

AI 科学计算服务

产品介绍

文档版本 01
发布日期 2025-05-30



版权所有 © 华为云计算技术有限公司 2025。保留一切权利。

非经本公司书面许可，任何单位和个人不得擅自摘抄、复制本文档内容的部分或全部，并不得以任何形式传播。

商标声明



HUAWEI和其他华为商标均为华为技术有限公司的商标。

本文档提及的其他所有商标或注册商标，由各自的所有人拥有。

注意

您购买的产品、服务或特性等应受华为云计算技术有限公司商业合同和条款的约束，本文档中描述的全部或部分产品、服务或特性可能不在您的购买或使用范围之内。除非合同另有约定，华为云计算技术有限公司对本文档内容不做任何明示或暗示的声明或保证。

由于产品版本升级或其他原因，本文档内容会不定期进行更新。除非另有约定，本文档仅作为使用指导，本文档中的所有陈述、信息和建议不构成任何明示或暗示的担保。

华为云计算技术有限公司

地址：贵州省贵安新区黔中大道交兴功路华为云数据中心 邮编：550029

网址：<https://www.huaweicloud.com/>

目 录

1 什么是 AI 科学计算服务.....	1
2 产品优势.....	2
3 重点应用场景.....	3
4 安全.....	4
4.1 责任共担.....	4
4.2 身份认证与访问控制.....	5
4.3 数据保护技术.....	6
4.4 审计.....	6
4.4.1 云审计服务.....	6
4.4.2 支持云审计的关键操作.....	7
4.4.3 如何查看审计日志.....	12
4.5 服务韧性.....	13
5 权限管理.....	14
5.1 平台用户权限管理.....	14
5.2 依赖和委托.....	14
6 约束与限制.....	20
7 配额说明.....	21
8 与其他云服务的关系.....	22
9 基本概念.....	23

1 什么是 AI 科学计算服务

AI科学计算服务（AI for Science Service, AI4SService），是一个致力于将人工智能技术与科学研究相结合的创新平台。面向生物医药、计算化学、地球科学、电磁学、流体仿真等科学领域，提供开箱即用的澎湃算力（昇腾、鲲鹏）及调度能力，内置丰富的各领域AI模型、分析工具及流程、专业数据与知识、便捷式开发环境等，助力敏捷科研创新。

AI 科学计算服务面向的用户

从行业方向上，AI科学计算服务主要面对以下行业的从业者：

- 高校
构建全校性的人工智能科研平台，致力于培育AI与各学科交叉融合的创新型人才，同时积极推动产教融合，为学生的全面发展提供强有力的支持。
- 科研机构&实验室
为各个重点实验室提供开闭源的模型与算子，以加速人工智能技术在科学研究中的快速应用和落地。
- 企业
通过运用先进的自研基模型，能够为各行业企业提供强大的支持，助力企业实现成本降低和效率提升。

2 产品优势

- **满足国产化科研诉求**
基于大规模的昇腾和鲲鹏算力，为科研领域提供强大的国产化算力支持，以推动科学研究的发展。
- **丰富的预置资产**
面向科学计算的各个领域提供典型的开源的模型、应用、工作流、镜像等核心资产，包括生物医药、化学材料、流体仿真等领域。
- **强大的闭源模型**
面向细分领域提供高精度高性能的闭源模型，助力细分领域发展，如小分子药物设计。
- **一站式开发平台**
支持低代码构建流程、应用以及Notebook开发环境，提供端到端的AI赋能平台加速AI的研发和应用，使能AI科学计算快速发展。
- **成熟的权限管理体系**
保障数据安全的同时，确保团队高效协作。

3 重点应用场景

小分子药物设计场景

- 靶点发现
在靶点发现阶段，提供靶点优化、靶点口袋发现功能。
- 苗头化合物发现
在苗头化合物发现阶段，提供分子对接、分子属性预测、分子搜索、CPI预测、分子生成功能，在分子对接中，预置了大量的分子库可供选择。
- 先导化合物优化
在先导化合物优化阶段，提供分子优化、靶点口袋分子设计（骨架跃迁、片段优化、片段连接、片段生成）、自由能微扰功能。
- 模型管理
支持客户用自己的数据进行模型训练、对模型进行管理以及在平台上用自己的模型进行分析。

