

华东师范大学超算中心

HPC 集群软件说明与安装位置

2009 年 11 月 23 日更新

华东师范大学计算中心开发环境相关软件说明与安装位置

软件名称	相关说明、手册、网址及安装位置
编译器及相关版本	<p>INTEL 编译器 版本为 11.1-0.56，安装路径/data/soft/compiler/intel/Compiler/11.1/056，使用时执行如下环境变量 source /data/soft/compiler/intel/Compiler/11.1/056/bin/iccvars.sh intel64 可以使用 64 位的 INTEL C/C++编译器，执行 source /data/soft/compiler/intel/Compiler/11.1/056/bin/ifortvars.sh intel64 可以使用 64 位的 INTEL F77/F90 编译器</p> <p>INTEL Fortran 9.1.041 编译器 版本为 9.1.041，安装路径为/data/soft/compiler/intel/fce/9.1.041，使用时执行如下环境变量 source /data/soft/compiler/intel/fce/9.1.041/bin/ifortvars.sh</p> <p>PGI 编译器 版本 9.0-1，安装路径/data/soft/compiler/pgi，使用时环境变量文件参考/data/share/env_pgi</p> <p>GNU 编译器 C 编译器 gcc 版本 4.1.2，C++编译器 g++版本 4.1.2，F77 编译器 g77 版本 3.3.5，F90 编译器 gfortran 版本 4.1.2</p>
MPI 及其安装版本	<p>INTEL MPI 是 INTEL 公司提供的高性能 MPI，同时支持 Infiniband、TCP 两种网络，安装路径为/data/soft/compiler/mpi/impi/3.2.2.006，关于 IMPI 环境变量的设定参考/data/share/env_impi；关于 IMPI 运行的作业卡参考/data/share/1.job.impi</p> <p>HP-MPI</p>

	<p>目前是 Platform 旗下的 MPI 产品，版本 2.2.7，环境变量设定参考/data/share/env_hpmpi；作业卡文件参考/data/share/1.job.hpmpi</p> <p>MVAPICH2 是 MPI 接口在 Infiniband 网路上的 MPI2 实现版本，在 Infiniband 上具有较高的性能。安装路径为 /data/soft/compiler/mpi/mvapich2/1.4rc2/icc.ifort/</p> <p>OpenMPI 是 MPI2 实现的高性能的 MPI，可以运行于任何网络上。安装路径为 /data/soft/compiler/mpi/openmpi/1.3.3/gcc.ifort/ 采用 gcc 4.1.2 和 ifort 9.1.041 编译 /data/soft/compiler/mpi/openmpi/1.3.3/gcc.pgf90/ 采用 gcc 4.1.2 和 pgf90 9.0 编译 /data/soft/compiler/mpi/openmpi/1.3.3/icc.ifort/ 采用 icc 11.0 和 ifort 11.0 编译</p>
<p>OpenMP</p>	<p>OpenMP 是一个便携的可扩展的标准，为程序员提供了一个简单和灵活的接口，可以方便地为共享内存的多处理器平台增加并行机制。OpenMP 在所有的架构上都支持使用 C/C++和 FORTRAN 进行共享内存并行编程。OpenMP 使用编译器指令，帮助并行应用程序员使用 C/C++和 FORTRAN 创建多线程应用。</p> <p>相关文档： OPENMP 直接使用编译预处理指令实现工作并行化，所以 OPENMP 程序需要直接使用支持其功能的编译器进行编译，所以 pgi 编译器的手册中包含 openmp 的文档。</p> <p>相关网站： http://www.openmp.org/ 结合在 pgi 编译器中</p>
<p>数学库</p>	<p>BLAS BLAS 库，基本线性代数库(Basic Linear Algebra Subroutines)，提供最基本的线性代数函数接口。BLAS 分为三级：BLAS 1 (Level 1) 向量与向量操作、BLAS 2 (Level 2)：矩阵与向量操作、BLAS 3 (Level 3)：矩阵与矩阵操作。</p>

GOTO 和 ATLAS 都是针对特定平台性能调优的高性能 BLAS 库。

GOTO 库是目前性能最优的 BLAS 库，支持 Opteron、Xeon、Itanium、Power、Alpha 等平台。在 Xeon 和 Opteron 平台上，同时支持 Windows 和 Linux 两种操作系统平台。

ATLAS 库是自动优化线性代数库，它给用户提供了源代码，通过编译自动性能调优。ATLAS 库包括全部 BLAS 函数和一部分 LAPACK 函数，提供 C 和 Fortran 77 语言函数接口。

LAPACK

LAPACK，即线性代数计算子程序包 (Linear Algebra Package)，它是建立在 BLAS 1、BLAS 2 和 BLAS 3 基础之上，使用 Fortran 77 语言开发，使用了线性代数中最新、最精确的算法，同时采用了将大型矩阵分解成小块矩阵的方法从而可以有效地使用存储空间。

FFTW

FFTW，即 (the Fastest Fourier Transform in the West) 库，是由 MIT 的 Matteo Frigo 和 Steven G. Johnson 开发的，用于一维和多维实数或复数的快速离散傅里叶变换，可以针对各种不同的平台作高效率的 FFT 运算。

这些库的大部分资料都在网上，下边列出相关网址：

<http://www.netlib.org/blas/>

<http://www.lrz-muenchen.de/services/software/mathematik/atlas/>

<http://www.tacc.utexas.edu/resources/software/>

<http://developer.amd.com/acml.aspx>

<http://www.fftw.org/>

<http://www.netlib.org/lapack/>

INTEL CMKL 9.1

[/data/soft/libs/cmkl/9.1](#)

Goto BLAS

[/data/soft/libs/goto/](#)

	FFTW /data/soft/libs/fftw/3.1.2/
Linux 操作系统	<p>Linux 操作系统是一个复杂的操作系统，很难有一本资料可以完全说明其中原委，图书馆中也有许多相关的书籍，网络上的资料一般是最全和更新速度更快的，但是大多数是英文内容。linux 操作系统下自带有大部分命令的参考手册，只要在提示符下键入 man 命令名字<回车>就可以看到英文帮助。</p> <p>http://www.novell.com/zh-cn/documentation/suse.html</p> <p>下边给出一个翻译的比较好的中文网站</p> <p>http://cmpp.linuxforum.net/</p>