

<https://ccub.u-bourgogne.fr/dnum-ccub/spip.php?article392>

Environnement logiciel : modules

- Site Public - Calcul -

Date de mise en ligne : mardi 21 février 2012

**Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne - Tous
droits réservés**

Sommaire

- [La commande module](#)
- [Afficher la liste des environnements disponibles : module avail](#)
- [Afficher l'aide pour un logiciel : module help](#)
- [Charger un environnement : module load](#)
- [Afficher la liste des environnements chargés : module list](#)
- [Afficher le contenu d'un module : module show](#)
- [Décharger un environnement : module unload](#)
- [Changer de version pour un environnement : module switch \[modulefile\]](#)

Le CCUB met à disposition plusieurs logiciels sur le cluster, et souvent plusieurs versions de chaque logiciel. Enfin d'éviter les conflits entre différentes versions d'un même logiciel, il faut généralement définir un environnement propre à chaque version. L'outil **Modules Environment** permet de configurer l'environnement tout en gérant les conflits et les dépendances.

Par exemple plusieurs versions de Gromacs sont installées (4.0.7, 4.5.3, etc.). Les binaires de la version **4.0.7** sont installés dans **/usr/local/gromacs-4.0.7/bin** et les binaires de la version **4.5.3** sont installés dans **/usr/local/gromacs-4.5.3/bin**. Si on mettait les 2 chemins dans le path (variable \$PATH) alors la commande **grompp** pointerait sur le premier binaire **grompp** trouvé dans le path sans avoir la certitude que l'on utilise la version désirée.

Le site web de Modules Environment : <http://modules.sourceforge.net>

Remarque : il est déconseillé de placer les commandes de chargement de module dans votre .profile , il est préférable de charger les modules dans le shell en interactif, et de les charger au début de vos scripts en batch.

La commande module

La commande module est une fonction directement accessible en KSH.

Pour obtenir la liste des commandes disponibles, faire `module help`

Modules Release 3.2.7 2009-07-30 (Copyright GNU GPL v2 1991):

Usage: module [switches] [subcommand] [subcommand-args]

Switches:

-H --help	this usage info
-V --version	modules version & configuration options
-f --force	force active dependency resolution
-t --terse	terse format avail and list format
-l --long	long format avail and list format
-h --human	readable format avail and list format
-v --verbose	enable verbose messages
-s --silent	disable verbose messages
-c --create	create caches for avail and apropos
-i --icase	case insensitive
-u --userlvl	set user level to (nov[ice],exp[ert],adv[anced])

Available SubCommands and Args:

+ add load	modulefile [modulefile ...]
+ rm unload	modulefile [modulefile ...]
+ switch swap	[modulefile1] modulefile2
+ display show	modulefile [modulefile ...]
+ avail	[modulefile [modulefile ...]]
+ use [-a --append]	dir [dir ...]
+ unuse	dir [dir ...]
+ update	
+ refresh	
+ purge	
+ list	
+ clear	
+ help	[modulefile [modulefile ...]]
+ whatis	[modulefile [modulefile ...]]
+ apropos keyword	string
+ initadd	modulefile [modulefile ...]
+ initprepend	modulefile [modulefile ...]
+ initrm	modulefile [modulefile ...]
+ initswitch	modulefile1 modulefile2
+ initlist	
+ initclear	

Afficher la liste des environnement disponibles : module avail

```
$ module avail
----- /usr/local/modulefiles -----
R/2.11.0                gromacs/4.5.5-plumed
R/2.13.0                gromacs/4.5.5-test
R/2.15.0                intel/11.1(default)
crystal09/1.0.1(default) intel/12.1
gcc/4.1.2               latex/20110705(default)
gcc/4.5.0               molpro/2010.1.24-mpi-intel
gromacs/4.0.7           mpi/mpi/gcc/4.1.2
gromacs/4.5.1           mpi/mpi/gcc/4.5.0
gromacs/4.5.3(default)  mpi/mpi/intel
gromacs/4.5.4           mpi/vlt/vlt-gcc
gromacs/4.5.5           mpi/vlt/vlt-pgi
gromacs/4.5.5-intel     pgsq1/9.0.4(default)
gromacs/4.5.5-intel12
```

Afficher l'aide pour un logiciel : module help

Par exemple pour obtenir l'aide du CCUB pour le logiciel Gromacs :

```
$ module help gromacs

----- Module Specific Help for 'gromacs/4.5.3' -----

  Charge l'environnement (PATH, MANPATH) pour gromacs version 4.5.3
...
*****
* Utilisation en mode batch SGE
..
.
```

Charger un environnement : module load

```
$ module load gromacs/4.5.4
```

Si la commande ne retourne rien, c'est que l'environnement a été chargé avec succès.

Afficher la liste des environnements chargés : module

list

```
$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) gromacs/4.5.4
```

Afficher le contenu d'un module : module show

```
$ module show gromacs/4.0.7
-----
/usr/local/modulefiles/gromacs/4.0.7:

module-whatis    Sets the environment (PATH, MANPATH) for gromacs version 4.0.7
conflict         gromacs
setenv           GROMACSPATH /usr/local/gromacs-4.0.7
prepend-path     PATH /usr/local/gromacs-4.0.7/bin
prepend-path     MANPATH /usr/local/gromacs-4.0.7/share/man
-----
```

Décharger un environnement : module unload

```
$ module unload gromacs/4.5.4
```

Changer de version pour un environnement : module switch [modulefile]

Si une version d'un module est chargé, et que l'on veut changer de version pour le même programme, il faut utiliser module switch, ou décharger le premier module sans quoi le programme va sortir en erreur pour cause de conflit.

```
$ module load gromacs/4.5.4
$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) gromacs/4.5.4
$ module load gromacs/4.0.7
gromacs/4.0.7(17):ERROR:150: Module 'gromacs/4.0.7' conflicts with the currently loaded module(s)
'gromacs/4.5.4'
gromacs/4.0.7(17):ERROR:102: Tcl command execution failed: conflict      gromacs
$ module switch gromacs/4.0.7
$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) gromacs/4.0.7
```