

玻尔-科研空间站使用手册

1. 平台介绍	3
2. 平台核心模块	3
【模块一：首页】	3
1. 科学导航	3
1.1 强大、精准、定制化的“数据库 & 知识库”	4
1.2 个性化、精准的问题捕捉：帮科学家找到一个好问题	5
1.3 平台资源智能推荐	6
1.4 支持多种先进大模型切换	8
1.5 多模态能力	8
1.6 批量文献问答	10
2. 推荐：科研版小蓝书，让科研触手可及	10
2.1 论文推荐	10
2.2 学者推荐	11
2.3 专利推荐	12
2.4 问答推荐	12
【模块二：探究】	13
1. 订阅：个性化精准推送，实时获取最新资讯	13
1.1 多种订阅类型	13
1.2 AI 速览	14
1.3 批量文献问答	15
2. 期刊库：理工农医文全学科覆盖	15
3. 学者：和 2000W+活跃学者的 AI 分身聊聊天	17
4. 知识库：智能科研资产管理平台	18
4.1 高效科研资产管理	18
4.2 智能科研阅读器	20
4.3 丰富的 AI 单点功能	20
5. Notebooks：云端快速实践	23
5.1 创建 Notebook	23
5.2 编辑 Notebook	24
5.3 运行 Notebook	25
5.4 分享 Notebook	27
6. 课程：AI for Science “第二课堂”	29
6.1 申请开课	29
6.2 创建课程	29
6.3 上传课件	31
6.4 上传及批改作业	33
6.5 学员管理	34

7. APPs : 开箱即用的科研领域的 “一站式” 服务商店	36
8. 比赛 : “以赛代练” , 聚焦领域前沿真问题	37
【模块三 : 实验室】	38
Uni-Lab : 开源智能实验室操作系统	38
【模块四 : 计算】	39
1. 任务	39
1.1 在玻尔上提交任务	39
1.2 网页提交任务	39
1.3 命令行提交任务	42
1.4 查看任务	43
1.5 下载结果	43
2. 文件	43
2.1 文件管理	43
2.2 文件的下载和上传	43
2.3 结构文件可视化	44
3. 节点	46
3.1 创建容器节点	46
3.2 选择机型并设置镜像	47
3.3 提交任务并监控节点使用情况	47
4. 数据集	47
4.1 创建数据集	48
4.2 查看数据集	49
4.3 数据集的编辑及版本管理	50
4.4 使用数据集	52
4.5 数据集填写内容说明	57
5. 镜像	57
5.1 什么是镜像	57
5.2 如何使用镜像	57
5.3 玻尔提供的镜像	59
5.4 如何制作自定义镜像	60
5.5 如何将镜像拉取到本地 docker	60
6. 项目	61
6.1 创建项目	61
6.2 项目预算管理	62
6.3 项目成员管理	64
6.4 项目文件管理	66
6.5 共享镜像	67
6.6 删除项目	67
7. 数据库	68
【个人设置】	68

1. 平台介绍

玻尔 (Bohrium) AI for Science 科研空间站致力于提供面向 AI 时代的全新科教新范式，以科技创新赋能科研探索和教育教学，让知识的获取、理解与应用更加智能、高效。

玻尔平台以全新升级的“科学导航 (Science Navigator, SN) ”为核心，深度融合“自研科学大模型”、“海量科研数据”、“智能计算资源”和“前沿科研实践”，覆盖从“科研数据管理”、“知识体系构建”、“智能研究助手”到“自动化实验与计算”的全流程，推动科学研究向“智能化”、“自动化”与“高效化”迈进。

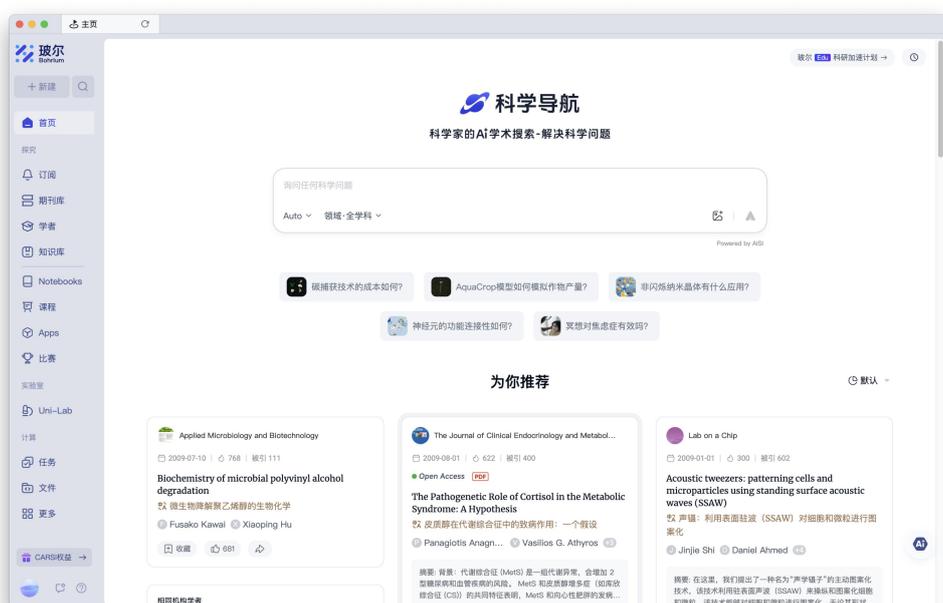
玻尔全面覆盖科研与教学过程中的多样化应用场景，赋能“教”、“学”、“研”、“用”，为个人、高校、科研机构及科技企业提供精准、智能、高效的科研和教学支持与创新解决方案。

2. 平台核心模块

【模块一：首页】

1. 科学导航

通过深度整合权威科研数据库，科学导航能够准确、快速地回答各类科学问题，并为每个答案提供权威文献引用与相关资料，确保回答的可信度和专业性。此外，科学导航还具备强大的多模态问答能力，支持图像和附件输入，为用户提供全面的科研支持。





1.1 强大、精准、定制化的“数据库 & 知识库”

数据库 & 知识库

玻尔

全学科 1.6亿文献

自然科学 1700万文献
数学、物理、化学、地球与环境科学等

工程技术 1300万文献
计算机、材料科学、电子、土木等

生命科学 3100万文献
生物学、医学、农林科学等

哲学与社会科学 900万文献
法学、经济学、心理学、人文科学等

私有

📖 大学图书馆 私有

📖 固态电池知识库 私有

我的知识库

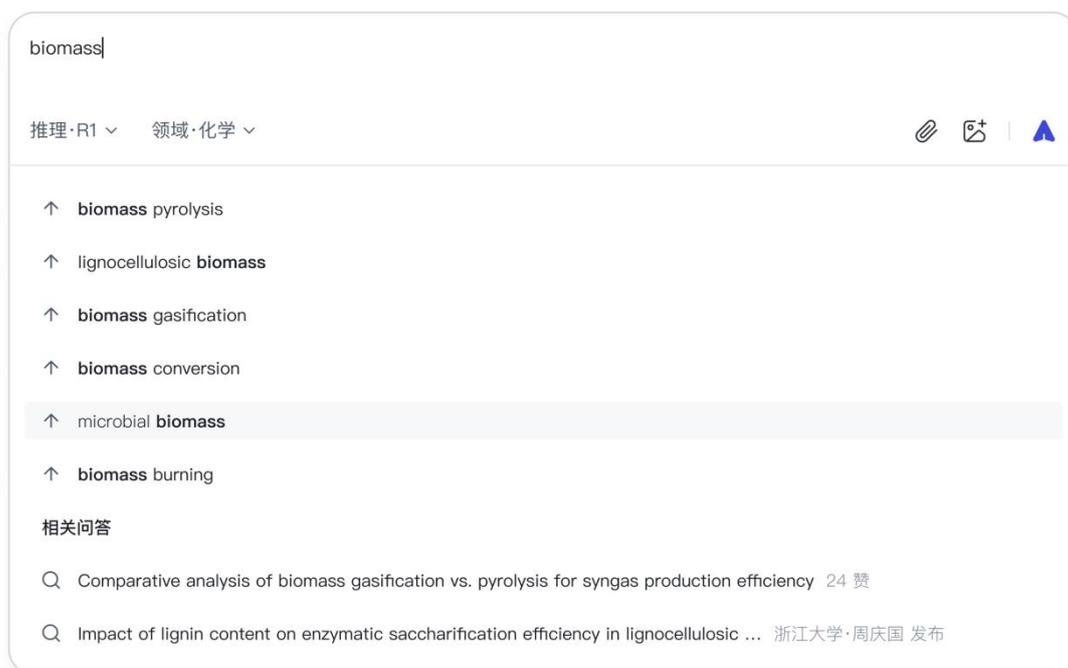
选择 ▼

- **涵盖全学科 1.6 亿文献**：提供跨学科的全面支持
- **支持切换领域知识库**：获得更加精准、专业的学科领域回答
- **支持私有数据库**：可以根据需求定制或接入专属的数据源，确保数据安全性与科研内容的个性化，提升研究效率与精准度
- **支持切换个人知识库**：提供个性化的科研数据管理与精准的信息检索体验

1.2 个性化、精准的问题捕捉：帮科学家找到一个好问题



- **千人千面的首页科学问题推荐**：通过分析用户画像，在输入框下方智能推荐 5 个相关问题，实现个性化、精准的问答体验，帮助用户快速找到所需信息。

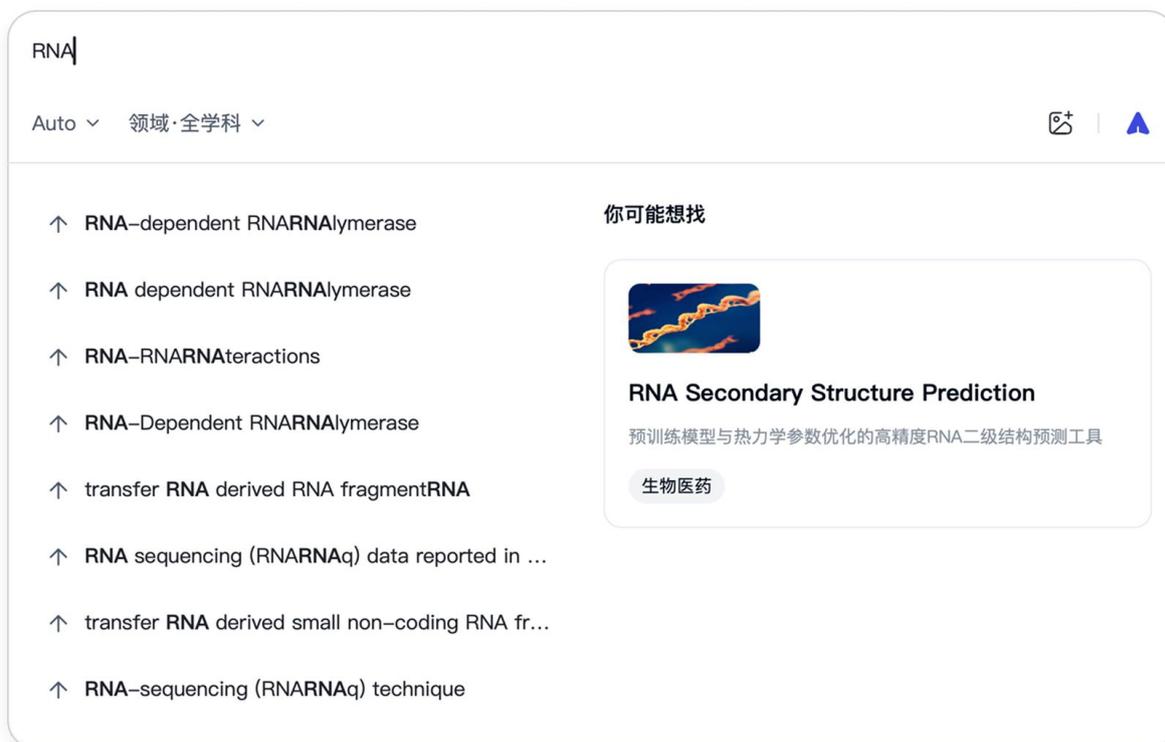


- **智能补全与高质量问答整合**：在用户输入过程中，系统实时提供智能补全建议，不仅基于上下文预测输入内容，还通过链接真实用户的高质量问答，提供相关的、经过验证的专业答案。



- 深入追问：根据当前问题和回答推荐问题，研究更深入。

1.3 平台资源智能推荐





- **实时输入智能推荐**：在用户输入过程中，平台实时分析输入内容，智能推荐相关学者、APP、课程等资源，帮助用户即时发现与研究主题相关的专业知识和工具，提升搜索效率。



- **相关学者推荐**：助力用户进一步拓展学术网络和获取专家观点。

1.4 支持多种先进大模型切换



- **Auto、DeepSeek、4o 自由切换**：不同的模型支持不同类型的科研任务，满足用户多样化的信息检索需求。研究人员可根据查询目标，灵活选择最适合的 AI 模型，以获取更精准、更专业的搜索结果。
- **支持接入私有模型**：用户可以将自有的专业知识和业务需求直接整合进平台，确保回答更加贴合特定领域的需求，提高定制化和数据安全性，同时有效保护敏感数据的隐私。

1.5 多模态能力

文本智能搜索：支持自然语言输入，基于全球 1.6 亿篇科研数据库，精准解析科研意图，提供高质量答案并关联原始文献。

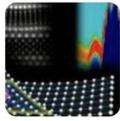
图表搜索：解析并检索科研论文中的图表，帮助研究者获取实验结果、趋势分析和数据可视化信息。

分子与化学结构搜索：直接输入分子式、化学结构或靶点信息，快速检索相关文献、实验数据和分子特性研究。

专利与技术搜索：提供全球专利数据库查询，支持按技术概念、创新点、产业应用等维度挖掘核心专利信息。

实验数据搜索：结合实验方法、设备参数等多模态信息，助力科研人员高效复现实验或寻找优化方案。

持续建设中...



询问任何科学问题

推理·R1 ▾ 领域·化学 ▾



添加图片：一次支持1张
单张最大10MB支持jpg、jpeg、png等



muccio-et-al-1ed-6-s-trans-rer-r...
PDF | 392.1KB

询问任何科学问题

推理·R1 ▾ 领域·化学 ▾



添加附件：支持上传文件(1次支持1个文件，每个 100 MB)
文件类型: pdf、txt、csv、docx、doc、xlsx、xls、pptx、ppt、mobi、epub、png、jpeg、jpg

- 可输入图片&附件进行问答：兼容多种数据格式。

玻尔 Bohrium

如何设计多... x

+ 新对话

如何设计多孔纳米材料以提高催化降解效率?

参考 74 篇资料回答

Boosting the catalytic activity toward oxygen reduction via...
Kakali ... Matthe... 43

Improving catalytic efficiency via tailoring macroscopic...
Fushen... Lei Zhao 43

74 文献 >

Journal of Energy Chemistry

Journal of Materials Sci...

设计多孔纳米材料以提高催化降解效率是当前材料科学和环境治理领域的一个重要研究方向。以下是实现这一目标的一些关键策略和思路：

1. 优化材料结构

提高比表面积和孔隙结构：多孔纳米材料的一个显著优势是其高比表面积。通过优化孔隙度和孔径分布，可以显著提高活性位点的数量，从而增强催化性能。例如，文献中的研究表明，通过调控纳米孔材料的宏观弹性，可以有效提高催化效率¹。此外，双孔结构如双孔ZIF-8能够提供更多反应位点，促进反应物的接触，从而提高催化降解效率²。

结构定向设计：通过合成具有特定形貌的材料，例如中空纳米纤维或二维纳米片，可以提高电子传输效率和反应物的扩散效率^{3 4}。这些设计有助于减少电子-空穴的复合，提高光催化降解效率。

2. 材料改性与功能化

掺杂与共价修饰：通过在多孔纳米材料中引入过渡金属掺杂或杂原子改性，可以显著影响材料的催化性能。例如，铜和氮共掺杂的多孔碳纳米片表现出卓越的过氧单硫酸盐活化能力，这在有机污染物的降解中显示出显著的优势⁵。

查看更多图片 >

相关学者

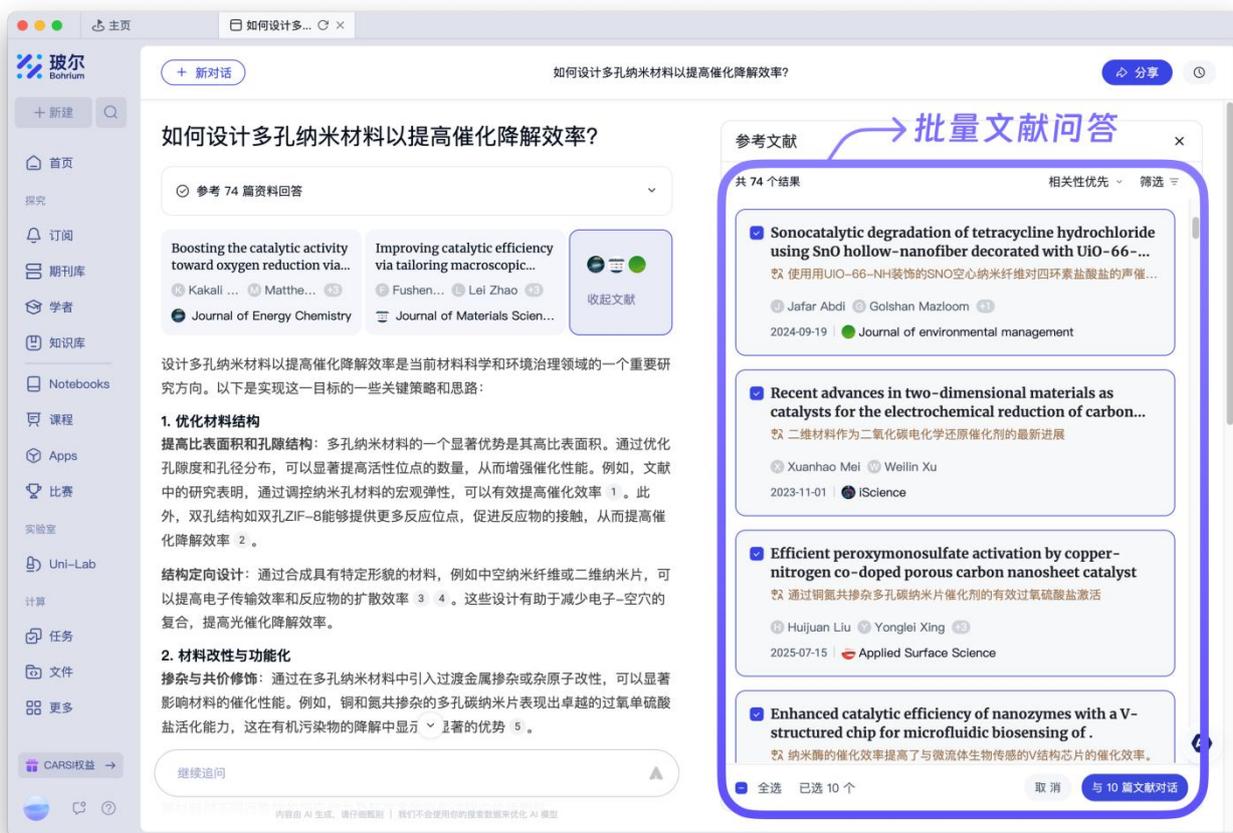
Alistair Jan Gunn
Faculty of Medical and Health Sciences, University of...
被引用数 22,774 | h-index 72 | 收录论文 457

Boon L. Lee
Associate Professor in Economics, Queensland University ...
被引用数 2,751 | h-index 25 | 收录论文 68

内容由 AI 生成，请仔细甄别 | 我们不会使用你的搜索数据来优化 AI 模型

- 回答内容关联学术图片：帮助用户更直观地理解科研内容，提升信息的权威性和可视化效果。

1.6 批量文献问答



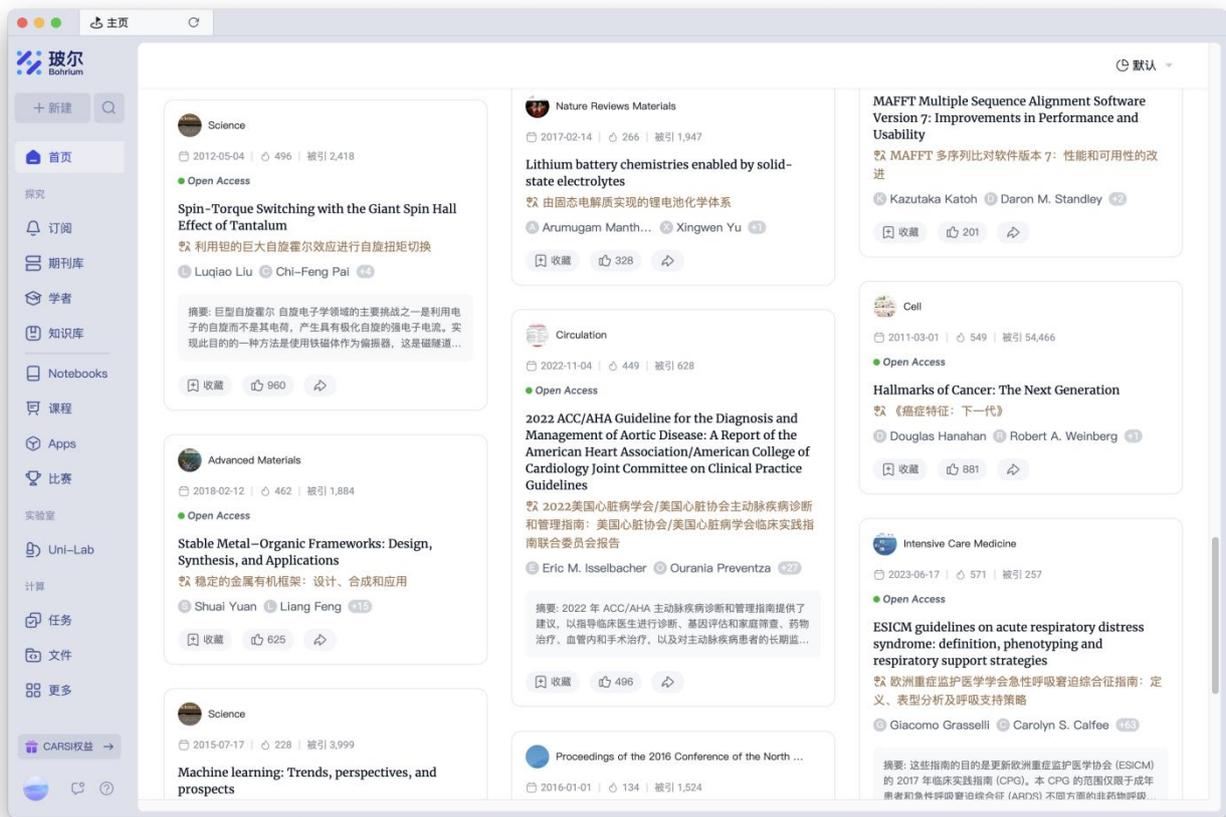
- **批量文献问答**：支持批量选择引用文献，进行多篇文献的深入问答，帮助用户全面解析相关研究内容。

2. 推荐：科研版小蓝书，让科研触手可及

推荐系统通过智能算法为科研人员提供个性化的学术资源推荐，帮助用户在浩瀚的科研信息中高效筛选和发现最相关的内容。无论是文献、学者、专利，还是问答，系统都能根据用户的兴趣、需求和历史行为提供精准的推荐。此外，我们还为用户推荐平台内的其他资源，如课程、Notebook、比赛等，全面提升科研效率与学习体验。

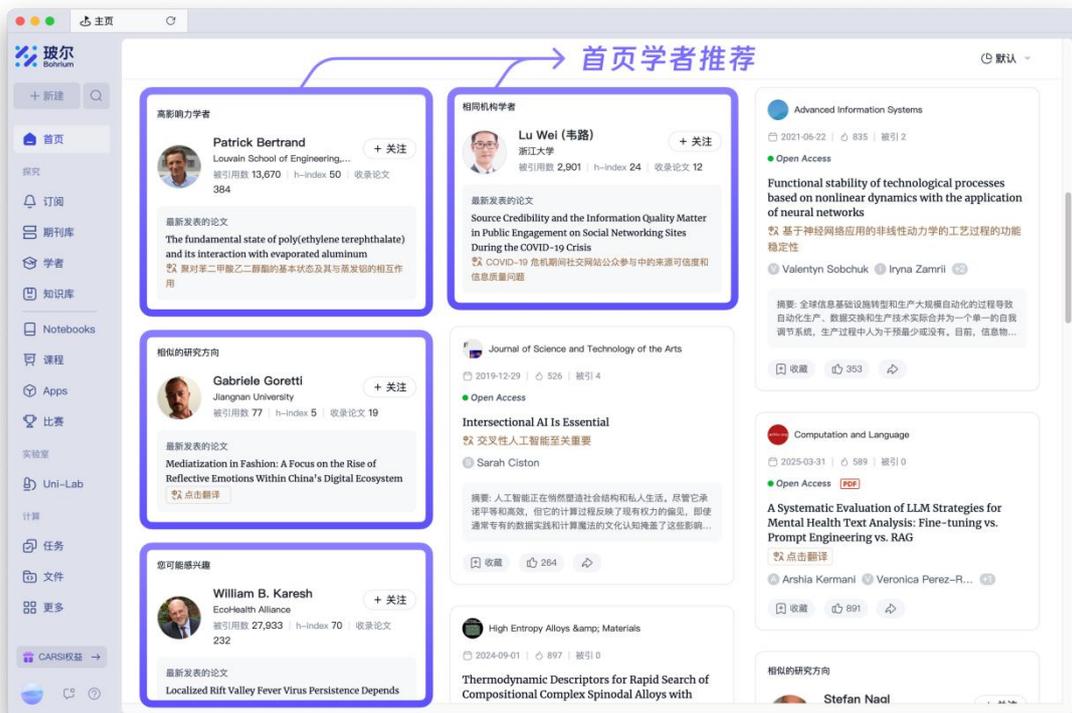
2.1 论文推荐

基于用户的研究领域和兴趣，文献推荐系统为用户推荐最新、最相关的学术文献。通过智能分析和自然语言处理技术，系统能够精准匹配文献内容，帮助用户快速获取重要的研究资料，节省时间并提升研究效率。



2.2 学者推荐

学者推荐系统根据用户的学术背景和研究兴趣，推荐相关领域的顶尖学者及其研究成果。这不仅有助于用户找到相关领域的专家，还能为科研合作和学术交流提供有力支持，推动跨学科的合作。



2.3 专利推荐

专利推荐帮助用户关注行业前沿技术和创新成果，推动科研人员在知识产权领域的深入探索。



Metabolic markers and applications for rapid diagnosis of multiple myeloma
代谢标志物及其在多发性骨髓瘤快速诊断中的应用

申请号 CN-132878723-B 申请日 2018-08-16
公开号 CN-132878723-B 公开日 2018-08-16
专利权人 中国检验检疫院

摘要： 本发明提供了代谢标志物及其在多发性骨髓瘤快速诊断中的应用，其中，所述代谢标志物包括苯丙氨酸、酪氨酸和色氨酸中的一种或多种。与现有技术相...

