

AI 科学计算服务

快速入门

文档版本 01
发布日期 2025-07-08



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 使用预置模型创建分子优化作业.....	1
1.1 场景描述.....	1
1.2 准备工作.....	1
1.3 操作流程.....	1
2 自定义镜像运行流程.....	20
2.1 场景描述.....	20
2.2 准备工作.....	20
2.3 操作流程.....	21
2.4 配置命令行工具.....	39
2.4.1 步骤 1: 获取认证信息.....	39
2.4.2 步骤 2: 获取命令行工具.....	40
2.4.3 步骤 3: 初始化配置.....	43

1 使用预置模型创建分子优化作业

1.1 场景描述

本章节以分子优化为例，基于盘古药物分子大模型，以参考化合物为起点，针对给定的期望理化性质，得到性质更优、结构新颖、与靶点蛋白亲和力高的化合物。

旨在帮助您了解AI科学计算服务小分子药物设计的基本使用流程以及相关的常见问题，帮助您快速上手AI科学计算服务。

1.2 准备工作

- [注册华为账号并开通华为云](#)，并进行[账号实名认证](#)。购买服务时，账号不能处于欠费或冻结状态。
- 购买服务时，需使用华为主账号购买。如果不确定账号类型，可登录[账号中心](#)查看所属账号是主账号还是子账号（IAM账号）。

在账号中心左侧导航栏中有“我的主账号”页签，则说明是子账号；没有“我的主账号”页签，则说明是主账号。

图 1-1 查看账号信息



1.3 操作流程

分子优化操作流程如[操作流程](#)所示。

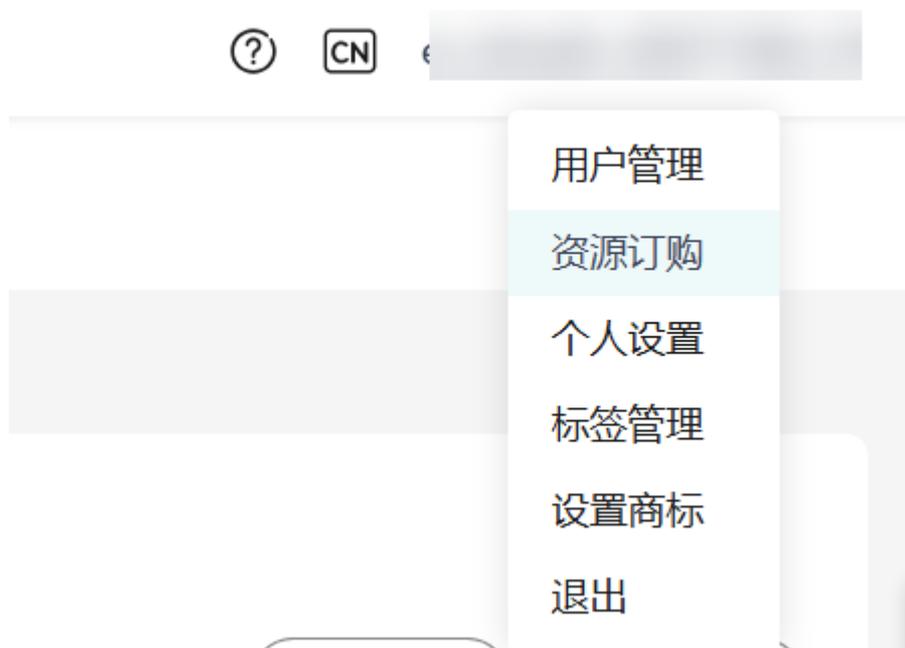
表 1-1 操作流程

操作步骤	说明
步骤一：购买盘古药物分子大模型	需要完成相关订购后才可创建分子优化作业。
步骤二：创建空间	在AI科学计算平台创建新空间，并在空间范围内上传数据、创建作业等。
步骤三：添加数据	支持数据的添加、导入、引用、复制、删除等操作。
步骤四：创建药物作业	通过资产市场页面创建。
步骤五：获取结果	查看运行结果、收藏结果、分子详情、作业信息、聚类分析等。

步骤一：购买盘古药物分子大模型

步骤1 进入AI科学计算平台后，左上角“单击”用户名，选择“资源订购”。

图 1-2 资源订购



步骤2 订购盘古药物分子大模型，可选择按需或者包周期。

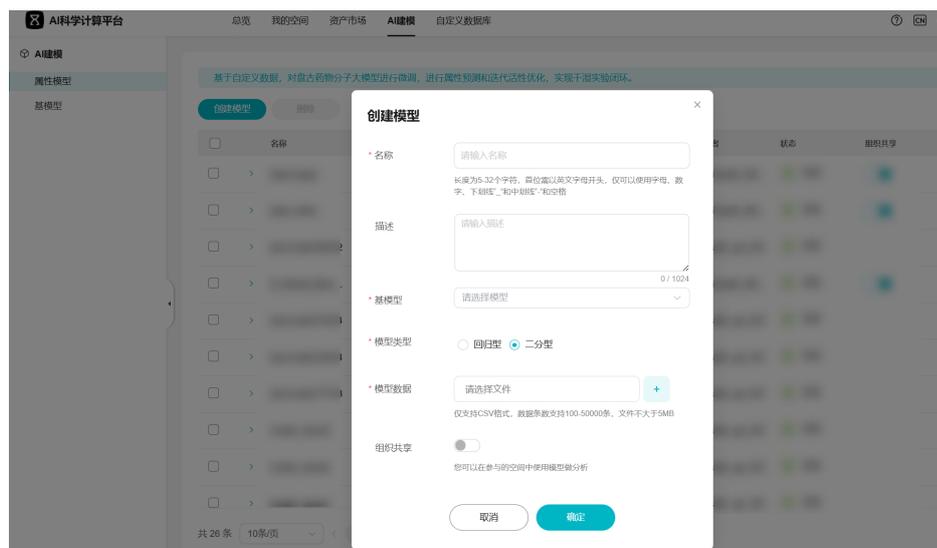
图 1-3 订购盘古药物分子大模型



步骤3 (可选) 订购AI制药API套餐包。

步骤4 可正常创建药物作业和提交属性模型作业。

图 1-4 正常创建模型作业



---结束

步骤二：创建空间

您可以在AI科学计算平台创建新空间，并在空间范围内上传数据、创建作业等。“空间列表”展示了当前用户有权限访问的空间。

图 1-5 创建新空间



创建新空间时可直接创建一个OBS桶，也可使用已有的桶。

图 1-6 创建新空间 2

创建新空间

空间名称

空间名称

空间名称不可更改, 请谨慎操作

描述

空间描述

0 / 1024

OBS桶

新建桶 选择已有桶

使用OBS桶存储数据会产生一定的费用, 具体计费详情请参考 [OBS计费说明](#)。

取消 确定

创建桶的命名遵循obs桶命名规则:

- 需全局唯一, 不能与已有的任何桶名称重复, 包括其他用户创建的桶。用户删除桶后, 立即创建同名桶或并行文件系统会创建失败, 需要等待30分钟才能创建。
- 长度范围为3到63个字符, 支持小写字母、数字、中划线 (-)、英文句号 (.)。
- 禁止两个英文句号 (.) 相邻, 禁止英文句号 (.) 和中划线 (-) 相邻, 禁止以英文句号 (.) 和中划线 (-) 开头或结尾。
- 禁止使用IP地址。

说明

使用OBS桶存储数据会产生一定的费用, 具体计费详情请参考[OBS计费说明](#)。

步骤三: 添加数据

在添加数据前, 您可以创建存储数据的文件夹, 将数据存储在对应的文件夹中。如果已有存储数据的文件夹, 可以直接添加数据。

(可选) 新建文件夹

1. 单击空间名称, 并选择“数据”。
2. 单击“新建文件夹”, 创建文件夹。

图 1-7 新建文件夹



说明

文件夹名称命名规则：

- 支持创建单个文件夹和多层级的文件夹。
- 单个斜杠 (/) 表示分隔并创建多层级的文件夹。
- 单个文件夹名称不能包含以下字符：\ / : ; * ? < " > |。
- 文件夹的绝对路径总长度不能超过1023字符。
- 文件夹名称不能以英文句号 (.) 或斜杠 (/) 开头或结尾。
- 不能包含两个以上相邻的斜杠 (/)。
- 文件夹名称不能以中划线 (-) 开头。
- 多层文件夹不能超过45层。
- 数据列表按照先文件夹后文件的顺序排列。文件夹默认为首字母排序，文件可按照时间顺序排序，但始终在文件夹后面显示。

