

超算平台 AI 部署使用手册

一、连接方式

目前超算平台仅支持在校园网环境下访问，登录方式：

登录地址	端口	说明
10.3.20.3	30000	全天访问网络

登录示例：

```
ssh 账号名@登录地址 端口号  
如： ssh 92014011@10.3.20.3 30000
```

```
[C:\Users\92014011]$ ssh 92014011@10.3.20.3 30000  
  
Connecting to 10.3.20.3:30000...  
Connection established.  
To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+]'.  
  
*****  
* 温馨提示 *  
* 禁止在登录节点login02(10.3.20.3)和login03(10.3.20.4)直接运行软件程序，需按照使用文档 *  
* 按照脚本提交作业，敬请遵守规定！如因此造成的脚本中断或数据丢失，用户自行负责！如不按规定 *  
* 操作，账号将进行冻结处理！！！谢谢！ *  
*****  
Last login: Thu Nov 13 18:47:21 2025 from 10.50.79.225  
(base) [92014011@login02 ~]$
```

二、环境模块管理（Module）

平台使用 module 命令管理软件环境，常用命令如下：

命令	说明
module avail	查看可用模块
module list	查看已加载模块
module load <module>	加载指定模块（如 R、Anaconda、CUDA 等）
module unload <module>	卸载指定模块

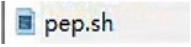
示例：

```
module load r/3.5.2      # 加载 R 3.5.2  
module load anaconda3/3.6    # 加载 Anaconda3  
module unload r          # 卸载 R 模块
```

可用 module:

```
(base) [92014@ll@login02 script]$ module avail
..... /hpcfile/jhino/modulefiles/compiler .....
cmake/3.6 cmake/3.12 gcc/5.4.0 gcc/9.3.0 intel/2016 pgi/18.10
..... /hpcfile/jhino/modulefiles/cuda .....
cuda/9.0 cuda/9.2.0 cuda/10.1 cuda/10.2.09 cuda/11.0 cuda/11.6 cuda/12.1.0 cudnn9.0 cuda/12.4.0 cudnn9.0 cuda/13.0
..... /hpcfile/jhino/modulefiles/mpi .....
intelmpi/2016 mpich/3.2.1 mpich/3.2.1.bak openmpi/1.10.7 openmpi/3.0.2 openmpi/4.1.5
..... /hpcfile/jhino/modulefiles/Bioinformatics .....
ASProfile/1.0.4 bioconda/python3_bioconda boost/1.67.0 bowtie2/2.3.4.1 cellranger/7.1.0 gatk/4.1.0 neme/5.0.1 ovito/3.0.0 segmeahl/1.0.2.0 trinity/v2.8.4
bcftools/1.9 bismark/0.19.1 bowtie/1.2.2 bwa/0.7.17 cufflinks/2.2.1 genome/genome namd/2.12.0 samtools/1.3 star/2.6.0 zlib/1.2.8
bedtools2/2.27.1 blast/2.7.1 bowtie2/2.1.0 cd-hit/4.8.1 fastqc/0.12.1 hisat2/2.0.0 nba/8.0 samtools/1.9 tophat/2.1.1
..... /hpcfile/jhino/modulefiles/opensoft .....
anaconda3/3.6 gromacs/5.1.5 lammps/2020 ovito/3.0.0 python/3.6.10-t2.0/3.6.10 python/3.8.5/3.8.5 r/3.5.2 vasp/5.4.4
anaconda3/2025.06 gromacs/2018.8 lammps/2022 plumed/2.8.2 python/3.6.10-pytorch1.5/3.6.10 python/3.6/3.6.10 tensorflow/TF-gpu-1.12.0-python3.6-cuda9.0
charmm/mpi gromacs/2022.5_plumed matlab/r2022 python/2.7.15/2.7.15 python/3.6.10/3.6.10 pytorch/pytorch-1.6 tensorflow/TF-gpu-1.14.0-python3.6-cuda10.1
gauss/09 gromacs/2023.1_mpi namd/2.12.0 python/3.5.6/3.5.6 python/3.7.6/3.7.6 pytorch/pytorch-1.6-cuda10.1-gcc5.4.0 tensorflow/TF-gpu-2.4-python3.8-cuda9.0
gpumod/gpumd gromacs/2018 lammps/2018 ollama/0.3.11 python/3.6.6/3.6.6 python/3.8.1/3.8.1 pytorch/pytorch-1.7.1-cuda10.1 tensorflow/TF-gpu-2.4-python3.8-cuda10.1
..... /hpcfile/jhino/modulefiles/library .....
boost/1.67.0 fftw/3.3.5 fftw/3.3.8 lapack/3.5.0 lapack/3.8.0 openblas/3.2.0 zlib/1.2.8
```

三、任务提交方式（JSUB）

平台使用 JSUB 命令进行任务调度，任务需通过 .sh 脚本提交。例如：| 

1. 基本脚本模板（CPU 任务）

```
#!/bin/bash

#JSUB -J job_name          # 任务名称
#JSUB -n 3                 # 使用 3 个 CPU 核心
#JSUB -e error.%J          # 错误输出文件
#JSUB -o output.%J         # 标准输出文件

# 加载所需模块
module load anaconda3/3.6
source activate              # 激活 base 环境
conda activate your_env      # 激活 Conda 环境

module load r                # 加载 R 模块

# 执行 R 脚本
Rscript your_script.R
```