[收藏](#) [分享](#)

2.4 问答推荐

问答推荐系统基于平台内高质量的用户提问和专家解答，向用户推荐最相关的学术问题与答案。这一推荐帮助用户快速解决科研过程中的疑难问题，同时促进平台知识的共享与交流，增强学术互动和社区氛围。

来自  **李复元 (博士·悉尼大学)** 的问题 +1 | 999+人

Q “现有的速率适配技术与针对基于LTE的车载网络提出的方法有何不同？”

A 现有的速率适配技术通常依赖于对网络性能指标的测量，如丢失率、延迟、等待时间和信道繁忙率等。这些测量值用于评估网络性能，并相应地调整安全消息生成速率和...

相关文献：《Safety message generation rate adaptation in LTEA...》

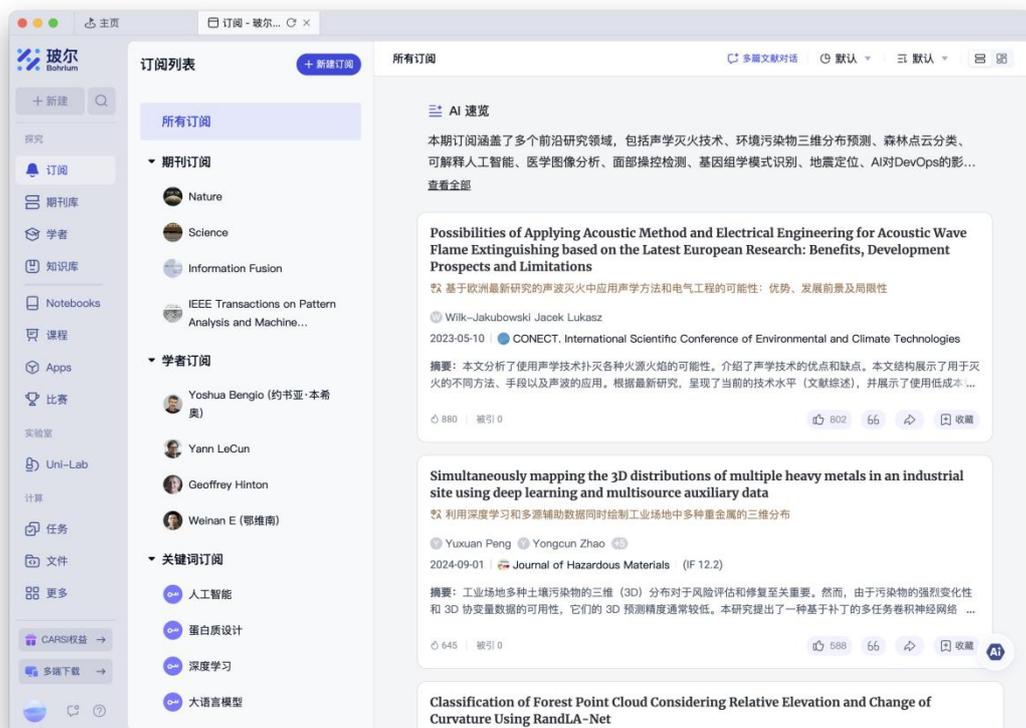
【模块二：探究】

1. 订阅：个性化精准推送，实时获取最新资讯

玻尔提供文献订阅功能，聚合多个学科最新动态，支持用户按照期刊、关键词、学者等维度订阅，实时更新。

- **关键词订阅**：例如“人工智能+医疗”、“基因编辑”、“新能源材料”等，每个关键词下整合论文、学者动态等多种内容。
- **期刊订阅**：选择感兴趣的核心期刊或学科期刊，推送该期刊最新出版文章、特刊信息等。
- **学者订阅**：关注特定学者或研究团队的最新发表、被引等动态。
- **组合订阅**：可以根据自己的研究兴趣，进行关键词、期刊和学者等维度的自由组合订阅，以获取更加精准和个性化的学术内容推送。
- **机构订阅**：提供科研机构的最新推文和研究成果，帮助用户跟踪机构的研究进展及相关领域的动态。

1.1 多种订阅类型



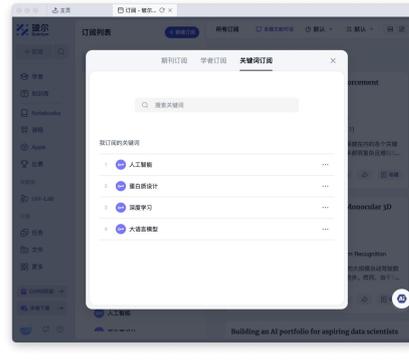
订阅-所有订阅



期刊订阅

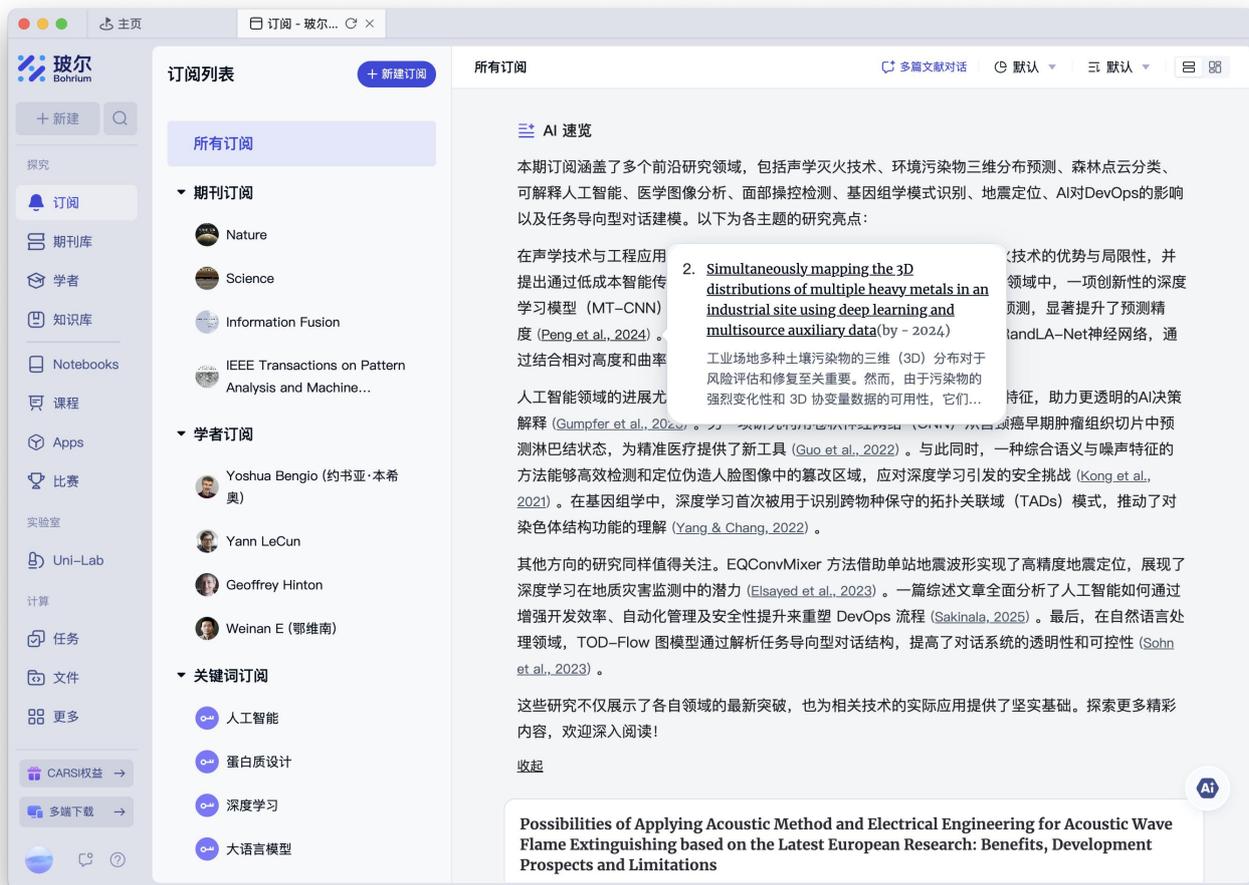


学者订阅



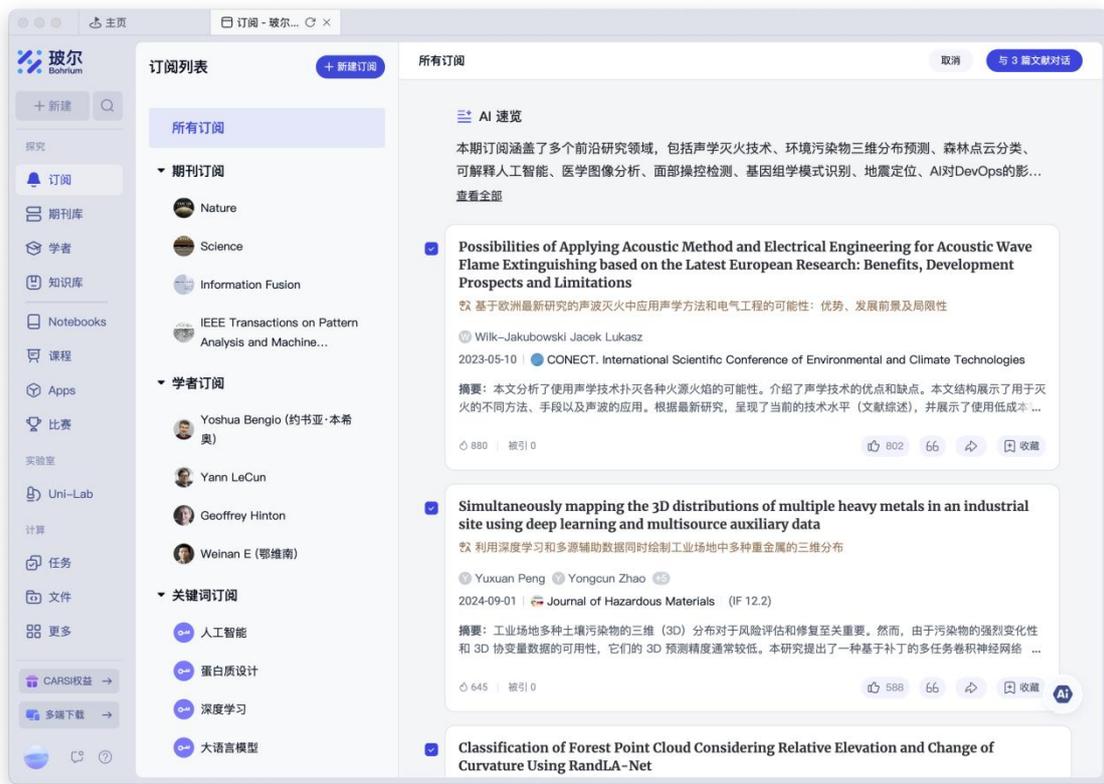
关键词订阅

1.2 AI 速览



- **AI 速览**：快速提炼核心，高效掌握文献关键内容。内容精准标注引用文献，一键溯源，明晰观点出处。

1.3 批量文献问答



- **批量文献问答**：订阅模块同样支持批量选择引用文献，进行多篇文献的深入问答，帮助用户全面解析相关研究内容。

2. 期刊库：理工农医文全学科覆盖

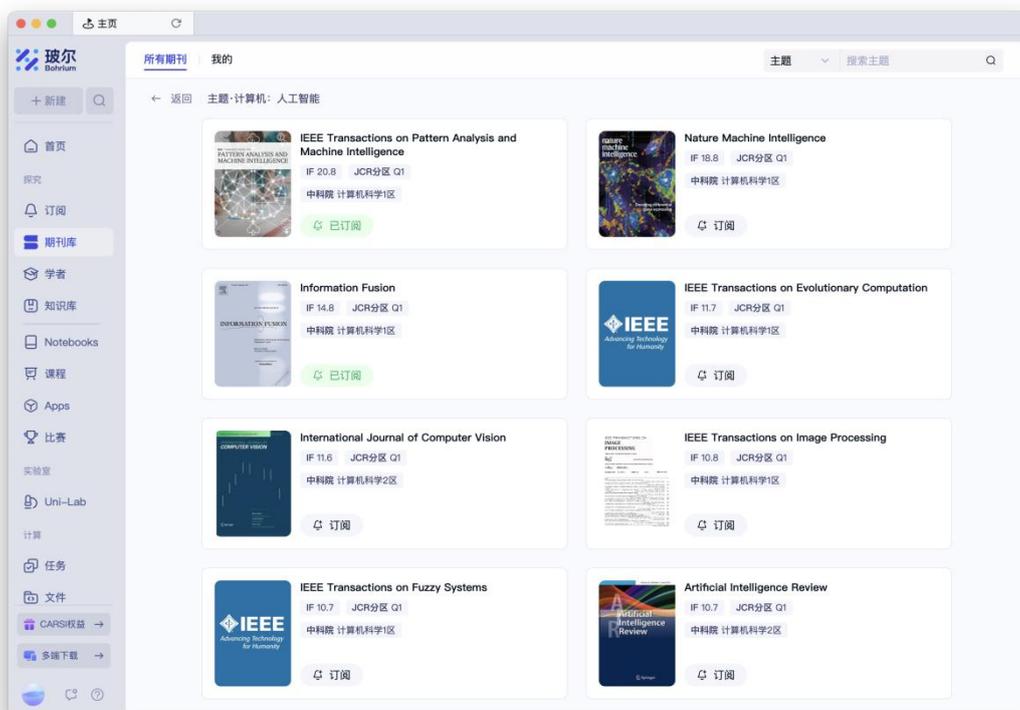
- 期刊库收录超 140,000 本期刊资源，从人文社科到自然科学，覆盖 26 大学科领域，1000+ 研究主题。只需一次订阅，实时更新推送。



期刊库主页：26+科研领域

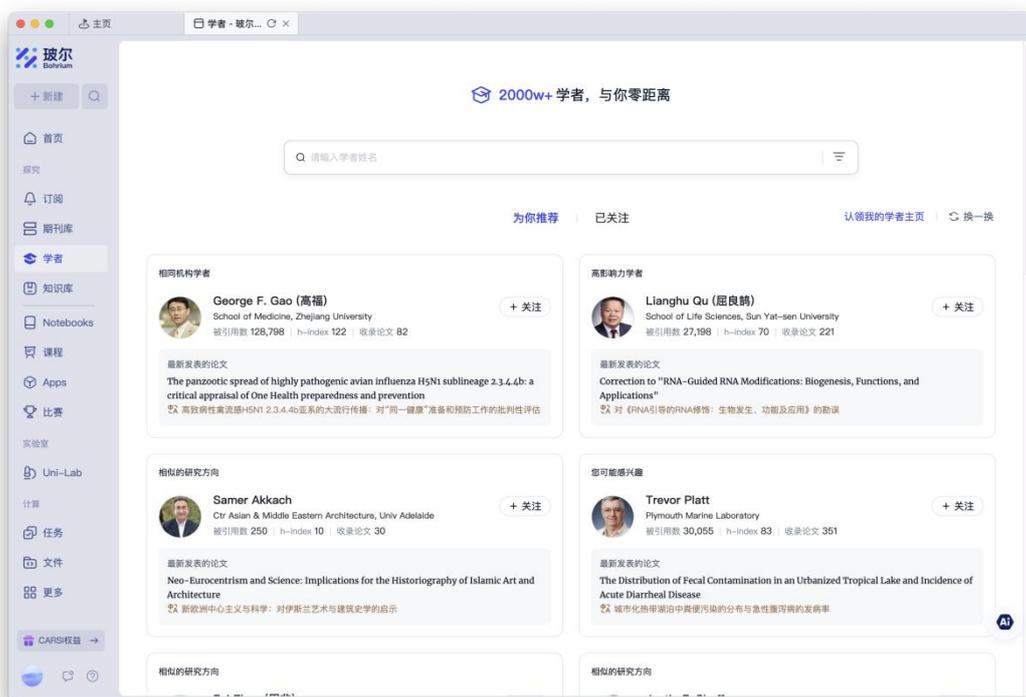


领域“计算机科学”下的细分主题



主题“计算机：人工智能”下的期刊列表

3. 学者：和 2000W+ 活跃学者的 AI 分身聊聊天



- **学者库收录超 2,000W+ 全球活跃学者**：全面覆盖科研画像、研究方向、学术成果与合作网络，一站式了解“谁在研究什么”。



- **学者 AI 分身**：基于真实学者的经历和成果打造，支持对话交流，能回答专业问题、分享观点、拓展科研思路，是学者智慧的数字化延伸。



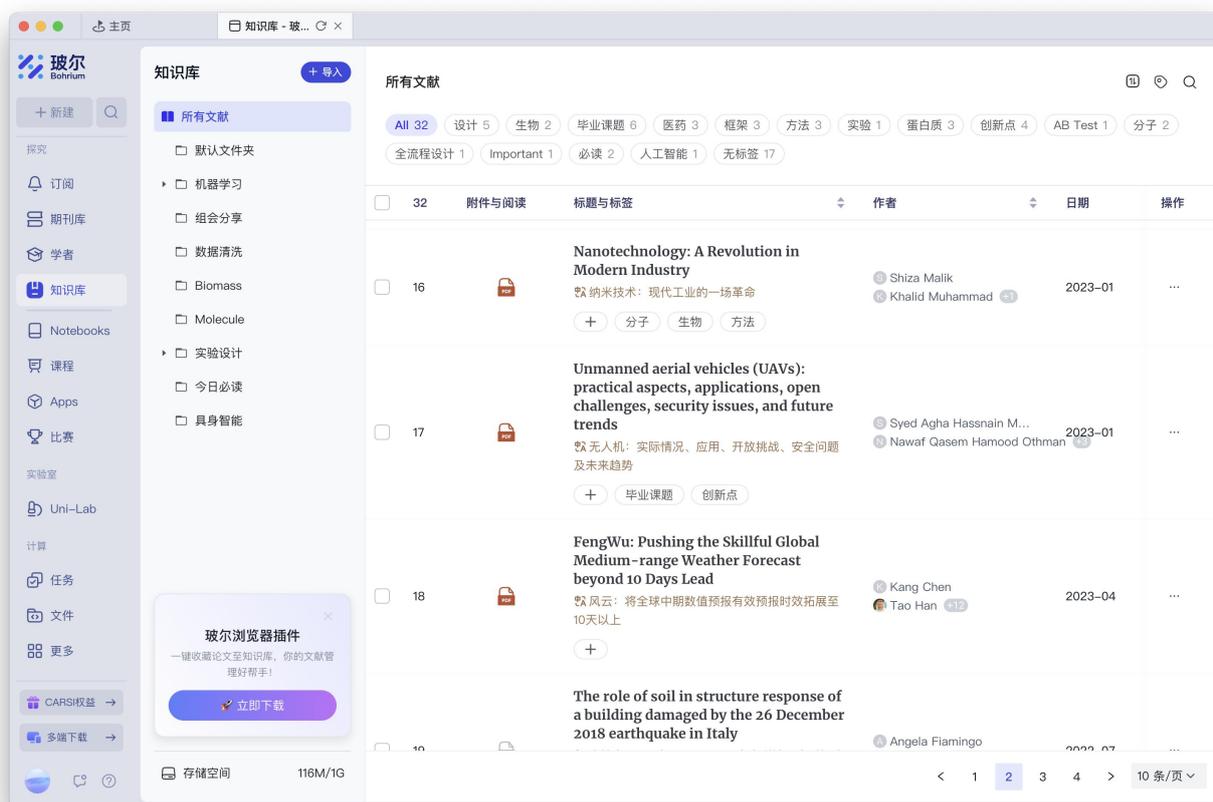
- **学术名片**：1分钟认领自己的**专属主页**，制作自己的**学术名片**，辐射全球科学家。

4. 知识库：智能科研资产管理平台

4.1 高效科研资产管理

玻尔知识库是专为科研人员设计的高效文献管理工具，旨在提供便捷、精准的文献管理和归档功能。系统采用先进的分布式存储架构，确保数据的高可用性和安全性，并具备以下核心特点：

- **分布式存储架构**：基于分布式存储技术，提供高效、可靠的数据存储和管理，确保文献数据的安全性与可扩展性。
- **元数据自动标注**：系统支持对上传文献进行自动化元数据标注，包括作者、出版时间、期刊、DOI 等信息，提升文献管理的精确度和便捷性。
- **树状文件夹管理**：支持树状结构的文件夹管理，使得文献的分类和检索更加有序、精准，用户可以轻松管理大量文献。
- **自动标签与分类**：系统能够自动为上传的文献添加标签，并按分类规则进行智能归档，极大提高文献整理效率，使分类操作更加便捷。

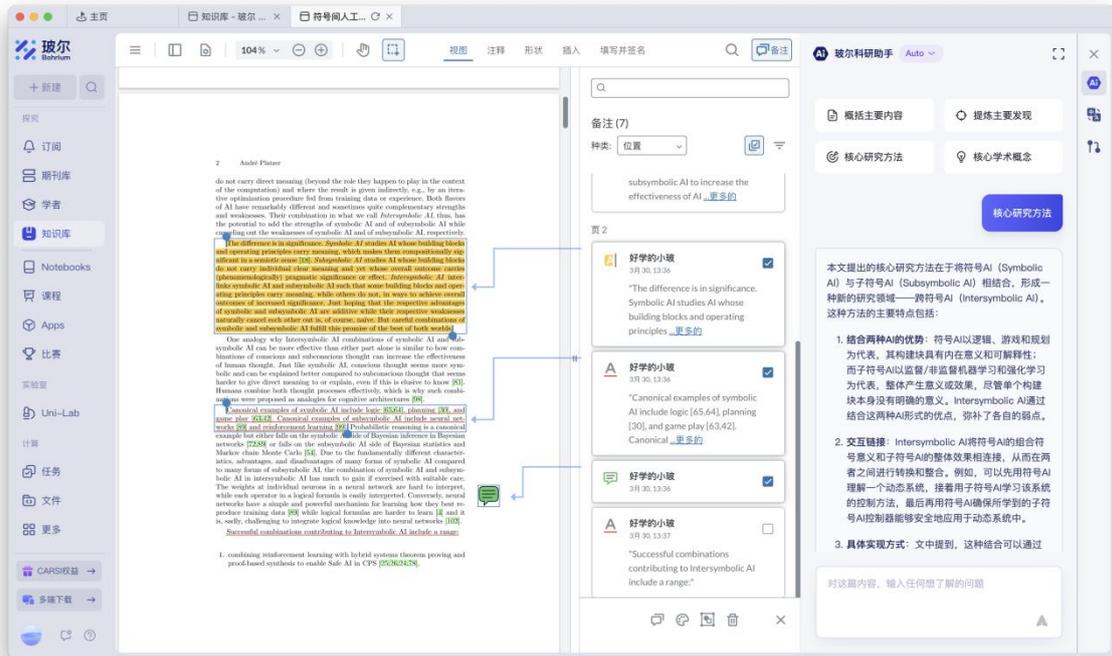


支持 Endnote、Zotero 联动导入文献，支持 PDF、XML、RIS 等文件格式，方便多种资源的管理



玻尔知识库提供浏览器插件，安装后可以轻松将网页中的文献及 PDF 同步保存，便捷管理

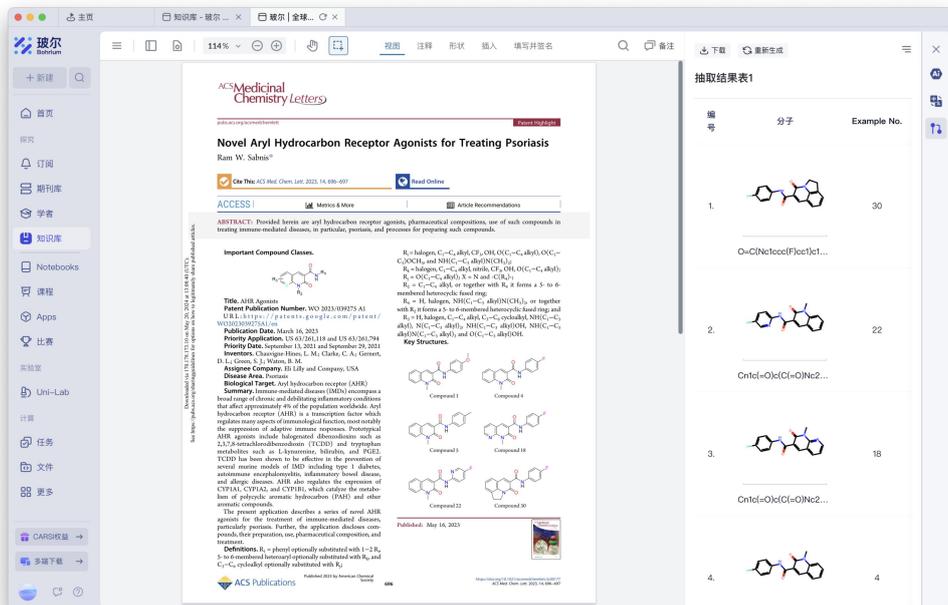
4.2 智能科研阅读器



- **高效阅读，深度理解：**集成 AI 问答、智能翻译、笔记标注等功能。侧边栏提供实时互动支持，帮助科研人员高效阅读、理解和管理学术内容，提升科研效率。

4.3 丰富的 AI 单点功能

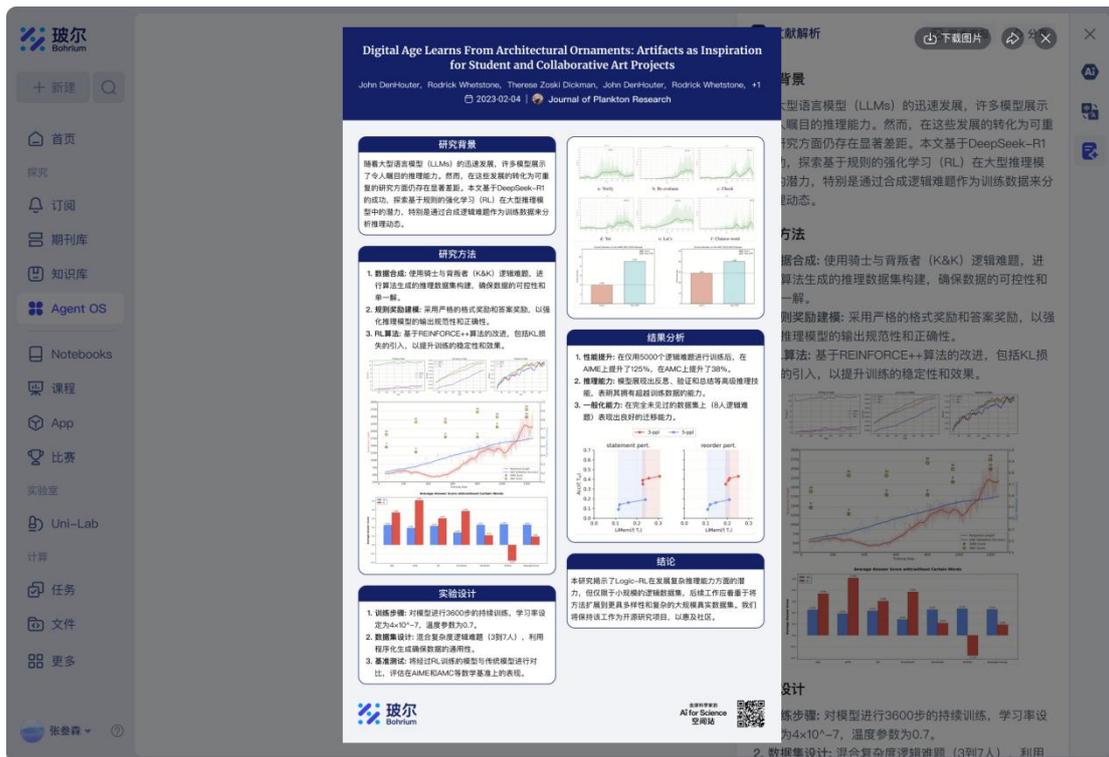
1. **支持文档内分子活性信息抽取：**从复杂文献中精准识别并匹配分子结构及其活性数值，生成结构化数据表格。显著提升数据收集效率与准确性，为分子优化和药物设计提供可靠数据支持，加速科研进程。