上传数据

1. 在“数据”页签，选择数据需要上传的文件夹并单击“添加数据”，或者直接单击“添加数据”。

图 1-8 添加数据



2. 在添加数据页面，可以直接将文件拖拽至上传文件区域，也可以单击“拖拽或点击上传文件”区域，上传待分析数据。

图 1-9 上传文件



3. 数据上传成功后，单击“确定”。

说明

上传文件大小不能超过1GB。

更多添加数据方式，请查看《用户指南》手册“添加数据”章节。

步骤四：创建药物作业

分子优化基于盘古药物分子大模型，以参考化合物为起点，针对给定的期望理化性质，得到性质更优、结构新颖、与靶点蛋白亲和力高的化合物。

1. 在“资产市场 > 小分子药物设计”页面，单击“分子优化”功能卡片的“立即使用”。

图 1-10 立即使用



2. 选择空间后，单击“确定”进入配置页面。支持在已有空间选择空间或者新建空间。

图 1-11 选择空间



3. 在白框内输入需要优化的小分子SMILES表达式或者上传分子文件。上传的文件支持SDF、MOL2、PDB、SMI格式。

图 1-12 输入分子



4. 单击“下一步”，进入靶点设置（可选步骤）。

如果需要设置靶点，并且将对接结合能作为一个约束条件进行优化，需要进行配置。最多可添加2个靶点。在添加靶点后，会进行单分子预对接，可查看Top1的对接打分与构象。

如果不需要设置靶点，此步骤可以进行省略，如果设置了靶点，作业运行时间会加长。

图 1-13 靶点设置

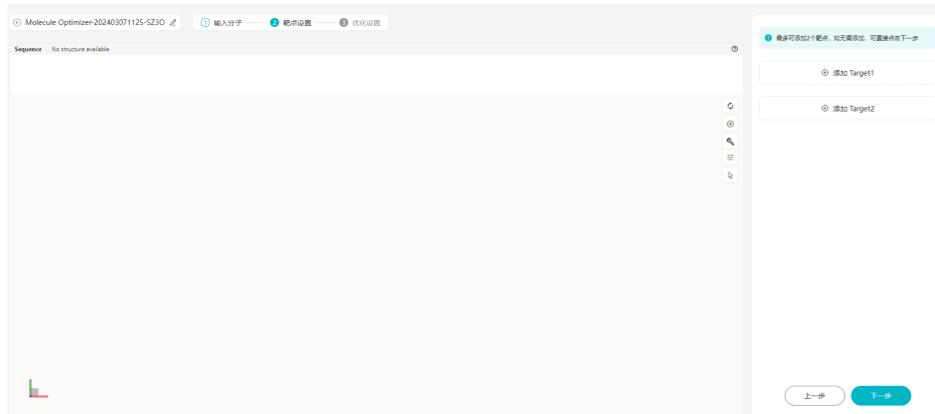


图 1-14 Target 设置

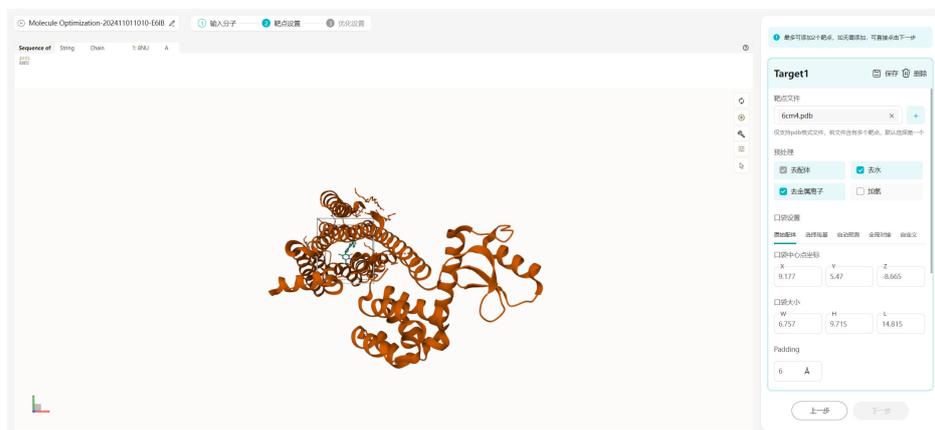


图 1-15 靶点设置完成



a. 通过“靶点设置”上传靶点，并且设置对接口袋。

此处靶点设置为可选参数，如果选择靶点设置，可以将对接活性作为一个约束条件进行分子优化。靶点1对应的约束条件是target1_binding_energy，靶点2对应的约束条件是target2_binding_energy。

您可以通过“上传靶点”，将受体文件上传。受体文件仅支持pdb格式的文件，提交任务时系统会自动删除受体中包含水、配体和金属离子。删除受体文件后，运行任务时会跳过靶点设置步骤。

b. 口袋设置。

■ 原始配体

将原始配体作为口袋位置，也可以通过上传配体文件来进行口袋设置。

■ 选择残基

选择某些残基来作为口袋位置。

■ 自动预测

如果没有受体口袋位置未知，可以使用自动预测软件来进行口袋位置预测。

■ 全局对接

将整个受体作为口袋位置。

■ 自定义

手动修改口袋位置和大小。

■ padding

口袋位置放大多少尺寸。

c. 对接引擎类型：DSDP、AutoDock Vina。

5. 单击“下一步”，进入优化设置页面。

图 1-16 优化设置页面 (1)

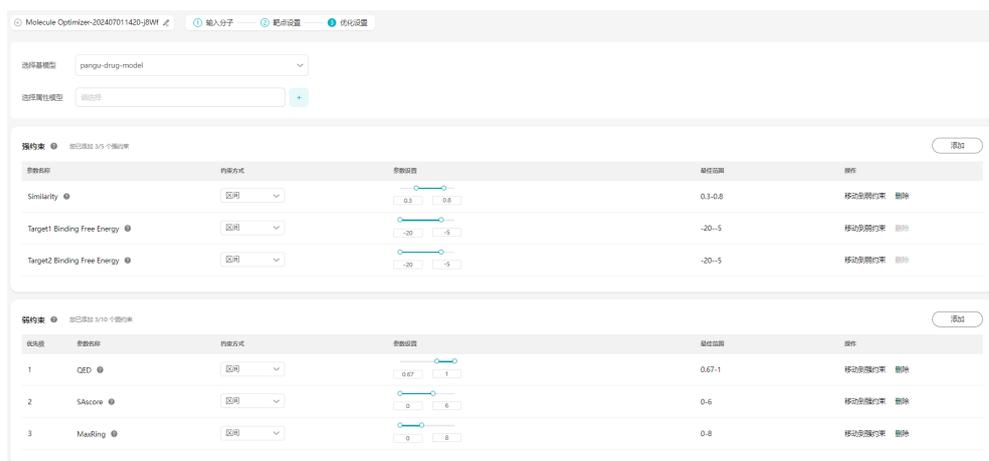


图 1-17 优化设置页面 (2)



- 选择基模型：支持选择基模型。如果选择的基模型是非官方盘古药物大模型，则约束条件不支持官方机器学习属性，只支持以该基模型创建的属性模型作为约束条件。基模型列表见[AI建模](#)。
- 选择属性模型：选择AI模型。如果需要创建模型，可参考[属性模型](#)。一次最多可以选10个模型属性。属性模型的基模型必须与上一步所选择的基模型一致。
- 优化强约束、弱约束的参数和参数值。
 - 强约束：优化后的小分子必须要满足的约束条件。强约束用于严格筛选输出分子，若分子不满足其中任何一条约束则会被直接丢弃。强约束条件个数1~3个最佳，不宜过多，过多的强约束会导致输出结果数量少于预期或者没有分子生成。如果设置的官能团结构太大，建议放到弱约束，因为这样设置会使模型可探索的区间比较小，导致可能没有结果生成。如果分子较难优化，优化后的分子数过少，建议可以适当放宽强约束的条件设置，比如相似度可以放宽到0.3~1.0。如果分子较易优化，优化后的分子相似度较高，新颖性较低，建议可以适当收紧强约束的条件设置，比如相似度可以收紧到0.3~0.7等等，正常情况下相似度设置按照默认即可。
 - 弱约束：优化后的小分子不必要满足的约束条件。弱约束用于打分排序最终结果，输出分子会按照弱约束顺序尽可能多地满足所有弱约束；不

满足弱约束的结果依然会被保留在结果中，对于一个比较关注且重要的分子属性，建议放到强约束条件设置里，因为弱约束不会做过滤。

如果进行了“靶点设置”，会自动加上相应靶点的“Binding Free Energy”才会计算对接结合能，并将对接结合能作为约束条件进行分子优化。

您可以通过“添加”来添加新的约束条件，也可以在操作列单击删除图标，删除约束参数。每个约束参数的含义参考[小分子药物设计相关参数](#)。

强约束最多选择5个，仅Substructure和Interaction参数可重复选择，其余不可以；弱约束最多选择10个，可以重复选择，弱约束的初始权重与弱约束的顺序有关，弱约束条件越靠前则初始权重越大。

- 输出个数：选择输出个数，目前支持500、1000、5000。输出个数越多，任务时间越长。
- 名称：可修改，修改后左上角也同步修改。长度为5~64个字符；仅可以使用字母、数字、下划线“_”、中划线“-”和空格；首位只能以数字或字母开头。
- 初始化采样权重：设置越大，优化的小分子新颖性越低，设置越小，优化的小分子新颖性越高。
- 选择属性模型：选择AI模型。如果需要创建模型，可参考[AI建模](#)。一次最多可以选10个模型属性。
- 标签：设置任务标签。
- 功能调用消耗：运行一次作业会消耗对应的调用次数。

说明

优化后的小分子在满足强约束条件的基础上，会根据满足弱约束条件的权重总和以及与参考小分子的相似度来打分并进行排序。在初始化权重的基础上，每个约束所占的权重，会在每一轮的分子优化迭代中，根据所满足的约束来进行动态调整。比如说约束条件1，在分子优化迭代中比较容易满足，那么该条件的权重会降低，如果不容易满足，该条件的权重会升高。

如果需要设置官能团的约束，可以在约束条件中设置“Substructure”，然后选择“包含”或者“排除”，包含官能团或者去除官能团条件，设置1个官能团数为佳。在官能团设置中，可以单击蓝色按钮来设置生长方向，即所优化的分子只会往所标记的方向生长。如果在一个Substructure约束条件里面添加多个官能团，则官能团之间的关系是“或”，即生成的分子满足其中一个官能团即可。如果添加多个Substructure约束，则官能团之间的关系是“和”，即生成的分子都会满足这几个官能团。

如果需要设置相互作用力的约束，可以在约束条件中设置“Interaction”，然后选择“包含”或者“排除”，包含相互作用力或者去除相互作用力。在相互作用力约束条件设置中，可以选择相应的靶点、氨基酸和相互作用力，相互作用力支持H bond, Hydrophobic, Salt Bridge, Pi Stacking, Pi Cation。如果在一个Interaction约束条件里面添加多个相互作用力，则相互作用力之间的关系是“或”，即生成的分子满足其中一个相互作用力即可。如果添加多个Interaction约束，则相互作用力之间的关系是“和”，即生成的分子都会满足这几个相互作用力。

约束方式，包含“区间”，“最大化”和“最小化”种方式，“区间”指的是所选择的属性包含在所设置的参数设置区间内。“最大化”指的是所设置的属性越大越好，而不只是限定在某区间内，当无法判断属性应该设置在什么区间，但是属性越高，成药性越好，可以设置属性设置条件为最大化，这个只能在弱约束里面进行设置。“最小化”指的是所设置的属性越小越好，与最大化相反，也是只能在弱约束里面进行设置。

相似度分数，是利用ECFP4分子指纹计算优化后分子与原始分子的Tanimoto相似性。设置了禁止优化列表，禁止以高毒性为优化目标的属性优化，列表为：hERG Blockers, H-HT, DILI, AMES, Skin Sensitization, Carcinogenicity, Eye Irritation, Eye Corrosion。

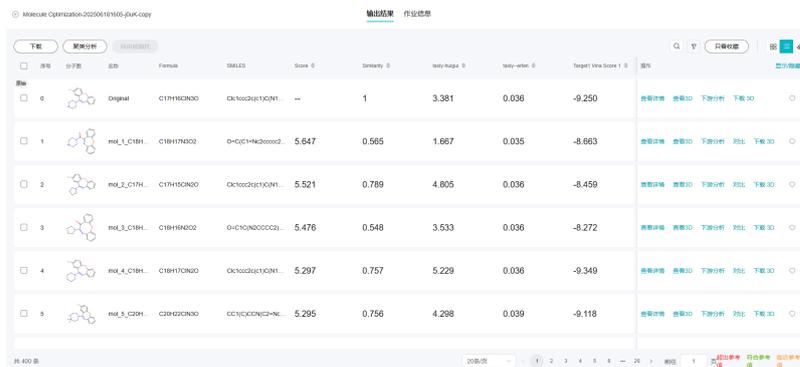
6. 单击“提交”。

步骤五：获取结果

1. 查看运行结果。

- 可以以列表的形式查看分子优化的作业，单击左上角“下载”，下载分子优化的结果或者分子3D构象。如果分子设置了靶点，可以下载小分子或复合物，若分子未设置靶点，只能下载小分子。小分子支持SDF和PDB格式，复合物只支持PDB格式。
- 单击  可以收藏结果，收藏后可直接在收藏夹页查看。
- 分子优化对应的下游分析为分子优化和分子搜索，如果分子设置了靶点，可以选择自由能微扰进行下游分析，通过单击“下游分析”可以进行创建。
- 如果分子设置了靶点，可以单击“下载3D”下载优化后的小分子或者复合物，如果分子未设置靶点，单击“下载3D”只能下载小分子。小分子支持SDF和PDB格式，复合物只支持PDB格式。
- 如果添加了靶点，支持按照相互作用力进行高级筛选，单击  进行条件配置。

