

子图智算 ZeoOne 平台软件

产品白皮书

V1.0

上海子图信息技术有限公司

<https://www.zeotru.com>

2025 年 3 月

目录

一、产品背景	3
二、核心目标	4
三、产品核心功能	4
3.1 三大核心模块.....	4
3.2 平台关键问题.....	5
3.3 平台优势总结.....	6
四、产品技术架构	6
4.1 分层结构图.....	7
4.2 技术选型.....	7
4.3 实施路径.....	9
4.2 优势亮点.....	9
五、典型应用场景与案例	10
5.1 典型应用描述——以计算生物学分子生成为例.....	10
5.2 其他应用场景（表格整理）	10
5.3 应用延展：科研-产业转化与教育平台搭建	11
六、部署模式与系统集成能力	11
6.1 多形态部署方式.....	11
6.2 系统集成能力.....	12
6.3 运维与升级支持.....	12
6.4 DEVOPS 支持与自动部署体系	12
6.5 典型部署拓扑图.....	13
七、产品总结	13

一、产品背景

随着人工智能与高性能计算（HPC）技术的深度融合，科研与产业正加速进入“算力驱动科学发现”的新时代。大模型的发展推动了算法复杂度的跃迁，科研项目对数据规模、并行能力、精度保障与安全隔离等方面的要求持续走高，传统计算架构已难以支撑现代科研与创新应用的多维需求。在这一背景下，计算生物学、计算化学、计算材料学等领域面临前所未有的技术转型机遇，也暴露出多重挑战：

- ✓ **计算生物学**日益依赖蛋白质结构预测、基因组解析、多组学整合分析等大规模建模任务，亟需支持图神经网络、生物序列建模与 AI 预测融合的高性能平台。
- ✓ **计算化学**中的分子模拟、反应路径预测、第一性原理计算等场景对计算精度、模拟尺度与并发处理能力要求极高，对传统硬件与资源调度系统构成巨大压力。
- ✓ **计算材料学**强调跨尺度建模、纳米结构优化与性能预测，需在大样本筛选与多物理场协同计算中实现 AI 加速与数据闭环。

这些典型科研场景不仅涉及海量计算任务、动态任务调度和多模型并发，还要求平台具备高弹性、高安全、高效率的支撑能力。特别是在大模型训练、科学模拟、多模态数据处理等融合应用中，对弹性扩展、高安全隔离、任务编排与可视化运维提出了系统性挑战。

子图智算 ZeoOne 平台作为由上海子图信息科技有限公司研发的智能计算基础设施，以“AI 友好+科学适配+异构高效”为设计原则，专为面向科研与行业落地场景构建，尤其是聚焦私有化“**数据驱动+算法集成+弹性算力**”三位一体的智能算力体系，具备以下关键优势：

- **一体化智能调度**：基于自研子图算力调度引擎，实现多源资源统一编排、秒级任务响应和高效并行管理；
- **异构计算适配**：全面支持 GPU、CPU、NPU、FPGA 等多种计算芯片，适配主流科研工具链（如 AlphaFold、Gaussian、VASP、LAMMPS、DeepChem）；
- **国产化与安全可靠**：支持国产芯片与操作系统，符合信创环境要求，满足政产学研客户的私有部署与合规审计需求；
- **多领域场景支撑**：广泛服务于生物医药研发、分子模拟、材料筛选、高通量实验设计等前沿科研应用。

通过算力基础设施的重构与科研工具链的集成优化，ZeoOne 正成为推动科研计算范式升级的重要平台，促进“AI+科学”从探索走向生产力，实现从“数据-模型-计算-知识-价值”的全流程加速，为新质生产力发展提供算力核心支撑。

二、核心目标

子图智算 ZeoOne 平台的建设围绕“新质生产力基础设施”定位，旨在为 AI 与科学计算深度融合场景提供统一的智能算力平台。平台不仅解决传统计算架构在算力调度、安全管理、模型训练等方面的瓶颈，更致力于推动科研范式升级和产业应用加速，具体目标如下：

(1) 打造私有化统一智能算力底座。为 AI 研发、科学计算、多模态数据处理等复杂任务提供高性能、可扩展、稳定可靠的底层算力支撑，构建覆盖模型训练、推理、仿真、分析的一体化智能计算平台。