基因组分析场景

提供从基因组数据管理、生物信息分析流程到科研分析管理整个流程的服务，快速实现基因组数据分析及AI建模，提供高性能、高可靠性、高性价比的基因测序计算、存储、分析和AI能力支持，让科研过程标准化、可执行。

基因组测序是新型冠状病毒疑似病例确诊的病原学证据之一，基于基因组分析结果，可准确识别病毒基因特性，监测病毒变异趋势，在疫情防控、疾病诊治、药物筛选、疫苗设计与药物研发等工作中发挥着不可替代的基础性的作用；也将支撑病毒溯源、变异进化、致病机理等研究工作。华为云联合多家科研单位，推出基因组自动化鉴定云平台。该平台直接对接人体样本的RNA二代测序原始数据，具有对数据全自动质量控制、拼接和病毒组成分析等功能，实现了对样本中可能存在的包括新型冠状病毒在内的各种病毒的快速检测，并在线分析各种病毒的相对载量。

4 安全

4.1 责任共担

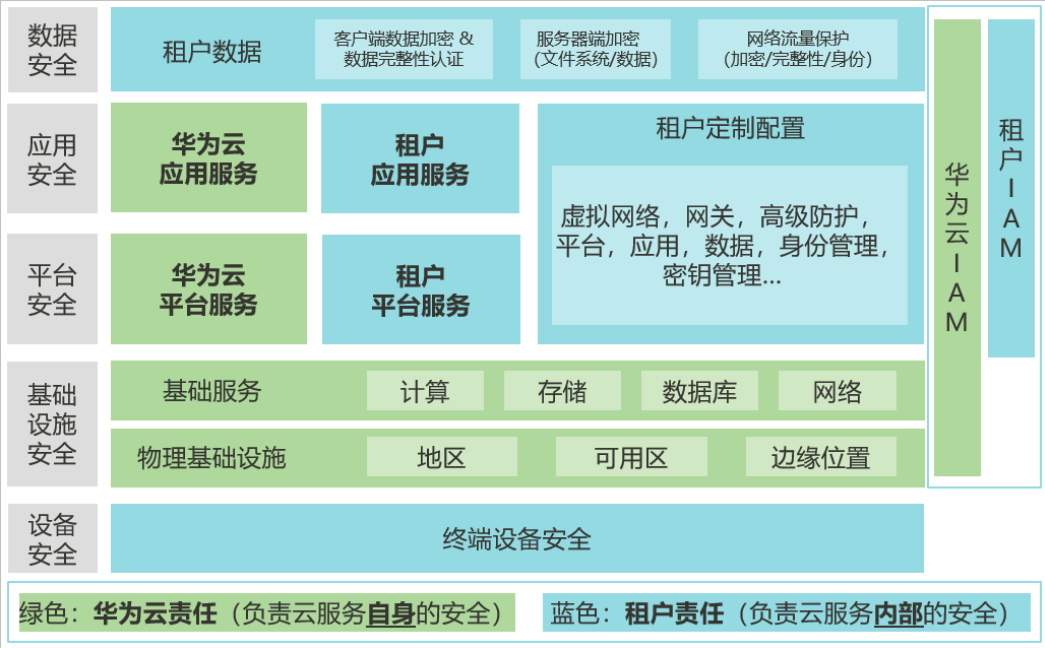
华为云秉承“将公司对网络和业务安全性保障的责任置于公司的商业利益之上”。针对层出不穷的云安全挑战和无孔不入的云安全威胁与攻击，华为云在遵从法律法规业界标准的基础上，以安全生态圈为护城河，依托华为独有的软硬件优势，构建面向不同区域和行业的完善云服务安全保障体系。

安全性是华为云与您的共同责任，如[图4-1](#)所示。

详细介绍华为云安全性的构建思路与措施，包括云安全战略、责任共担模型、合规与隐私、安全组织与人员、基础设施安全、租户服务与租户安全、工程安全、运维运营安全、生态安全。