图 1-18 查看结果（1）



序号	分子名	结构	Formula	SMILES	Score	Entropy	Entropy-Adj	Entropy-Adj-2	Target Free Energy	操作
0	Original		C17H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	...	1	3.381	0.036	-9.250	查看详情 下载3D 下游分析 下载3D
1	mol_1_C18H16O2		C18H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.647	0.565	1.667	0.035	-8.663	查看详情 下载3D 下游分析 对比 下载3D
2	mol_2_C17H16O2		C17H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.521	0.789	4.805	0.036	-8.459	查看详情 下载3D 下游分析 对比 下载3D
3	mol_3_C18H16O2		C18H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.476	0.548	3.533	0.036	-8.272	查看详情 下载3D 下游分析 对比 下载3D
4	mol_4_C18H16O2		C18H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.297	0.757	5.229	0.036	-9.349	查看详情 下载3D 下游分析 对比 下载3D
5	mol_5_C20H18O2		C20H18O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.295	0.756	4.298	0.039	-9.118	查看详情 下载3D 下游分析 对比 下载3D

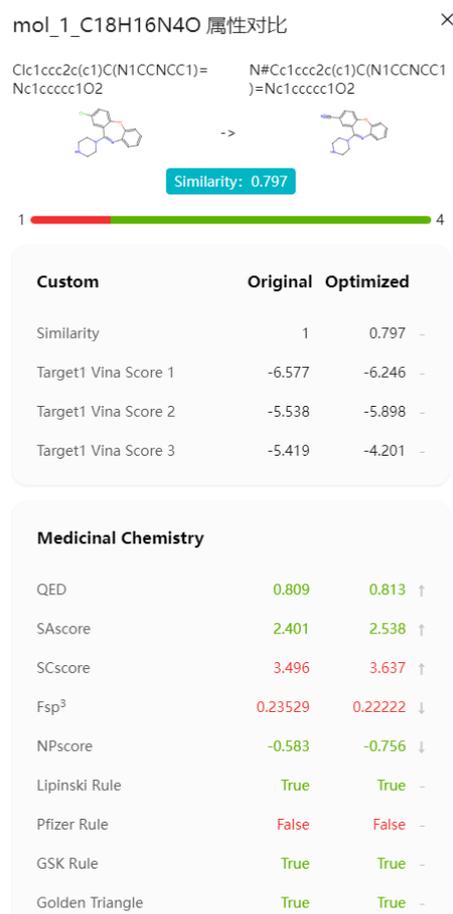
图 1-19 高级筛选

高级筛选

筛选条件: $0.300 \leq \text{Score} \leq 1.895$;



2. 分子优化的结果可以查看原始配体和生成后的配体的结构以及属性值对比，可单击“对比”进行查看。可以直观地看到哪些属性变好了，哪些属性变坏了。

图 1-20 属性对比

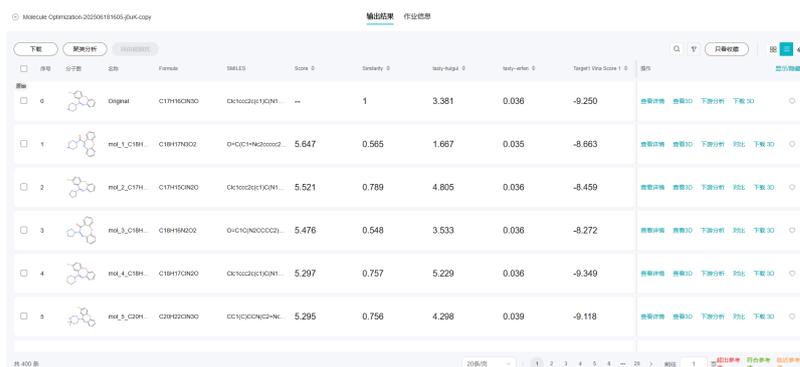
3. 分子优化结果支持以卡片视图的形式进行查看，参考图1-22，在卡片视图中：
- 单击右上方的选择下拉框，可以选择分子的排序方式，将分子按照所选的排序方式进行展示。

图 1-21 排序方式

- 单击每个分子卡片右上方的 可以收藏结果，收藏后可直接在收藏夹页查看。
- 单击每个分子卡片右上方的 ，可以选择“查看详情”、“查看3D”、“下游分析”、“下载3D”。
 - 查看详情：单击查看详情，跳转至分子详情页进行查看。
 - 查看3D：查看分子的3D视图。

- 下游分析：分子优化对应的下游分析为分子优化和分子搜索，如果分子设置了靶点，可以选择自由能微扰进行下游分析，单击“确定”即可创建。
 - 下载3D：如果分子设置了靶点，可以单击“下载3D”下载优化后的小分子或者复合物，如果分子未设置靶点，单击“下载3D”只能下载小分子。小分子下载支持SDF和PDB格式，复合物下载只支持PDB格式。
- 每个分子卡片上会展示相应分子序号与对应的参数Vina Score（有靶点）、Score、Similarity、QED、SaScore
- Vina Score：代表分子如果添加了靶点，将会计算对接结合能，并按照Vina Score进行排序。
 - Score：代表优化后小分子的综合打分。
 - Similarity：代表优化后的分子与原始分子的相似度。
 - QED：代表分子的成药性。
 - SaScore：代表合成可及性分数，旨在评估分子的合成难易程度。

图 1-22 查看结果（2）



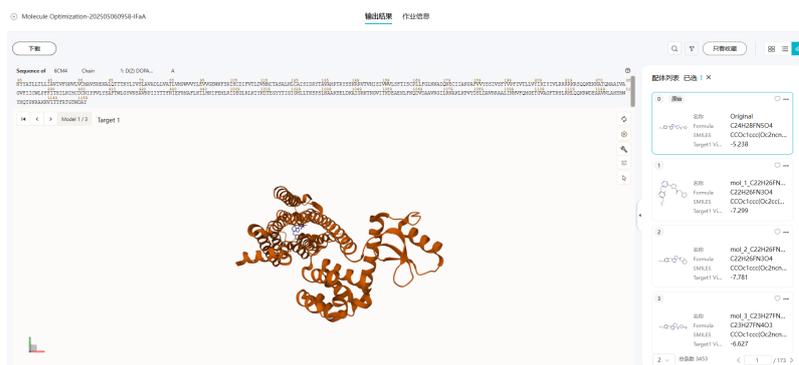
ID	名称	SMILES	Score	Similarity	Vina Score
0	Original	C17H16O2	...	1	-9.250
1	mol_1_C17H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.847	0.565	-8.663
2	mol_2_C17H16O2	C1=CC=CC=C1C=O	5.521	0.789	-8.459
3	mol_3_C17H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.476	0.548	-8.272
4	mol_4_C17H16O2	C1=CC=CC=C1C=O	5.297	0.757	-9.349
5	mol_5_C17H16O2	O=C1C=CC(=O)C=C1	5.295	0.756	-9.118

单击“查看3D”，可以看到分子的3D构象，如果设置了靶点，还可以看到优化后的小分子与靶点的结合构象。

如果上传了双靶点，可以通过切换 $\langle 1/2 \rangle$ 来切换靶点，查看相应靶点和优化后分子的结合构象。如果设置了两个靶点会默认下载两个靶点的结果。

单击配体列表的  可以收藏结果，收藏后可直接在收藏夹页查看。

图 1-23 查看 3D 图

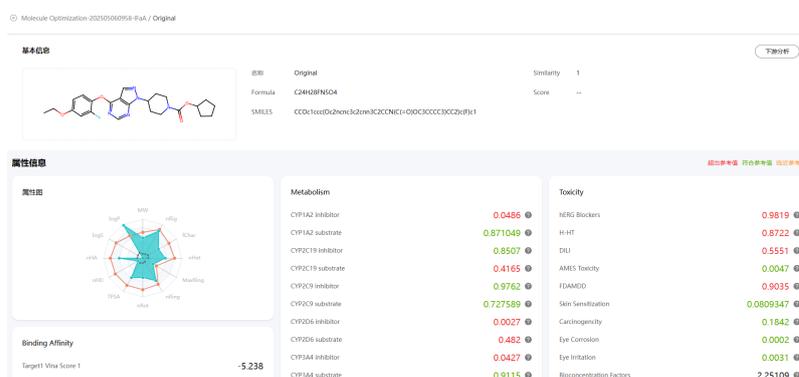


在查看3D的页面中，单击右侧的配体列表中，每个配体卡片右上角的“...”图标，可以查看：

- 查看详情：可以查看每个分子的属性信息，score和similarity。
- 查看属性：查看每个配体的分子属性。
- 查看2D相互作用图：查看配体中分子之间的2D相互作用图，并且可以进行图片下载。
- 下游分析：分子优化对应的下游分析为分子搜索和分子优化，如果分子设置了靶点，可以选择自由能微扰进行下游分析，单击“确定”即可创建。
- 下载3D：选择下载小分子或者复合物后，单击“确定”，小分子支持SDF和PDB格式，复合物只支持PDB格式。

4. 查看分子详情。

图 1-24 查看分子详情



5. 查看作业信息。

单击“作业信息”切换到作业信息页签，可以查看作业的分子信息、靶点信息与优化信息等。

图 1-25 作业信息



6. 聚类分析

目前分子优化返回的结果小分子数较多，无法进行批量分析，通过一些聚类的辅助方式能更好地选择分子。从每个类里挑选出一两个分子进行后续分析和验证，提高分析的效率和分析质量。也可以通过聚类找出一些关键的骨架，来进行下游分析或者优化等。

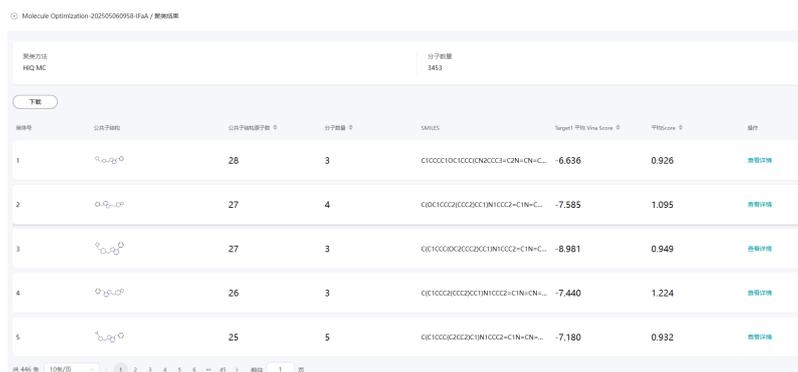
- 在输出结果页面左上角单击“聚类分析”后，系统开始进行分析，同时显示“聚类分析中”。

