

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:\~]$ ssh 92014011@10.3.20.3 30000

Connecting to 10.3.20.3:30000...
Connection established.
To escape to local shell, press 'Ctrl+Alt+J'.

+++++
*                               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 *
* 撰写脚本提交作业，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) [9201401@login02 script]$ module avail
----- /hpcfile/jhinno/modulefiles/compiler -----
cmake/3.6  cmake/3.12  gcc/5.4.0  gcc/9.3.0  intel/2016  pgi/18.10

----- /hpcfile/jhinno/modulefiles/cuda -----
cuda/9.0  cuda/9.2.0  cuda/10.1  cuda/10.2.89  cuda/11.0  cuda/11.6  cuda/12.1.0_cudnn9.0  cuda/12.4.0_cudnn9.0  cuda/13.0

----- /hpcfile/jhinno/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/jhinno/modulefiles/Bioinformatics -----
ASProfile/1.0.4  bisconda/python3_bisconda  boost/1.67.0  bowtie2/2.3.4.1  cellranger/2.1.0  gatk/4.4.0  mems/5.0.1  ovito/3.0.0  segemehl/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
bedtools/2.2.27.1  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/jhinno/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/2.0.2  python/3.6.10_pytorch1.5/3.6.10  python/3.610/3.610  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
gpusd/gpusd  lammps/2019  ollama/0.3.11  python/3.6.6/3.6.6  python/3.8.1/3.8.1  pytorch/pytorch-1.7.1-python3.6-cuda10.1  tensorflow/TF-gpu-2.4-python3.8-cuda10.1

----- /hpcfile/jhinno/modulefiles/Library -----
boost/1.67.0  fftw/3.3.5  fftw/3.3.8  lapack/3.5.0  lapack/3.8.0  openvc/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： pep.sh

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    *cientnet_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
ed 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]$
(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。