2. AI精读文献：支持对上传文献进行深度AI精读，自动提取关键信息，帮助用户快速掌握文献核心内容。

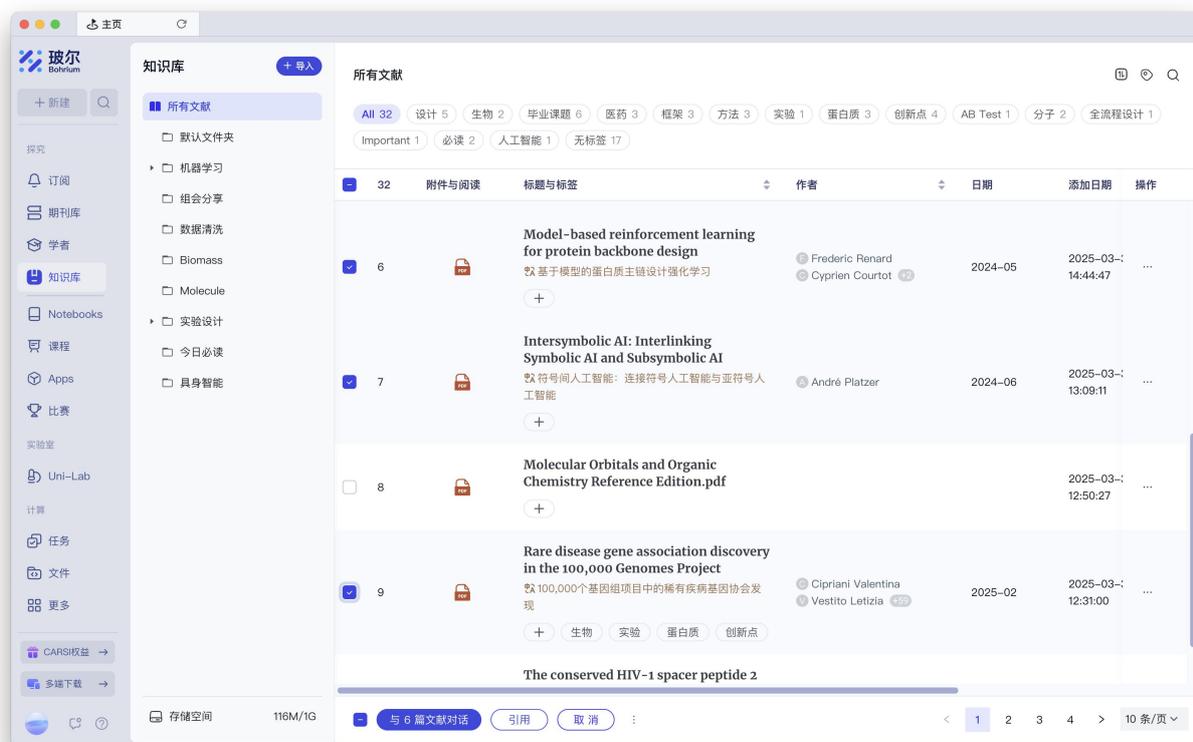


3. 学术海报与音频概览生成：根据精读内容，自动生成学术海报和音频概览，便于快速展示和分享研究成果。

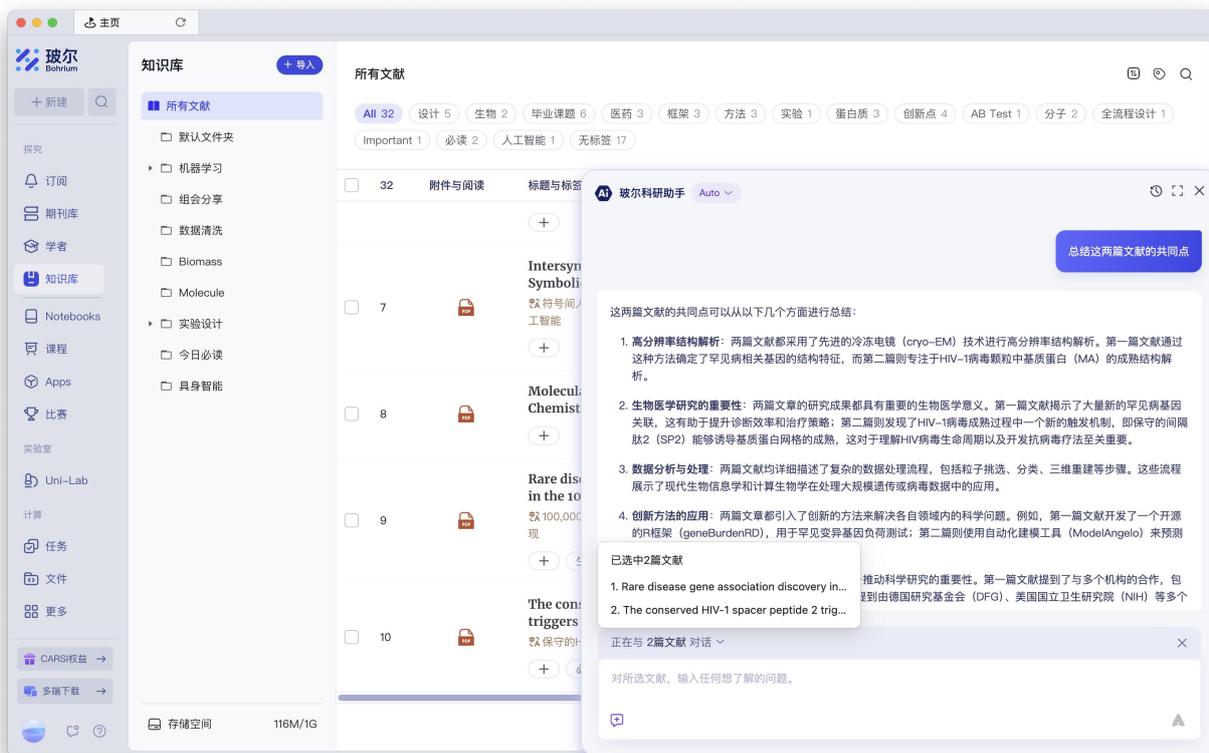




4. **AI 文献问答**：支持单篇或多篇文献的 AI 问答功能，用户可以通过提问，获得文献中的关键信息和答案，提升文献的解读效率。



在知识库中选择多篇文献



在知识库中对多篇文献进行问答

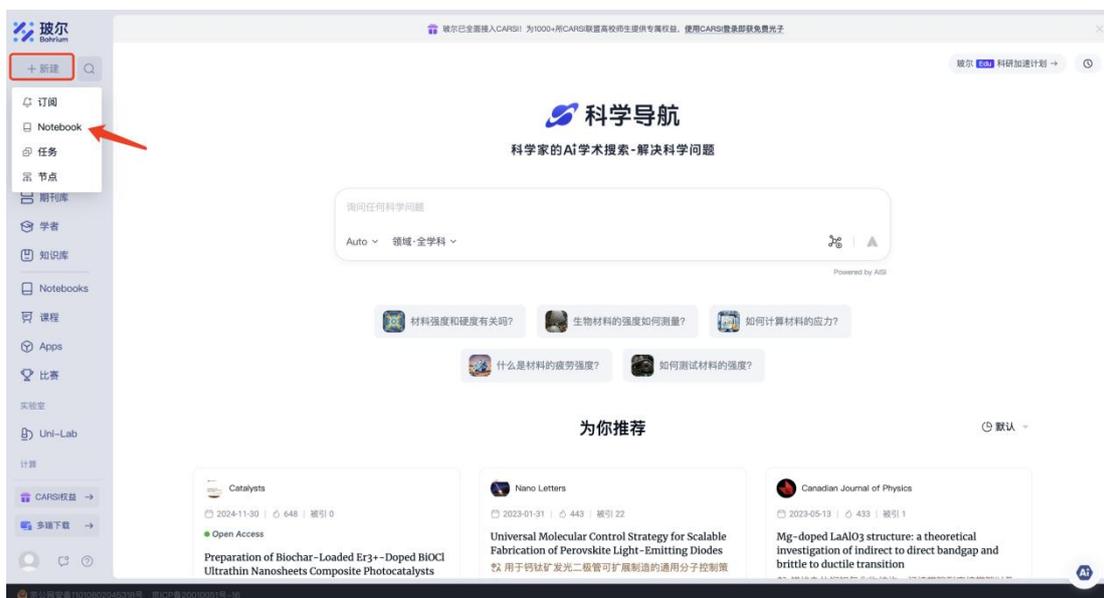
5. **一键生成笔记**：通过智能算法提取文献中的关键信息，自动生成笔记，方便科研人员快速整理和总结文献要点。
6. 支持多语言互译与对齐，支持代码/公式语义解析。

5. Notebooks：云端快速实践

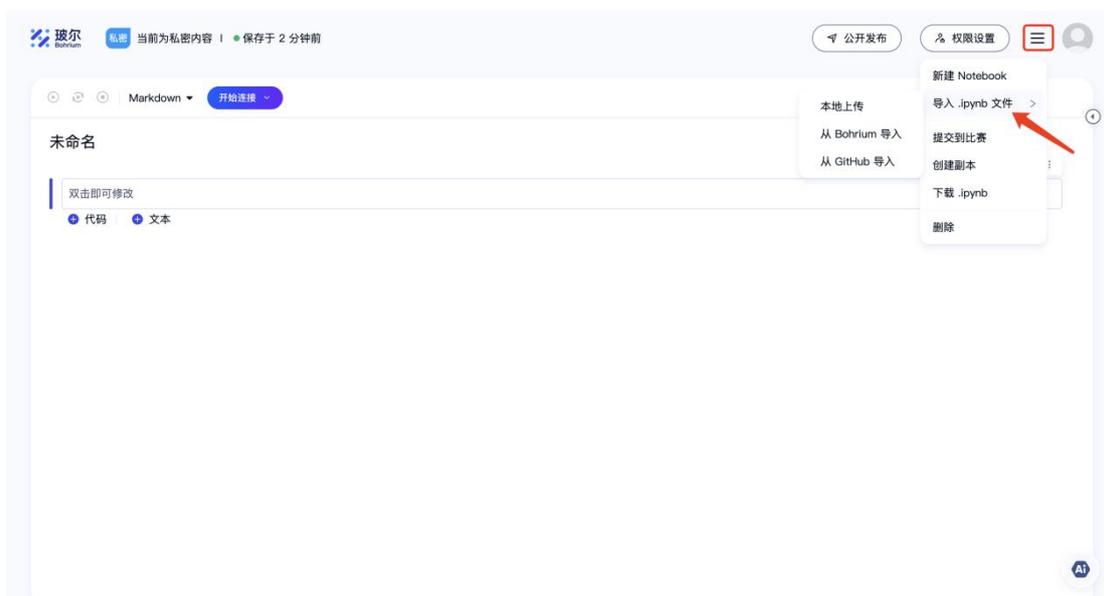
玻尔的 Notebook 提供了一个一站式编写和运行代码的交互式环境，用户可以在同一个文档中编写可执行代码、LaTeX、富文本、图片、HTML 等内容，使用玻尔预装好的 DeePMD-kit 等软件和 PyTorch、TensorFlow 等框架，一键连接海量的 CPU 和 GPU 资源，并且可以非常便捷地分享给他人进行协作。

5.1 创建 Notebook

点击左上角的“新建”按钮，选择“Notebook”，即可创建一篇 Notebook 的草稿并开始编辑：



如果您想把别处写好的 Notebook 导入进来，请点击编辑页右上角“三”形按钮，选择“本地上传”或“选择文件”即可。



5.2 编辑 Notebook

在 Notebook 编辑页撰写 Notebook 标题和正文。Notebook 正文中的“文本”单元格支持常见的 Markdown 语法，如标题、加粗/斜体、有序/无序列表、代码段、超链接、表格、图片等，双击单元格即可使用玻尔提供的可视化编辑能力。

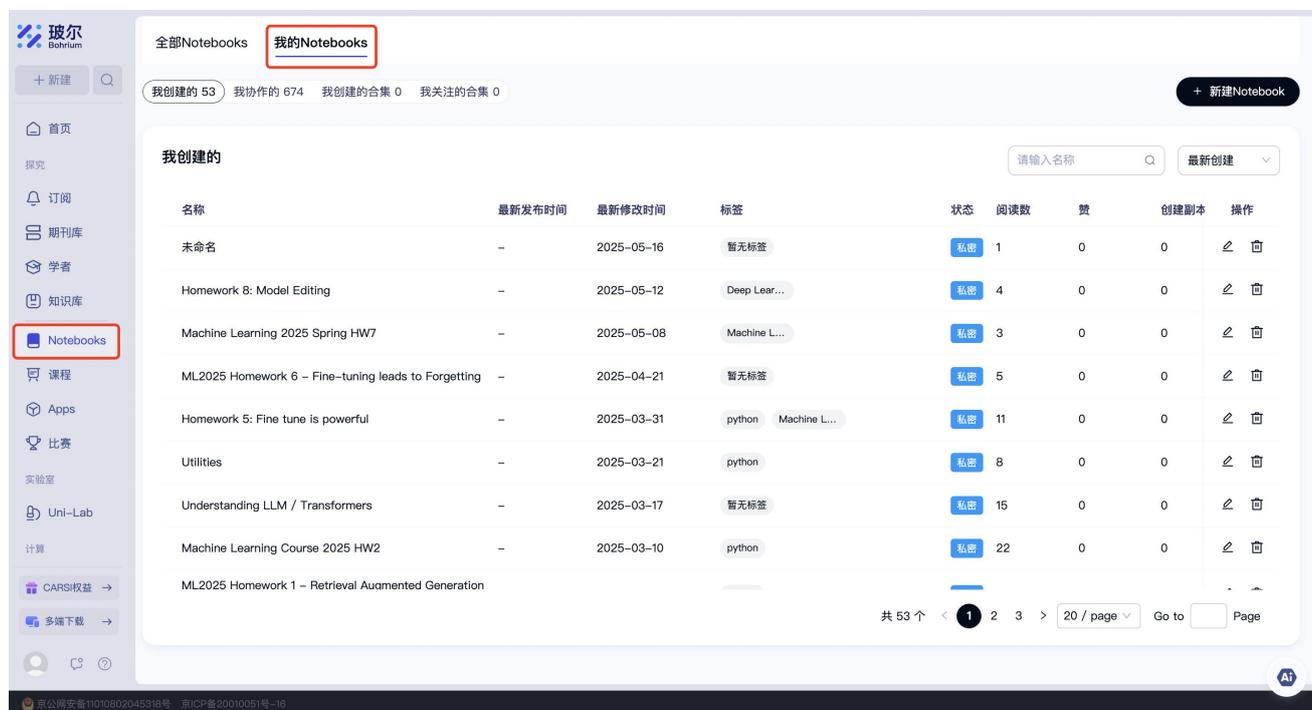


Notebook 的代码单元格支持 Python 代码和 Shell 命令，点击单元格的运行按钮即可运行代码。当代码运行出错时，玻尔内置的 AI 助手会智能识别错误原因并提供正确的示例；

Notebook 在编辑时会自动保存，当图示位置指示灯为绿色时，表示自动保存已完成。



您可以在个人主页的“我的 Notebook”页面，看到所有您创建的、或他人分享给您的 Notebook 并进行编辑。



更多更详细的编辑技巧，您可以阅读《[一篇带你了解 Bohrium Notebook 的使用](#)》，里面提供了 markdown 编辑的详细方法和使用 Notebook 进行数据可视化的实战案例，还有对提升编辑效率非常有帮助的快捷键用法。

更多 Notebook 写作技巧，推荐阅读：《[NBHub | Notebook 写作帮助](#)》、《[8 个不易发现的 Notebook 使用技巧](#)》这两篇内容，或在网络上检索获取更多方法。

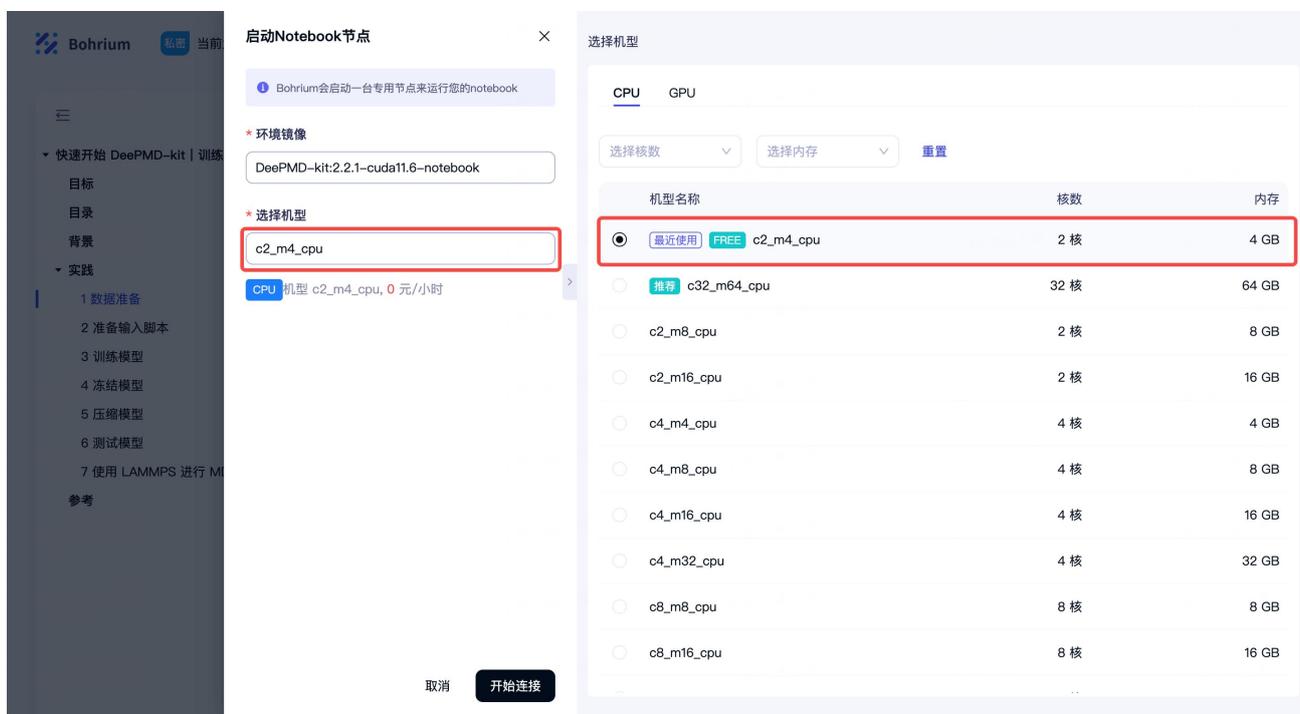
5.3 运行 Notebook

您可以点击图示位置的“开始连接”按钮来启动一台节点运行 Notebook：



其中“启动 Notebook 节点”，点击后会按照您指定的配置启动一台新的 Notebook 专用节点。而如果您已经有运行中的节点，并在其中准备好了 Notebook 运行所需的环境，希望用它直接运行 Notebook，可以选择“连接已有节点”。

玻尔提供了多种 CPU 和 GPU 型号供您选择，其中 2 核 4G 的 CPU 资源是免费的。



完成选择后点击“确认”，等待 10 秒左右的开机时间，当按钮显示为绿色的“已连接”状态时，就可以开始运行 Notebook 了。

注意：如果您在选择了自定义镜像来运行 Notebook，请确保镜像中已安装 [JupyterLab 3.0](#) 以上版本，建议安装**最新版**。请使用 JupyterLab [官方推荐的方法](#) 安装，以确保 jupyter lab 命令可以正确执行。如果镜像不符合启动要求，连接节点时会失败，请更换其他镜像重新连接。

为了帮您节省费用，玻尔会在 Notebook **闲置超过 120 分钟**（未运行任何代码且页面不在激活状态）后自动释放该节点。节点释放不会影响您已保存的 Notebook 文件，也不会影响您保存在 /personal 个人盘下的任何文件，但您在节点系统盘中所做的变更（如新安装的软件）将会丢失。

如果您不希望丢失这些变更，请保持 Notebook 处于活跃状态，或在节点列表中[将环境保存为自](#)

定义镜像，下次连接时，使用该镜像开启节点即可。

当您暂时不需要使用计算资源时，也可以主动断开连接。

5.4 分享 Notebook

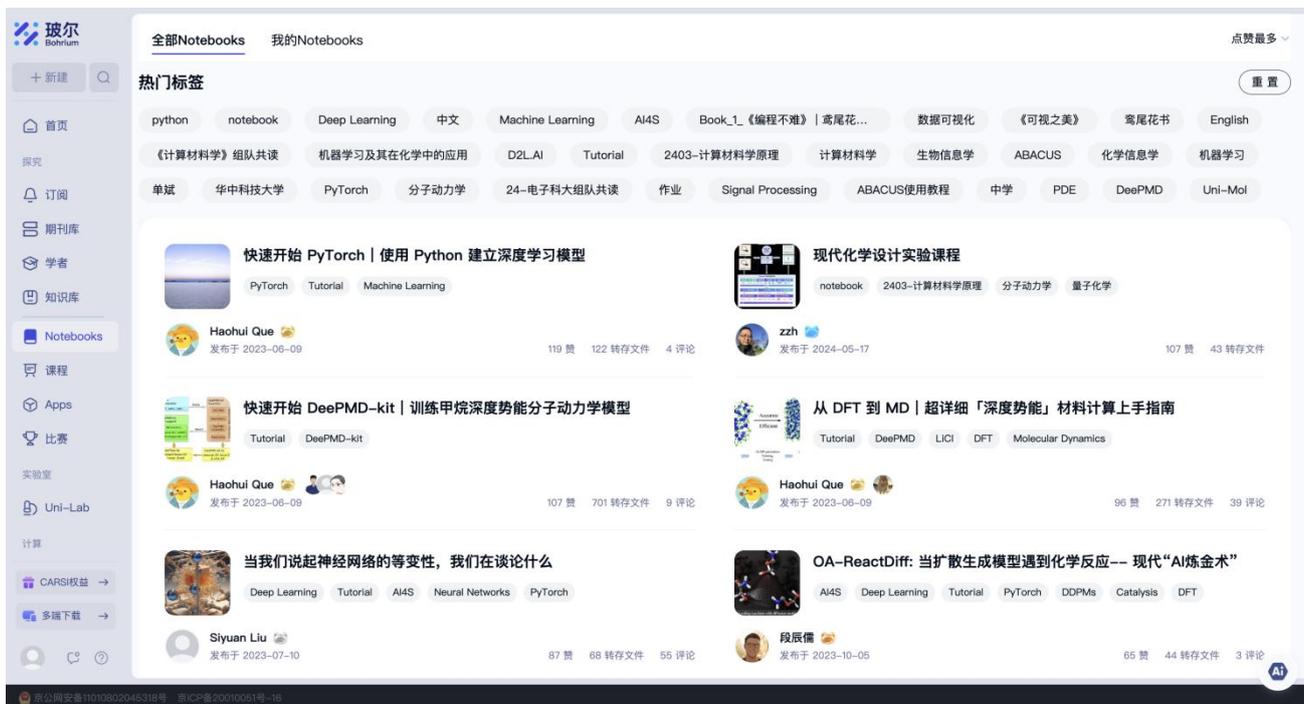
新创建的 Notebook 默认只有您自己可见，当您想邀请他人一起阅读或编写时，可以点击右上角“权限设置”按钮，将 Notebook 分享给指定的用户：