(2) 赋能“AI+科学研究/垂类产业”的融合创新。面向计算生物学、计算化学、计算材料学等核心领域，构建高度集成的 AI+科学应用生态，打通数据、算法、算力全链路，加速科研任务从数据导入到知识发现的闭环实现。

(3) 构建异构融合与安全可信的资源池。支持 GPU、CPU、NPU、FPGA 等多种算力资源的统一调度与隔离部署，提供灵活的资源租赁、按需分配、租户级安全隔离机制，保障大规模多用户共享场景的稳定运行。

(4) 提供自主可控、国产化适配能力。响应信创国产化趋势，平台全面兼容国产操作系统（麒麟、UOS）、芯片（鲲鹏、飞腾、海光等）及中间件，支持政府、高校、央企等对信息安全与数据合规的刚性需求。

(5) 降低 AI 算力应用门槛。通过 Web 界面+API 接口+自动化部署工具，提供“零代码提交任务”、“一键调用模型”、“可视化监控调度”等简洁上手的用户体验，服务科研人员、工程师、算法开发者与管理人员等多类型角色。

三、产品核心功能

子图智算 ZeoOne 平台围绕“平台化门户+聚合式调度+分布式算力”的设计理念，构建了以 ZeoOne Portal、ZeoOne Fusion、ZeoOne Core 为核心的三层架构体系，全面支撑从开发到部署的全生命周期 AI 计算与科学模拟任务。

3.1 三大核心模块

(1) ZeoOne Portal: 交互门户与智能控制台。ZeoOne Portal 是平台的前端门户系统，面向用户提供一站式的交互界面和可视化工作流，实现：

- ✓ 用户与权限管理（支持多级组织与多租户协作）
- ✓ 项目与实验管理（任务分组、状态跟踪、日志查看）

- ✓ 数据集与模型资源管理（版本控制、访问权限、挂载支持）
- ✓ 模型训练与推理任务可视化（图形化调度与实时监控）
- ✓ 分析报告生成与知识沉淀（支持结果回溯与指标可视呈现）
- ✓ 该模块为开发者、科研人员、项目管理者提供友好的使用体验，有效降低使用门槛。

（2）ZeoOne Fusion：业务聚合与任务编排中枢。 ZeoOne Fusion 是平台的核心业务协调中台，负责构建数据、算法、模型与服务的高效协同环境。主要功能包括：

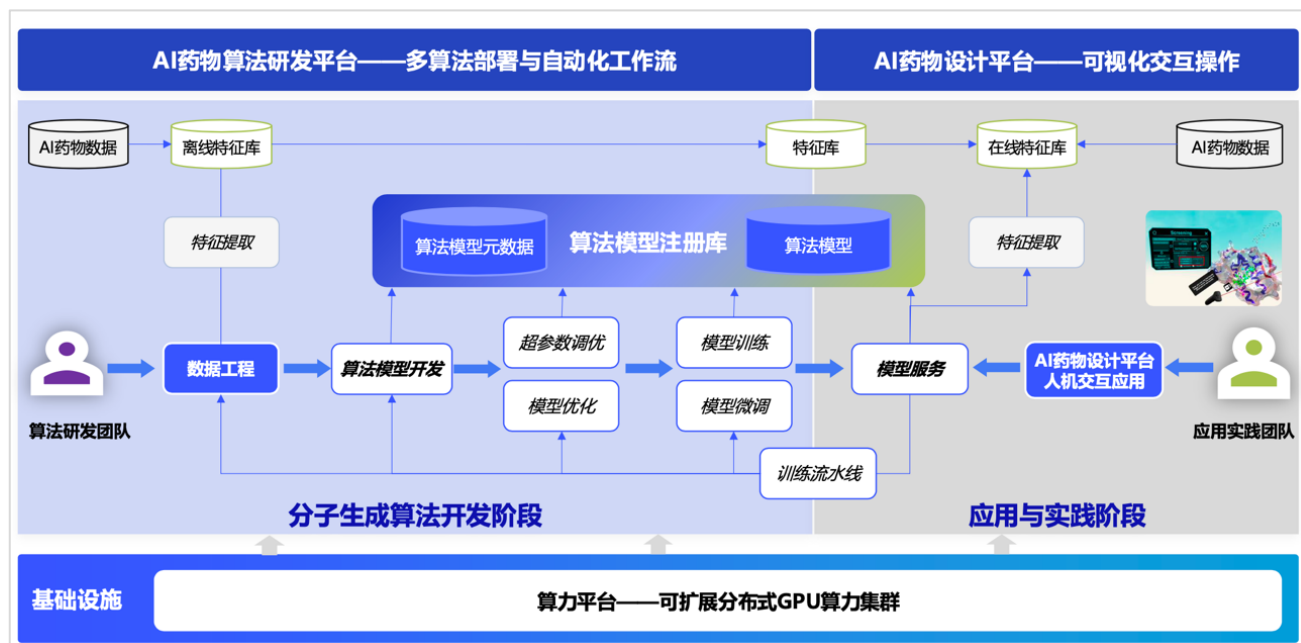
- ✓ 算法版本管理与模型仓库支持（适配主流深度学习与科研工具）
- ✓ 科学计算与 AI 任务统一调度（自动资源绑定、失败重试、异步任务）
- ✓ 数据预处理与流式分发（支持结构化/非结构化/图数据管道）
- ✓ 微服务架构支撑的组件解耦与可插拔能力
- ✓ API 网关与模型服务接口编排（开放调用能力，支持业务系统对接）
- ✓ 该模块承载平台的智能引擎功能，是科研与业务工作负载的融合执行中心。

