed: prereq          compiler/devtoolset/7.3.1
```

自定义modulefile

- 版本冲突检查，一个模块只能有一个版本，如果冲突提示错误

```
prereq          compiler/devtoolset/7.3.1
conflict        mpi/hpcx
set hpcx_dir    /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.4.1
set hpcx_mpi_dir $hpcx_dir/gcc-7.3.1
set ucx_dir     $hpcx_dir/ucx_without_rocm
set hcoll_dir  $hpcx_dir/hcoll
set sharp_dir  $hpcx_dir/sharp

module-whatis   Mellanox HPC-X toolkit
```

```
[root@j13r2n00 2.4.1]# module load mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1
mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1(15):ERROR:150: Module 'mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1' conflicts with the currently loaded module(s) 'mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1'
mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1(15):ERROR:102: Tcl command execution failed: conflict          mpi/hpcx
```

自定义modulefile

■ 设置module路径

/usr/share/Modules/init/.modulespath中添加module路径

```
#!/usr/share/Modules/modulefiles # Module pkg modulefiles (if no versioning)
#/etc/modulefiles # General module files
#/usr/share/Modules/your_contribs # Edit for your requirements
/opt/hpc/software/modules
~
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module av
```

```
----- /opt/hpc/software/modules -----
compiler/devtoolset/7.3.1      mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1      mpi/hpcx/2.4.1/intel-2017.5.239  mpi/openmpi/4.0.2/gcc-7.3.1
compiler/intel/2017.5.239     mpi/hpcx/2.11.0/intel-2017.5.239  mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
compiler/rocm/2.9             mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1      mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239
[ksadmin@login02 ~]$
```

自定义modulefile

- 使用其他module路径

```
module use [modulefile]
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module use /public/software/modules  
[ksadmin@login02 ~]$ module av
```

```
----- /public/software/modules -----  
apps/abinit/8.10.3/hpcx-2.4.1-intel2017  
apps/amber/2018/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1  
apps/amber/2018/hpcx-2.4.1-intel2017  
apps/anaconda2/4.3.0  
apps/anaconda3/4.9.2  
apps/anaconda3/5.2.0  
apps/AutoDock-DCU/4.2.6/gcc-7.3.1  
apps/AutoDock-DCU2/4.2.6/gcc-7.3.1  
apps/automake/1.16.1  
apps/barracuda-DCU/0.6.2_beta/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1  
apps/bedtools/2.29.1/gcc-7.3.1  
apps/R-3.6.3/R-gcc-7.3.1  
apps/relion/3.1.2-intelmpi2017  
apps/relion_casopt-DCU/3.0.7/hpcx-v2.4.1-gcc-7.3.1  
apps/relion-DCU/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1  
apps/relion-DCU/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1-dtk-21.04  
apps/relion-DCU2/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1  
apps/relion-DCU2/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1-dtk-21.04  
apps/ROMS/3.6/hpcx-2.4.1-intel2017  
apps/rosetta/rosetta  
apps/samtools/1.9/gcc-7.3.1  
apps/siesta/4.0.2/hpcx-2.4.1-intel2017
```

目录

01

module介绍

02

自定义modulefile

03

module常用命令

module常用命令

常用命令	说明
module av avail	显示可使用模块
module li list	显示已加载模块
module load add [modulefile]	加载模块
module unload rm [modulefile]	卸载模块
module purge	清理说有已加载模块
module show display [modulefile]	查询配置信息
module use [modulefile]	使用其他module path
module switch swap [modulefile1] [modulefile2]	切换modulefile

module常用命令

- 显示可使用模块

```
module av | avail
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module av
```

```
----- /opt/hpc/software/modules -----  
compiler/devtoolset/7.3.1      mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1      mpi/hpcx/2.4.1/intel-2017.5.239  mpi/openmpi/4.0.2/gcc-7.3.1  
compiler/intel/2017.5.239     mpi/hpcx/2.11.0/intel-2017.5.239  mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1  
compiler/rocm/2.9             mpi/hpcx/2.4.1/gcc-7.3.1      mpi/hpcx/2.7.4/intel-2017.5.239
```

module常用命令

- 显示已加载模块

```
module li | list
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) compiler/devtoolset/7.3.1    2) compiler/rocm/2.9            3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
[ksadmin@login02 ~]$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
  1) compiler/devtoolset/7.3.1    2) compiler/rocm/2.9            3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
```

module常用命令

■ 加载模块

