

Bedienung des Software-Modulsystems

Befehl: **module av**

Dieser Befehl listet Ihnen alle auf dem Cluster verfügbaren [av = available] Softwaremodule auf. Hierzu zählen Compiler wie GCC aber auch alle anderen Softwareprodukte.

```

Datei Bearbeiten Ansicht Suchen Terminal Hilfe
libpng/1.6.21-foss-2016a                                zlib/1.2.11-GCCcore-6.4.0
libpng/1.6.23-foss-2016a                                zlib/1.2.8
libpng/1.6.24-GCCcore-4.9.3                             zlib/1.2.8-foss-2016a
libpng/1.6.32-GCCcore-6.4.0                             zlib/1.2.8-foss-2017b
libpthread-stubs/0.3-foss-2016a                         zlib/1.2.8-GCC-4.9.3-binutils-2.25
libreadline/6.3-foss-2015a                              zlib/1.2.8-GCCcore-4.9.3
libreadline/6.3-foss-2015b

----- /srv/software/modules/base -----
nlopt/2.4.2-foss-2016a

----- /srv/software/modules/bio -----
GROMACS/2016.4-foss-2017b

----- /srv/software/modules/cae -----
Elmer/8.0-foss-2015a                                    OpenFOAM/2.3.1-foss-2015b          qmcpack/3.1.0-foss-2016a
GATE/7.0-foss-2015a                                    OpenFOAM/3.0.0-foss-2016a
GATE/8.0-foss-2017b-Python-2.7.14-Geant4-10.04        OpenFOAM/4.0-foss-2016a

----- /srv/software/modules/chem -----
GAMESS/2014

----- /srv/software/modules/compiler -----
GCC/4.9.2                                                GCC/4.9.3-binutils-2.25          GCCcore/4.9.3                    LLVM/3.7.1-foss-2016a          LLVM/5.0.0-foss-2017b
GCC/4.9.3-2.25                                          GCC/6.4.0-2.28                   GCCcore/6.4.0                    LLVM/3.8.0-foss-2016a

----- /srv/software/modules/data -----
GDAL/2.1.0-foss-2016a                                    HDF5/1.8.16-foss-2016a-serial      ROOT/6.10.08-foss-2017b-Python-2.7.14
HDF5/1.10.1-foss-2017b                                  HDF5/1.8.17-foss-2016a            XML-Parser/2.44_01-GCCcore-6.4.0-Perl-5.26.0
HDF5/1.8.16-foss-2016a                                  netCDF/4.4.1-foss-2016a           XML-Parser/2.44-foss-2016a-Perl-5.22.1

```

Wie man sieht, kann ein Programm in mehreren Versionen vorliegen, der Gnu-Compiler beispielsweise in den Versionen 4.7, 4.8 und 4.9. So ist es Ihnen möglich verschiedene Ihrer Scripte mit verschiedenen Versionen des gleichen Compilers auszuführen, indem Sie den jeweils gewünschten Compiler zu Ihren ausgewählten Modulen hinzufügen.

Befehl: **module show [modulname]**

Mit diesem Befehl können Sie sich die Informationen zu einem bestimmten Modul anzeigen lassen:

```

Datei Bearbeiten Ansicht Suchen Terminal Hilfe

gilbert@fb11-nx-main:~$ module show ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi
-----
/srv/software/modules/all/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi:

module-whatis      Description: ParaView is a scientific parallel visualizer.
module-whatis      Homepage: http://www.paraview.org
conflict           ParaView
module             load foss/2017b
module             load X11/20171023-GCCcore-6.4.0
module             load Mesa/17.2.5-foss-2017b
module             load libGLU/9.0.0-foss-2017b
module             load Qt/4.8.7-foss-2017b
module             load zlib/1.2.11-GCCcore-6.4.0
module             load HDF5/1.10.1-foss-2017b
module             load Python/2.7.14-foss-2017b
prepend-path       CPATH /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi/include
prepend-path       LD_LIBRARY_PATH /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi/lib
prepend-path       LIBRARY_PATH /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi/lib
prepend-path       MANPATH /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi/share/man
prepend-path       PATH /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi/bin
setenv             EBRROOTPARAVIEW /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi
setenv             EBVERSIONPARAVIEW 5.4.1
setenv             EBDEVELPARAVIEW /srv/software/software/ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi/easybuild/ParaView-5.4
                  .1-foss-2017b-mpi-easybuild-devel
-----

```

Befehl: **module add [modulname]**

Mit diesem Befehl fügen Sie ein Modul zu Ihrer Arbeitsumgebung hinzu. Z.Bsp:

```
gilbert@fb11-nx-main:~$ module add ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi
gilbert@fb11-nx-main:~$
```

Hinweis: oftmals werden dadurch automatisch weitere module mitgeladen, die für das gewählte Modul benötigt werden.