- 华为云：负责云服务自身的安全，提供安全的云。华为云的安全责任在于保障其所提供的IaaS、PaaS和SaaS类云服务自身的安全，涵盖华为云数据中心的物理环境设施和运行其上的基础服务、平台服务、应用服务等。这不仅包括华为云基础设施和各项云服务技术的安全功能和性能本身，也包括运维运营安全，以及更广义的安全合规遵从。
- 租户：负责云服务内部的安全，安全地使用云。华为云租户的安全责任在于对使用的IaaS、PaaS和SaaS类云服务内部的安全以及对租户定制配置进行安全有效的管理，包括但不限于虚拟网络、虚拟主机和访客虚拟机的操作系统，虚拟防火墙、API网关和高级安全服务，各项云服务，租户数据，以及身份账号和密钥管理等方面的安全配置。

图 4-1 华为云安全责任共担模型



4.2 身份认证与访问控制

身份认证

用户访问AI科学计算服务的方式有多种，包括控制台、API、SDK，无论访问方式封装成何种形式，其本质都是通过AI科学计算服务提供的REST风格的API接口进行请求。

接口有如下两种认证方式，您可以选择其中一种进行认证鉴权。

- Token认证：通过Token认证调用请求。
- AK/SK认证：通过AK（Access Key ID）/SK（Secret Access Key）加密调用请求。经过认证的请求总是需要包含一个签名值，该签名值以请求者的访问密钥（AK/SK）作为加密因子，结合请求体携带的特定信息计算而成。通过访问密钥（AK/SK）认证方式进行认证鉴权，即使用Access Key ID（AK）/Secret Access Key（SK）加密的方法来验证某个请求发送者身份。

访问控制

AI科学计算服务支持通过权限控制（IAM权限）进行访问控制。

访问控制方式		简要说明
权限控制	IAM权限	IAM权限是作用于云资源的，IAM权限定义了允许和拒绝的访问操作，以此实现云资源权限访问控制。管理员创建IAM用户后，需要将用户加入到一个用户组中，IAM可以对这个组授予AI科学计算服务所需的权限，组内用户自动继承用户组的所有权限。
	委托授权	如果用户想使用存储在对象存储服务（OBS）上的数据，他可以委托授权AI科学计算服务访问对象存储服务。

4.3 数据保护技术

- AI科学计算服务处理以下类型的数据：
- 用户输入数据，包括基因测序文件、药物分子模型文件、蛋白质结构文件等等。
 - 各类算法模型计算结果。
- AI科学计算服务通过多种数据保护手段和特性，保障客户在使用时数据安全。

表 4-1 表 1 AI 科学计算服务的数据保护手段和特性

数据保护手段	说明
传输加密（HTTPS）	支持HTTPS传输协议，采用华为云官网标准网关，数据传输过程有全链路安全保障。API网关支持TLS 1.1及TLS 1.2版本，推荐您使用更加安全的TLS 1.2版本。
数据存储	承诺数据不落盘，用户的上传的数据和计算结果数据均不在服务端作保留。

4.4 审计

4.4.1 云审计服务

云审计服务（Cloud Trace Service，CTS），是华为云安全解决方案中专业的日志审计服务，提供对各种云资源操作记录的收集、存储和查询功能，可用于支撑安全分析、合规审计、资源跟踪和问题定位等常见应用场景。

用户开通云审计服务并创建和配置追踪器后，CTS可记录AI科学计算服务的管理事件和数据事件用于审计。

CTS的详细介绍和开通配置方法，请参见[CTS快速入门](#)。

CTS支持追踪的AI科学计算服务管理事件列表，请参见[支持云审计的关键操作](#)。

4.4.2 支持云审计的关键操作

操作场景

平台提供了云审计服务。通过云审计服务，您可以记录与AI科学计算服务相关的操作事件，便于日后的查询、审计和回溯。

前提条件

已开通云审计服务。

支持审计的关键操作列表

表 4-2 云审计服务支持的 AI 科学计算服务操作列表

操作名称	资源类型	事件名称
删除邮箱配置	MsgCenter	deleteMessageEmailConfig
检测邮箱连通性	MsgCenter	checkEmailConnection
更新邮箱配置	MsgCenter	updateMessageEmailConfig
更新消息清理规则	MsgCenter	updateMessageClearRule
批量删除系统通知	MsgCenter	batchDeleteNotice
创建用户	User	createUser
更新用户密码	User	changePassword
初始化密码	User	updateInitPassword
更新用户信息	User	updateUser updateUserByDomain
导入用户	User	importUser
删除用户	User	deleteUser
更新用户角色	User	updateUserRole
更新用户配置	User	updateUserSetting
更新归档配置	System	updateArchiveConfig
更新提供商	System	updateVendor
绑定SFS-Turbo实例	PerformanceResource	createPerformanceResource