您可以定向邀请具体的玻尔用户，也可以批量邀请一个项目下的全部成员。邀请协作者时，您可以指定对方的权限范围，玻尔提供了可阅读、可编辑、可管理 3 档权限类型。

如果您不清楚被邀请人的玻尔账号（如开放式的讲座或课程），或对方没有玻尔账号，您可以打开“链接分享”开关，此时所有获得链接的人都可以阅读您的 Notebook。

如果您希望把 Notebook 分享给玻尔的全部用户，可以选择“公开发布”，这样所有用户都可以搜索到这篇 Notebook，也可以在您的个人主页上看到它。如果您的 Notebook 获得了较多点赞，它将有可能出现在 Notebooks 首页。



公开发布 Notebook 时，您可以进行以下设置：

- **添加署名作者**：添加其他需要署名的贡献者，并通过添加顺序决定作者的排名先后；
- **添加标签**：便于案例广场用户检索，以及平台进行相关内容推荐；
- **推荐镜像和机型**：您可以指定镜像和机型，读者在案例广场运行您的 Notebook 时，系统会自动选择您指定的镜像和机型来开启节点。如果您推荐的镜像是自定义镜像，请确保其中不包含您的隐私数据，并确保镜像可用；
- **分享数据集**：如果您的 Notebook 引用了其他数据或文件，您可以将其制作成数据集，并在发布时一并分享，读者运行您的 Notebook 时可以访问到这些文件。

公开发布后的 Notebook 可以持续修改，但别忘记在完成修改后，点击“重新发布”按钮，将最新版内容同步给其他人：



注：只有公开发布的文档需要点击“重新发布”。私密文档不需要该操作，任何用户编辑私密文档后，其他协作者看到的都将是最新版。

6. 课程：AI for Science “第二课堂”

玻尔课程平台面向科研工作者提供教、学、研、用一系列功能，汇聚、精选并整合了国内外优质的 AI for Science 教学资源，包括课程资料、实训案例等，为想要了解和学习 AI for Science 的学员提供最好的学习体验。目前平台上线的课程包括机器学习、材料学、化学、生物医药、物理、数学、文献管理、科研绘图等领域。

6.1 申请开课

在课程页面右上角选择【我是老师】，点击【申请开课】，填写申请表，工作人员会在 1-2 个工作日内完成审核并联系您。

玻尔 Bohrium

+ 新建

首页

探究

订阅

期刊库

知识库

Notebooks

课程

Apps

比赛

实验室

Uni-Lab

李宏毅2024
生成式人工智能导论
Introduction to Generative AI
(2024 Spring)

我的学习 我是老师

当前无开课权限

申请开课

精品课程

计算材料学 (2024秋)
Computational Materials Science (Autumn 2024)
开课中

深度学习及应用
Deep Learning and Its Application
开课中

人工智能辅助科学研究 (AI for Science)
开课中

DeePMD
从入门到精通
开课中

计算材料学 (2024秋)
单斌、文艳伟、杜纯
3,022 人报名 免费

深度学习及应用
严骏驰
3,679 人报名 免费

人工智能辅助科学研究 (AI for S...
张林峰、王一博、周巍青
2,477 人报名 免费

DeePMD: 从入门到精通
张林峰、王一博、徐张清仓、石孟超... 等
242 人报名 ¥1999.00 ¥1499.00

新课推荐

开课信息

老师您好，欢迎您来到玻尔空间站开课。请您填写如下信息，课程助教会尽快联系您

* 您的称呼
请输入您的称呼

* 您的邮箱
请输入您的邮箱

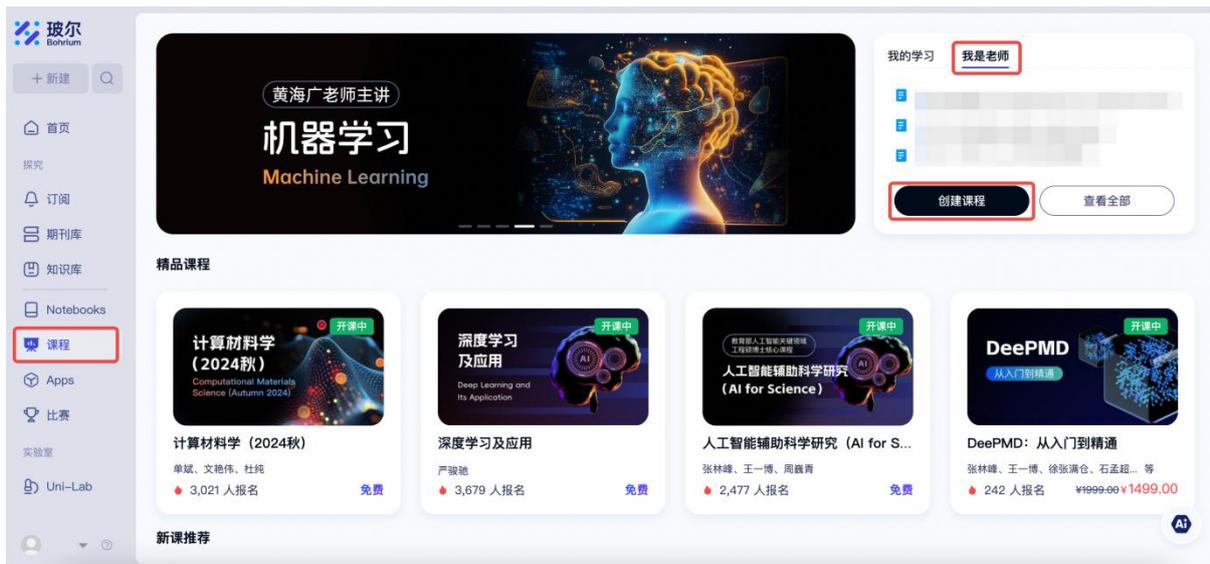
* 您的微信
请输入您的微信

* 您的学校
请输入您的学校

* 您的院系
请输入您的院系

6.2 创建课程

1. 开课申请通过后，在右上角选择【我是老师】并点击【创建课程】。



2. 填写【课程基本信息】，帮助学员了解课程内容。



⚠ 注意：

- 如您的课程为双语课，可以填写对应英文信息，学生将玻尔语言调整为英文后，可以进行英文课程的学习；
- **【开课时间】**一栏：
 - 若开课时间晚于当前日期，该门课程将处于“**报名中**”状态，学生仅可浏览课程主页、进行课程报名，无法进行课程学习；
 - 超过课程结束时间，课程将关闭报名通道，已报名的学生依然可以学习。因此若您的课程为长期课，没有结束日期，请选择“长期课，无结束时间”；
 - 课程在课程正式开课后（非“报名中”状态时），不可进行调整。

6.3 上传课件

1. 创建课程之后，在课程页面点击**【课件管理】**设置课程目录，并上传课件。



注：各选项含义：

- 新建课程目录：添加课程一级目录；
- 允许下载：是否允许学员下载课件资料（视频默认不可下载）；
- 添加课件：支持上传视频、Notebook、压缩包、pdf、ppt、word、excel 等格式的课件：
视频：仅支持从本地上传
PDF 及其他文件格式：支持从本地上传、从玻尔盘中上传两种方式
Notebook：需添加 Notebook 链接，操作如下：



您上传的课件是实时保存的，后续您和课程助教可以随时调整课件内容。

2. 上架课程

课件上传完毕后，点击【上架】按钮，课程会公开出现在玻尔课程列表（<https://玻尔.dp.tech/courses>）；若您暂时不想公开课程，可以不点击【上架】按钮，此时课程为私密状态，您可以把课程链接发送给学生进行学习。



6.4 上传及批改作业

1. 在课程页面点击【作业管理】，按照教学需求设置作业并上传。



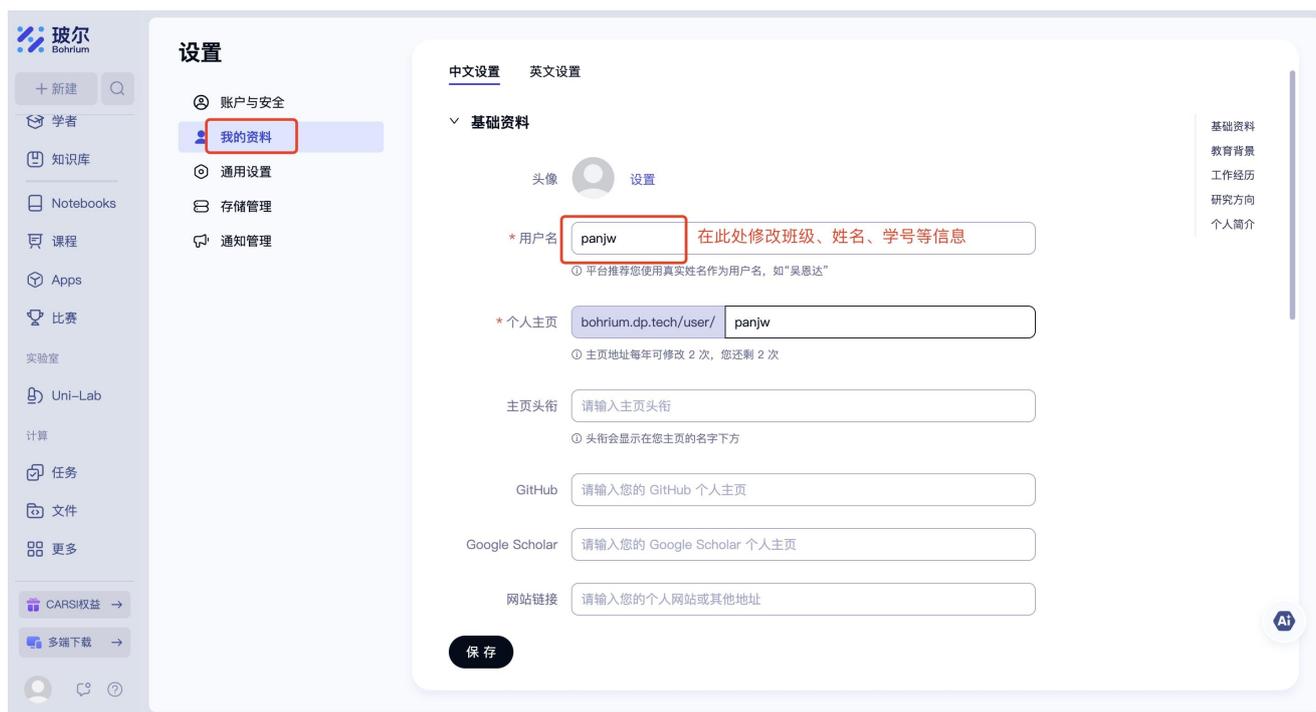
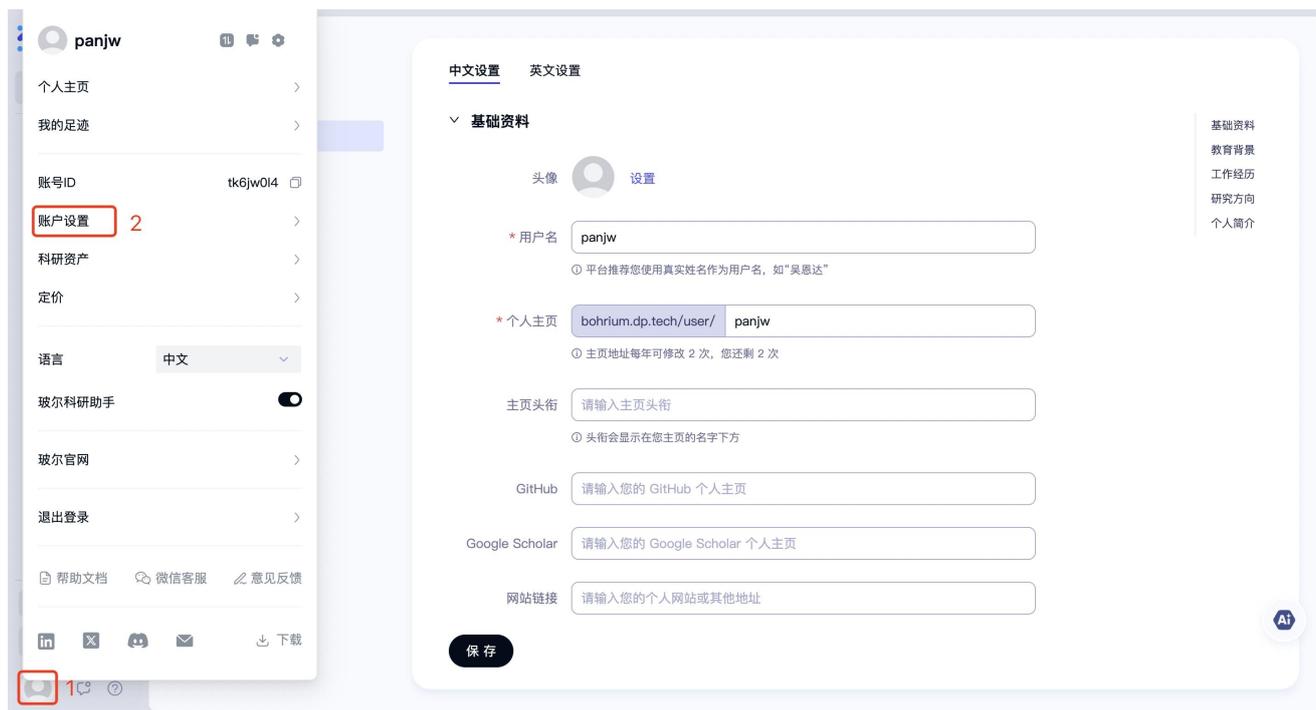
2. 点击【保存并发布】后，该作业会显示在课程页面，学生端可以点击【去提交】按钮提交作业。

3. 收集完学生作业后，在课程管理界面中点击【作业管理】进行作业查看和批改，支持批量批改、打分、写评语、导出所有作业文件及学生成绩。

6.5 学员管理

1. 您可以在课程的【学员管理】页面下看到所有报名课程的学员信息，支持按照学员的玻尔用户名进行搜索，检查学员是否加入课程。

2. 在线下教学过程中，为了方便进行学员管理，建议学生在【头像-账户设置-我的资料】中，将用户名根据需要调整为姓名、学号、学院、班级等信息。



7. APPs : 开箱即用的科研领域的“一站式”服务商店

玻尔 Apps 集合了 200+ 科研工具，全面覆盖文献调研、干湿实验、数据分析、科研绘图等场景。同时，玻尔 Apps 为开发者推出了配套的 Apps 开发平台，让开发者上架自己的应用。开发者仅需简单地修改算法运行入口代码，即可生成丰富的用户界面和完整的功能套件。借助玻尔 Apps，开发者能够迅速收集用户反馈，为方法的进一步优化提供支持，实现研究成果的落地应用，并创造商业价值。

The screenshot displays the Bohrium Apps store interface. The top navigation bar includes '精选推荐', '全部App', '网站收录', '我的订阅', and a search bar for '搜索App名称'. Below the navigation, there are filter tabs for '全部', 'protein', 'notebook', 'Machine Learning', 'DFT', '中文', 'Uni-Mol', 'ABACUS', '化学信息学', 'RDKit', 'Deep Learning', and '综合排序'. The main content area features a grid of application cards, each with a thumbnail, title, description, and user statistics. The visible cards include:

- React-OT**: 让过态搜索像打个响指一样简单 (A4S, 213 likes, 42 downloads)
- MatModeler**: 一款专为材料科学领域设计的APP, 为材料研发人员提供高效... (材料可视化, 3.5K likes, 263 downloads)
- 学术搜索小助手**: 学术搜索小助手是一款无需科学上网的google scholar加强版科研工... (1.4M likes, 59.3K downloads)
- 期刊分区查询小助手**: 期刊分区查询 (论文, 270.5K likes, 14.2K downloads)
- Uni-Fold**: 高精度蛋白质结构预测工具, 支持蛋白复合物、同源寡聚体预测 (生物医药, 24.9K likes, 2.3K downloads)
- Uni-View**: 一个具有编辑、测量、样式定制和图像导出功能的分子... (生物医药, 19.6K likes, 1.6K downloads)
- 在线矢量图表生成 (Graphs)**: Graphs 是一个在线图表生成工具, 无需代码即可轻松探索数据并创... (Graph, 13.2K likes, 2.2K downloads)
- Uni-AIMS**: Uni-AIMS 是一款由深势科技研发, 集成了前沿人工智能技术的电镜... (表征分析, 8.3K likes, 347 downloads)
- Uni-Mol Docking V2**: 使用Uni-Mol Docking V2进行分子-蛋白配体复合物结构预测。 (Uni-Mol, 7.6K likes, 954 downloads)
- LAMMPS**: 开源的分子动力学模拟软件, 常用于模拟液体、固体或气态的粒... (LAMMPS, 7.1K likes, 882 downloads)
- Uni-ELF**: AI for Science时代下高效开展电解液设计的智能研发工具 (5.9K likes, 318 downloads)
- RNA Secondary Structure ...**: 预训练模型与热力学参数优化的高精度RNA二级结构预测工具 (生物医药, 5.6K likes, 644 downloads)

The screenshot displays the Bohrium Apps store interface, showing a different set of applications. The top navigation bar is similar to the previous screenshot. The filter tabs are: '全部', 'scidraw', '数字图书馆', '科学出版社', 'pubmed', '文献管理', '绘图', '专利', '学术期刊', '文献', '蛋白质数据库', and '综合排序'. The main content area features a grid of application cards, each with a thumbnail, title, description, and user statistics. The visible cards include:

- FigDraw**: 快乐科研, 轻松绘图 (绘图, 59.6K likes, 624 downloads)
- Molecule Recognition**: OCSR APP: Translate optical molecular image into SMILES (OCSR, 56.8K likes, 4.7K downloads)
- SciDraw**: 在线科学绘图工具, 提供各种科学图表和图形的创建和编辑功能 (绘图工具, 22.8K likes, 394 downloads)
- JSTOR**: JSTOR (全称为Journal Storage) 是一个非营利性的数字图书馆, ... (数字图书馆, 12.9K likes, 88 downloads)
- UniProt**: 蛋白质数据库, 主要包括UniProtKB 知识库、UniParc归档库和UniRef... (蛋白质数据库, 9.7K likes, 14 downloads)
- Scholarscope**: Scholarscope 是一款专为 PubMed 用户设计的浏览器插件, 旨在提... (pubmed, 9.1K likes, 233 downloads)
- SpringerLink**: SpringerLink 是一个综合性的在线学术资源平台, 由德国施普林格... (资源平台, 7.5K likes, 31 downloads)
- DOAJ**: DOAJ: DOAJ is a unique and extensive index of diverse open... (文献查找工具, 7.1K likes, 24 downloads)
- Mendeley**: Mendeley 是一款广受欢迎的免费跨平台文献管理软件, 它不仅提供... (文献管理, 6.7K likes, 81 downloads)
- KEGG**: KEGG 是一个数据库资源, 用于从分子级信息 (尤其是基因组测序... (数据库, 5.0K likes, 11 downloads)
- ChemDraw | Revvity Signal...**: Create chemical structures with ChemDraw, the leading softwar... (可视化, 4.3K likes, 46 downloads)
- Medscape**: Medscape 是一个面向医疗专业人士的在线平台, 提供广泛的医疗... (资源平台, 3.6K likes, 39 downloads)

8. 比赛：“以赛代练”，聚焦领域前沿真问题

玻尔竞赛平台旨在从真实科研问题出发，通过以赛代练的方式，推动深入实践，构建从知识学习到实战检验的完整闭环。平台支持校级或联盟级赛事系统建设，营造专属的 AI for Science 竞赛与社区氛围，配备强大的算力基础设施和专业的赛事运营团队。经过数百轮比赛的打磨，玻尔科研空间站已形成一套专业且灵活的竞赛系统，赛题涵盖生物、化学、材料、物理、计算机视觉等前沿领域，并与 20 多家合作单位成功开展赛事合作。

The screenshot displays the Bohrium competition platform interface. On the left is a navigation sidebar with options like '首页', '探究', '订阅', '期刊库', '学者', '知识库', 'Notebooks', '课程', 'Apps', '比赛', '实验室', 'Uni-Lab', and '计算'. The main content area is titled '全部比赛' and includes filters for '进行中', '已结束', and '我参加的'. It features a grid of eight competition cards:

- 2025 Synbio Challenges 4.0: Synbio Foundry - Protein Design**: 合成生物学创新赛：大设施赛 - 蛋白设计。进行中，67人参赛。
- The 2nd Global Digital Intelligence Education Innovation Competition**: 第二届全球数字教育创新大赛。进行中，系列赛，14人参赛。
- The 2nd Global Digital Intelligence Education Innovation Competition**: 第二届全球数字教育创新大赛。进行中，9人参赛。
- AI4S CUP 人工智能基础技能认证**: AI4S Cup - 人工智能基础技能认证。认证，189人参加。
- AI4S Cup Python 基础能力认证**: AI4S Cup - Python基础能力认证。认证，636人参加。
- NOAI2025 教学测试**: NOAI 作为全球科学类奥林匹克大家庭中的新兴力量，专注于培养顶尖的人工智能中学生... 进行中，系列赛，1,246人参赛。
- AI4S Cup - OpenLAM Challenge**: 本轮 AI4S Cup 的赛题专注于搜集所有潜在的稳定晶体结构。通过生成式算法来创造晶体... 进行中，长期赛，424人参赛。
- AI4S Cup 学习赛 - 超导体临界温度预测**: AI4S Cup 学习赛是一类具有教学意义的比赛。学习赛将长期开放，旨在提供一次学习 AI for... 进行中，学习赛，773人参赛。

At the bottom of the page, there is a footer with the text: '京公网安备11010802045318号 京ICP备20010051号-16'.

【模块三：实验室】

Uni-Lab：开源智能实验室操作系统

玻尔 Uni-Lab 可以无缝集成各种实验室仪器设备和软件系统，高效搭建和管理实验室工作流程，构建涵盖软件、硬件、科研人员以及科研数据的完整实验生态。

玻尔 Bohrium

UNI-LAB 首页 设备

Uni-Lab-OS 开源社区 联系我们

全部供应商 上海奔曜科技有限公司 苏州中析生物信息有限公司 广州智达实验室科技有限公司 北京戴纳纳科技有限公司 广州翎羽科技有限公司 收起

广州标智未来科学技术有限公司 国仪量子技术(合肥)股份有限公司 安徽国科仪器科技有限公司 江苏东华分析仪器有限公司 东莞新威检测技术有限公司

武汉中科牛津波谱技术有限公司

全部设备标签 后处理 灵活 可拓展 高速度 高精度 移液 转运 紧凑型 高精度 自动进样 综合实验室场景 存档 开反应 收起

高分辨率 形貌分析 结构分析 物相鉴定 恒电位/恒电流 循环伏安 电化学阻抗 频率扫描 恒温控制 小电流测试 扣电兼容 恒温测试

数据记录 压片 压力可调 精密封口 扣式电池 压力可控 均匀涂膜 厚度可调 自动干燥 分子结构解析 化学位移

核磁共振波谱仪
化学位移 分子结构解析
核磁共振波谱仪是一种利用原子核在磁场中共振吸收射频能量的原理，用于解析分子结构...
武汉中科牛津波谱技术有限公司

涂布机
自动干燥 厚度可调 均匀涂膜
自动涂膜烘干机是一种将浆料均匀涂布在集流体上并连续加热干燥形成电极片的设备，是...
东莞新威检测技术有限公司

扣电封口机
精密封口 压力可控 扣式电池
扣电封口机是一种用于将扣式电池的上下壳体通过精密加压方式实现密封封装的设备，确...
东莞新威检测技术有限公司

固体压片机
压片 压力可调
冲片机是用于将电池电极片(正极或负极片)按指定尺寸和形状高速精准冲切的设备，是...
东莞新威检测技术有限公司

京公网安备11010802045318号 京ICP备20010051号-16

玻尔 Bohrium

奔曜科技 Beyard Robotics

依华智慧

北京大学·朱戎老师课题组

奔曜科技
奔曜科技创立于上海张江科学城，创始团队来自机器人和生命科学领域的世界五百强企业，具有深厚的科研底蕴与卓越的产品开发能力。公司致力于加速生命科学行业的智能化自动化变革，利用尖端的机器人、视觉与人工智能技术，为科学研究、临床诊断及理化应用等各类实验室，提供更易用、更高效的产品和解决方案。依托丰富的行业数据和前端的算法优势，奔曜科技精心打造出具有“领域认知和推理能力”的智能实验机器人，旨在让自动化触手可及，释放科学创新力，推动实验室卓越发展。

解决方案

多肽、环肽合成与药物筛选

已接入操作系统
深势科技 × 奔曜科技
多肽合成与筛选工作站
微量液体 强酸 多肽固相合成
本方案整合机器人系统、液体工作站、平行多肽阵列合成系统、声波移液系统、LCMS系统、多功能酶标仪、高速离心机、低速孔板离心机、氮吹模块、正压过滤模块、自动化冰箱、封膜机、撕膜机、孔板贴标模块以及自...