图 1-26 聚类分析



- 待聚类分析完成后，单击“查看聚类结果”。进入聚类结果页。
- 在聚类结果页面，可以查看每个聚类的分子数量等信息。

图 1-27 查看聚类结果



名称	公共子结构	公共子结构原子数	分子数量	SMILES	Target1 平均 Vina Score	平均 Score	操作
1		28	3	C1CCCC1OC1CCCNCCCC=C2N=CNC=C...	-6.636	0.926	查看详情
2		27	4	C1C1CCCC2C1CC2C1N1CCCC2=C1N=C...	-7.585	1.095	查看详情
3		27	3	C1C1CCCC2C1CC2C1N1CCCC2=C1N=C...	-8.981	0.949	查看详情
4		26	3	C1C1CCCC2C1CC2C1N1CCCC2=C1N=C...	-7.440	1.224	查看详情
5		25	5	C1C1CCCC2C1CC2C1N1CCCC2=C1N=C...	-7.180	0.932	查看详情

- 单击某个聚类的操作列的“查看详情”，即可进入聚类详情页面，聚类详情页支持以卡片、列表以及3D的形式查看。默认展示卡片页面，用户可自行进行切换。

说明

- 每个结果页面只用进行一次聚类分析操作。
- 聚类结果是存成文件，如果文件被删或者获取不到的话会有警告，聚类结果不存在。此时可以单击“重新聚类分析”。
- 如果聚类失败，根据提示失败原因解决问题后，可单击“重新聚类分析”。

2 自定义镜像运行流程

2.1 场景描述

应用是运行作业的最小单位，每个应用依托于一个镜像进行创建。本示例中制作 bioifo_demo 镜像，并基于镜像创建 multifasta 应用、搭建流程、运行分析作业。

旨在帮助您了解 AI 科学计算服务如何创建分析作业并获取作业结果，帮助您快速上手 AI 科学计算服务。

镜像简介

运行生物信息学软件，往往由于不同的操作系统（Windows、Linux、Mac 等）原因，无法实现统一的运维管理。同时，这些软件具有不同的版本和软件包，安装、使用过程复杂。将生物信息学软件封装成 Docker 镜像，可以使程序在不同的环境中运行，并通过 AI 科学计算平台的镜像管理，实现高效的调用，极大方便了软件的安装和运行。

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。

AI 科学计算服务使用容器镜像服务（Software Repository for Container，简称 SWR）进行简单易用、安全可靠的镜像管理。单击空间名称，进入所选空间，在“镜像”页签中，以列表形式展示了空间中的镜像。您可查看镜像的详细信息，执行删除和查询操作。

2.2 准备工作

- [注册华为账号并开通华为云](#)，并进行[账号实名认证](#)。购买服务时，账号不能处于欠费或冻结状态。
- 购买服务时，需使用华为主账号购买。如果不确定账号类型，可登录[账号中心](#)查看所属账号是主账号还是子账号（IAM 账号）。

在账号中心左侧导航栏中有“我的主账号”页签，则说明是子账号；没有“我的主账号”页签，则说明是主账号。

图 2-1 查看账号信息



2.3 操作流程

自定义镜像运行流程的操作流程如表2-1所示。

表 2-1 操作流程

操作步骤	说明
步骤一：绑定资源	购买并绑定计算集群。
步骤二：创建空间	在AI科学计算平台创建新空间，并在空间范围内上传数据、创建作业等。
步骤三：从dockerhub下载镜像	从dockerhub下载镜像。
步骤四：上传镜像至AI科学计算平台	上传bioifo_demo镜像至AI科学计算平台。
步骤五：创建multifasta应用	基于bioifo_demo镜像创建multifasta应用。
步骤六：搭建流程、运行作业	基于multifasta应用搭建流程并启动作业。
步骤七：获取分析结果	查看作业信息、输入输出数据等信息。

步骤一：绑定资源

AI科学计算服务的分析作业是以容器的形式在CCE集群中运行，用户可在平台绑定本账号下的CCE集群用于此功能的运行。

📖 说明

- 当前仅支持CCE集群1.23&1.25&1.28版本。
- 如果您没有可用的CCE集群，需先创建CCE集群。CCE 1.28集群版本支持通过控制台或API方式创建，CCE 1.23和CCE 1.25版本支持通过API方式创建。不同版本的CCE集群创建方式请见[Kubernetes版本策略](#)。
- 如果您已有CCE集群，但CCE集群版本低于1.23，则可参考[升级集群的流程和方法](#)，建议将集群升级至1.28版本。

具体操作步骤如下：

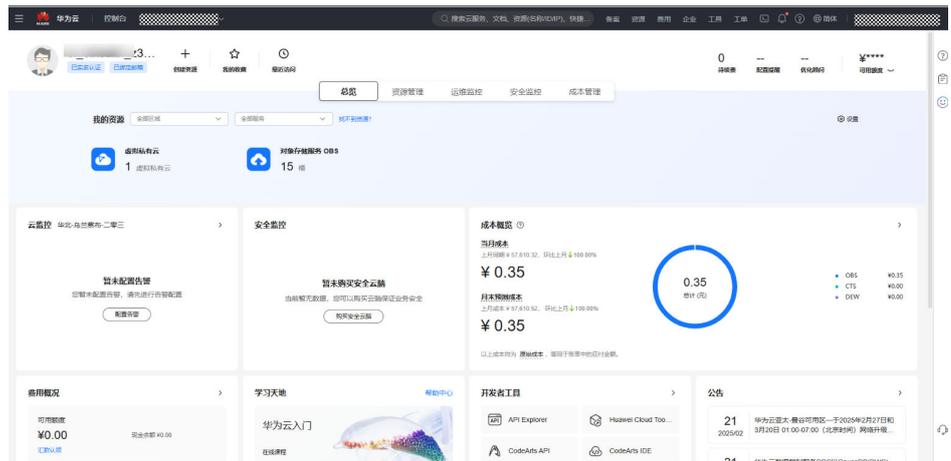
步骤1 购买CCE集群并进行相关配置

首先，用户需要购买CCE集群并进行相关配置，以满足AI科学计算服务使用的要求，具体操作指导如下：

1. 创建虚拟私有云

- 登录华为云**控制台**。

图 2-2 控制台



- 左上角打开服务搜索页面，搜索“vpc”，单击进入“虚拟私有云”服务。

图 2-3 虚拟私有云



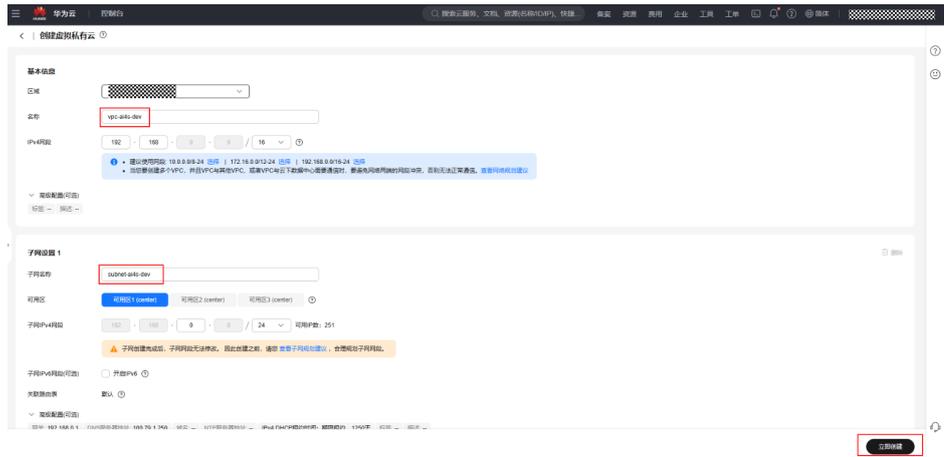
- 单击右上角“创建虚拟私有云”按钮。

图 2-4 创建虚拟私有云



- 虚拟私有云名称与子网名称可以根据用户要求自行修改，其他配置默认即可，最后单击右下角“立即创建”按钮。

图 2-5 立即创建



- 检查创建好的虚拟私有云如图2-6所示。

图 2-6 创建好的虚拟私有云



- 检查创建好的子网如图2-7所示。

图 2-7 创建好的子网



2. 创建CCE集群

- 左上角打开服务搜索页面，搜索“cce”，单击进入“云容器引擎”服务。

图 2-8 云容器引擎



- 新账号首次进入“云容器引擎”服务界面，会弹窗提示授权，单击“确定”按钮即可。

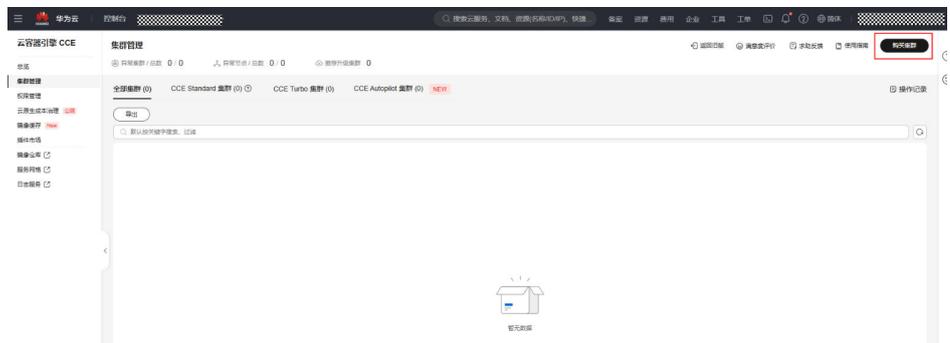
如果没有弹窗，说明以前创建过授权，可以跳过此步骤继续往下进行。

图 2-9 提示授权



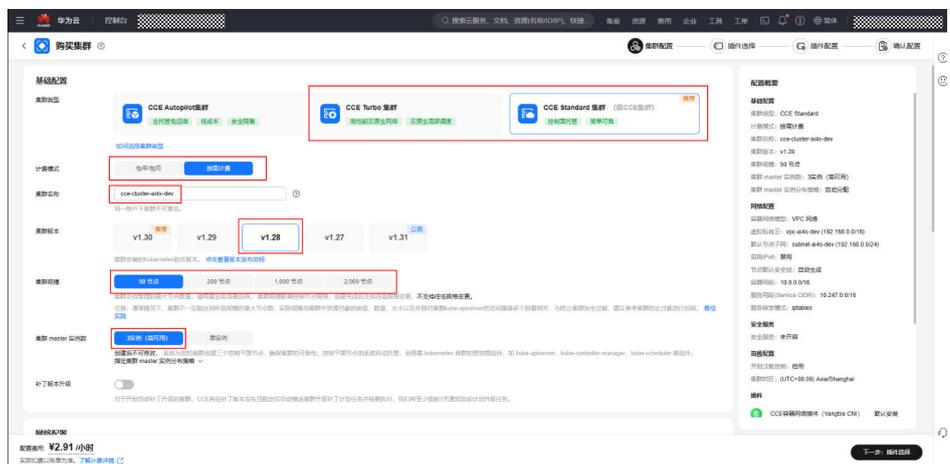
- 单击右上角“购买集群”按钮。

图 2-10 购买集群



- 在集群配置页面，根据自己需要进行设置，基础配置可参考如下：
集群类型：可选“CCE Turbo 集群”或“CCE Standard 集群”。
计费模式：可选“包年/包月”或“按需计费”。
集群版本：建议选择v1.28。
集群规模：根据使用场景可选“50节点”、“200节点”、“1000节点”或“2000节点”。
集群master实例数：建议选择“3实例（高可用）”。