（3）ZeoOne Core：算力聚合与资源调度底座。 ZeoOne Core 是平台的计算资源基础设施模块，具备跨设备、跨节点的分布式算力调度与资源统一管理能力，涵盖：

- ✓ 支持 GPU、CPU、NPU、FPGA 等多种异构计算资源的接入
- ✓ 跨集群、跨区域算力资源统一调度池构建
- ✓ 动态资源调配与弹性扩容，提升算力利用率
- ✓ 底层对接 Kubernetes、Slurm 等调度框架，支持自研调度器扩展
- ✓ 提供高可靠、高吞吐的运行容器环境（Singularity、Docker、Podman）
- ✓ ZeoOne Core 构建平台“云边协同 + 异构融合 + 私有可控”的算力能力底座。

3.2 平台关键问题

AI 平台的核心任务是以需求、数据、代码与算法为输入，生成可复用的模型与服务为输出成果。其生命周期涵盖数据收集与预处理、模型训练、模型优化、模型注册、服务部署等关键阶段。为实现高效闭环管理，平台构建了一条围绕持续集成（CI）、持续部署（CD）与持续监控（CM）的智能 AI 流水线，确保从模型开发到上线部署的全过程具备标准化、自动化与可观测性，实现研发运维一体化，支撑多模型、多任务、多场景的高效交付。



以下表格展示了平台的关键问题

模块分类	平台关键问题 / 功能要点
数据管理	数据存储、数据清洗、特征工程
算法开发	在线开发、算法测试、算法调优、超参数调优、模型训练与微调
模型管理	模型存储中心、多版本管理、模型元数据管理、本地离线模型上传
参数配置	算法模型参数配置与管理
模型服务	支持在线/离线部署、合理调度系统资源、提升推理效率
计算资源管理	计算资源池总量管理、资源利用率监控与优化
可视化编辑	基因、蛋白、分子药物的结构可视化与交互编辑
权限管理	用户、数据、算法、模型等多维权限体系与安全审计