平行多肽阵列合成系统 液体工作站 高速离心机 更多

设备产品

LabGenius G 系列移液机器人
LabGenius G 系列是一款高速、高精度的高端、好用、智能的移液机器人，开创移液机器人设计新模式。通过自由搭配移液、力位控制夹爪等模块，配合振荡、加热振荡、温控、磁力架、正压、PCR、HEPA、UV 等功能模块，满足不同客户对实验的多样化需求，实现全天候无人值守运行。

京公网安备11010802045318号 京ICP备20010051号-16

【模块四：计算】

1. 任务

1.1 在玻尔上提交任务

当前玻尔针对用户的不同使用场景，提供了两种不同的提交作业方式，参考使用场景如下：

使用场景	建议提交方式
对 Linux 命令不熟悉，对软件使用参数不熟悉	网页提交
初次使用玻尔，不会使用 Bohrium CLI，不会写 job.json 等	网页提交
熟悉 Linux 命令以及玻尔作业提交命令的高阶用户	命令行提交

点击图片可查看完整电子表格

1.2 网页提交任务

玻尔预置了用户常用的科学计算软件，您只需准备好输入文件，即可在 1 min 内快速提交计算任务。

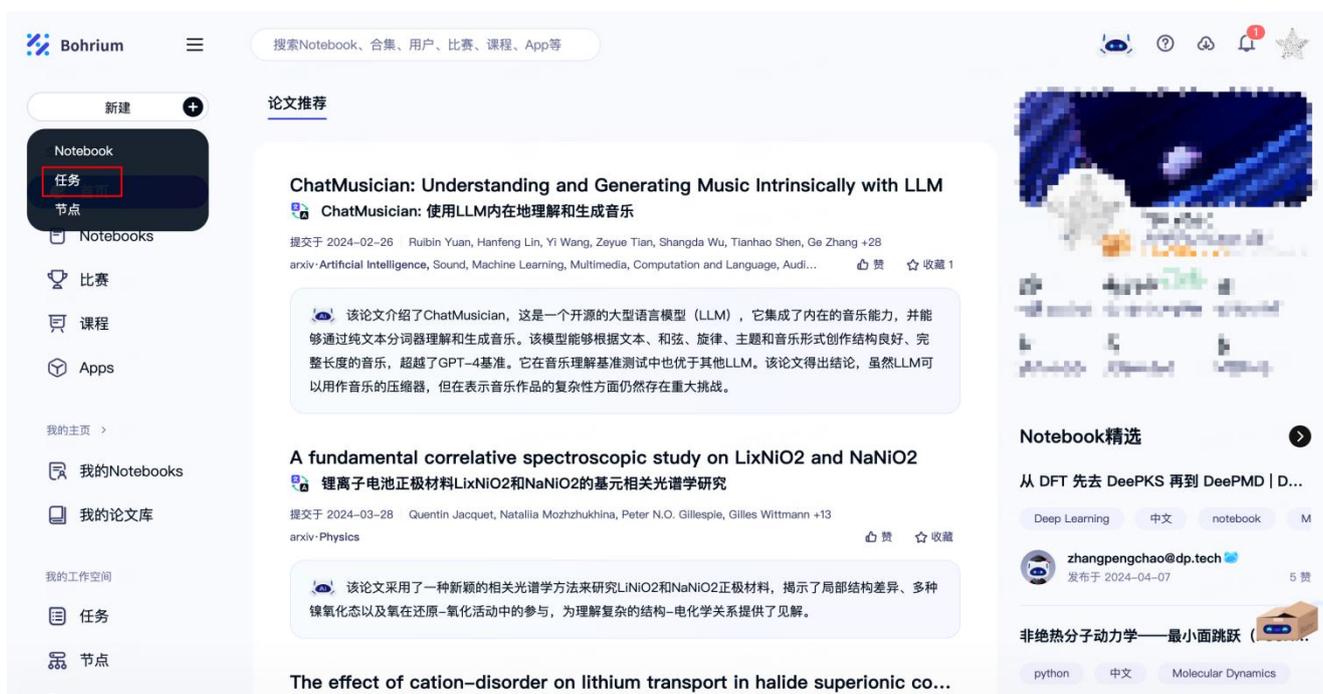
1.2.1 基本流程

1. 在玻尔左侧菜单栏选择“新建任务”；
2. 选择所需使用软件，按照步骤上传文件，设置参数；
3. 提交后可查看对应任务的计算过程及结果。

1.2.2 具体操作

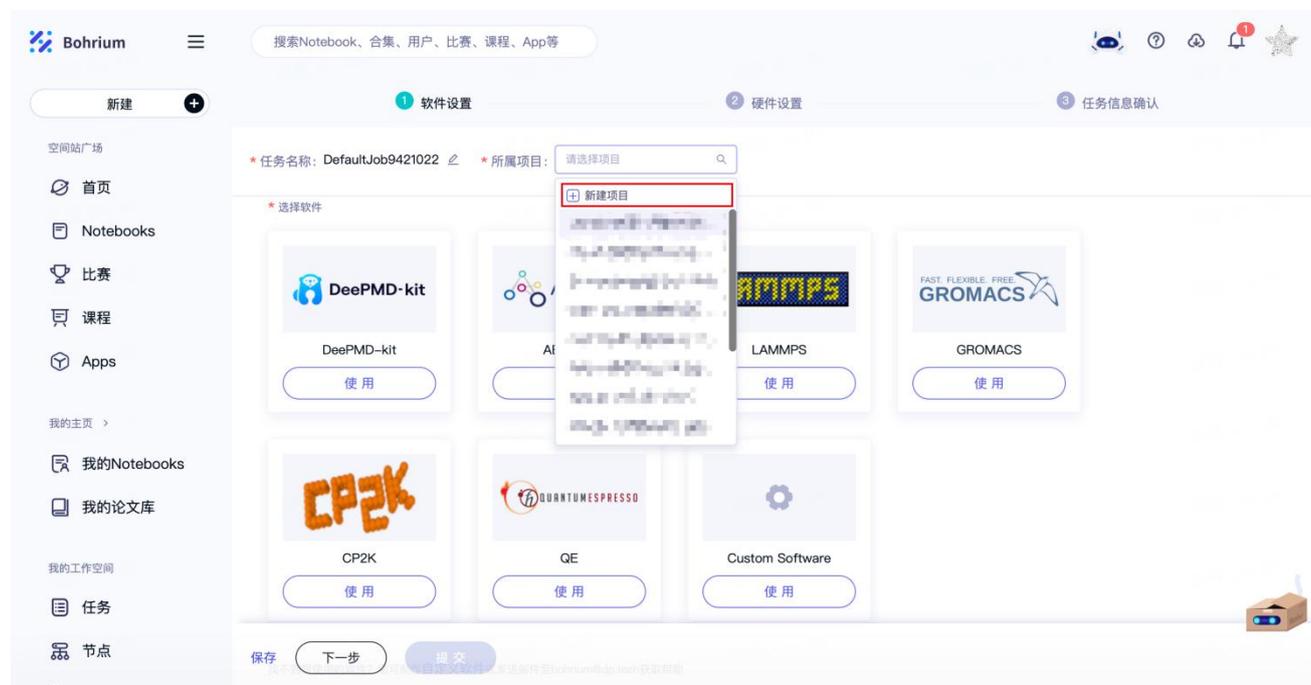
1. 设置任务基础信息

点击玻尔左侧菜单栏的“新建-任务”按钮，进入网页提交任务页面，如下图中红框所示：



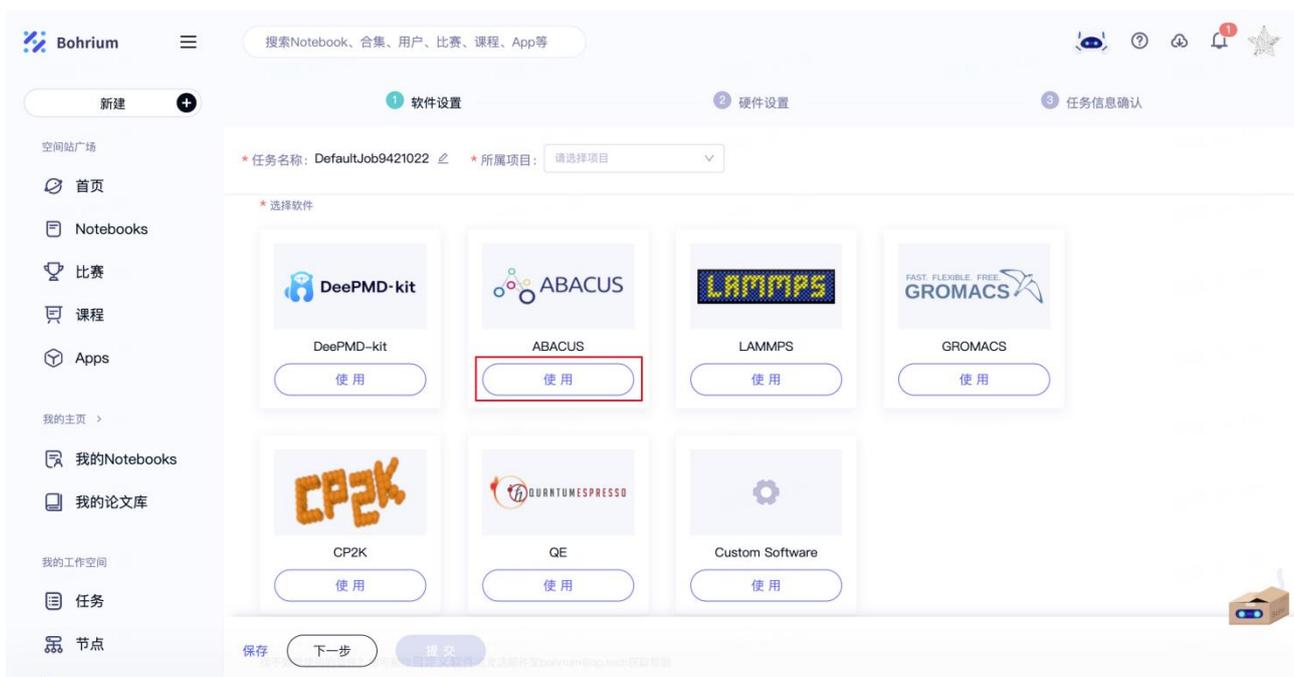
任务基础信息包括任务名称和任务所属项目：

- 任务名称填充了默认值，您可根据实际需要进行更改；
- 所属项目处需要选择任务所归属的项目，该任务将直接使用该项目的创建者余额；如您没有项目，可在此处进行创建，点击“新建项目”，输入项目名称即可。



2. 选择软件并设置参数

您可在软件列表处选择您所需要使用的软件，如列表内没有您需要的软件，您可联系企业微信 17710231129 获取帮助。点击需要使用的软件，即可进入该软件的具体设置，本教程以 ABACUS 为例：



- 点击“本地上传”，上传您需要用于计算的输入文件，如下图标号 1；
- 选择所需软件具体版本，如下图标号 2，如没有您需要的版本，请联系企业微信 17710231129 获取帮助。
- 系统会根据您选择的软件版本，自动填入运行软件所需的 command，如下图标号 3。

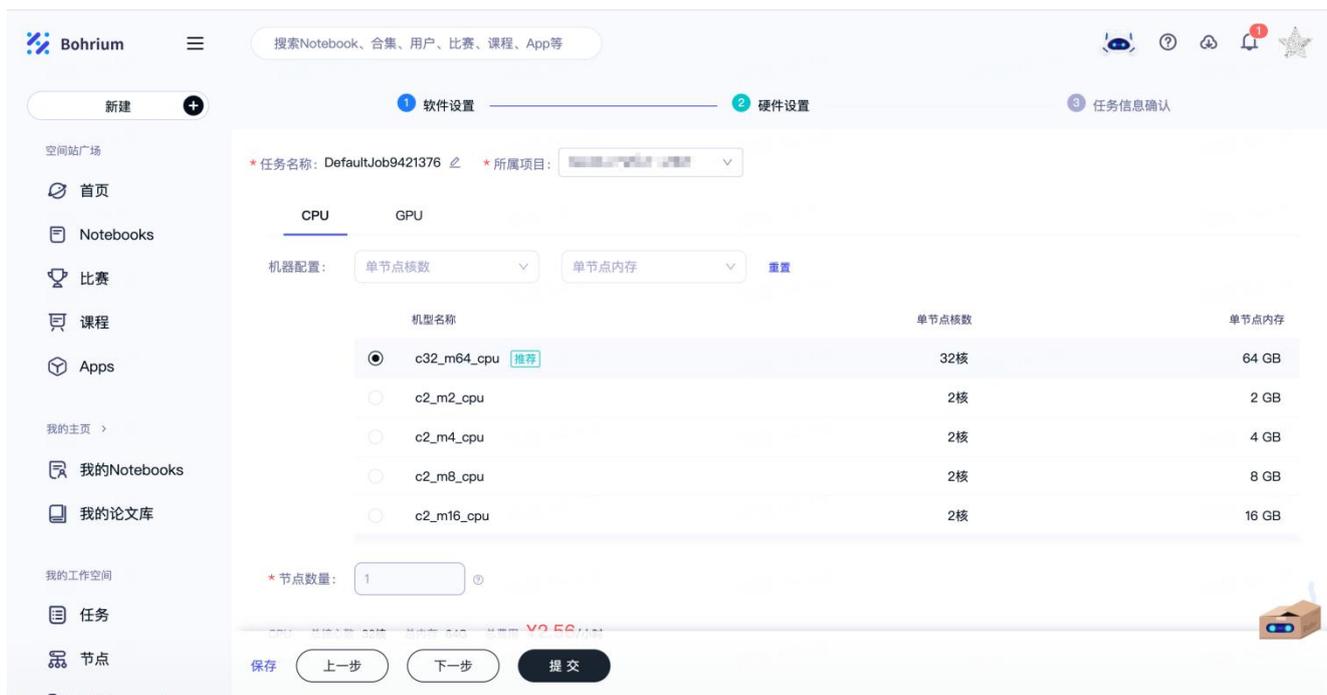
注意 部分软件的 command 内需要填入 input_file，您可在已上传的输入文件列表内选择对应文件，系统会自动填充。



3. 硬件设置

完成软件设置后，点击“下一步”进入硬件设置，您可在此处选择您所需要的计算机配置。如您不

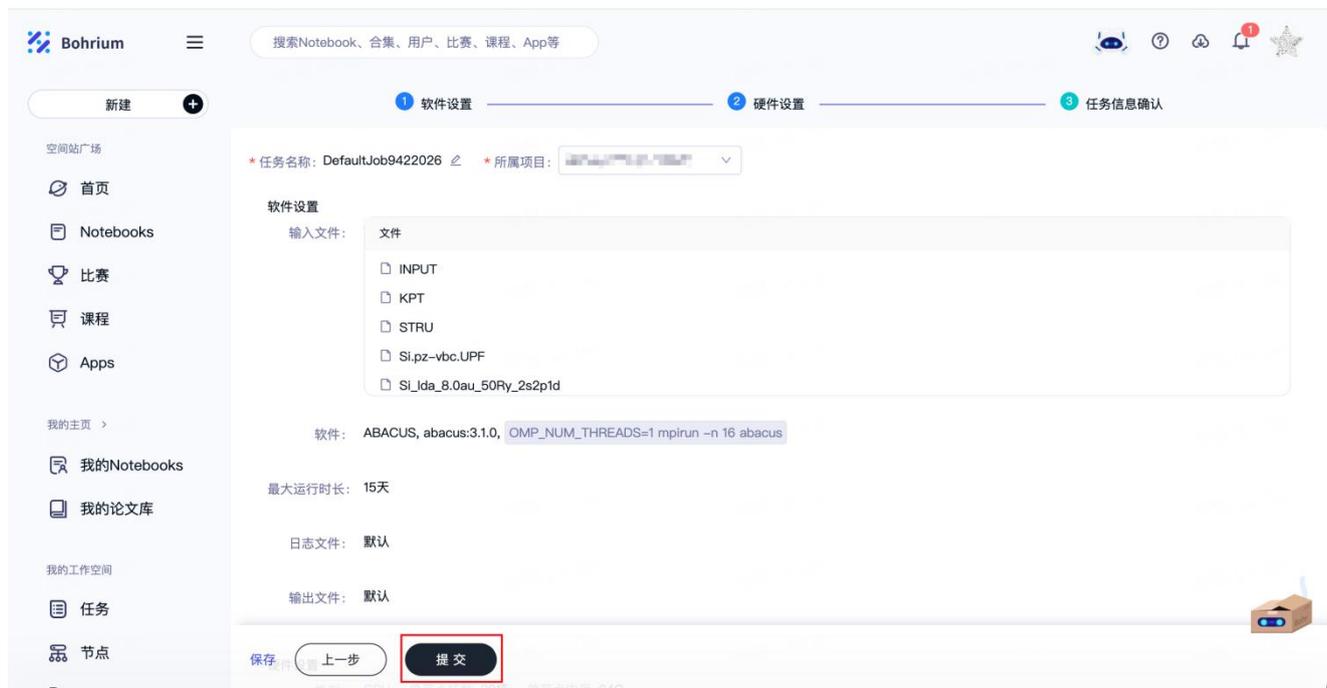
知道选择何种配置，直接使用系统默认填入的推荐值即可。



4. 参数确认并提交任务

软件硬件均设置完成后，可进行“任务信息确认”，如无问题则可进行任务提交。

注意 必填项全部填写无误，“提交”按钮才会亮起，如按钮未亮起，请检查必填项是否正确填写。



1.3 命令行提交任务

您可以在[命令行提交任务文档](#)中了解如何在玻尔平台使用命令行提交任务。

1.4 查看任务

您可以在[监控任务文档](#)中了解如何在玻尔平台查看任务状态。

1.5 下载结果

您可以在[结果下载文档](#)中了解如何在玻尔平台下载任务结果。

2. 文件

2.1 文件管理

在该页面上，您可以对节点数据盘内的所有文件进行**上传、下载、移动、复制、重命名、删除**等基本操作，还可以对**文本文件**和**结构文件**进行**在线预览和编辑**，玻尔支持的文件类型和操作详见下表：

文件类型	文件格式	支持的操作
结构文件	POSCAR、CONTCAR、CIF、XYZ	在线预览和编辑
	dump、lammprj、pdb、sdf、mol、mol2	在线预览
文本文件	PY、CPP、JSON、LOG、XML、TXT等绝大多数文本格式	在线预览和编辑
图片文件	JPEG、PNG、BMP、GIF、SVG	在线预览

[点击图片可查看完整电子表格](#)

其中，玻尔在识别结构文件时采用的规则如下：

- VASP 结构文件识别
 - 文件名中包含大写 POSCAR 或 CONTCAR 的文件
 - 文件名以 poscar、contcar、vasp 为后缀的文件
- LAMMPS 轨迹文件识别
 - 文件名以 dump、lammprj 为后缀的文件
 - 文件名以 lammprj 为前缀的文件
- 其他结构文件识别
 - 文件名以 cif、pdb、sdf、mol、mol2、xyz 为后缀的文件

2.2 文件的下载和上传

2.2.1 下载

在玻尔文件目录树中选中文件并右键点击下载即可将 /personal 盘中的文件下载到本地。

2.2.2 上传

在玻尔上，您可通过三种方式将本地的文件或文件夹上传到 /personal 盘：

1. 点击上传按钮进行文件和文件夹的上传



2. 在文件目录树中选中文件夹并右键点击上传

3. 直接拖拽文件或文件夹到 /personal 目录树 中来上传

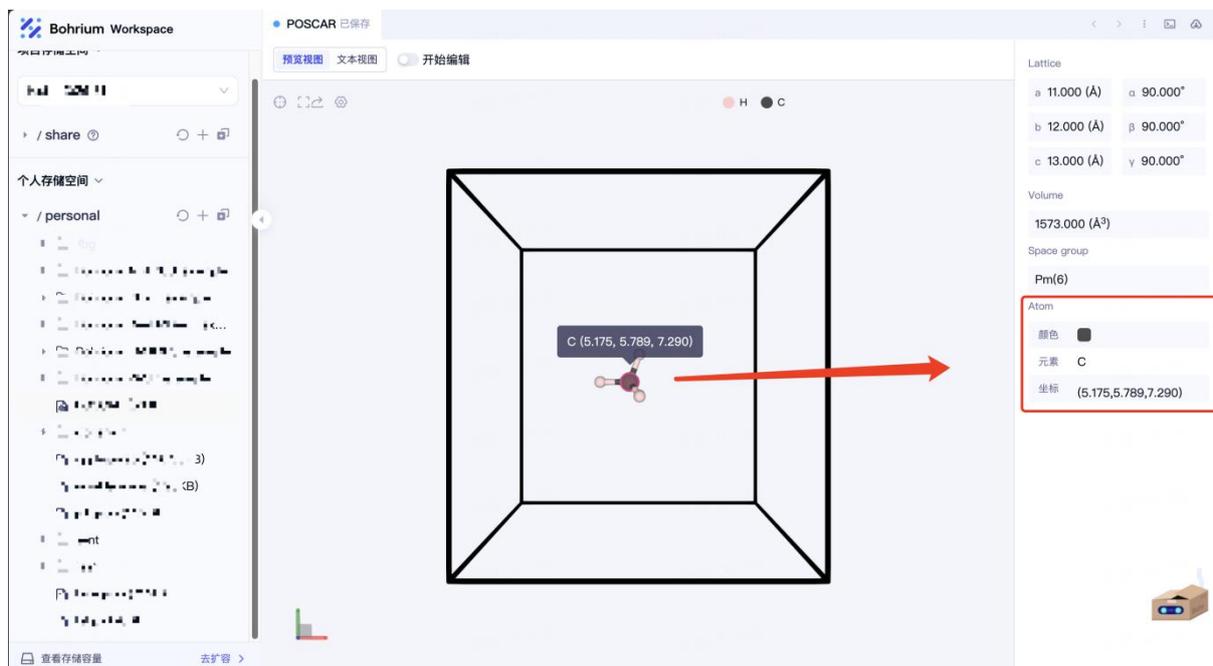
2.3 结构文件可视化

2.3.1 在线预览

对于 POSCAR、dump、xyz、mol2 等结构文件，在玻尔文件管理页面的左侧文件树中双击该结构文件即可即可进行方便快捷的结构预览。

在预览模式下，您可以查看结构的晶格信息，也可以通过 **Ctrl + 拖动鼠标**和**仅拖动鼠标**操作来分别进行结构的**平移**和**旋转**。

当**鼠标悬停**到某原子时，会显示出该原子的**元素名称**和**坐标**；**单击选中**该原子后，在右侧结构信息栏也会显示出原子信息。



2.3.2 在线编辑

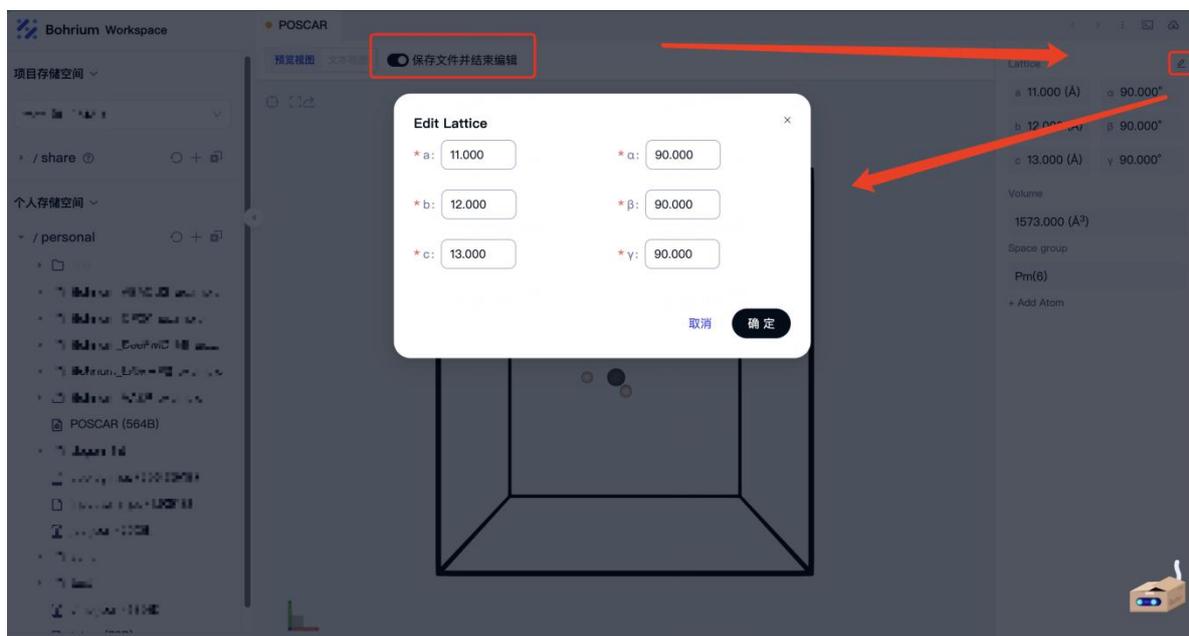
特别地，对于 POSCAR、CONTCAR、CIF 以及单帧结构的 XYZ 格式文件，玻尔现可以对这些结构文件进行在线编辑。

单击开始编辑左侧的滑块进入编辑模式后，即可进行结构文件的在线编辑；编辑完成后，再次单击滑块，即可保存文件并结束编辑。

在编辑模式下，您可以对晶格大小进行修改，也可以在结构文件中增加、编辑和删除原子。

2.3.3 编辑晶格

在编辑模式下，单击 Lattice 右侧的编辑图标，即可对晶格的大小进行修改。



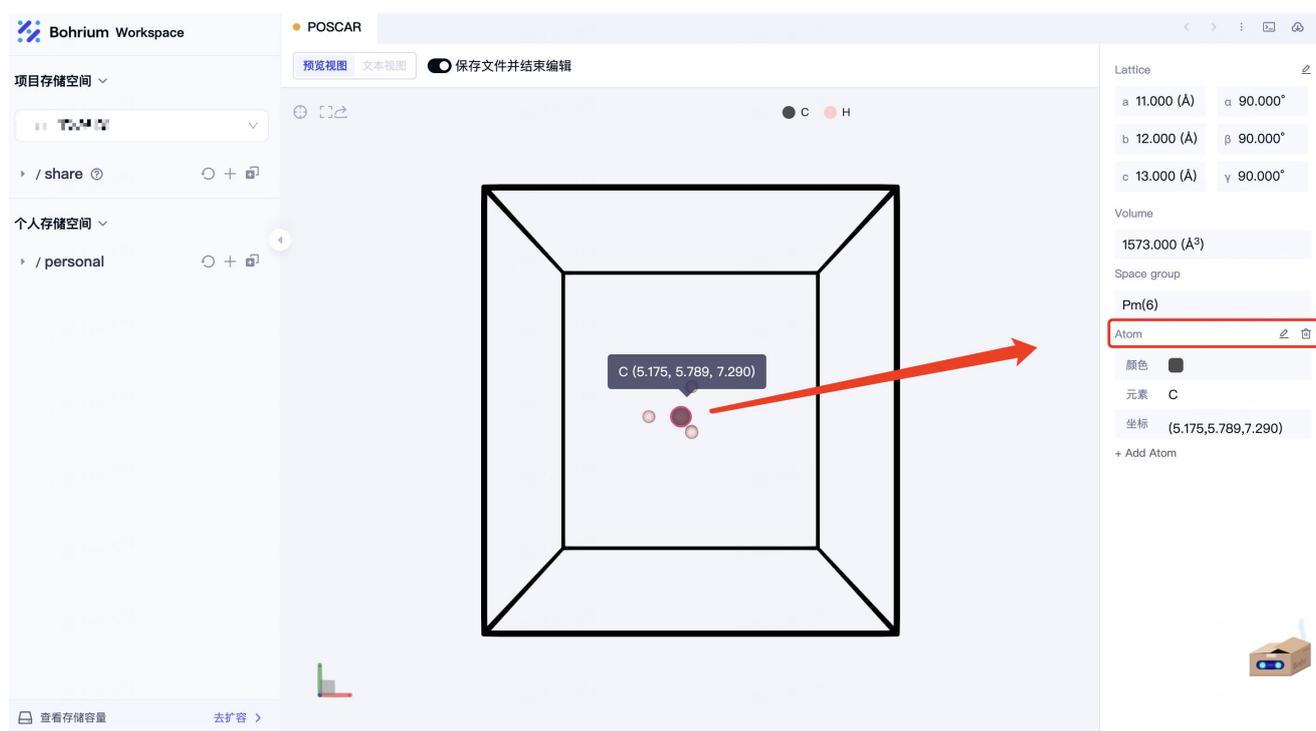
注意：在编辑晶格时，原子间距离也会同比例的放缩。

1. 增加原子

在编辑模式下，单击右侧结构信息栏的 **Add Atom**，选择元素周期表中的某个原子并填写笛卡尔坐标或分数坐标即可在结构文件中增加原子。

2. 编辑原子

在编辑模式下，选中某个想要进行编辑的原子后，单击原子信息栏的**编辑**图标，即可对该原子类型和坐标进行修改。



3. 删除原子

在编辑模式下，选中某个想要进行编辑的原子后，单击原子信息栏的**删除**图标或键入 **Del**，即可删除该原子。

3. 节点

在玻尔中，节点可以理解为用于运行计算任务的计算资源单位。每个节点都具有一定的计算能力（如 CPU 核心数、内存大小等），并且可能还配备有 GPU 等加速设备。这些节点是用户提交任务时所依赖的实际计算环境。