图 2-11 基础配置



说明

AI科学计算服务只支持v1.28、v1.25、v1.23三个版本的CCE集群，且当前CCE页面可直接选择v1.28。如果用户需要使用v1.25或v1.23版本CCE集群，可参考CCE操作指导使用api接口创建。

- 网络配置可参考如下：

虚拟私有云与默认节点子网：选择上一步骤中创建的**虚拟私有云与子网**。

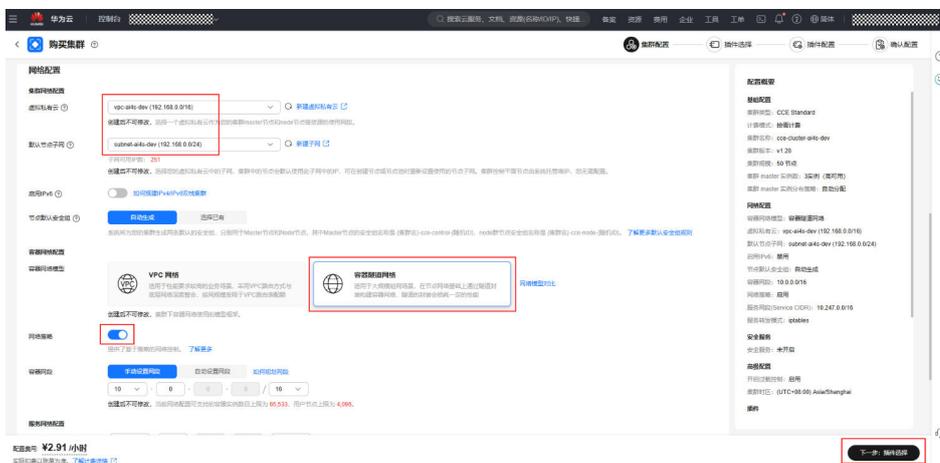
容器网络模型：建议选择“容器隧道网络”。

网络策略按钮：默认打开。

其他配置保持默认。

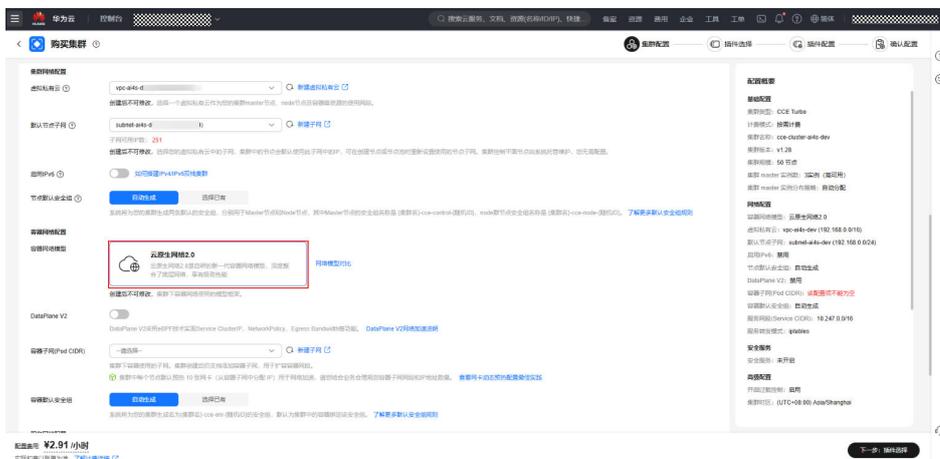
最后单击右下角“下一步：插件选择”按钮。

图 2-12 网络配置-CCE Standard 集群



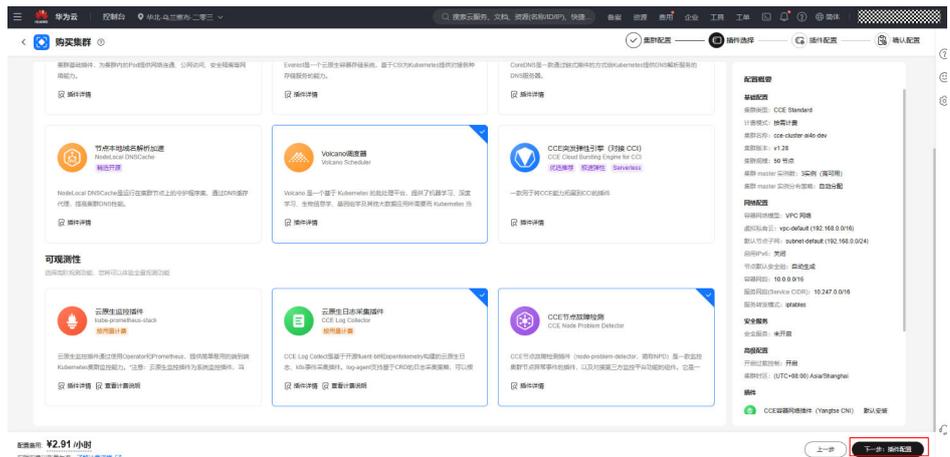
文档以“CCE Standard 集群”为例，如果选择创建“CCE Turbo 集群”，则容器网络模型只有“云原生网络2.0”，其他配置方式相同。

图 2-13 网络配置-CCE Turbo 集群



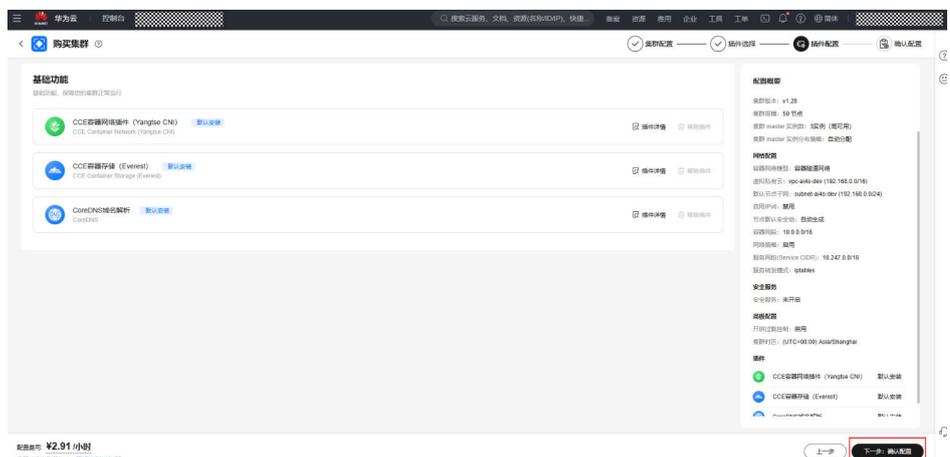
- 插件选择页面，单击勾选“Volcano调度器”、“云原生日志采集插件”、“CCE节点故障检测”插件，单击右下角“下一步：插件配置”按钮。

图 2-14 插件选择



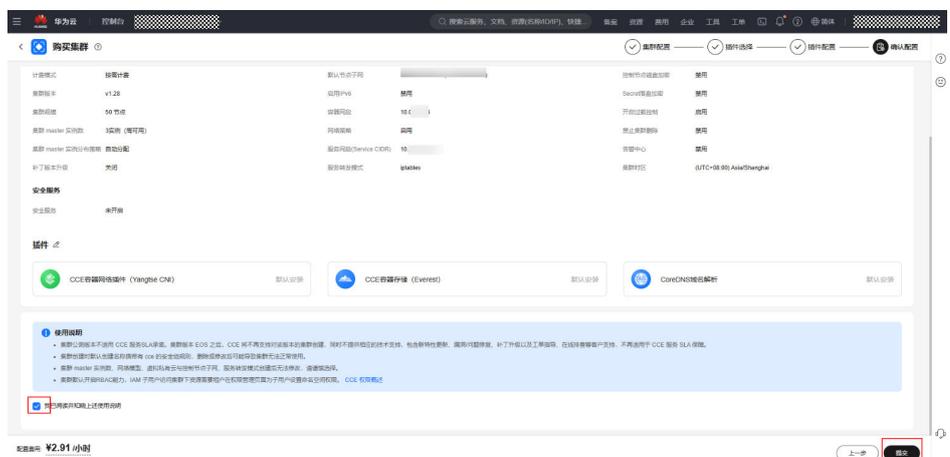
- 插件配置页面，不需要操作，直接单击右下角“下一步：确认配置”按钮。

图 2-15 插件配置



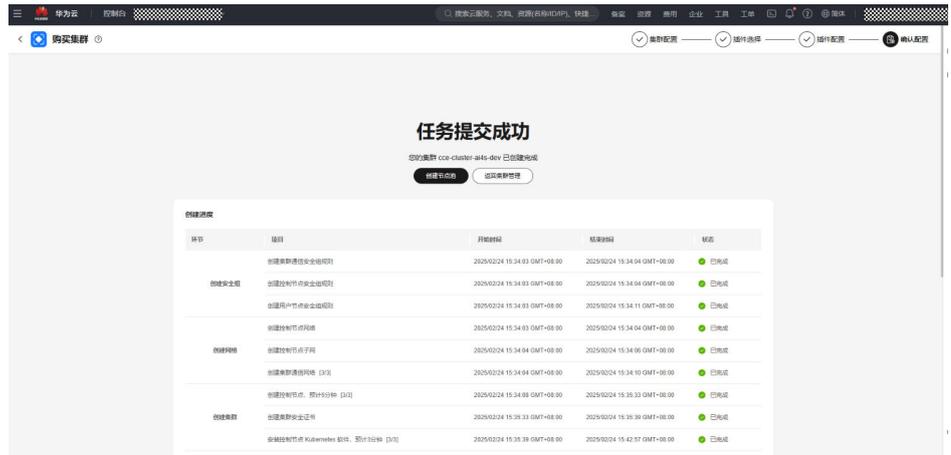
- 确认配置页面，左下角勾选“我已阅读并知晓上述使用说明”，然后单击右下角“提交”按钮。