3.3 平台优势总结

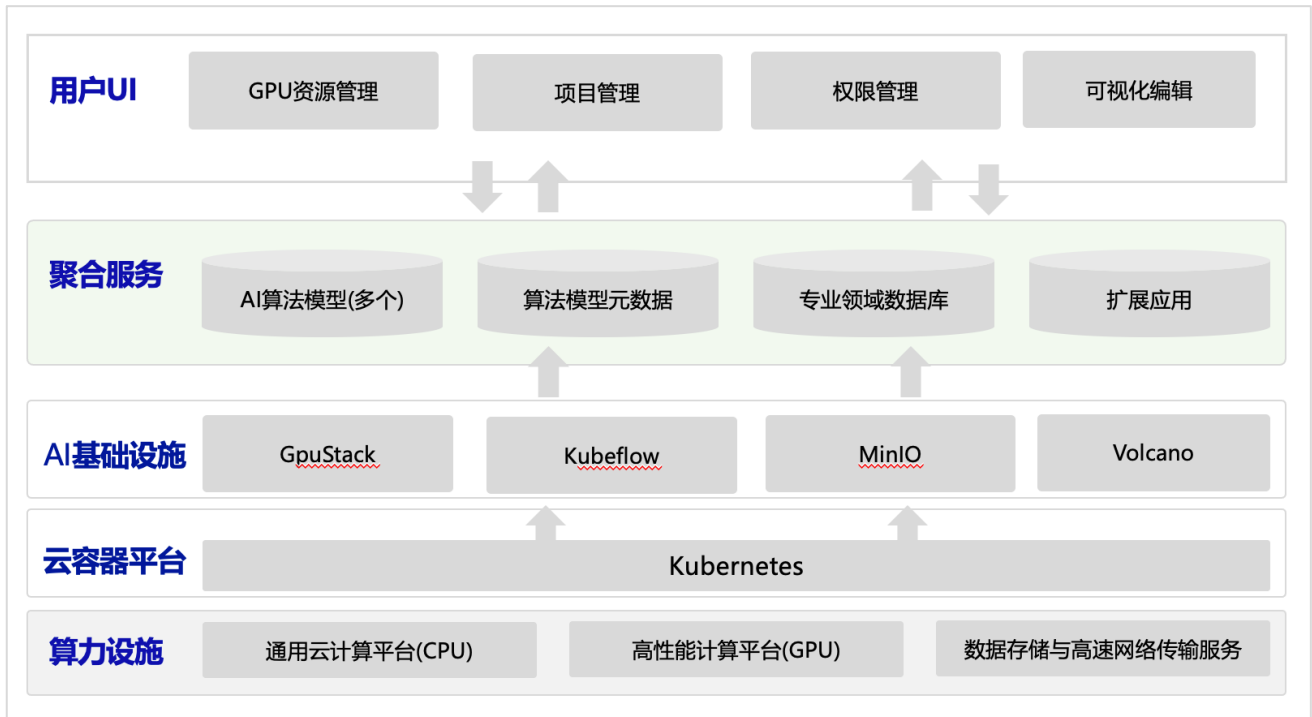
凭借这三大模块的高度集成，ZeoOne 平台实现了从“任务提交→数据处理→算法训练→推理部署→结果可视化”的一站式闭环，帮助科研机构、高校实验室、科技企业在更高效、更安全、更易用的环境中完成 AI 研发与科学计算任务。

四、产品技术架构

子图智算 ZeoOne 平台采用分层解耦、模块协同、异构融合的系统架构，构建“门户服务+任务中台+算力底座”的一体化智能算力平台。该架构不仅支持高性能科学计算与 AI 任务统一管理，还具备良好的扩展性、安全性与国产化适配能力。

4.1 分层结构图

ZeoOne 平台采用自底向上的分层架构设计，覆盖从高性能硬件资源到上层 AI 应用的完整体系。底层由高性能计算节点和云基础设施提供算力保障，中层包括数据管理、集群调度与 AI 服务框架，上层聚焦业务场景融合，集成生物计算、药物设计等领域工具，并通过统一的交互入口支持模型训练与推理任务，形成面向科研与产业的智能计算平台闭环。



4.2 技术选型

Zeone 平台采用面向高性能科研计算的前瞻性技术架构，架构设计强调可扩展性、算力适配性、任务调度弹性与平台服务的模块化部署。平台融合了分布式并行计算、GPU 加速引擎、大数据处理平台、主流 AI 训练框架以及容器化微服务架构，全面覆盖科研建模、任务执行、服务部署与用户访问的全流程技术栈。