3.1 创建容器节点

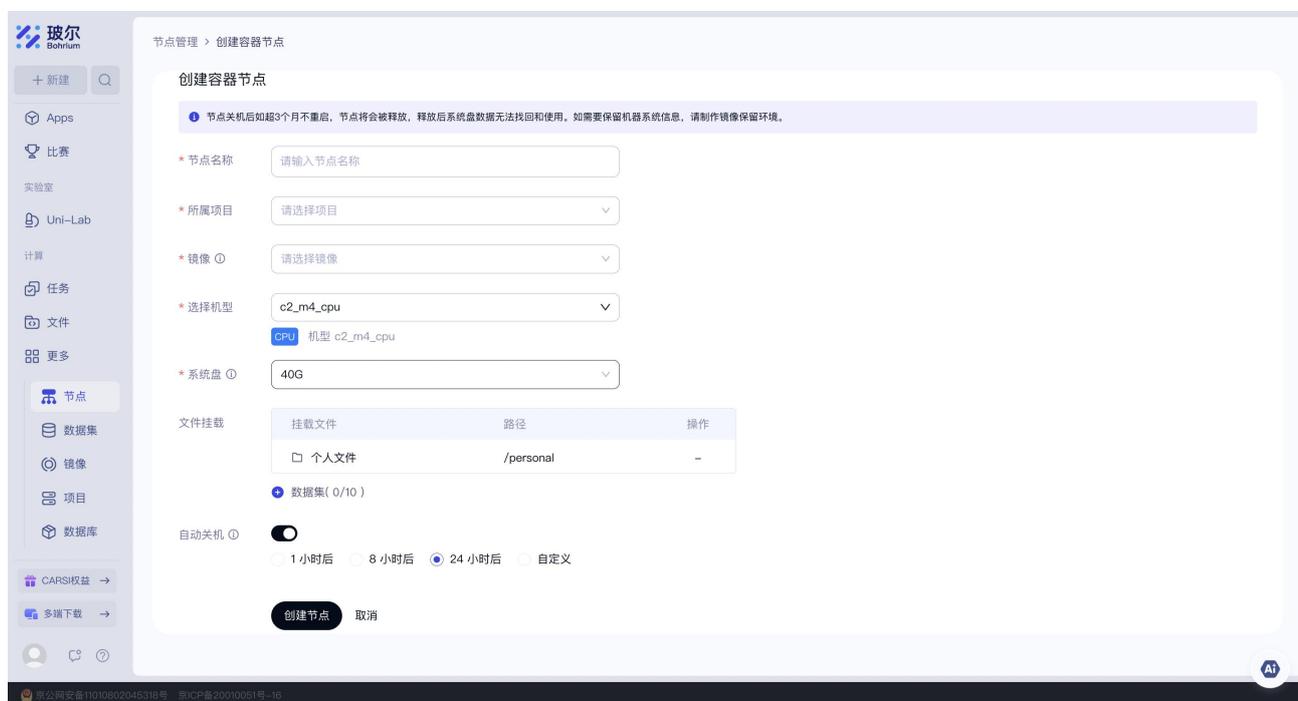
您可以创建容器节点，根据具体项目进行命名。

3.2 选择机型并设置镜像

根据您的计算需求（例如需要 CPU 计算还是 GPU 加速，任务的内存需求等），选择合适的机型并设置镜像。例如，如果您的任务是深度学习模型训练，可能需要选择带有 GPU 的节点。

3.3 提交任务并监控节点使用情况

创建节点后，提交任务。任务提交后，您可以在平台的任务管理界面监控节点的使用情况，包括节点的运行状态、资源使用率等信息。如果在任务运行过程中出现任何问题，也可以通过平台提供的日志查看功能来排查问题。



4. 数据集

玻尔数据集提供了数据的导入、下载、数据版本管理、数据分享及数据集挂载能力。您之前是否遇到过以下问题：

- 大部分任务的输入文件都是一样的，但每次提交任务时，还要等待文件打包上传过程，任务提交效率低；
- 输入文件很大，提交任务时打包上传要等待的时间很久；
- 我有一些文件想分享给其他人，不知道该如何分享。

• ...

现在数据集功能可以为您解决以上问题，提高任务提交效率，解决数据分享需求。

4.1 创建数据集

4.1.1 网页端创建数据集

点击玻尔左侧菜单栏的“数据集”按钮，进入数据集列表页，如下图标号 1。点击“创建数据集”按钮，如下图标号 2，进入数据集创建页面。

填写数据集基本信息并上传文件，点击创建后，系统将默认将当前内容创建为数据集的 v1 版本。点此[查看填写内容说明](#)

信息及文件准备完成后，点击“创建”，数据集创建成功，页面自动跳转至该数据集版本的详情页。

4.1.2 命令行工具创建数据集

当数据集文件太大时，由于传输时间较长，中途可能会由于网络等其他因素导致创建失败。因此可以使用支持断点续传的 [Bohrum CLI](#) 工具来创建数据集。

如果中途由于网络等因素导致了中断，可以通过重新执行同样的命令，然后根据提示输入 `y` 恢复先前的文件，最后即可做到断点续传。

入口：

```
bohr dataset create
```

概要：

Bash

Flags:

```
-m, --comment string  dataset description
-h, --help            help for create
-l, --lp string       file local path
-n, --name string     dataset name
-p, --path string     dataset path
-i, --pid int         project id
```

参数说明：

参数	缩写	说明	必填
--comment	-m	数据集描述	否
--name	-n	数据集名字	是
--path	-p	数据集路径	是
--pid	-i	项目id	是
--lp	-l	上传文件的本地路径	是

点击图片可查看完整电子表格

案例：

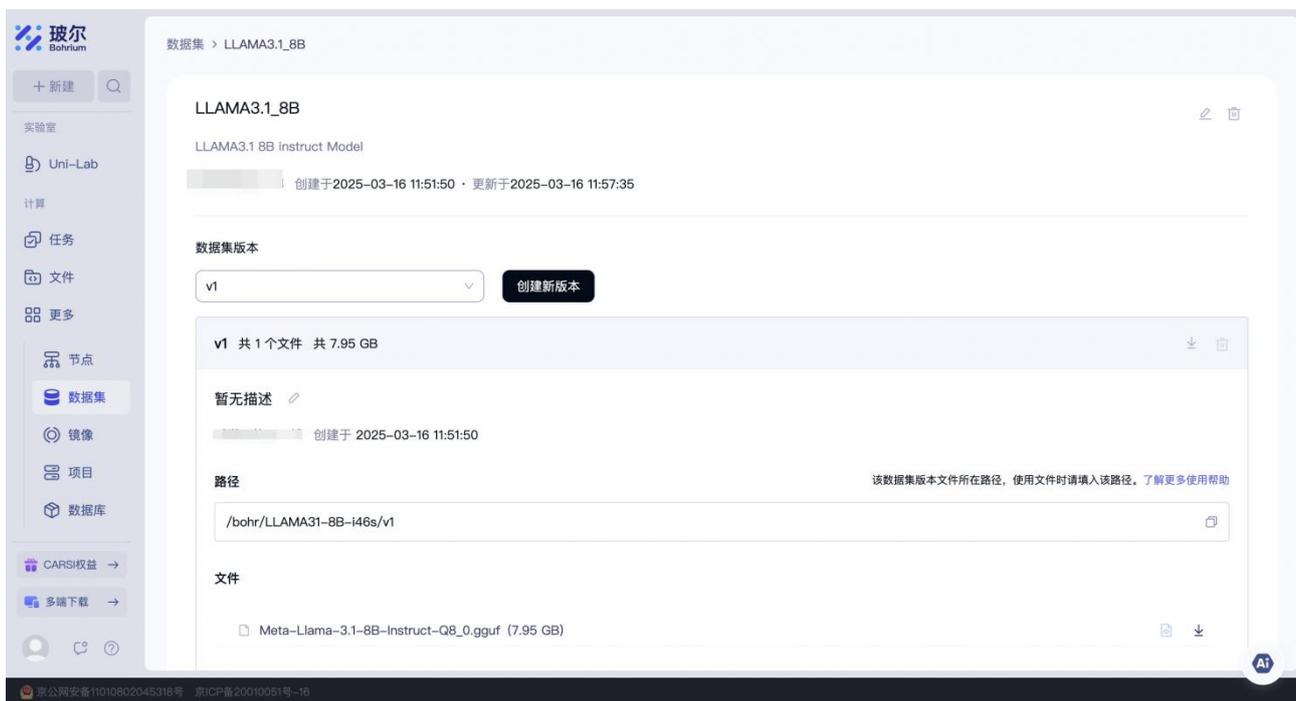
Bash

```
$ bohr dataset create -n bigfile -p bigfile -i 26611 -l
"/Users/dp/Downloads/test"
# 将 test 文件夹上传到 bigfile 数据集
# 并在上传过程中打断创建
# 重新输入相同命令，并输入 y，继续上传
```

4.2 查看数据集

从左侧菜单栏的“数据集”按钮进入数据集列表页。该列表内展示了您可使用的全部数据集，包括您创建的数据集及他人创建后分享给您的数据集。

点击数据集名称进入数据集详情页，可查看数据集基础信息及包含的各版本信息，获取各版本文件路径、查看及下载版本文件。



同时也可以使用 **Bohrium CLI** 工具来查看数据集。

```
Bash
```

```
$ bohr dataset list # 查看所有数据集 (按 Ctrl+C 退出)
```

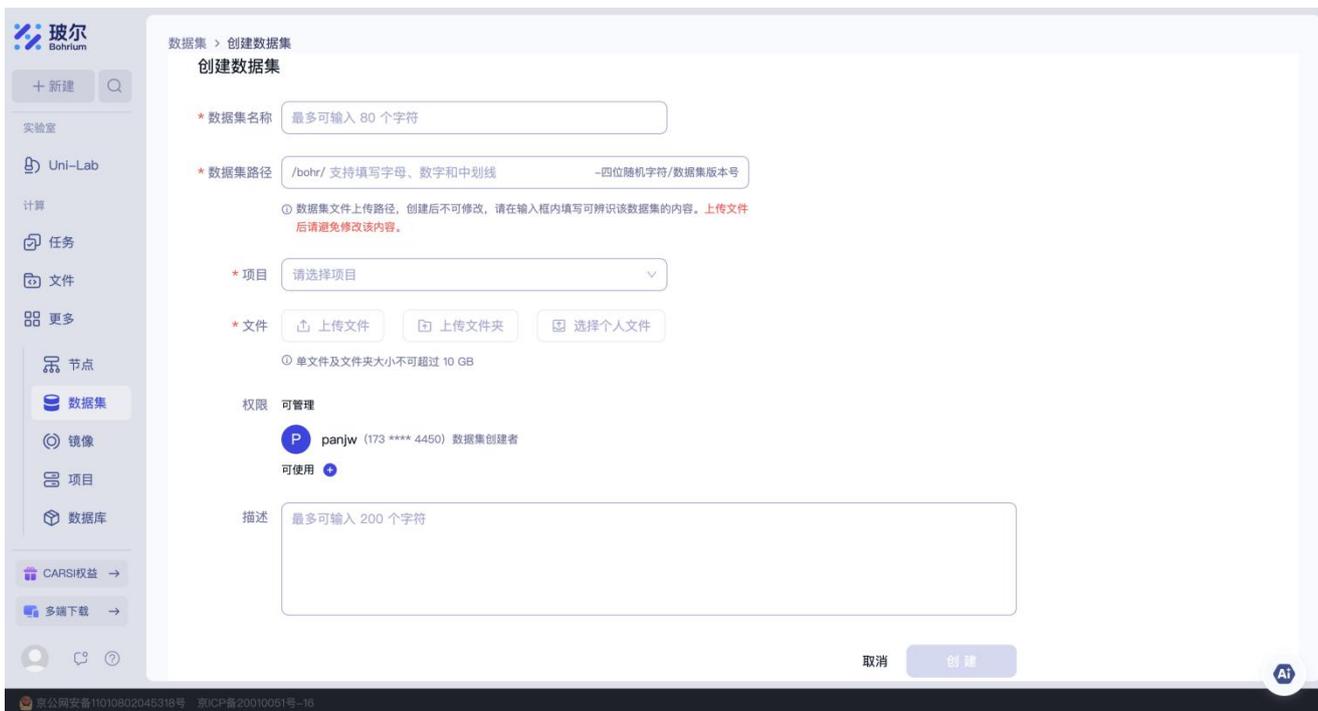
4.3 数据集的编辑及版本管理

如果您拥有数据集的管理权限，则可以对已创建的数据集进行版本新增、删除及数据集基础信息编辑等操作。

4.3.1 版本管理

若您需要对当前数据集内文件进行变更，您可通过“创建新版本”的方式，来发布一个新的版本。

1. 创建：点击“创建新版本”按钮，进入数据集新版本创建页面。系统会默认导入当前已发布的最新版本内已经存在的文件，您可根据需求进行文件的增加或删除，点击“创建”进行新版本的发布。



1. **等待准备完成**：新版本的创建需要一定的准备时间，准备期间其他使用者看不到该版本也无法使用，准备时间的长短与版本文件数量及大小有关，请等待版本准备完成后再进行使用。

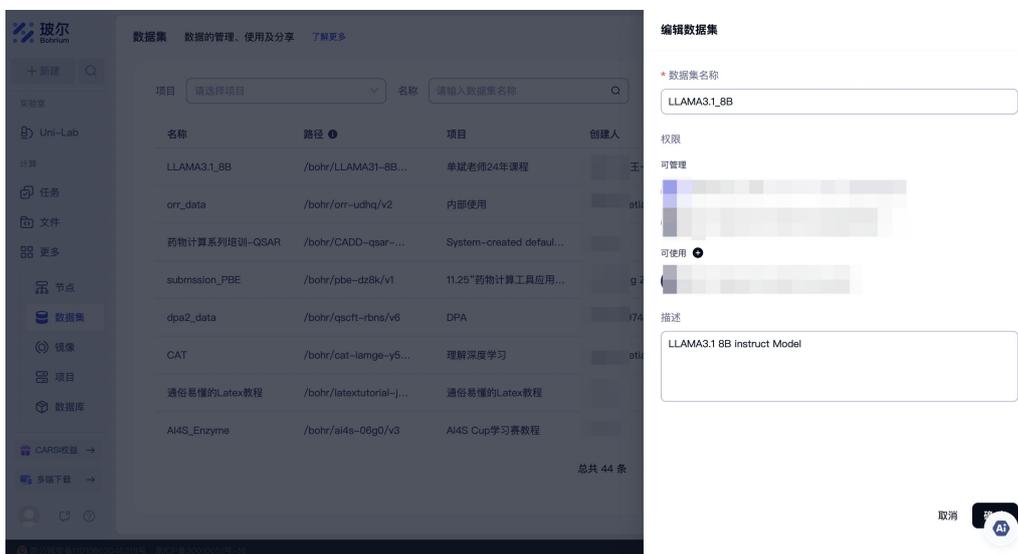
2. 版本创建后，版本内文件不可进行变更，如需调整可重新创建版本。

您发布的全部版本均会展示在数据集中，您可根据实际需求进行数据集版本的增加与删除，其他使用者仅可看到您已发布成功的数据集。

注意：被删除的版本不可恢复，将不可被继续查看和使用。

4.3.2 编辑数据集

在数据集列表页或数据集详情页点击“编辑”按钮，可对数据集的名称、描述、权限范围，进行修改。



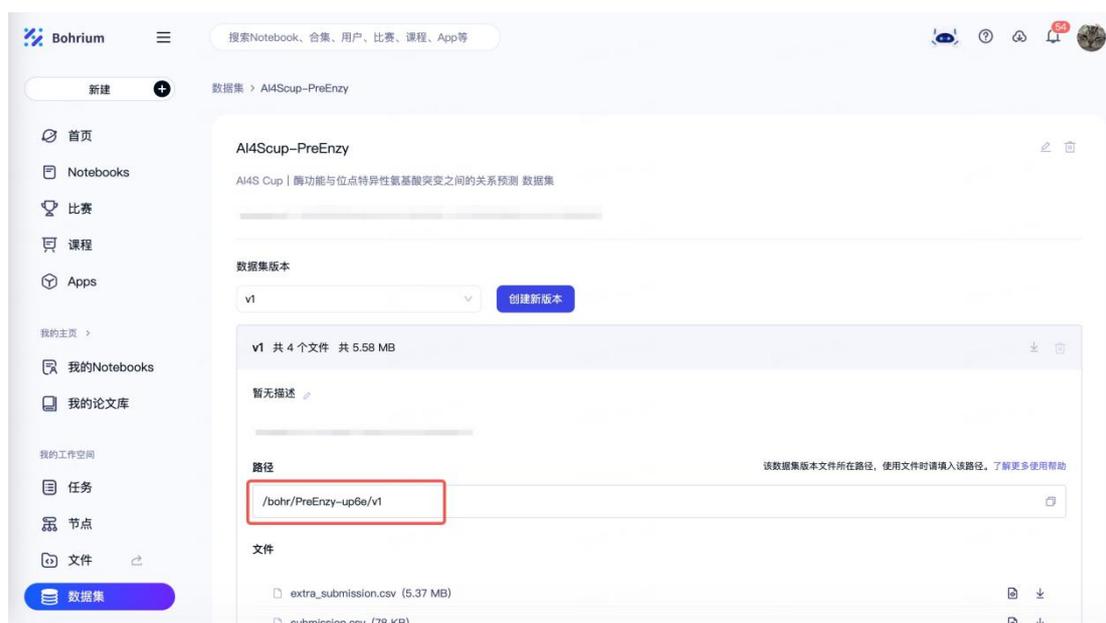
- 在数据集详情页内，也可对每个版本的描述进行修改。

4.4 使用数据集

当前支持在以下场景下使用数据集：

4.4.1 提交任务

1. **命令行提交任务**：您只需修改您的 `job.json`，在其中添加 `dataset_path` 字段，在该字段内以数字格式填入您需要使用的数据集版本对应路径，即下图红框内内容。



提交任务时，指定输入文件目录的方式依然支持，二者可同时使用。

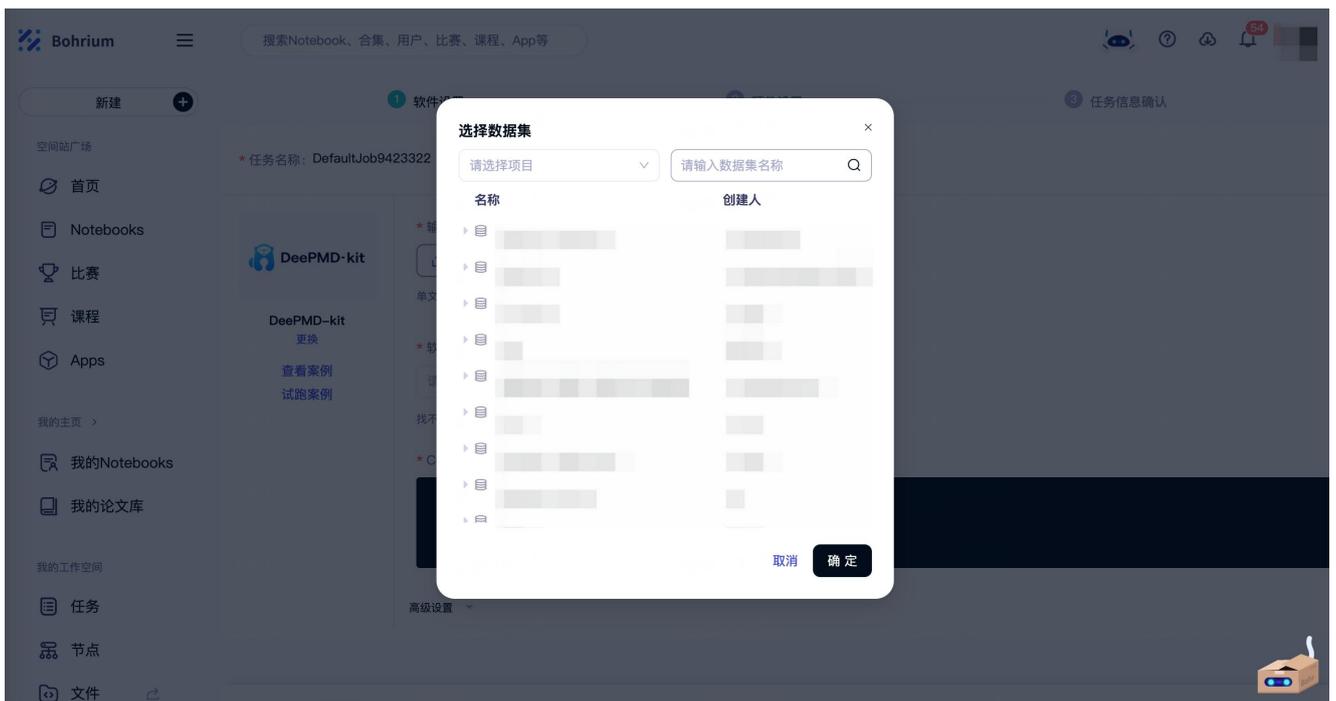
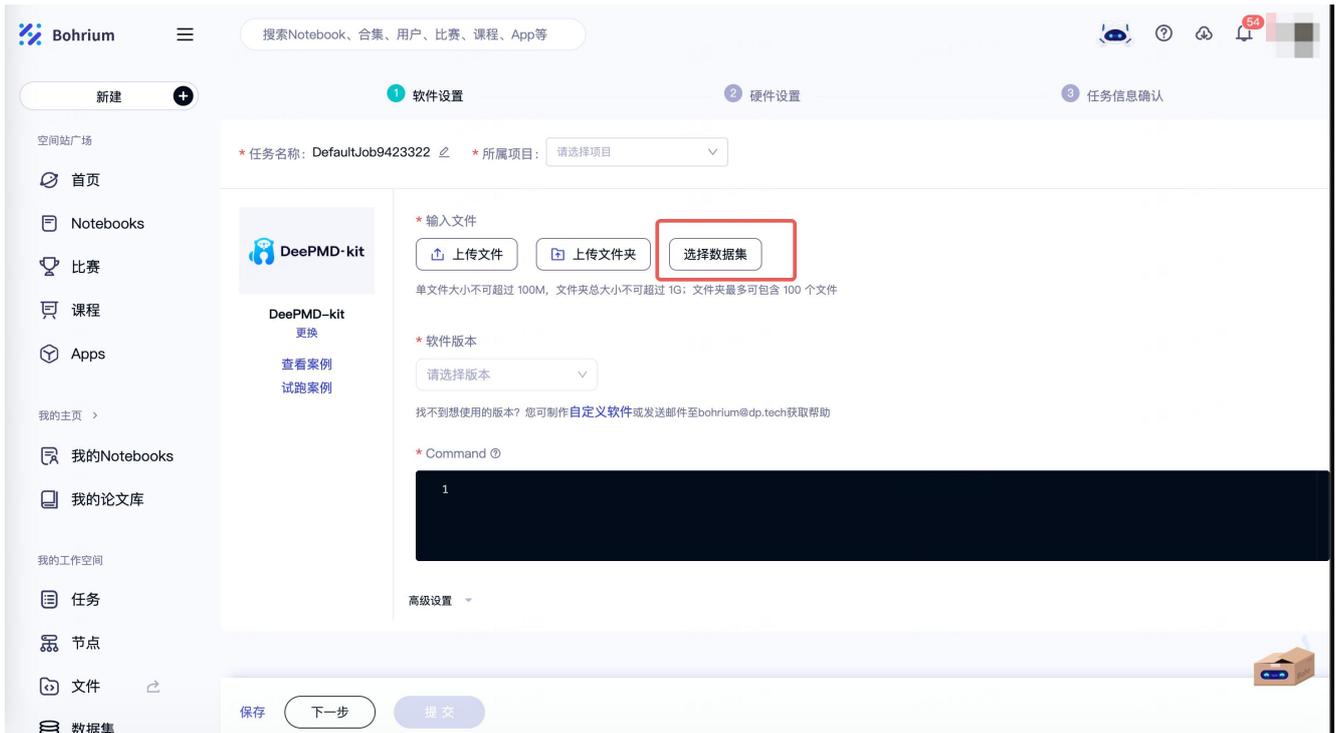
以下为 `job.json` 的填写示例：