图 2-16 确认配置



- 创建集群任务提交成功后，等待几分钟，集群创建成功，页面显示如图16 任务提交成功。

图 2-17 任务提交成功



- 云容器引擎集群管理页面，集群展示如图17 集群管理所示。

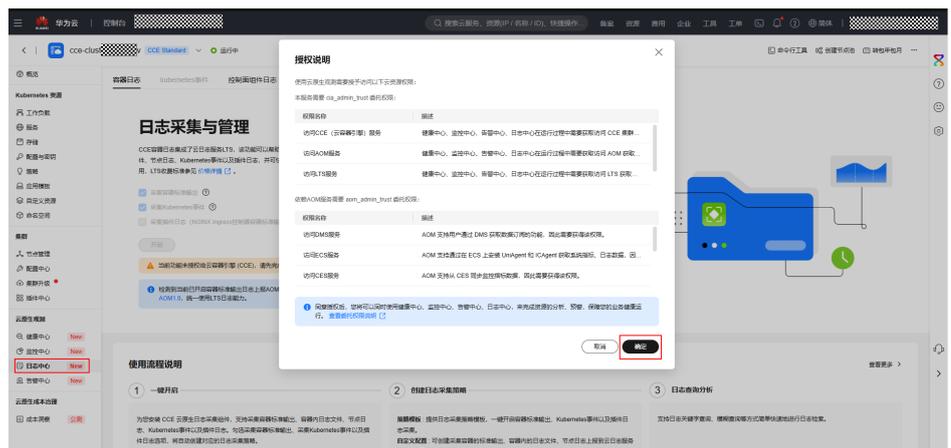
图 2-18 集群管理



3. 打开日志采集配置

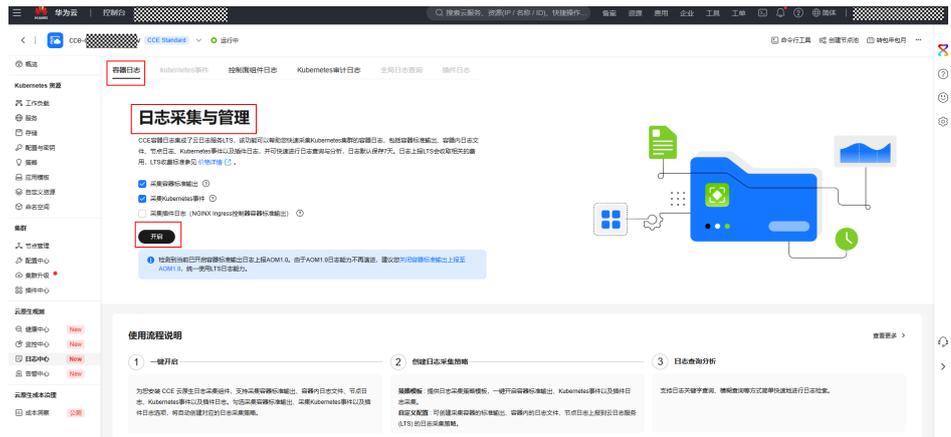
- 单击集群名称，找到日志中心-->授权说明弹窗，单击“确定”按钮。

图 2-19 授权说明



- 在容器日志界面，日志采集与管理下方，单击“开启”按钮。

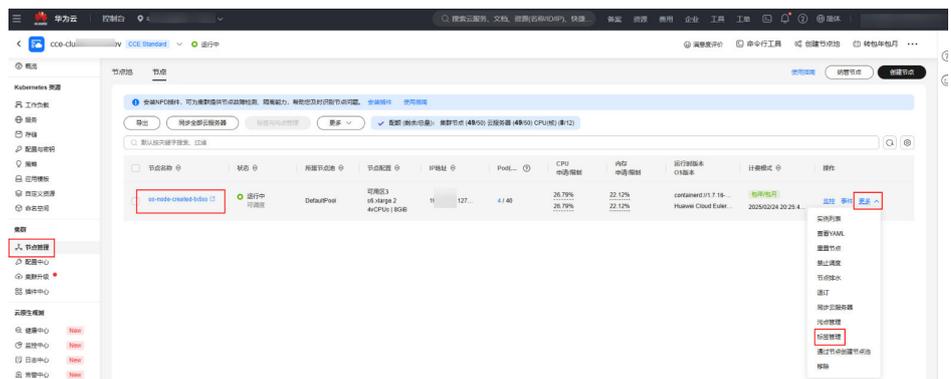
图 2-20 开启日志采集与管理



4. 节点标签配置

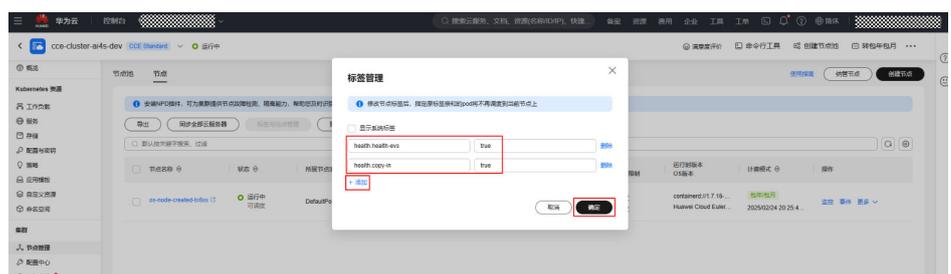
- 用户根据自己需要创建好节点后，单击右侧“更多 > 标签管理”按钮。

图 2-21 标签管理



- 在标签管理弹窗单击“+添加”按钮添加标签，然后单击“确定”按钮。

图 2-22 添加标签



平台功能涉及标签及对应功能如表2-2所示，请用户根据需求进行标签配置，以控制分析作业的部分任务的调度节点。

表 2-2 平台功能涉及标签及对应功能

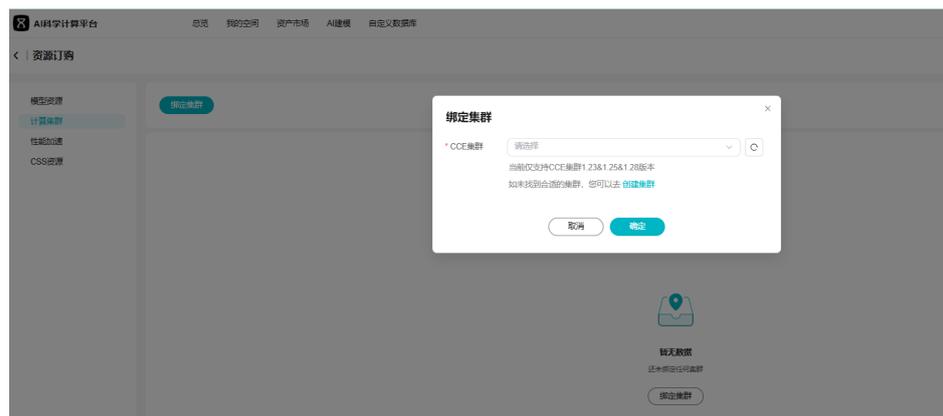
标签	功能
health-eva=true	若存在节点挂载了容量较大的数据盘，分析作业的加速方式选择了“本地盘加速”，则需在该节点配置标签，使得作业可调度到该节点上。
health.copy-in=true	若分析作业的加速方式选择了“IO加速”，则需选择节点配置标签使得作业可调度到该节点上。
health.{自定义}=true	若分析作业的高级参数中配置了“计算节点标签”，则需在希望调度上的节点配置相应标签。

若用户新增了其他节点，需重复以上动作进行标签配置。

步骤2 完成[CCE集群创建](#)后，用户可进入[AI科学计算平台](#)进行计算集群绑定。

1. 单击右上角账号名，选择“资源订购”，进入“计算集群”页面，单击“绑定集群”按钮。

图 2-23 绑定集群



2. 在“绑定集群”弹窗中，选择[上面步骤](#)创建的CCE集群。

图 2-24 绑定集群 2



说明

此处仅展示符合AI科学计算服务约束的CCE集群。若未展示，请检查集群类型、集群版本是否在支持的版本范围内，集群状态是否为可用状态。

- 单击绑定后，查看集群绑定状态为“绑定中”，需等待几分钟。绑定完成后，即可使用Notebook和分析作业功能模块。

图 2-25 绑定中



----结束

步骤二：创建空间

您可以在AI科学计算平台创建新空间，并在空间范围内上传数据、创建作业等。“空间列表”展示了当前用户有权限访问的空间。

图 2-26 创建新空间



创建新空间时可直接创建一个OBS桶，也可使用已有的桶。

图 2-27 创建新空间 2

创建新空间

空间名称

空间名称

空间名称不可更改, 请谨慎操作

描述

空间描述

0 / 1024

OBS桶

新建桶 选择已有桶

使用OBS桶存储数据会产生一定的费用, 具体计费详情请参考 [OBS计费说明](#)。

取消 确定

创建桶的命名遵循obs桶命名规则：

- 需全局唯一，不能与已有的任何桶名称重复，包括其他用户创建的桶。用户删除桶后，立即创建同名桶或并行文件系统会创建失败，需要等待30分钟才能创建。
- 长度范围为3到63个字符，支持小写字母、数字、中划线（-）、英文句号（.）。
- 禁止两个英文句号（.）相邻，禁止英文句号（.）和中划线（-）相邻，禁止以英文句号（.）和中划线（-）开头或结尾。
- 禁止使用IP地址。

说明

使用OBS桶存储数据会产生一定的费用，具体计费详情请参考 [OBS计费说明](#)。

步骤三：从 dockerhub 下载镜像

1. 在linux环境上配置docker环境。

```
curl -fsSL get.docker.com -o get-docker.sh
sh get-docker.sh
```
2. 配置完成后，运行**docker**命令，可查看docker的信息。

图 2-28 docker 信息

```
(base) ~$ docker
Usage: docker [OPTIONS] COMMAND

A self-sufficient runtime for containers

Options:
  --config string      Location of client config files (default "/home/wangbing/.docker")
  -D, --debug          Enable debug mode
  -H, --host list      Daemon socket(s) to connect to
  -l, --log-level string Set the logging level ("debug"|"info"|"warn"|"error"|"fatal") (default "info")
  --tls               Use TLS; implied by --tlsverify
  --tlscert string    Trust certs signed only by this CA (default "/home/wangbing/.docker/ca.pem")
  --tlscert string    Path to TLS certificate file (default "/home/wangbing/.docker/cert.pem")
  --tlskey string     Path to TLS key file (default "/home/wangbing/.docker/key.pem")
  --tlsverify        Use TLS and verify the remote
  -v, --version       Print version information and quit

Management Commands:
  builder      Manage builds
  config       Manage Docker configs
  container    Manage containers
  engine       Manage the docker engine
  image        Manage images
  network      Manage networks
  node         Manage Swarm nodes
  plugin       Manage plugins
  secret       Manage Docker secrets
  service      Manage services
  stack        Manage Docker stacks
  swarm        Manage Swarm
```

3. 构建镜像。

- 可以在dockerhub官网上进行搜索，选择出对应的名称与版本。
- 可以使用**docker search**命令进行搜索镜像。
- 若dockerhub上没有想要的镜像，可以利用基础的操作系统镜像进行构造，构造方式请参见用户指南。

4. 选择和获取镜像。

搜索到的镜像列表中选择一个镜像进行pull，这里以pegi3s/fastqc为例。

```
(base) ~$ docker search fastqc
```