操作名称	资源类型	事件名称
更新SFS-Turbo实例配置	PerformanceResource	updatePerformanceResource
解绑SFS-Turbo实例	PerformanceResource	deletePerformanceResource
更新作业配置	JobConfig	updateJobConfig
删除标签	Label	deleteLabel
创建标签	Label	createLabel
批量删除标签	Label	batchDeleteLabel
批量更新节点标签	NodeLabel	batchUpdateNodeLabel
更新委托权限	Agency	updateAgency
解绑计算集群	ComputingCluster	deleteComputingCluster
绑定计算集群	ComputingCluster	createComputingCluster
初始化平台	Overview	initializePlatform
创建空间	Project	createProject
设置置顶空间	Project	updateTopProject
批量删除空间成员	Project	batchDeleteMember
转移空间	Project	transferProject
更新空间信息	Project	updateProject
删除空间	Project	deleteProject
更新空间成员	Project	updateMember
删除空间成员	Project	deleteMember
删除镜像Tag	Image	deleteTag
更新镜像	Image	updateImage
删除镜像	Image	deleteImage
发布镜像	Image	publishImage
上传镜像	Image	createImage
批量删除镜像Tag	Image	batchDeleteTag
导入镜像	Image	importImage
订阅镜像	Image	subscribeImage
添加收藏	Favorite	createFavorite
删除收藏	Favorite	deleteFavorite

操作名称	资源类型	事件名称
创建数据归档	DataBackup	createBackup
删除数据归档	DataBackup	deleteBackup
恢复数据归档	DataBackup	restoreBackup
设置空间级权限控制策略	Data	updateDataPolicy
上传数据	Data	uploadData createData
导入数据	Data	importData importNetworkData
设置数据对象策略	Data	updateDataPathPolicy
订阅资产市场数据	Data	subscribeData
引用数据	Data	quoteData
复制数据	Data	copyData
发布数据	Data	publishData
批量删除数据	Data	batchDeleteData
删除数据作业	DataJob	deleteDataJob
取消数据作业	DataJob	cancelDataJob
重试数据作业	DataJob	retryDataJob
批量删除作业	Job	batchDeleteJob
批量取消作业	Job	batchCancelJob
取消作业	Job	cancelJob
重试作业	Job	retryJob
批量重试作业	Job	batchRetryJob
创建作业	Job	executeJob
更新作业	Job	updateJob
删除作业	Job	deleteJob
导入流程	Workflow	importWorkflow
发布流程	Workflow	publishWorkflow
订阅流程	Workflow	subscribeWorkflow
更新流程	Workflow	updateWorkflow
删除流程	Workflow	deleteWorkflow

操作名称	资源类型	事件名称
创建流程	Workflow	createWorkflow
创建应用	App	createApp
订阅应用	App	subscribeApp
批量导入应用	App	batchImportApp
更新应用	App	updateApp
删除应用	App	deleteApp
发布应用	App	publishApp
获取Notebook的token	Notebook	getNotebookToken
启动或停止Notebook	Notebook	stopOrStartNotebook
创建Notebook	Notebook	createNotebook
更新Notebook	Notebook	updateNotebook
删除Notebook	Notebook	deleteNotebook
收藏资产	StarAsset	updateStar
删除收藏	StarAsset	deleteStar
操作资产发布状态	Asset	executeAssetAction
更新资产版本	Asset	updateAssetVersion
删除资产版本	Asset	deleteAssetVersion
绑定CSS集群	DrugCssCluster	createCssCluster
校验CSS集群连通性	DrugCssCluster	validateCssConnection
解绑CSS集群	DrugCssCluster	deleteCssCluster
生成分子SDF三维结构	DrugCommon	createDrugLigandSdf
创建配体文件预览任务	DrugCommon	deleteDrugLigandPreviewTask
将传入的蛋白和小分子 拼接成复合物结构	DrugCommon	generateComplexCombine
受体预处理	DrugCommon	runFastaPreprocess
创建批量下载任务	DrugCommon	createMolBatchDownloadTask
创建配体相似性图计算 任务	DrugCommon	createDrugLigandSimilarityGra phTask
计算配体间的3D结构差 异	DrugCommon	checkDrugLigandDifference
配体格式转换为 SMILES	DrugCommon	runDrugLigandToSmilesConver sion