JSON

```
{
  "job_name": "DeePMD-kit test",
  "command": " cd se_e2_a && dp train input.json > tmp_log 2>&1 && dp freeze -o graph.pb",
  "log_file": "se_e2_a/tmp_log",
  "backward_files": ["se_e2_a/lcurve.out", "se_e2_a/graph.pb"],
  "project_id": 0000,
  "platform": "ali",
  "machine_type": "c4_m15_1 * NVIDIA T4",
```

```
"job_type": "container",  
"image_address": "registry.dp.tech/dptech/deepmd-kit:2.1.5-cuda11.6",  
"dataset_path": ["/bohr/test1-51ov/v1", "/bohr/test1-51ov/v2"]  
}
```

2. **网页提交任务**：在图形化界面上提交任务时，点击“选择数据集”按钮，选择您需要使用的数据集版本即可。

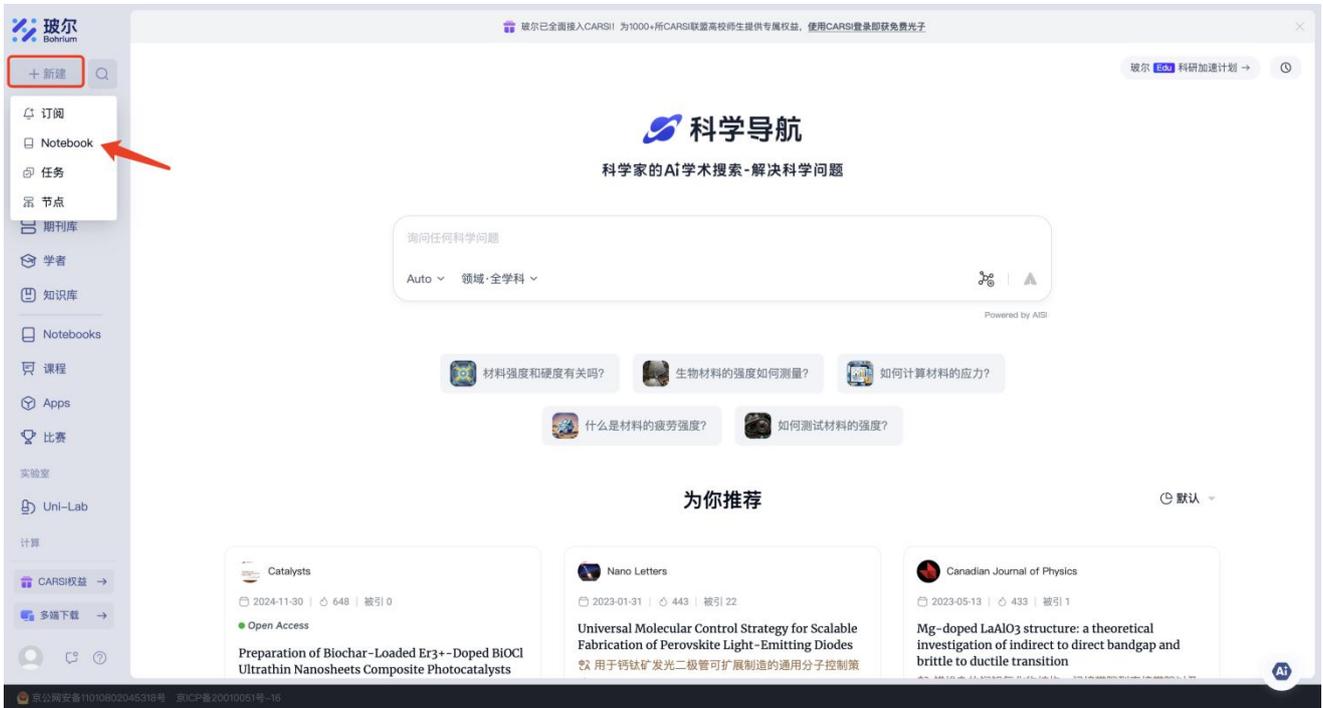


4.4.2 在 Notebook 中使用并分享数据集

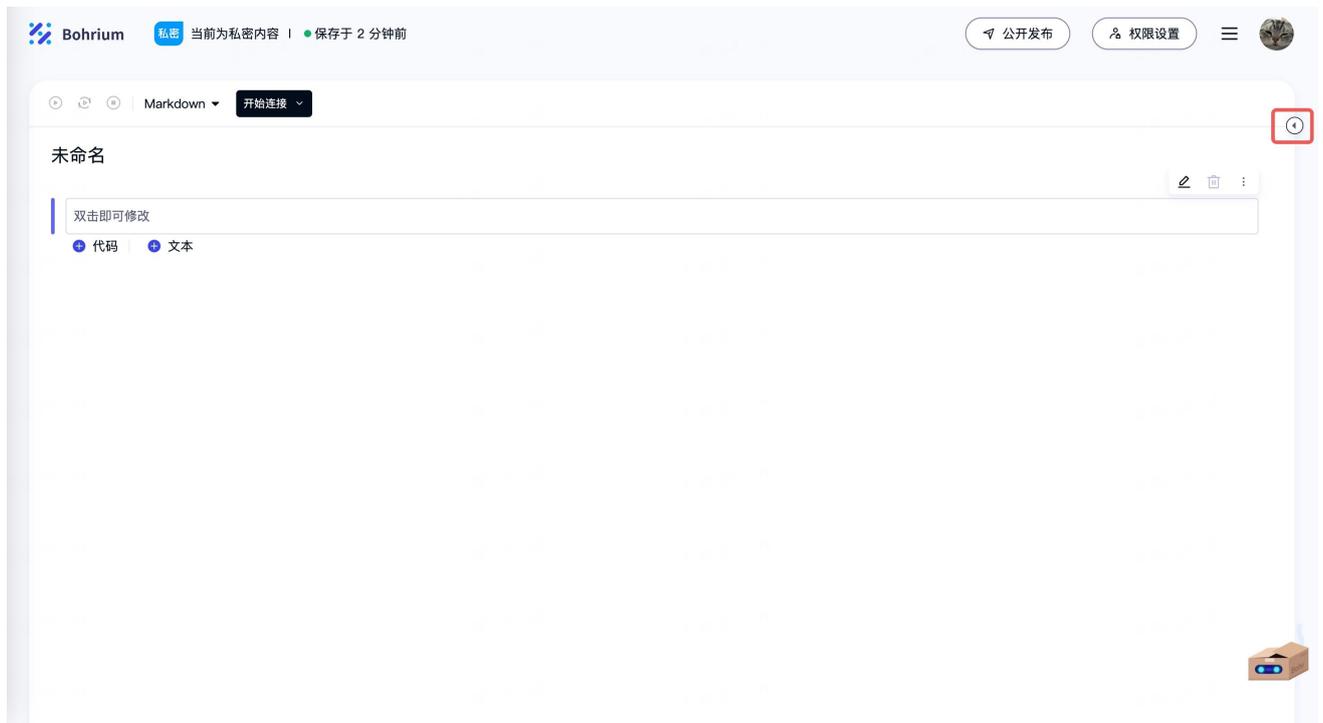
编写、发布 Notebook 时，可使用并随 Notebook 分享其中需要使用的数据集。

步骤一：选择需要使用/分享的数据集

在玻尔首页，点击左上角“新建-Notebook”按钮，进入 Notebook 编辑页。



点击右侧箭头展开扩展面板。



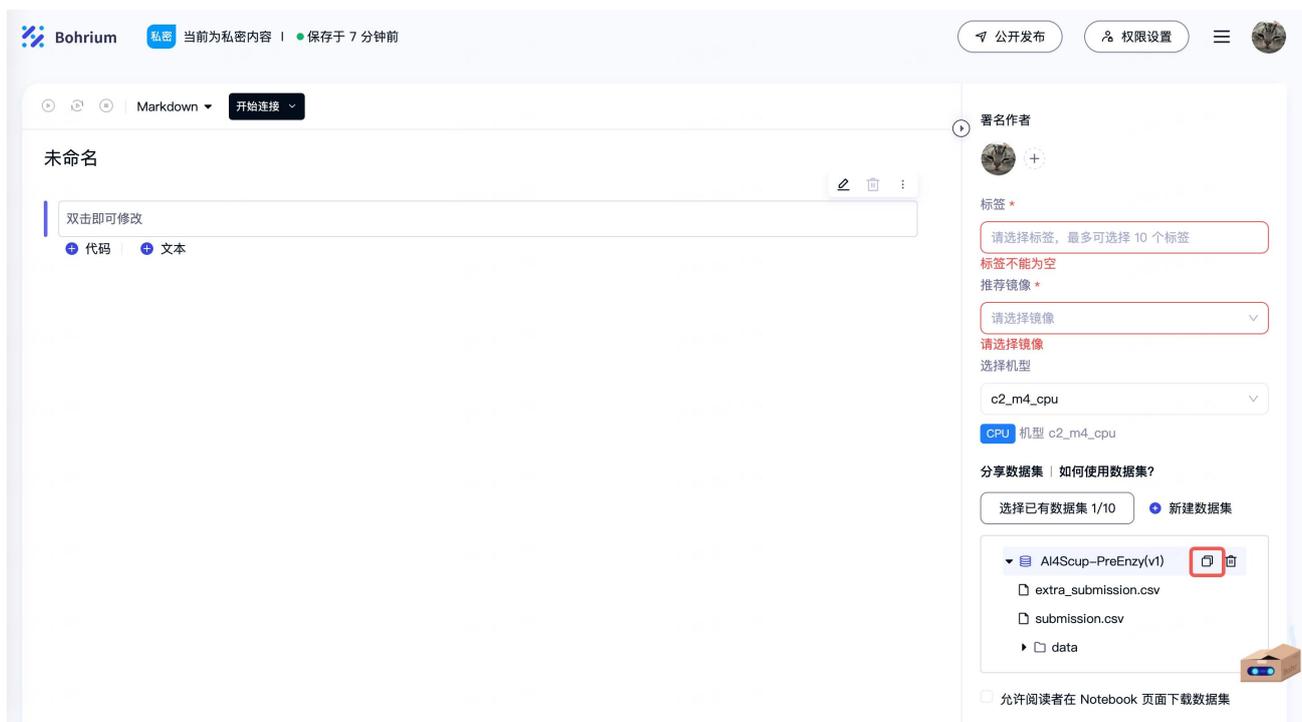
点击“选择已有数据集”，添加在本篇 Notebook 中需要使用的数据集版本。也可点击“新建数据

集”创建新的数据集。

注意：请在连接节点前添加数据集，节点开机后添加的数据集需要重启节点后才可生效。

步骤二：在 Notebook 中使用数据集

鼠标移动至已选择的数据集名称上，点击复制按钮即可获取该数据集文件的存储路径，数据集的文件均存储在该路径中。



在 Notebook 中直接填入该路径即可使用，下方举例中使用的路径为 `/bohr/rereceshi-yqdf/v3/`：

例 1：进入数据集目录

Plain Text

```
cd /bohr/rereceshi-yqdf/v3/
```

例 2：列出数据集下全部文件

Plain Text

```
ls /bohr/rereceshi-yqdf/v3/
```

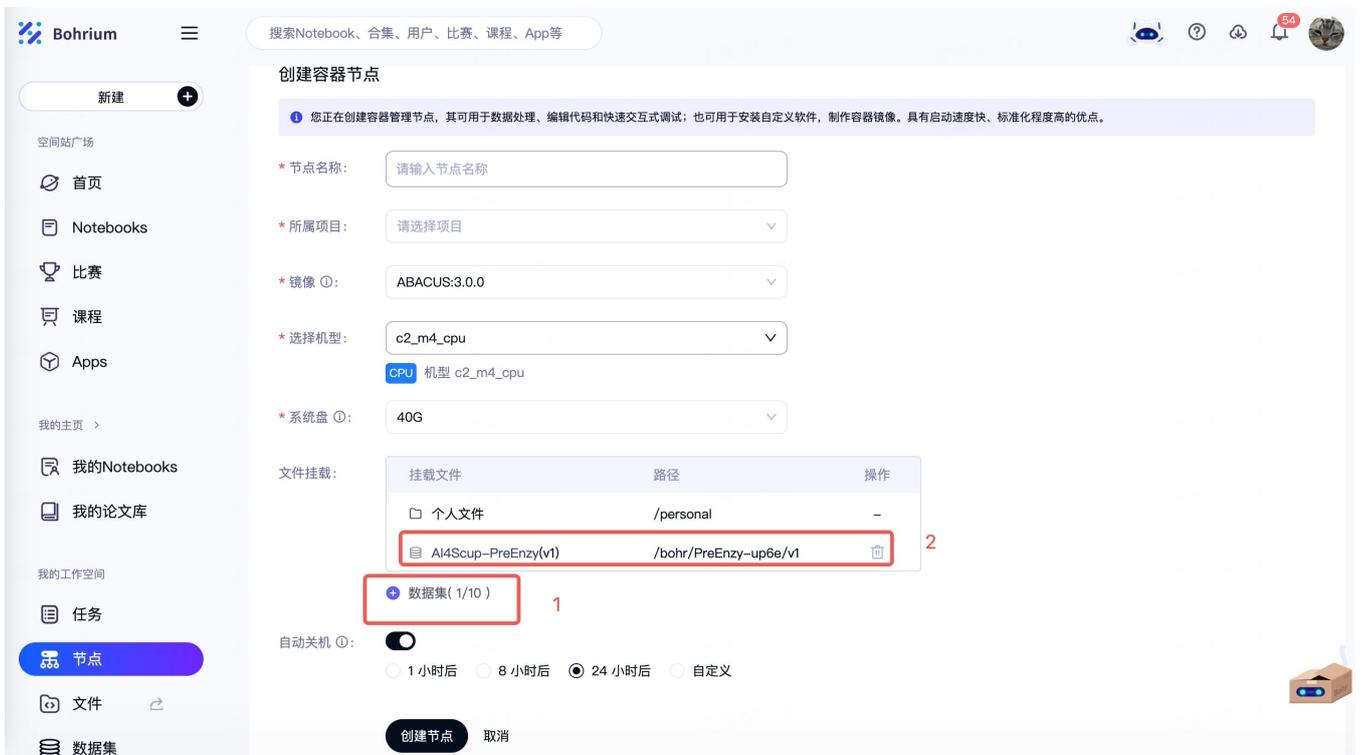
步骤三：发布 Notebook 并分享数据集

添加了数据集的 Notebook 发布后，其他用户可在详情页查看并使用相应的数据集。



4.4.3 在管理节点上使用数据集

您可在开启容器管理节点的时候，挂载需要使用的数据集版本，如下图中 1 所示。挂载并开机成功后，您可通过 2 处所展示路径，在管理节点上找到数据集文件。



4.5 数据集填写内容说明

字段名称	字段含义	填写示例
数据集名称	数据集的名称，可随时修改	testdataset
数据集路径	数据集文件将上传至该路径， 数据集创建后则不可修改 。请在输入框内填入可用于辨识该数据集的内容，系统将自动生成版本对应的唯一路径 注意： 上传文件后再进行路径修改将会清空您已经上传的文件，请谨慎修改	/bohr/testdataset-b2c
文件	该数据集版本所包含的文件，支持上传本地文件或文件夹 注意： 文件上传中请不要刷新或离开页面，避免上传失败	--
项目	该数据集所属项目，项目内人员默认可使用该数据集	testproject
权限	可管理：数据集的编辑、删除、新建版本等权限；数据集创建者和数据集所属项目的创建者及管理员默认拥有该权限且不可更改 可使用：数据集的查看和使用权限；数据集所属项目内人员默认拥有该权限且不可更改，可将该权限开放给其他项目或用户	可管理：数据集创建者 属项目的创建者及管理 可使用：数据集所属项 目

点击图片可查看完整电子表格

5. 镜像

5.1 什么是镜像

镜像是一种文件储存形式，其内包含应用程序运行所需的基础环境等信息。玻尔根据用户需求制作了适用于不同开发场景、计算任务的镜像，以满足用户在数据准备、编译调试、任务计算等场景下的即开即用。

5.2 如何使用镜像

5.2.1 如何提交计算任务

您可在使用 Bohrium CLI [提交任务](#)时，在配置文件 `job.json` 的 `image_address` 字段处填入所需软件所对应的容器镜像地址（下图红框所示）来进行相应的任务计算，镜像地址可在[镜像中心](#)内查看。

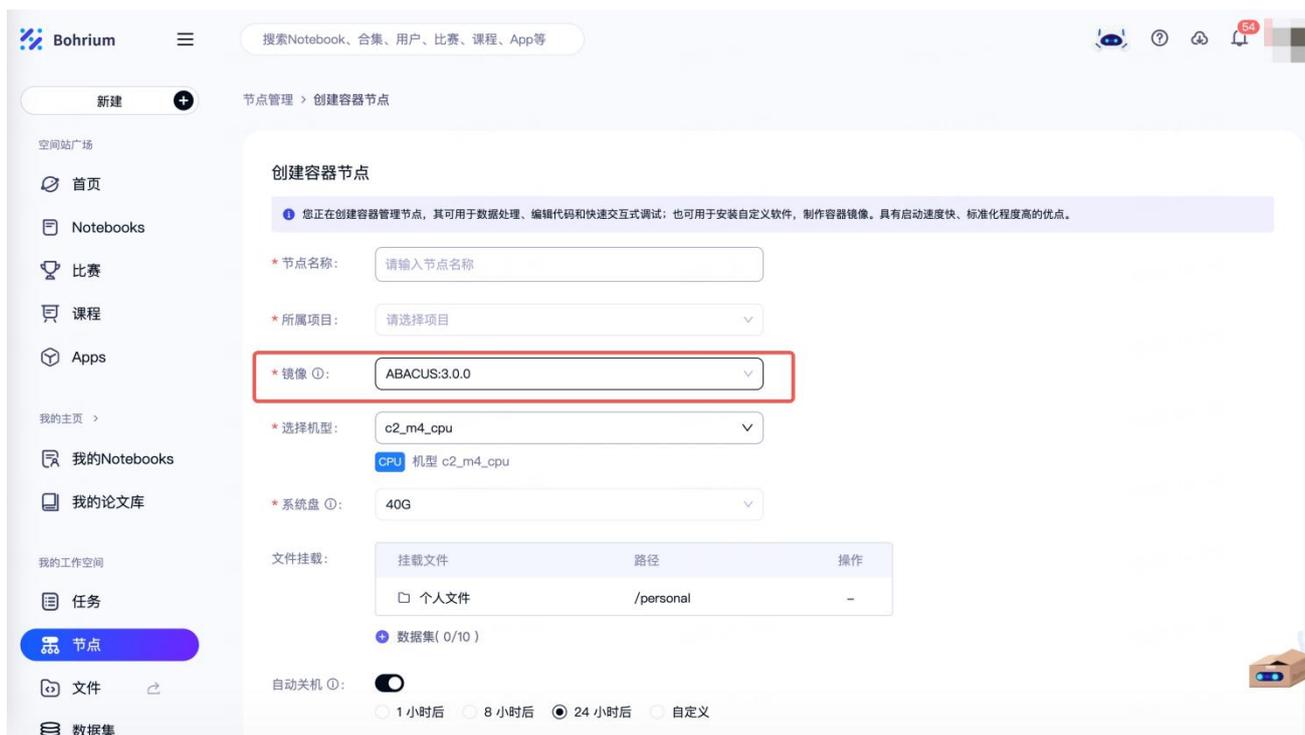
若我们提供的软件无法满足您的需求，您可参考[如何制作自定义镜像](#)，进行自定义软件的安装或者联系企业微信 17710231129 获取帮助。

注意：自 2023 年 1 月 1 日起，玻尔不再支持使用虚拟机镜像提交虚拟机任务，为保证您的任务可成功提交，请您在提交任务时填写容器镜像并在 `job.json` 内配置 `job_type` 字段为 "container"。

5.2.2 如何进行软件开发/调试

玻尔支持开启容器节点，相比于传统的虚拟化技术，容器省去了操作系统的虚拟化，直接在宿主机（Host）的操作系统上封装了应用或服务所需要的环境和依赖，只需数秒即可启动一个新的容器实例，而传统的虚拟化技术需要数分钟。

因此我们推荐您开启容器节点来进行软件的开发、调试、debug 等，您可在[开启容器管理节点](#)时，选择对应的容器镜像，如下图所示。您可在[镜像中心](#)内查看官方提供的容器镜像和虚拟机镜像。



- 如您想要一个预置了基础环境的空白机，推荐您根据需要的资源类型、是否运行 mpi 等需求，使用以下容器镜像：

资源类型	容器镜像地址
CPU	registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10 registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-intel2022
GPU	registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-cuda11.6 registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-intel2022-cuda11.6

[点击图片可查看完整电子表格](#)

- 如您想要对玻尔已有科学计算软件进行自定义或运行 DPGEN 任务，则可根据镜像名称，使用对应的容器镜像开启管理节点。
- 由于容器节点本身已经是 docker 环境，暂时不支持在其上再创建 docker 环境。如果您有进行 docker 开发的需求，例如需要自己构建 docker 镜像，或者需要拉取 docker hub 上别人的镜像，请您使用虚拟机镜像 `LBG_Common_v2` 开启虚拟机管理节点进行开发。

5.3 玻尔提供的镜像

5.3.1 用于提交计算任务

下方列出了玻尔已预置的科学计算软件中的一部分，更多软件请至[镜像中心](#)内查看：

- DeePMD-kit
- DPGEN
- VASP：需获得 VASP 授权，请通过微信发送您的 VASP 授权凭证至企业微信 17710231129。
- LAMMPS
- GROMACS
- Quantum-Espresso
- ...

5.3.2 用于进行软件开发

在玻尔上进行软件开发、编译、调试等对灵活度有更高要求的工作，可在启动管理节点时，使用基础公共容器镜像，其中已打包了开发常用软件：

任务类型	容器镜像地址
CPU	registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10 registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-intel2022
GPU	registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-cuda11.6 registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-intel2022-cuda11.6

[点击图片可查看完整电子表格](#)

玻尔官方提供的全部镜像内均已预置以下软件：

软件分类	预置软件
Python 相关	python3.10 pip Anaconda Jupyter Lab: 强大的 Notebook 工具
文件管理	wget, curl: 文件下载工具 unzip: 文件解压工具 emacs, vim: 文件编辑工具 rsync: 文件同步工具 tree: 查看目录结构工具 git: 版本管理工具
编译工具	cmake build-essential: gnu编译工具

点击图片可查看完整电子表格

部分镜像内单独预置了某些软件，如 Intel-oneapi、Pytorch、TensorFlow 等，会体现在镜像地址内，您可根据实际需求进行选择。例如：`registry.dp.tech/dptech/ubuntu:20.04-py3.10-intel2022` 内即预置了 Intel-oneapi。

5.4 如何制作自定义镜像

若我们当前提供的公共容器镜像无法满足您的需求，您可进行[自定义容器镜像](#)的制作，或联系企业微信 17710231129 获取帮助。

5.5 如何将镜像拉取到本地 docker

目前支持通过 docker cli 拉取玻尔的公共镜像和本人的自定义镜像（别人分享的不支持）

5.5.1 访问地址

registry.bohrium.dp.tech（玻尔镜像菜单处直接复制的 registry.dp.tech 域名是不支持的，请手动替换！）

5.5.2 使用方式

1. Docker login：使用玻尔的登录账号和密码 登录

```
Bash
代码块
docker login registry.玻尔.dp.tech
Username: xxx@dp.tech
```

Password:

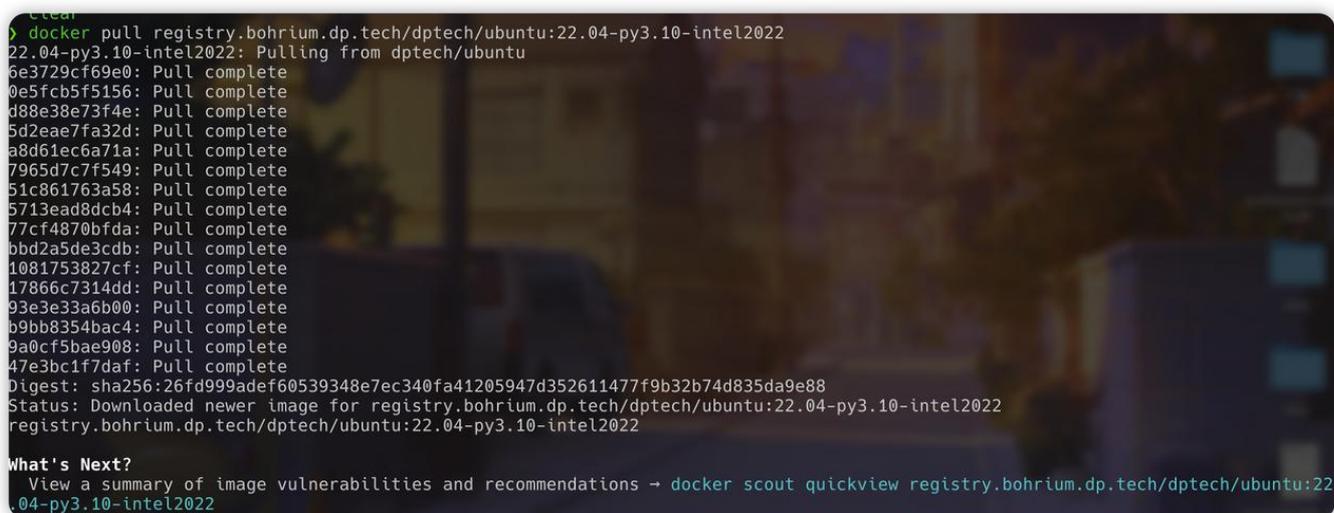
Login Succeeded

2. Docker pull: 拉取玻尔公共镜像

Bash

代码块

```
docker pull registry.玻尔.dp.tech/dptech/ubuntu:22.04-py3.10-intel2022
```



```
> docker pull registry.bohrium.dp.tech/dptech/ubuntu:22.04-py3.10-intel2022
22.04-py3.10-intel2022: Pulling from dptech/ubuntu
6e3729cf69e0: Pull complete
0e5fcb5f5156: Pull complete
d88e38e73f4e: Pull complete
5d2eae7fa32d: Pull complete
a8d61ec6a71a: Pull complete
7965d7c7f549: Pull complete
51c861763a58: Pull complete
5713ead8dcb4: Pull complete
77cf4870bfd4: Pull complete
bbd2a5de3cdb: Pull complete
1081753827cf: Pull complete
17866c7314dd: Pull complete
93e3e33a6b00: Pull complete
b9bb8354bac4: Pull complete
9a0cf5bae908: Pull complete
47e3bc1f7daf: Pull complete
Digest: sha256:26fd999adef60539348e7ec340fa41205947d352611477f9b32b74d835da9e88
Status: Downloaded newer image for registry.bohrium.dp.tech/dptech/ubuntu:22.04-py3.10-intel2022
registry.bohrium.dp.tech/dptech/ubuntu:22.04-py3.10-intel2022

What's Next?
View a summary of image vulnerabilities and recommendations → docker scout quickview registry.bohrium.dp.tech/dptech/ubuntu:22.04-py3.10-intel2022
```