NAME	DESCRIPTION	STARS	OFFICIAL	AUTOMATED
biocontainers/fastqc	Fastqc	4		[OK]
fjukstad/fastqc	fastqc	1		[OK]
dceov/fastqc	FastQC	1		[OK]
pegi3s/fastqc	FastQC (https://www.bioinformatics.babraham...	1		[OK]
maxulyse/fastqc	Archived image for Sarek	1		[OK]
staphb/fastqc	FastQC: A quality control analysis tool for ...	0		
savelabuh/fastqc	Mod of biocontainers version which doesn't s...	0		
sstevens/fastqc	FROM: https://github.com/s-andrews/FastQC	0		
clinicalgenomics/fastqc		0		
nanozoo/fastqc		0		
jjkrc/fastqc		0		
4ndrcic/fastqc		0		
biowardrobe2/fastqc	http://www.bioinformatics.babraham.ac.uk/pro...	0		[OK]
stjudecloud/fastqc		0		
intellisegns/fastqc		0		
umidock/fastqc	A quality control tool for high throughput s...	0		[OK]
singlerecipe/fastqc	Testing fastqc docker	0		[OK]
isaaccliao/fastqc	Concatenate fastqc files	0		
cgbiohub/fastqc		0		
wgspipeline/fastqc		0		
umichrcxcore/fastqc	Container for fastqc used in Orochi suite of...	0		
choclab/fastqc-tiyo	Image for use with https://github.com/chocla...	0		
abralab/fastqc		0		
swrlh/fastqc		0		

5. pull镜像。

若该镜像没有latest版本则需进入dockerhub官网进行查询。

```
(base) ~$ docker pull pegi3s/fastqc:latest
```

6. 查看镜像是否pull成功。

用**docker images**命令查看镜像是否pull成功。如果您本地已经有很多镜像，防止查询出全部镜像，可在**docker images**命令后面添加 **| grep pegi3s**使查询更精准。

```
(base) ~$ docker images |grep pegi3s
```

pegi3s/fastqc	latest	
64070538e7	2 years ago	578MB

7. 查询软件命令，以fastqc为例。熟悉该软件时可跳过。

复制上一步查找到的fastqc的id。利用**docker run imagesId fastqc--help**命令进行查询。**fastqc--help**可以替换成任何fastqc的命令，与linux类似。

```
(base) ~$ docker run 6d64070538e7 fastqc --help
FastQC - A high throughput sequence QC analysis tool

SYNOPSIS

fastqc seqfile1 seqfile2 .. seqfileN

fastqc [-o output dir] [--(no)extract] [-f fastq|bam|sam]
        [-c contaminant file] seqfile1 .. seqfileN

DESCRIPTION

FastQC reads a set of sequence files and produces from each one a quality
control report consisting of a number of different modules, each one of
which will help to identify a different potential type of problem in your
data.

If no files to process are specified on the command line then the program
will start as an interactive graphical application. If files are provided
on the command line then the program will run with no user interaction
required. In this mode it is suitable for inclusion into a standardised
analysis pipeline.

The options for the program as follows:

-h --help          Print this help file and exit
-v --version       Print the version of the program and exit
-o --outdir        Create all output files in the specified output directory.
```

步骤四：上传镜像至 AI 科学计算平台

1. 配置命令行工具。

若已完成配置，可跳过此步骤。

2. 在命令行工具所在的目录，使用switch命令进入AI科学计算平台的空间中。

```
# 命令结构
ai4s switch project <project-name>
# 命令示例，例如进入到名为user-tutorials的空间中
ai4s switch project user-tutorials
```

3. 使用docker tag命令给要上传的镜像打标签。

```
# 给上传的镜像打标签
./ai4s docker tag bioinfo_ubuntu2204 bioinfo_demo:latest
```

```
(base) ~$ docker tag bioinfo_ubuntu2204:latest bioinfo_demo:latest
(base) ~$ docker push bioinfo_demo:latest
The push refers to repository [gene-research/bioinfo_demo]
0002f5bb8823: Pushed
c9d525783a25: Layer already exists
latest: digest: sha256:3a80764a980d2a091bf37e9f55c17b70a3dad4eaf28fae38b2565249e4d46b90 size: 743
```

4. 使用docker push命令将镜像上传至AI科学计算平台。

-t APP 可不加，在平台上也可以对其进行设置，push前需要先switch到对应的空间中
ai4s docker push bioinfo_demo:latest -t APP

```
(base) ~$ docker push bioinfo_demo:latest
The push refers to repository [gene-research/bioinfo_demo]
0002f5bb8823: Pushed
c9d525783a25: Layer already exists
latest: digest: sha256:3a80764a980d2a091bf37e9f55c17b70a3dad4eaf28fae38b2565249e4d46b90 size: 743
```

上传成功后，可以转至平台查看已经上传的镜像。



步骤五：创建 multifasta 应用

上一步骤中，已经将bioifo_demo的镜像上传至平台，本步骤使用该镜像创建multifasta应用。

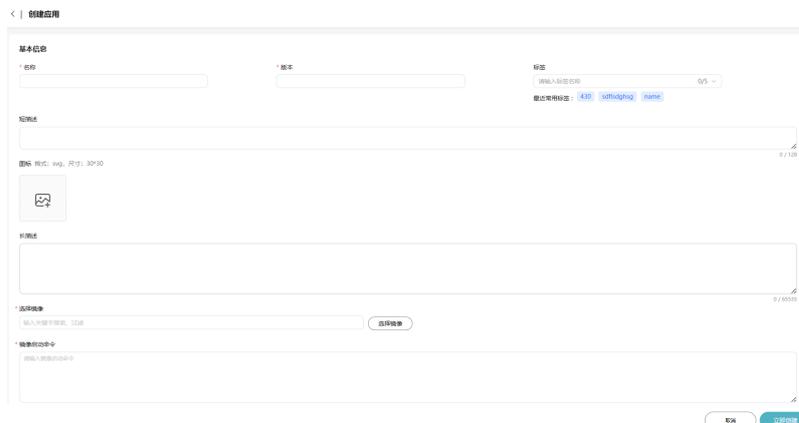
1. 单击“创建应用”，进入创建应用页面。

图 2-29 创建应用



2. 填写应用的基本信息，包括“名称”、“版本”、“图标”、“标签”、“短描述”和“长描述”。

图 2-30 基本信息



3. 选择镜像和镜像版本。

4. 填写镜像启动命令。

镜像启动命令需要引用输入、输出参数中的变量，并以大括号扩起，以\$符号进行引用。

镜像启动命令支持多行输入，每行最多256字符，最多支持300行。

镜像启动命令如下所示。镜像启动命令需要引用输入、输出参数中的变量，并以大括号{}扩起，以\$符号进行引用。

```
bash ${multifasta} -i ${indir} -o ${outfile}
```

图 2-31 选择镜像以及配置镜像启动命令



5. 填写输入参数、输出参数。

参数填写时，输入参数及输出参数有字符串（String），文件（File），文件夹（Directory），枚举（Enum）四种类型。

图 2-32 输入、输出参数

说明

- 对于输入参数，打开“并发”开关，在启动作业时，每个参数可以设置多个参数值，自动生成多个作业并发执行。并发执行的作业数为设置的参数值个数的乘积。
例如，存在输入参数a和输入参数b，在启动作业时，分别给参数a设置了2个参数值，给参数b设置了2个参数值。那么，系统将自动生成4个作业并发执行。
- 对于输出参数，如果镜像启动命令中指定了输出参数，则在设置输出参数时，需要勾选“必传”，并填写“默认值”。
 - 如果输出参数为String，默认值最大长度不超过256，仅支持字母、数字、中划线、下划线、小数点和斜线。
 - 如果输出参数为Enum类型，需填写有效值，并在有效值中选择默认值。

6. 填写资源参数。

填写CPU、Memory大小（内存单位为GB），选择GPU类型。

- CPU架构依赖于制作镜像过程中选择的系统类型，以及制作镜像时所需的生物信息学软件支持在X86还是ARM上运行。例如，GATK是基于X86指令集开发的生信软件，使用CentOS的X86系统创建GATK镜像，则在创建应用时选择“X86”。
- CPU需求：请按实际需求填写，取值范围为“0.1-128”，单位C，支持一位小数，不填默认1C。
- Memory需求：请按实际需求填写，取值范围为“0.1-3072”，单位GB，支持一位小数，不填默认1GB。
- GPU类型：请按实际需求填写，取值范围为“无、GPU、Snt9”，如果选择Snt9，GPU需求需要是0、1、2、4、8。
- 计算节点标签：请选择标签名称，不支持多选。应用将会调度到有相应节点标签的计算节点。计算节点标签设置方法请参见《用户指南》的计算资源标签管理章节。

图 2-33 资源参数

- 单击“立即创建”，创建应用。

步骤六：搭建流程、运行作业

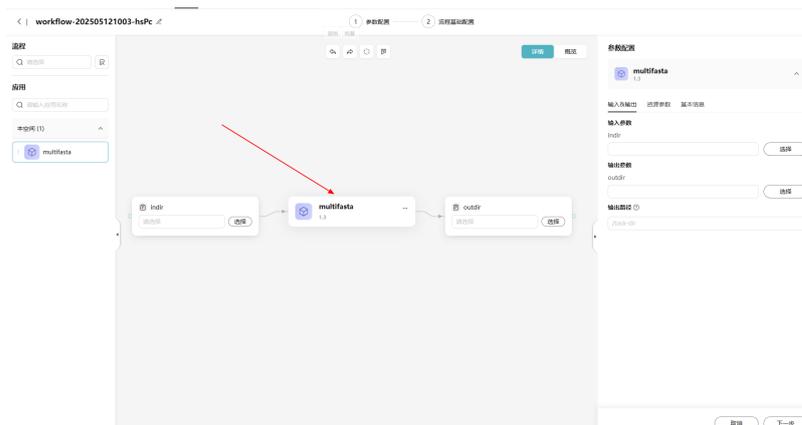
- 单击“创建流程”，进入流程设计器页面。

图 2-34 创建流程



- 将左侧应用列表中的应用，拖拽至画布中。

图 2-35 应用拖拽



- 在画布右侧参数配置模块，单击  按钮，进入参数设置页面，可查看修改参数。
 - 输入参数：由用户在[创建应用](#)时定义。
 - 输出路径：输出数据的存放路径，可修改。例如，gene-assets空间中的output文件夹，输出路径格式为/gene-assets/output。
 - 资源参数：CPU需求、Memory需求、GPU类型，请按照使用需求进行设置；CPU架构、计算节点标签，GPU需求不可修改。GPU包含NAIDIA架构GPU和自研的Snt9+ARM。选择GPU资源时，需要您在购买平台时包含了GPU资源，并且需要应用支持GPU运行。选择Snt9+ARM时，需要应用支持ARM环境运行，并在创建应用时，镜像系统为ARM类系统。

📖 说明

运行分析作业时，流程中的每一个应用称之为一个任务（Task），在编排流程时，如果“输出路径”修改为空，实际作业输出结果依然默认存在该路径。最终输出结果路径按照如下规则生成：

- 若使用的应用本身有配置输出参数，直接使用该路径。
- 若使用的应用本身未配置输出参数，并且子任务（Task）的输出路径为空，最终输出路径为对应作业配置的输出路径。若作业也未配置，则系统会默认生成格式为job-流程名称-时间戳-随机后缀的输出路径，例如/job-workflowname-202501031644-1654。
- 若使用的应用本身未配置输出参数，子任务（Task）的输出路径有配置，例如/task-output。那么会在上一项的基础上拼接上子任务的输出路径，例如/job-workflowname-202501031644-1654/task-output。

图 2-36 参数配置

参数配置

multifasta
1.3

输入&输出 资源参数 基本信息

输入参数

* indir

选择

输出参数

* outfile

输出路径

4. 单击“下一步”，进入流程基础配置页面。
5. 在流程基础配置页面填写流程基础信息。包括“流程名称”、“版本”、“标签”、“短描述”、“长描述”和“超时时间”。

图 2-37 流程基础配置

流程基础配置

* 流程名称

windows-202410251655-UZO4

* 版本

1.0

标签

请输入标签名称

最近常用标签：
i... 云... 镜像...