操作名称	资源类型	事件名称
删除配体相似性图计算任务	DrugCommon	deleteDrugLigandSimilarityGraphTask
根据表面离散点坐标集生成可渲染的文件内容	DrugCommon	generateSurfacePoints
生成分子SVG图	DrugCommon	createDrugLigandSvg
受体信息解析	DrugCommon	parseDrugReceptorInfo
受体预处理	DrugCommon	runDrugReceptorPreprocess
受体口袋检测	DrugCommon	recognizeDrugReceptorPocket
生成可渲染的口袋文件内容	DrugCommon	generatePocketFile
创建配体文件预览任务	DrugCommon	createDrugLigandPreviewTask
生成相互作用2D图	DrugCommon	createDrugLigandInteraction2dSvg
更新药物作业	DrugJob	updateDrugJob
删除药物作业	DrugJob	deleteDrugJob
创建分子聚类作业	DrugJob	createClusterJob
取消药物作业	DrugJob	cancelDrugJob
删除药物数据库	DrugDatabase	deleteDrugDatabase
更新药物数据库	DrugDatabase	updateDrugDatabase
创建药物数据库	DrugDatabase	createDrugDatabase
添加药物数据记录	DrugDatabase	addDrugDatabaseFile
创建分子生成作业	GenJob	createGenJob
创建分子属性预测作业	AdmetJob	createAdmetJob
创建自由能微扰作业	FepJob	createFepJob
创建分子搜索作业	SearchJob	createSearchJob
创建靶点优化作业	TargetOptJob	createTargetOptJob
创建靶点口袋分子设计作业	PocketMolDesignJob	createPocketMolDesignJob
创建CPI作业	DockingJob	createCpiJob
创建分子对接作业	DockingJob	createDockingJob
创建分子优化作业	OptimizationJob	createOptmJob
创建靶点口袋发现作业	PocketDetectionJob	createPocketDetectionJob

操作名称	资源类型	事件名称
创建分子合成路径规划作业	SynthesisJob	createSynthesisJob
更新药物模型	DrugModel	updateDrugModel
删除药物模型	DrugModel	deleteDrugModel
创建药物模型	DrugModel	createDrugModel

4.4.3 如何查看审计日志

操作场景

在您开启了云审计服务后，系统开始记录云服务器的相关操作。云审计服务管理控制台保存最近7天的操作记录。

本节介绍如何在云审计服务管理控制台查看最近7天的操作记录。

操作步骤

1. 登录云审计服务[控制台](#)。
2. 单击左侧导航树的“事件列表”，进入事件列表信息页面。
3. 事件列表支持通过筛选来查询对应的操作事件。当前事件列表支持四个维度的组合查询，详细信息如下：
 - 事件来源、资源类型和筛选类型。
在下拉框中选择查询条件。
其中筛选类型选择事件名称时，还需选择某个具体的事件名称。
选择资源ID时，还需选择或者手动输入某个具体的资源ID。
选择资源名称时，还需选择或手动输入某个具体的资源名称。
 - 操作用户：在下拉框中选择某一具体的操作用户，此操作用户指用户级别，而非租户级别。
 - 事件级别：可选项为“所有事件级别”、“normal”、“warning”、“incident”，只可选择其中一项。
 - 时间范围：可选择查询最近七天内任意时间段的操作事件。
4. 展开需要查看的事件，查看详细信息。

图 4-2 展开记录



5. 在需要查看的记录右侧，单击“查看事件”，弹窗中显示了该操作事件结构的详细信息。

4.5 服务韧性

AI科学计算服务通过设计和实施一套多层次、全方位的服务韧性架构，确保在各种可能的故障情况下，平台能够保持稳定、可靠的服务。平台采用三级可靠性架构，结合多种技术方案，包括跨可用区（AZ）容灾、可用区内实例冗余、实例健康检测等，全面提升服务的韧性和稳定性，保障用户业务连续性和数据安全。