```
module load |add [modulefile]
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
 1) compiler/devtoolset/7.3.1  2) compiler/rocm/2.9          3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
[ksadmin@login02 ~]$ module load mpi/hpcx/2.11.0/intel-2017.5.239
[ksadmin@login02 ~]$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
 1) compiler/devtoolset/7.3.1      2) compiler/rocm/2.9          3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1      4) mpi/hpcx/2.11.0/intel-2017.5.239
[ksadmin@login02 ~]$ █
```

module常用命令

■ 卸载模块

```
module unload |rm [modulefile]
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
 1) compiler/devtoolset/7.3.1      2) compiler/rocm/2.9              3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1      4) mpi/hpcx/2.11.0/intel-2017.5.239
[ksadmin@login02 ~]$ module rm mpi/hpcx/2.11.0/intel-2017.5.239
[ksadmin@login02 ~]$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
 1) compiler/devtoolset/7.3.1      2) compiler/rocm/2.9              3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
```

module常用命令

- 清理所有已加载模块

```
module purge
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
  1) compiler/devtoolset/7.3.1  2) compiler/rocm/2.9          3) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
[ksadmin@login02 ~]$ module purge
[ksadmin@login02 ~]$ module li
No Modulefiles Currently Loaded.
[ksadmin@login02 ~]$ █
```

module常用命令

■ 查询配置信息

```
module show|display [modulefile]
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module show mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
-----
/opt/hpc/software/modules/mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1:

prereq      compiler/devtoolset/7.3.1
module-whatis Mellanox HPC-X toolkit
setenv      HPCX_DIR /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4
setenv      HPCX_HOME /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4
setenv      HPCX_UCX_DIR /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4/ucx_without_rocm
setenv      HPCX_SHARP_DIR /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4/sharp
setenv      HPCX_HCOLL_DIR /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4/hcoll
setenv      HPCX_MPI_DIR /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4/gcc-7.3.1
setenv      HPCX_OSHMEM_DIR /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4/gcc-7.3.1
prepend-path PATH /opt/hpc/software/mpi/hpcx/v2.7.4/ucx_without_rocm/bin
```

module常用命令

■ 使用其他module path

```
module use [modulefile]
```

```
[ksadmin@login02 ~]$ module use /public/software/modules
[ksadmin@login02 ~]$ module av

----- /public/software/modules -----
apps/abinit/8.10.3/hpcx-2.4.1-intel2017
apps/amber/2018/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1
apps/amber/2018/hpcx-2.4.1-intel2017
apps/anaconda2/4.3.0
apps/anaconda3/4.9.2
apps/anaconda3/5.2.0
apps/AutoDock-DCU/4.2.6/gcc-7.3.1
apps/AutoDock-DCU2/4.2.6/gcc-7.3.1
apps/automake/1.16.1
apps/barracuda-DCU/0.6.2_beta/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1
apps/bedtools/2.29.1/gcc-7.3.1
apps/R-3.6.3/R-gcc-7.3.1
apps/relion/3.1.2-intelmpi2017
apps/relion_casopt-DCU/3.0.7/hpcx-v2.4.1-gcc-7.3.1
apps/relion-DCU/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1
apps/relion-DCU/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1-dtk-21.04
apps/relion-DCU2/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1
apps/relion-DCU2/3.0.7/hpcx-2.4.1-gcc-7.3.1-dtk-21.04
apps/ROMS/3.6/hpcx-2.4.1-intel2017
apps/rosetta/rosetta
apps/samtools/1.9/gcc-7.3.1
apps/siesta/4.0.2/hpcx-2.4.1-intel2017
```

module常用命令

■ 切换module file

```
module switch|swap [modulefile1] [modulefile2]
```

```
[root@j13r2n00 2.4.1]# module li
Currently Loaded Modulefiles:
  1) compiler/rocm/2.9                2) mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1    3) compiler/devtoolset/7.3.1
[root@j13r2n00 2.4.1]# module switch mpi/hpcx/2.11.0/gcc-7.3.1 mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1
[root@j13r2n00 2.4.1]# module li
Currently Loaded Modulefiles:
  1) compiler/rocm/2.9                2) mpi/hpcx/2.7.4/gcc-7.3.1    3) compiler/devtoolset/7.3.1
[root@j13r2n00 2.4.1]#
```

The background of the slide is a dark red color with a subtle, light-colored circuit board pattern. The pattern consists of various lines, curves, and small circular nodes, resembling a printed circuit board (PCB) layout. The lines are thin and light, creating a technical and modern aesthetic.

谢谢