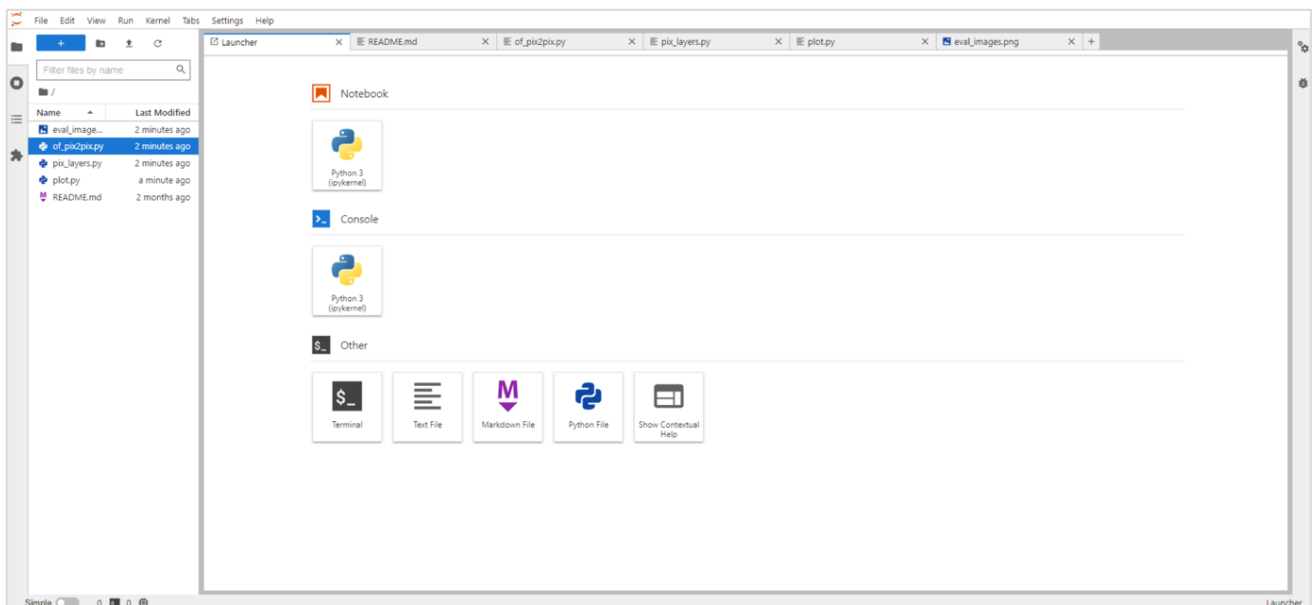
(1) 关键技术体系模块

技术方向	描述
分布式计算	平台通过将计算任务拆分为多个子任务分发至多个节点并行处理，大幅提升任务处理效率。
GPU 加速引擎	针对计算密集型任务（如基因组学、药物设计）提供 GPU 并行加速，兼容 CUDA 并支持国产 GPU（如景嘉微）。

大数据分析平台	集成 Hadoop、Spark 等大数据技术，实现海量生物数据的存储、预处理、分布式计算与并行挖掘。
AI 框架集成	支持 TensorFlow、PyTorch、MindSpore 等主流机器学习与深度学习框架，应用于疾病预测、基因分析等。
容器化与微服务	采用 Docker、Kubernetes 实现模块解耦、服务独立部署与弹性扩容，支持复杂科研工作流编排与快速迁移。

（3）在线开发支持：JupyterLab 开发环境

平台内置 JupyterLab 在线 Notebook 开发环境，支持开发者在浏览器中完成算法开发、调试、模型训练与结果可视化。该环境兼容 PyTorch、TensorFlow、scikit-learn 等主流 AI 框架，支持远程运行、实时保存代码，提高研发效率与实验 reproducibility。