- **跨可用区（AZ）容灾**
平台支持跨可用区部署，通过将关键服务和数据分布在多个可用区（AZ），实现异地容灾和故障隔离。当某个可用区发生故障（如网络中断、电力故障等），平台能够自动切换到其他可用区，确保服务不中断。
- **可用区内实例冗余**
通过多节点部署和负载均衡技术，平台每个关键服务组件都部署了多个实例，当某个实例出现故障时，系统会自动将流量切换到其他健康实例，确保服务的高可用性。
- **实例健康检测与自动恢复**
平台内置智能健康检测机制，能够实时监控实例的运行状态，包括CPU、内存、磁盘、网络等关键指标。当检测到实例异常时，平台会自动触发恢复机制，尝试修复问题或重新启动实例。

5 权限管理

5.1 平台用户权限管理

AI科学计算服务作为一个完备的AI开发平台，支持用户对其进行细粒度的权限配置，以达到精细化资源、权限管理之目的。

平台用户权限管理

AI科学计算服务支持两种类型的用户管理，可以帮助您安全地控制平台的访问和使用权限。

表 5-1 AI 科学计算服务用户管理类型

类型	说明
系统级别用户管理	系统级的角色配置，可创建平台的子用户，并为其分配权限。
空间级别用户管理	资源级的角色配置，以空间为粒度对数据、分析作业、开发环境和镜像进行分组，以使用户通过空间进行资源的访问、共享和协作。详见《用户指南》的用户管理章节。

5.2 依赖和委托

委托授权

在使用AI科学计算服务的过程中，为了简化用户的操作，AI科学计算后台可以代替用户完成一些工作，如自动转储作业日志到用户OBS桶中、定时更新用户投递作业的运行状态等。

AI科学计算服务不会保存用户的Token认证凭据，在后台异步作业中操作用户的资源（如OBS桶）前，需要用户通过IAM委托向AI科学计算显式授权，AI科学计算在需要时使用用户的委托获取临时认证凭据用于操作用户资源。

托授权的越权风险

为了控制委托授权的越权风险，AI科学计算服务要求租户主账号才能为用户配置委托，由主账号保证委托授权的安全性。

委托授权的最小化

主账号在配置委托授权时，应严格控制授权的范围。

委托基础授权范围

AI科学计算服务委托授权的权限列表如表5-2所示。

表 5-2 AI 科学计算服务委托授权的权限列表

委托名称	委托授权项	委托范围	依赖服务	委托用途
ai4s_admin_agency	"iam:users:getUser", "iam:users:listUsersForGroup", "iam:users:listUsers", "iam:groups:getGroup", "iam:groups:listGroupsForUser", "iam:groups:listGroups", "iam:roles:getRole", "iam:roles:listRoles", "iam:agencies:getAgency", "iam:agencies:listAgencies"	全局	IAM	AI科学计算服务项目权限控制管理相关功能需要。
ai4s_service_agency	"iam:users:getUser", "iam:users:listUsersForGroup", "iam:users:listUsers", "iam:groups:getGroup", "iam:groups:listGroupsForUser", "iam:groups:listGroups", "iam:roles:getRole", "iam:roles:listRoles", "iam:agencies:getAgency", "iam:agencies:listAgencies", "iam:permissions:listRolesForGroupOnDomain"	全局	IAM	AI科学计算服务用户管理功能需要。

委托名称	委托授权项	委托范围	依赖服务	委托用途
	"obs:bucket:GetBucketPolicy", "obs:bucket:GetBucketLocation", "obs:object:GetObjectVersion", "obs:bucket:GetBucketStorage", "obs:object:GetObject", "obs:object:GetObjectVersionAcl", "obs:bucket:GetBucketQuota", "obs:object:ListMultipartUploadParts", "obs:bucket:GetBucketAcl", "obs:bucket:GetBucketStoragePolicy", "obs:bucket:GetEncryptionConfiguration", "obs:object:GetObjectAcl", "obs:bucket:ListBucketMultipartUploads", "obs:bucket:HeadBucket", "obs:bucket:ListAllMyBuckets", "obs:bucket:ListBucket", "obs:bucket:PutLifecycleConfiguration", "obs:object:DeleteObject", "obs:bucket:PutBucketQuota", "obs:object:AbortMultipartUpload", "obs:object:DeleteObjectVersion", "obs:object:PutObject", "obs:bucket:PutEncryptionConfiguration", "obs:object:PutObjectVersionAcl", "obs:bucket:PutBucketAcl",	全局	OBS	AI科学计算服务数据管理功能需要。