短描述

0 / 128

长描述

0 / 65535

超时时间

7

天

取消

上一步

创建并启动...

立即创建

📖 说明

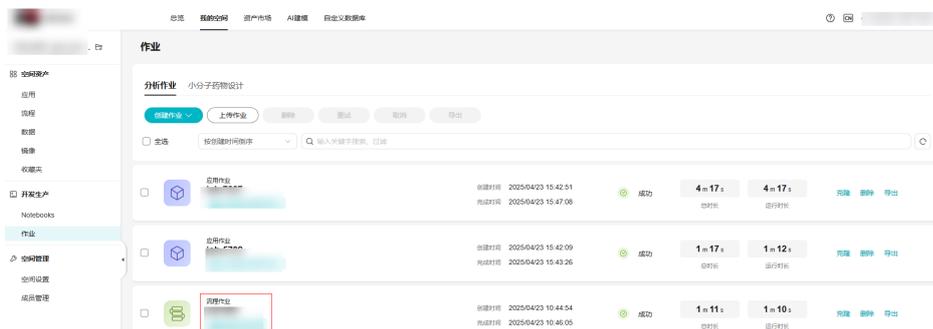
- “流程名称”和“版本”为必填项，其他参数可选填。
- “超时时间”指作业运行时间超过设置时间时即为超时，默认7天，基于流程创建分析作业时，该参数可重新定义。

6. 单击“创建并启动作业”。

步骤七：获取分析结果

在“作业”列表中，可单击作业名称查看作业信息、输入输出数据等信息。

图 2-38 作业列表



2.4 配置命令行工具

2.4.1 步骤 1：获取认证信息

获取 AK/SK

AK/SK (Access Key ID/Secret Access Key) 即访问密钥，包含访问密钥ID (AK) 和秘密访问密钥 (SK) 两部分，华为云通过AK识别用户的身份，通过SK对请求数据进行签名验证，用于确保请求的机密性、完整性和请求者身份的正确性。

1. 登录[华为云管理控制台](#)，鼠标指向页面右上角的用户名，在下拉列表中单击“我的凭证”。

图 2-39 我的凭证入口



2. 在“我的凭证”页面中选择“访问密钥”页签。单击“新增访问密钥”，按操作指引获取认证账号的AK/SK，请妥善保管AK/SK信息。

图 2-40 访问密钥



说明

- 每个用户仅允许新增两个访问密钥。
- 为保证访问密钥的安全，访问密钥仅在初次生成时自动下载，后续不可再次通过管理控制台页面获取。请在生成后妥善保管。

获取区域名称

区域是一个地理区域的概念，由于带宽原因，会在多个地区建立数据中心，提供服务。

AI科学计算服务部署在华北-北京四，区域名称为cn-north-4；部署在华东-上海一，区域名称为cn-east-3。

获取项目 ID

1. 登录[管理控制台](#)。
2. 鼠标移动到右上角的用户名上，在下拉列表中选择“我的凭证”。

图 2-41 我的凭证



3. 在“我的凭证 > API凭证”页面，可以查看用户名、账号名，在项目列表中查看项目。

图 2-42 查看项目 ID



多项目时，展开“所属区域”，从“项目ID”列获取子项目ID。

2.4.2 步骤 2：获取命令行工具

下载命令行工具 ai4s-toolkit

针对不同操作系统，ai4s-toolkit下载地址如下所示。

表 2-3 下载列表

支持平台	下载地址
Windows 64位	ai4s-windows-x86_64.zip、ai4s-windows-x86_64.zip.sha256，老版本的软件（ health-windows-x86_64.zip 、 health-windows-x86_64.zip.sha256 ）
Linux ARM 64位	ai4s-linux-aarch64.tar、ai4s-linux-aarch64.tar.sha256，老版本的软件（ health-linux-aarch64.tar 、 health-linux-aarch64.tar.sha256 ）
Linux AMD 64位	ai4s-linux-x86_64.tar、ai4s-linux-x86_64.tar.sha256，老版本的软件（ health-linux-x86_64.tar 、 health-linux-x86_64.tar.sha256 ）
macOS	ai4s-macOS-x86_64.tar、ai4s-macOS-x86_64.tar.sha256，老版本的软件（ health-macOS-x86_64.tar 、 health-macOS-x86_64.tar.sha256 ）

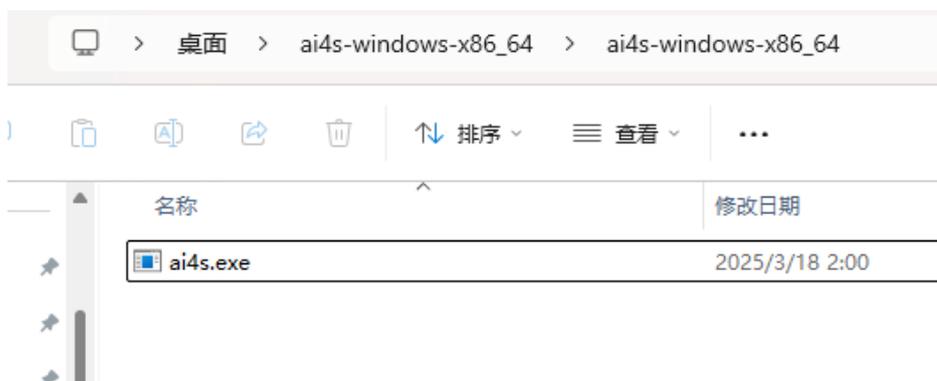
说明

- 本页面命令行工具下载后，在使用时，需用到您注册华为账号并开通华为云时提供的用户名等信息，用于登录并操作AI科学计算平台的空间、应用、流程等资产。这些信息的处理将遵循您已接收的《[华为云用户协议](#)》及《[隐私政策声明](#)》约束。
- 下载地址中带有sha256后缀的链接，指的是对应软件包的校验文件。例如：Windows x64版本的下载链接是ai4s-windows-x86_64，它的校验文件下载链接则是ai4s-windows-x86_64.zip.sha256。

安装 ai4s-toolkit

- 本示例中以Windows系统为例，介绍安装命令行工具的方法。
 - a. 获取Windows版本的命令行工具，得到ai4s.exe文件，ai4s文件无需安装，放置在任一文件夹中即可。

图 2-43 下载命令行工具



- b. 使用win键+R，输入cmd打开windows的cmd窗口。进入工具所在的目录，输入ai4s命令，即可使用。
如果cmd窗口显示目录不是ai4s文件所在目录，请使用cd命令切换路径。例如，切换至D盘：

```
cd /d d:
```

图 2-44 客户端

```
C:\Users\██████████\Desktop\ai4s-windows-x86_64\ai4s-windows-x86_64>ai4s
A simple command client for ai4s.

Usage:
  ai4s [flags]
  ai4s [command]

Available Commands:
  add      add a member...
  cancel  cancel or forcibly terminate the job
  clear   delete the checkpoint dir
  completion Generate the autocompletion script for the specified shell
  config  configure your config file ...
  create  create a app,workflow,job...
  delete  delete a app,workflow,job
  edit    edit a app,workflow...
  export  export job...
  get     get project, app, workflow
  help    Help about any command
  import  import app, workflow...
  retry   run the job or notebook again
  start   start notebook ...
  stop    stop notebook ...
  switch  switch project ...
  transfer transfer project...
  version show cli version

Flags:
  -h, --help  help for ai4s

Use "ai4s [command] --help" for more information about a command.
```

- 本示例中以Linux系统为例，介绍安装命令行工具的方法。
 - a. 获取Linux版本的命令行工具，得到ai4s文件，ai4s文件无需安装，放置在任一文件夹中即可。
 - b. 假设ai4s存放在/home/user-name/test/client目录，请使用cd命令进入ai4s所在目录。

```
cd /home/user-name/test/client/
```

图 2-45 客户端

```
[root@client]# ./ai4s
A simple command client for ai4s.

Usage:
  ai4s [flags]
  ai4s [command]

Available Commands:
  add          add a member...
  cancel      cancel or forcibly terminate the job
  clear       delete the checkpoint dir
  completion  Generate the autocompletion script for the specified shell
  config      configure your config file ...
  create      create a app,workflow,job...
  delete      delete a app, workflow, job
  edit        edit a app,workflow...
  export      export job...
  get         get project, app, workflow
  help        Help about any command
  import      import app, workflow...
  retry       run the job or notebook again
  start       start notebook ...
  stop        stop notebook ...
  switch      switch project ...
  transfer    transfer project...
  version     show cli version

Flags:
  -h, --help  help for ai4s

Use "ai4s [command] --help" for more information about a command.
```

说明

使用Linux版本命令行工具时，您需要在本地搭建Linux环境，并将下载的ai4s文件放至所需的目录下。macOS执行命令和linux一致，

- 如果当前目录为ai4s所在目录，可以使用./ai4s命令使用命令行工具。
- 如果当前目录不是ai4s所在目录，需要使用绝对路径。如当前目录为/opt，假设ai4s存放在/root/ai4s-toolkit/下，需要指定/root/ai4s-toolkit/ai4s路径进行使用。
- 如果无法运行，提示Permission denied，使用chmod 755 ai4s命令设置执行权限。

2.4.3 步骤 3：初始化配置

在使用命令行工具前，需要初始化配置信息，通过config命令对ai4s-toolkit进行初始化配置。本节以Windows为例介绍配置过程，Linux和macOS环境配置过程相同。

方法 1：使用账号、密码初始化

执行以下命令，进行初始化，命中的xxx和region信息请参考表2-5进行替换。

- Windows版命令行工具
health.exe config add --domain-name xxx --user-name xxx --password xxx --region cn-north-4 --platform-id xxx
- Linux、macOS版命令行工具
./health config add --domain-name xxx --user-name xxx --password xxx --region cn-north-4 --platform-id xxx