Um zu sehen, welche Module momentan geladen sind gibt es den Befehl `module li`.

Befehl: **module li**

Dieser Befehl listet [`li`→`list`] ihnen Ihre momentan ausgewählten Module auf.

```
Datei Bearbeiten Ansicht Suchen Terminal Hilfe
gilbert@fb11-nx-main:~$ module li
Currently Loaded Modulefiles:
 1) GCCcore/6.4.0
 2) binutils/2.28-GCCcore-6.4.0
 3) GCC/6.4.0-2.28
 4) numactl/2.0.11-GCCcore-6.4.0
 5) hwloc/1.11.7-GCCcore-6.4.0
 6) OpenMPI/2.1.1-GCC-6.4.0-2.28
 7) OpenBLAS/0.2.20-GCC-6.4.0-2.28
 8) gomp/2017b
 9) FFTW/3.3.6-gomp/2017b
10) ScaLAPACK/2.0.2-gomp/2017b-OpenBLAS-0.2.20
11) foss/2017b
12) bzip2/1.0.6-GCCcore-6.4.0
13) expat/2.2.4-GCCcore-6.4.0
14) zlib/1.2.11-GCCcore-6.4.0
15) libpng/1.6.32-GCCcore-6.4.0
16) freetype/2.8-GCCcore-6.4.0
17) fontconfig/2.12.4-GCCcore-6.4.0
18) X11/20171023-GCCcore-6.4.0
19) GMP/6.1.2-GCCcore-6.4.0
20) nettle/3.3-GCCcore-6.4.0
21) libdrm/2.4.88-GCCcore-6.4.0
22) ncurses/6.0-GCCcore-6.4.0
23) LLVM/5.0.0-foss-2017b
24) Mesa/17.2.5-foss-2017b
25) libGLU/9.0.0-foss-2017b
26) libffi/3.2.1-GCCcore-6.4.0
27) XZ/5.2.3-GCCcore-6.4.0
28) libxml2/2.9.4-GCCcore-6.4.0
29) gettext/0.19.8.1-GCCcore-6.4.0
30) PCRE/8.41-GCCcore-6.4.0
31) util-linux/2.31-GCCcore-6.4.0
32) GLib/2.53.5-GCCcore-6.4.0
33) Qt/4.8.7-foss-2017b
34) Szip/2.1.1-GCCcore-6.4.0
35) HDF5/1.10.1-foss-2017b
36) libreadline/7.0-GCCcore-6.4.0
37) Tcl/8.6.7-GCCcore-6.4.0
38) SQLite/3.20.1-GCCcore-6.4.0
39) Python/2.7.14-foss-2017b
40) ParaView/5.4.1-foss-2017b-mpi
gilbert@fb11-nx-main:~$
```

Befehl: **module add [modulname]** (Konflikte)

Module können, von Ihnen abhängige Module gleich mit einladen. Daruch könne Konflikte entstehen. In diesem Beispiel soll ein OpenMPI Modul geladen werden, welches selbst versucht ein Modul zu laden, welches aber bereits geladen ist:

```
gilbert@fb11-nx-main:~$ module add tools/CMake/3.9.5-foss-2017b-Python-2.7.14
gilbert@fb11-nx-main:~$ module add wheel/0.31.0-foss-2017b-Python-3.6.3
Python/3.6.3-foss-2017b(34):ERROR:150: Module 'Python/3.6.3-foss-2017b' conflicts with the currently loaded module(s) 'Python/2.7.14-foss-2017b'
Python/3.6.3-foss-2017b(34):ERROR:102: Tcl command execution failed: conflict Python
gilbert@fb11-nx-main:~$
```

Befehl: **module rm [modulname]**

Dieser Befehl entfernt [`rm`→`remove`] einzelne der Module aus den ausgewählten Modulen.

Befehl: **module purge**

Dieser Befehl entfernt *alle* Module aus der Liste der ausgewählten Module.

Dies ist vielleicht sinnvoll wenn Sie mit vielen Konflikten konfrontiert werden, entfernen Sie dann einfach alle Module und laden Sie mit dem „`module add`“-Befehl das Modul, welches Sie benötigen, neu.