委托名称	委托授权项	委托范围	依赖服务	委托用途
	"obs:object:PutObjectAcl", "obs:bucket:PutBucketPolicy", "obs:bucket:DeleteBucketPolicy", "obs:bucket:CreateBucket", "obs:bucket:DeleteBucket"			
	"css:cluster:get", "css:cluster:list"	项目级	CSS	AI科学计算服务 药物管理功能需要，纳管CSS集群。
	CCE Administrator	项目级	CCE	AI科学计算服务 流程管理功能需要，投递作业以及更新作业状态等。
	"aom:metric:list"	项目级	AOM	AI科学计算服务 流程管理功能需要，查询节点监控信息。
	"sfsturbo:shares:getShare" "sfsturbo:shares:getAllShares"	项目级	SFS-Turbo	AI科学计算服务 流程管理功能需要，纳管SFS-Turbo实例。
	"swr:namespace:createNamespace", "swr:namespace:getNamespace", "swr:namespace:deleteNamespaceAccess", "swr:repo:listRepoTags"	项目级	SWR	AI科学计算服务 项目管理及镜像管理需要。

委托名称	委托授权项	委托范围	依赖服务	委托用途
	elb:loadbalancers:create创建弹性负载均衡器实例 elb:loadbalancers:delete删除弹性负载均衡器实例 elb:loadbalancers:get查询弹性负载均衡器实例详情 elb:pools:get查询云服务器组详情 elb:pools:create创建云服务器组实例 elb:pools:delete删除云服务器组实例 elb:members:delete删除云服务器实例 elb:members:create创建云服务器实例 elb:members:get查询云服务器详情 elb:listeners:create创建监听器实例 elb:listeners:delete删除监听器实例 elb:listeners:get查询监听器详情	项目级	ELB	AI科学计算服务notebook开发环境需要。
	nat:snatRules:create创建SNAT规则 nat:snatRules:delete删除SNAT规则 nat:snatRules:get查询SNAT规则详情 nat:natGateways:create创建NAT网关 nat:natGateways:delete删除NAT网关 nat:natGateways:get查询NAT网关详情	项目级	NAT	AI科学计算服务notebook开发环境需要。

委托名称	委托授权项	委托范围	依赖服务	委托用途
	vpcep:epservices:create创建终端节点服务 vpcep:epservices:delete删除终端节点服务 vpcep:epservices:get查询终端节点服务详情 vpcep:epservices:list查询终端节点服务列表 vpcep:permissions:update批量添加或移除终端节点服务的白名单 vpcep:permissions:list查询终端节点服务的白名单列表 vpc:subnets:get 查询vpc子网 vpc:publicips:create 创建弹性公网IP vpc:publicips:delete 删除弹性公网IP vpcep:endpoints:get 查询终端节点详情	项目级	VPCE P	AI科学计算服务notebook开发环境需要。

6 约束与限制

使用区域限制

AI科学计算服务目前支持的区域为“华北-北京四”、“华东-上海一”、华南-广州。

不同区域云服务产品之间内网互不相通；请就近选择靠近您业务的区域，可减少网络延迟，提高访问速度。

平台用户权限限制

AI科学计算服务支持两种类型的用户管理，可以帮助您安全地控制平台的访问和使用权限。

表 6-1 AI 科学计算服务用户管理类型

类型	说明
系统级别用户管理	系统级的角色配置，可创建平台的子用户，并为其分配权限。详细介绍请参见用户管理。
空间级别用户管理	资源级的角色配置，以空间为粒度对数据、分析作业、开发环境和镜像进行分组，以使用户通过空间进行资源的访问、共享和协作。详细介绍请参见空间管理。