2. 提交任务

查看服务器作业占用情况: jhosts

提交作业命令:

```
jsub < xxx.sh
```

示例：

```
(base) [92014011@login02 script]$ jsub< cat_gpu.sh  
Job <116651> is submitted to queue <gpu_h100> and default application <default>
```

四、任务管理命令

命令	说明
jjobs	查看当前运行的任务
jctrl kill <任务 ID>	终止指定任务（任务 ID 通过 jjobs 查看）

```
jjobs  
jctrl kill 10392
```

示例：

```
(base) [92014011@login02 script]$ jjobs  
JOBID      USER      STAT  QUEUE      FROM_HOST   EXEC_HOST   JOB_NAME      SUBMIT_TIME   ORDER  
116130    92014011  RUN    gpu      login02    gpu06      *etl01_train Nov 12 11:13  -  
116629    92014011  RUN    gpu      login02    gpu06      *_tiny_train Nov 13 17:18  -  
116683    92014011  RUN    gpu_h100  login02    gpu07      *u_test_name Nov 13 19:09  -  
116669    92014011  PEND   gpu      login02    -          *clientnet_b0 Nov 13 18:24  2  
(py39_plantdoc) [92014011@login02 script]$ jctrl kill 116926  
Job <116926> is being terminated
```

五、磁盘空间查看

命令	说明
du -sh	查看当前目录总大小
du -sh ./*	查看当前目录下各文件/文件夹大小

六、GPU 使用说明

1. 环境搭建

1) 新建 conda 环境

```
# 指定 python 版本及环境名  
conda create -n py39_env python=3.9 -y
```

各部分含义：

- **conda**: 包管理和环境管理工具
- **create**: 创建新环境的子命令
- **-n py39_env**:
 - **-n**: 指定环境名称的选项
 - **py39_env**: 要创建的环境名称（表示 Python 3.9 环境）
- **python=3.9**: 指定环境中安装的 Python 版本为 3.9
- **-y** 或 **--yes**: 自动确认所有提示，无需手动输入 "y"

```
(base) [92014011@login02 script]$ conda create -n py39_env python=3.9 -y  
WARNING conda.gateways.disk.delete:unlink_or_rename_to_trash(184): Could not r  
eed to reboot to free file handles  
WARNING conda.gateways.disk.delete:unlink_or_rename_to_trash(184): Could not r  
eed to reboot to free file handles  
2 channel Terms of Service accepted
```

2) 安装所需包

```
# 进入新建的环境  
conda activate py39_env  
# 安装所需的 pytorch 版本和 CUDA 版本 (H100 GPU 节点仅支持 CUDA 11.8 及以上  
版本)  
pip install torch==2.6.0 torchvision==0.21.0 torchaudio==2.6.0 \  
--index-url https://download.pytorch.org/whl/cu124
```

```
(base) [92014011@login02 script]$ conda activate py39_env  
(py39_env) [92014011@login02 script]$ pip install torch==2.6.0 torchvision==0.21.0 torchaudio==2.6.0 \  
> --index-url https://download.pytorch.org/whl/cu124  
Looking in indexes: https://download.pytorch.org/whl/cu124  
Collecting torch==2.6.0
```

3) 查看环境位置

```
conda info --base
```

```
(py39_env) [92014011@login02 script]$ conda info --base  
/hpcfile/software/anaconda2025.06
```

记录下路径，sh 脚本的 CONDA_PREFIX 变量会用到。

2. 普通 GPU 节点 (gpu01~05, gcu01-10, 共计 22 张卡)

sh 脚本模版如下，任务提交及管理命令同 CPU 任务。

```
#!/bin/bash

#JSUB -J gpu_job          # 任务名称
#JSUB -m gpu01             # 指定 GPU 节点
#JSUB -q gpu                # 提交到 GPU 队列
#JSUB -gpgpu 1              # 使用 1 块 GPU
#JSUB -n 1                  # 使用 1 个 CPU 核心
#JSUB -e error.%J           # 错误输出文件
#JSUB -o output.%J          # 标准输出文件

# 1. 把个人 conda 设成第一优先级
# 只改动: CONDA_PREFIX 替换为 conda info --base 的路径
export CONDA_PREFIX=/hpcfile/software/anaconda2025.06
export PATH=$CONDA_PREFIX/bin:$PATH

# 2. 激活环境
# 只改动: conda activate 后接自己的环境名
source $CONDA_PREFIX/etc/profile.d/conda.sh
conda activate py39_plantdoc

python xxx.py
```

3. H100 GPU 节点使用说明 (gpu07~08, 共计 16 张卡)

sh 脚本模版如下，任务提交及管理命令同 CPU 任务。

```
#!/bin/bash
#JSUB -J h100_job
#JSUB -m gpu_07          # 或 gpu_08
#JSUB -q gpu_h100         # H100 队列
#JSUB -gpgpu 1            使用卡数（建议最大为 8）
#JSUB -n 8
#JSUB -e error.%J
#JSUB -o output.%J

# 1. 把个人 conda 设成第一优先级
# 只改动: CONDA_PREFIX 替换为 conda info --base 的路径
export CONDA_PREFIX=/hpcfile/software/anaconda2025.06
export PATH=$CONDA_PREFIX/bin:$PATH

# 2. 激活环境
# 只改动: conda activate 后接自己的环境名
source $CONDA_PREFIX/etc/profile.d/conda.sh
conda activate py39_plantdoc

python xxx.py
```

注意: H100 节点仅可选 gpu_07 或 gpu_08, 且仅支持 CUDA 11.8 及以上版本。