3. 暂不支持 push 操作

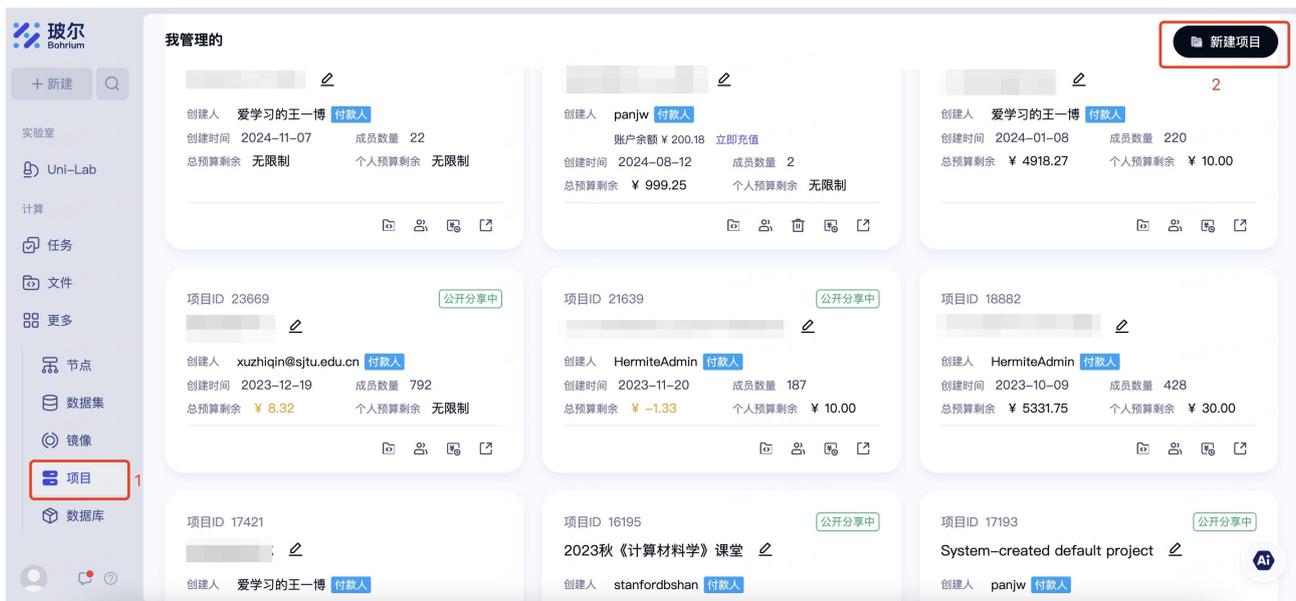
6. 项目

项目管理功能主要适用于科研协作场景，支持：

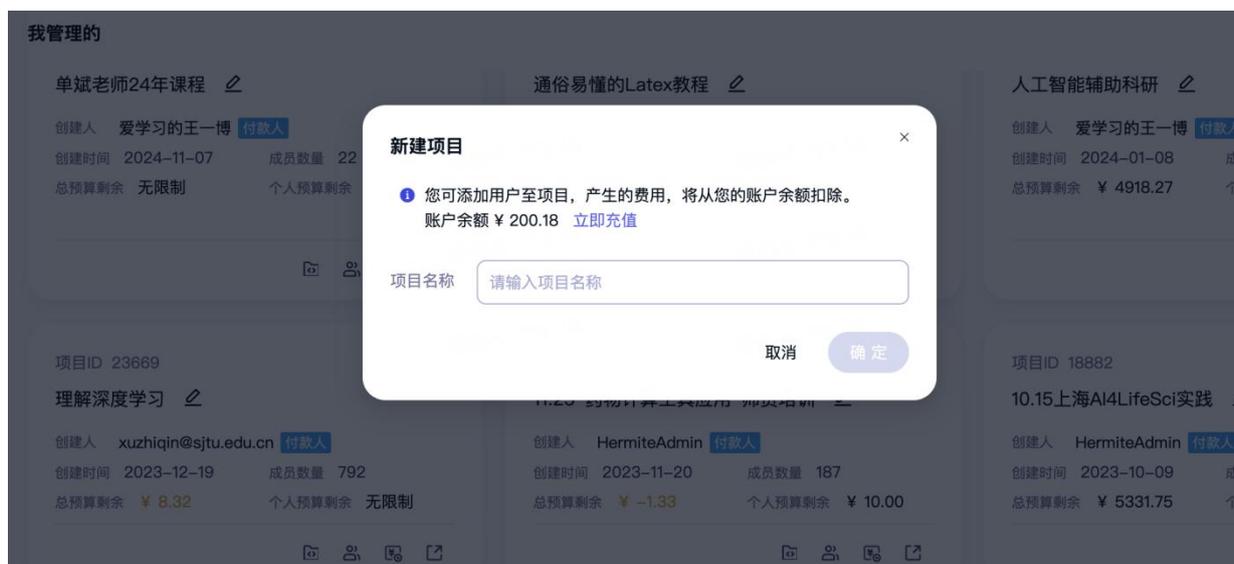
1. 统一管理同课题组/课程的学生经费，并管理预算；
2. 同个项目的成员可以便捷地使用其他成员开发好的代码和代码环境；
3. 同个项目的成员可以高效共享文件，避免文件传来传去；
4. 学生的代码始终跑不通，老师能直接登录查看问题。

6.1 创建项目

- 完成玻尔账号注册以及充值后，在玻尔主页左侧点击“更多” - “项目”，在页面右上方选择“新建项目”：



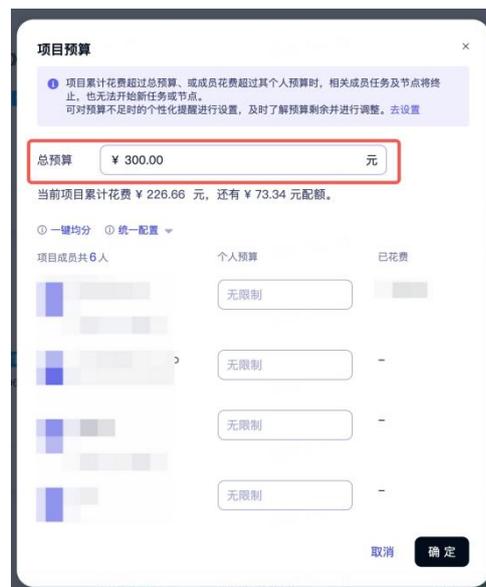
- 在弹出的窗口中，为项目起一个方便您辨识的名称（比如您课题组的名字、课程或者项目的名称），点击“确定”，即可完成项目创建。



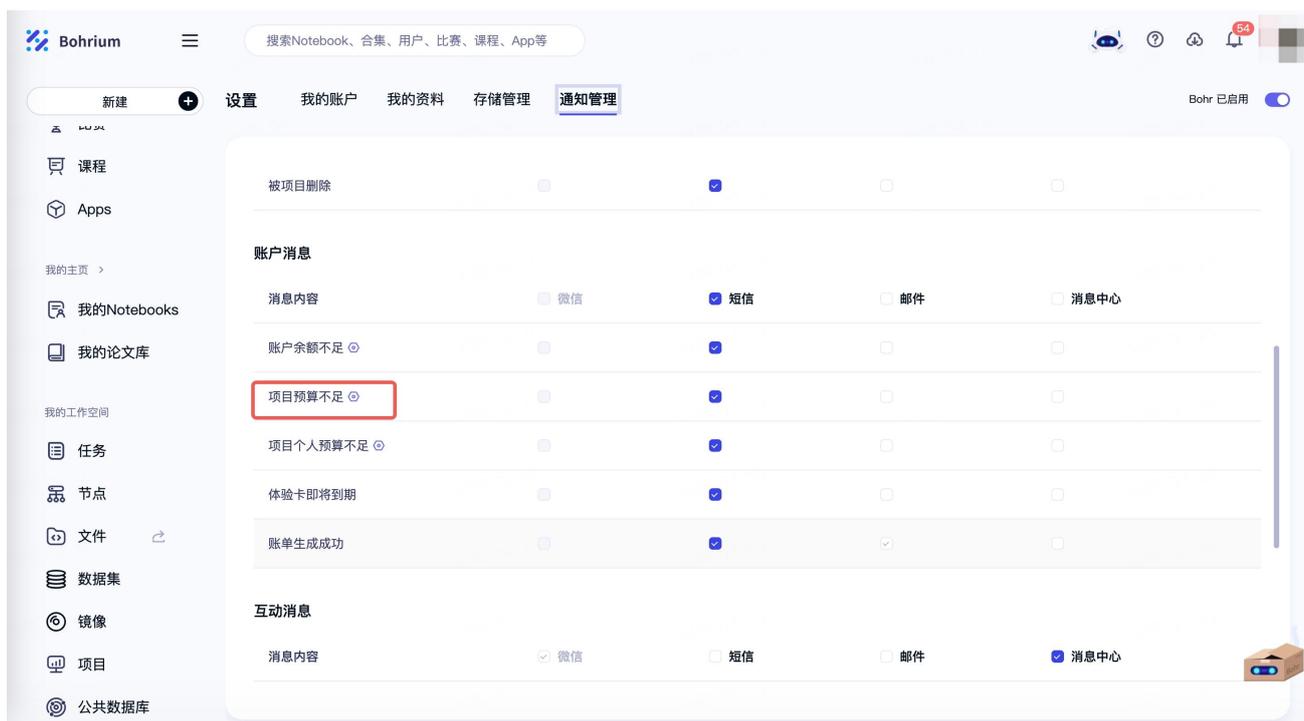
6.2 项目预算管理

6.2.1 总体预算管理

- 项目创建完毕后，项目创建者及管理员可以给项目设置总预算（非必须），来进行项目总花费金额的控制。如果您不设置，则项目预算默认为“无限制”。点击“项目预算”按钮（图中红圈处），进入预算管理页面。



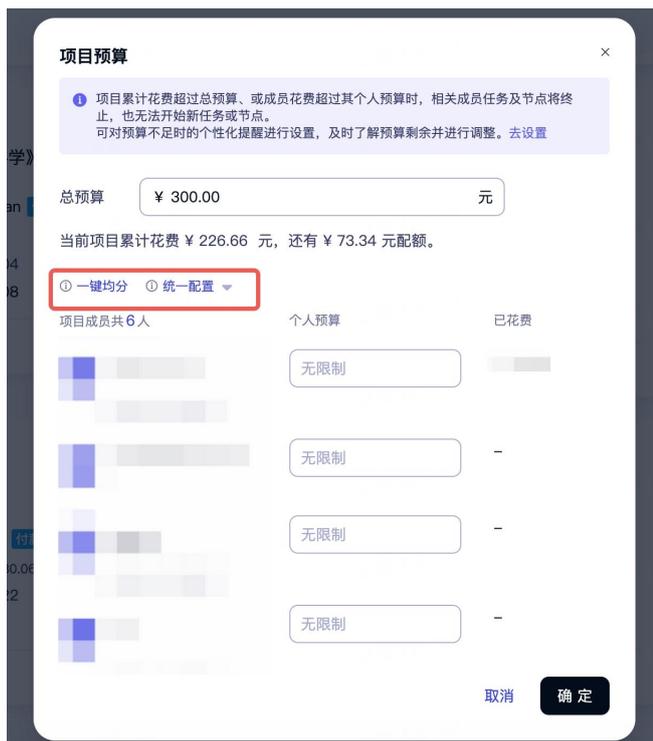
- 项目内所有成员在项目内的花费，都将记入该预算中。当该项目的总花费超过预算时，项目成员将无法提交新的任务或开启新的节点。
- 您可在通知设置内，设置提醒阈值，当项目剩余预算低于阈值时，您将收到消息提醒。



6.2.2 成员预算分配

- 项目的创建人及管理员可以对项目成员的可消费预算进行分配，从而对成员花费情况进行管控，具体有两种分配方式：
 - “一键均分”：将项目的总预算平均分配给所有成员；

- “统一配置”：为每位同学分配相同的预算，或手动给某位同学设置单独的预算金额。



为所有成员平均分配/统一配置预算



给不同成员设置不同预算

6.3 项目成员管理

- 项目中当前共有 3 种角色：
 - 创建者：创建项目的用户，一个项目必须有且仅拥有一位创建人，该角色不可转移给他人或删除；
 - 管理员：由创建者指定（非必需），一个项目可指定多名管理员，可随时指定或取消；
 - 成员：被添加进项目的用户默认为该角色。
- 各角色的具体权限如下：

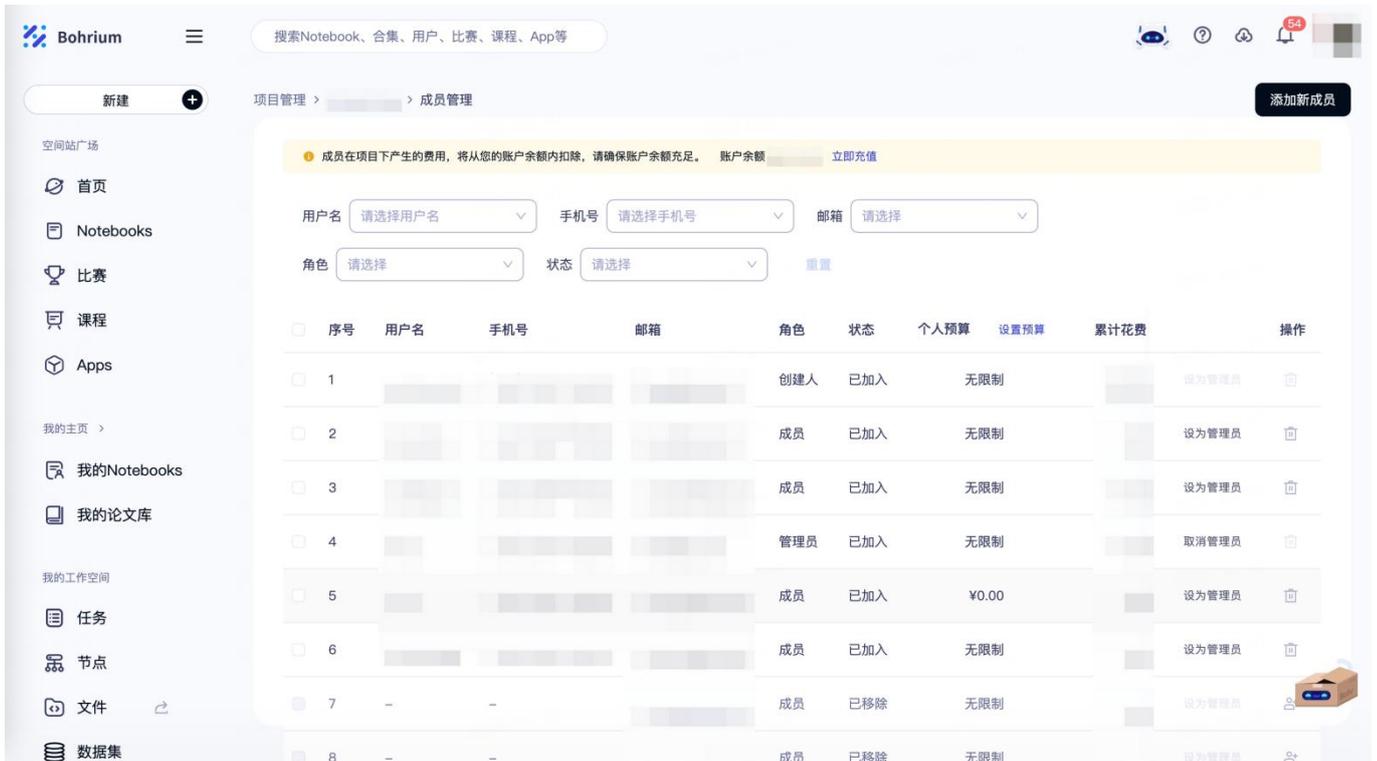
功能模块	权限内容	创建者	管理员	成员
项目管理	修改项目名称	√	√	X
项目管理	删除项目	√	X	X

项目成员管理	添加或删除项目成员	√	√	X
项目成员管理	指定或取消项目管理员	√	X	X
项目预算管理	查看项目整体及每个成员的消费情况 调整项目整体及每个成员的预算金额	√	√	X
项目节点管理	查看并操作项目内全部管理节点：如 登录管理节点、关机、删除等	√	√	X
项目任务管理	查看并操作项目内全部任务：如登录 计算节点、查看日志、下载文件等	√	√	X
项目镜像管理	查看并操作项目内全部镜像：如分 享、删除	√	√	X
项目费用账单	查看并下载项目的消费账单	√	√	X

√ 表示该角色拥有该权限；X 表示该角色没有该权限。

- 您可点击“成员管理”按钮（图中红圈处）进行成员管理，成员在项目提交的任务将直接消耗项目预算。成员管理页支持：
 - 项目成员的批量添加、批量删除；
 - 管理员的设置；
 - 查看组织内每个成员的预算和花费情况。





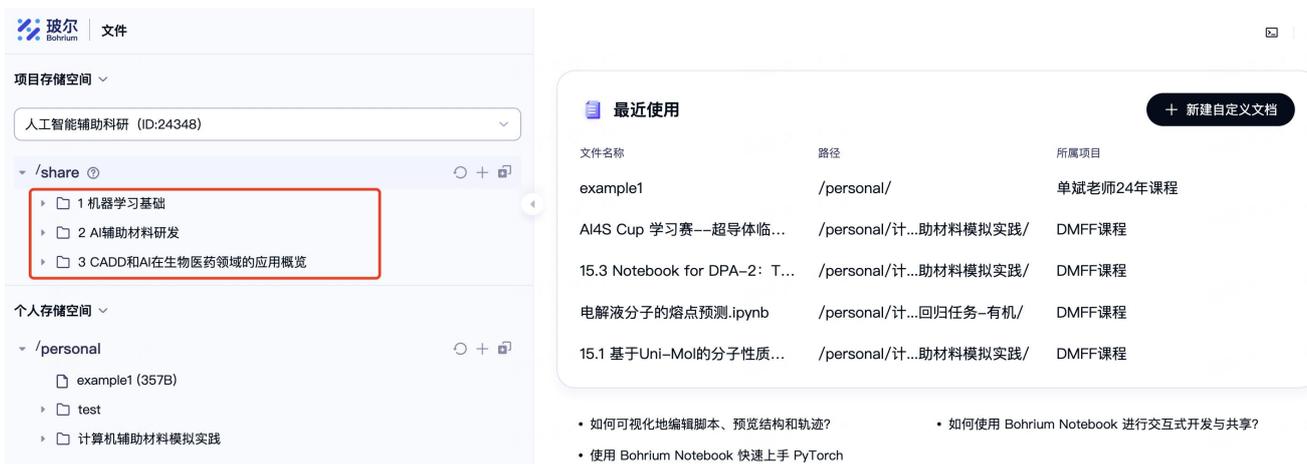
- 此外，您可以通过“项目分享”按钮，将项目公开分享给他人，并设置新成员的个人预算额度。



6.4 项目文件管理

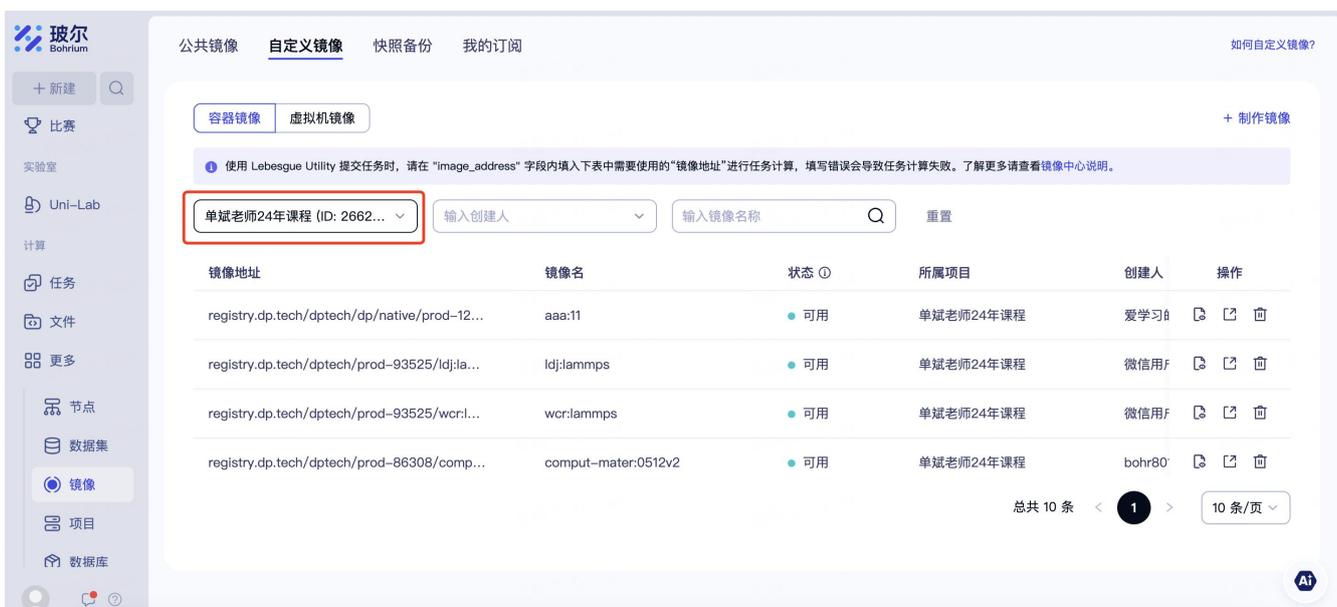
- 每个项目均有一个可用于文件共享的 /share 盘，默认赠送免费的 1024GB 空间。您可以将项目文件上传至 /share 盘内，项目内成员均可读写该盘内文件。点击“查看文件”按钮（图中红圈处），即可查看该项目的共享盘文件。





6.5 共享镜像

- 项目内所有人员均可以在玻尔“镜像” - “自定义镜像”中查看并使用同项目其他小伙伴制作好的镜像，可以更加方便的搭建一致的工作环境、对代码进行调试/debug、或者直接用于生产环境部署。



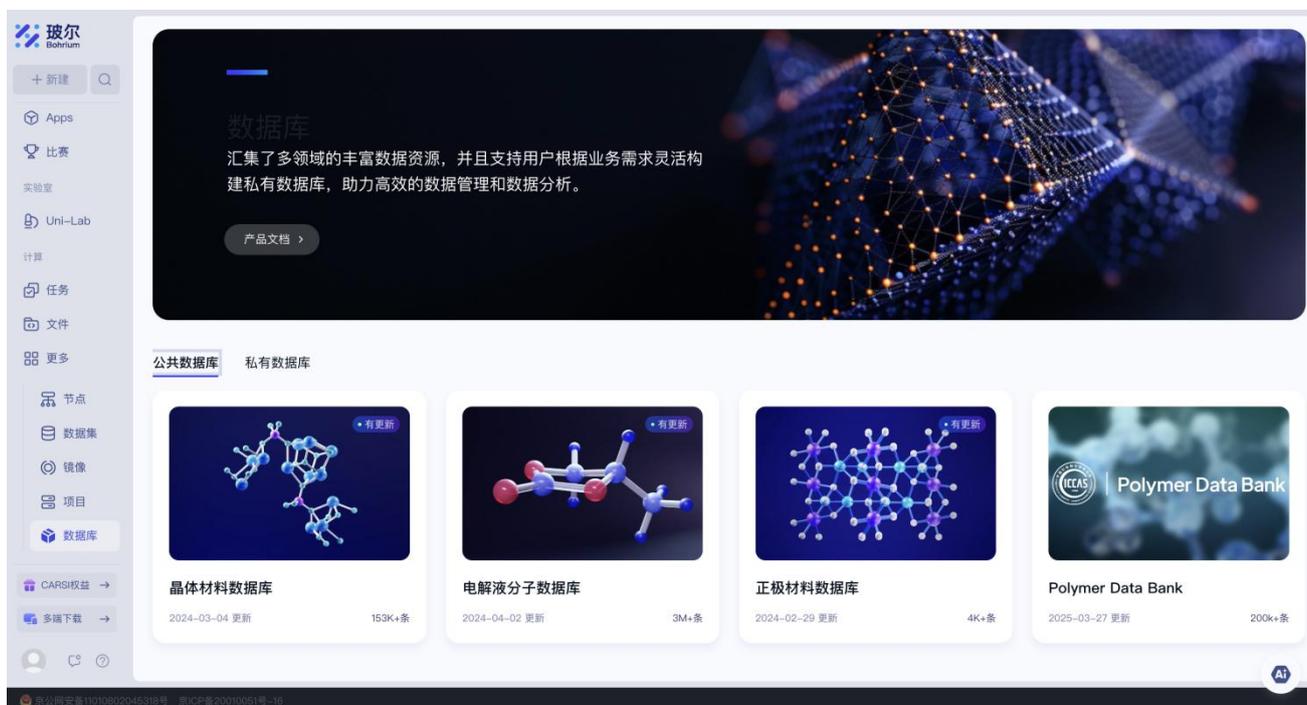
6.6 删除项目

- 您可以点击“删除”按钮（图中红圈处）来删除项目、解散项目内的成员，但项目删除后，项目内所有的任务及镜像将会被永久删除不可查看，删除操作不可逆，请您谨慎操作。



7. 数据库

材料数据库面向科学计算领域的科研机构、企业用户以及 C 端用户，业务范围包括但不限于电池研发、先进材料设计、工艺优化等多种场景，支撑用户进行数据清洗、自动入库、数据管理以及数据建模分析，构筑数据应用的完整链条。提供晶体材料数据库、电解液分子数据库、正极材料数据库等公共数据库及若干私有数据库。



【个人设置】

您可以在玻尔左下角-个人头像处，进行修改账户设置、充值、查看计算资源定价、学术认证、调整语言等操作。