使用限制

AI科学计算服务兼容最新版本的Edge或Chrome浏览器。

7 配额说明

为防止资源滥用，平台限定了各服务资源的配额，对用户的资源数量和容量做了限制。

如果当前资源配额限制无法满足使用需要，您可以联系[华为云支持人员](#)申请扩大配额。

表 7-1 配额说明

服务	资源类型	资源	总配额
AI4SService (AI for Science Service)	用户	用户总数	50
	空间	空间总数	100
		单用户创建空间数	20
	流程	单空间应用数	500
		单空间流程数	500
	开发环境	单空间开发环境数	10
	镜像	单空间镜像数	500
	小分子药物	作业并发数	150

AI科学计算服务应用的基础设施如下：

- 统一身份认证（IAM）
- 容器镜像服务（SWR）
- 对象存储服务（OBS）

8 与其他云服务的关系

统一身份认证服务（IAM）

统一身份认证（Identity and Access Management，简称IAM）是华为云提供权限管理的基础服务，可以帮助您安全地控制华为云服务和资源的访问权限。

AI科学计算服务使用IAM实现认证功能。

对象存储服务（OBS）

对象存储服务（Object Storage Service，简称OBS）是一个基于对象的海量存储服务，为客户提供海量、安全、高可靠、低成本的数据存储能力。

AI科学计算服务使用OBS存储原始数据、参考组数据、计算结果等。

容器镜像服务（SWR）

容器镜像服务（Software Repository for Container，简称SWR）是一种支持镜像全生命周期管理的服务，提供简单易用、安全可靠的镜像管理功能，帮助您快速部署容器化服务。

AI科学计算服务使用SWR存储工具镜像，包括内置工具及自定义工具的存储。

9 基本概念

盘古药物分子大模型

盘古药物分子大模型是基于华为与中科院上海药物所共同研发、专门面向药物研发领域推出的预训练大模型，旨在帮助医药公司开启AI辅助药物研发的新模式。盘古药物分子大模型学习了17亿个药物分子的化学结构，模型参数上亿，是目前最大的小分子药物模型。华为盘古药物分子大模型在分子生成、属性预测、生物活性预测和分子优化等20多个药物发现任务上均达到性能最优。

SPONGE

分子模拟是指利用计算机以原子水平的分子模型来模拟分子结构与行为，进而模拟分子体系的各种物理、化学性质的方法。它是在实验基础上，通过基本原理，构筑起一套模型和算法，从而计算出合理的分子结构与分子行为。SPONGE (Simulation Package toward Next Generation) 是由北京大学高毅勤教授课题组与华为团队联合开发的新一代分子动力学模拟程序，具有高性能、模块化等特性，是一个完全自主研发的分子模拟软件库。基于高毅勤教授课题组和华为团队的技术支持，已经实现自由能微扰加速10倍以上。

应用

AI科学计算服务应用是生物信息软件的镜像封装，应用既可以独立使用，也可以将多个应用编排入流程串联使用。用户可以制作自定义应用，创建分析流程。

流程

AI科学计算服务流程包含基因组学分析过程所需应用的执行先后信息以及数据输入输出等定义。分析流程由至少一个应用组成，流程中的各个应用由其前后顺序关系形成数据流，前序应用为后序应用提供输入。AI科学计算服务为您提供了多种分析流程，帮助您快速完成分析任务。

Notebook

Notebook是一个交互式应用程序，提供开发调试、代码运行、文档编写和结果展示等功能。Notebook使您无需关心分析软件包的安装、升级和维护等工作，只需聚焦于科研工作，从而加快科研进展。

镜像

Docker镜像是一个模板，是容器应用打包的标准格式，在部署容器化应用时可以指定镜像。例如一个Docker镜像可以包含一个完整的Ubuntu操作系统环境，里面仅安装了用户需要的应用程序及其依赖文件。

空间

空间是AI科学计算服务的一个工作空间，可以在空间中存储数据，上传镜像和创建分析作业。也可以将团队成员引入到空间中，并通过划分角色实现空间权限的划分。

空间管理是以空间为粒度对数据、分析作业、小分子药物设计作业、Notebook和镜像等进行分组。以使用户通过空间进行资源的访问、共享和协作。