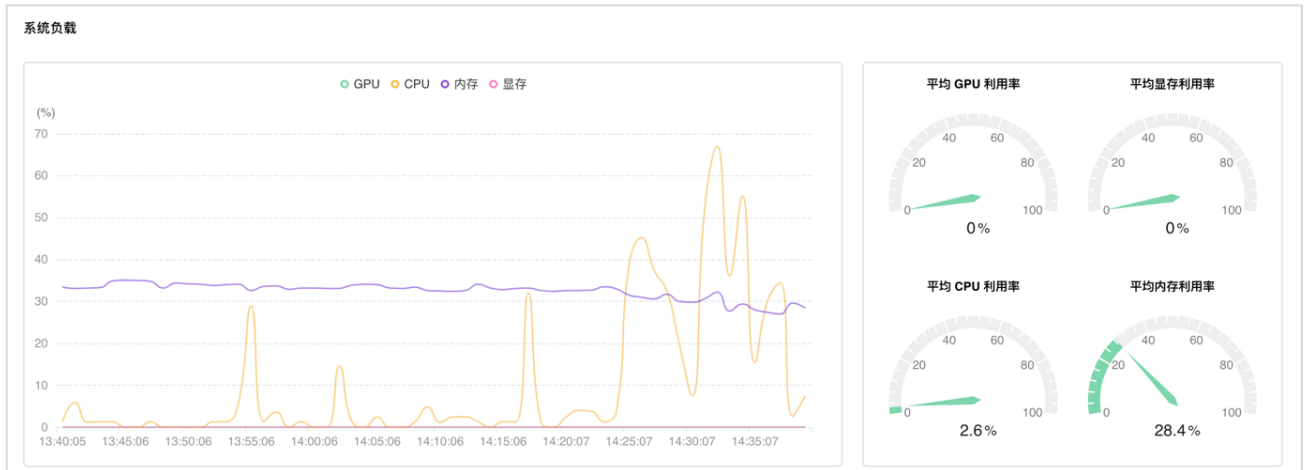
（4）平台部署策略与在线开发能力

ZeoOne 平台支持灵活部署，兼容本地机房部署与公有云/私有云部署，具体部署路径如下：

部署模块	功能描述
基础算力设施部署	安装服务器、GPU 卡、CUDA 驱动等基础运行环境，构建 AI 计算硬件底座。
Kubernetes 集群部署	推荐使用 Ubuntu 20+ 系统，搭建容器编排环境，支持任务调度与服务弹性伸缩。
AI 基础平台部署	部署 GPU 计算集群，支持异构 GPU 类型混合运行，Workers 节点支持横向扩容。
GPUStack 监控系统	展示服务器 GPU、CPU、内存、显存等关键资源使用情况，实现实时性能监控与负载管理。

聚合服务平台部署	包含数据管理中心、模型管理中心、算法开发与管理中心等模块，支撑全流程算法服务交付。
用户访问平台部署	提供任务发起、数据上传下载、计算执行、结果可视化与结构编辑等交互式入口。

GPUStack 系统负载展示服务器上 GPU、CPU、内存、显存利用率。



4.3 实施路径

以下表格展示了项目的各个实施阶段、时间周期、主要任务内容以及预期目标。

阶段	项目	时间周期	任务内容/目标
阶段一	用户管理模块	1-2 周	普通用户，开发者用户，管理员用等 3 种角色管理功能
阶段二	算法模型管理模块	3-5 周	算法模型上传和下载管理功能 算法在线开发和模型在线部署
阶段三	参数管理模块	2-3 周	环境参数和接口参数功能
阶段四	项目管理模块	2-3 周	项目创建，任务创建/执行
阶段五	数据管理模块	1-2 周	数据上传功能
阶段六	可视化操作模块	2-3 周	分子可视化展示编辑功能

4.2 优势亮点

模块	优势描述
模块解耦设计	各子模块可独立部署、扩展与升级，满足不同部署场景需求
异构资源调度	实现 GPU、CPU、NPU 等计算资源统一调度与负载均衡
私有化与国产化适配	满足数据安全与信创环境要求，适用于政府/高校/央企部署
多租户与安全隔离	项目级别资源与权限隔离，支持合规审计与行为追踪

可视化运维与任务监控	全链路任务状态可视、日志追踪与异常告警，提升运维效率
------------	----------------------------

五、典型应用场景与案例

ZeoOne 平台面向“AI+科研融合”构建，已广泛应用于多个对算力、算法与数据安全要求极高的科研与工业场景。平台支持灵活接入多类科学工具链与 AI 模型体系，推动科学研究从理论计算向智能加速迈进，加快科研成果产业化转化步伐。

5.1 典型应用描述——以计算生物学分子生成为例

在以分子设计为核心的计算生物学研究中，如何高效组织算法资源、调度算力、管理数据与用户协作，成为推动 AI 药物研发落地的关键。ZeoOne 平台通过其灵活的权限系统、组件化的功能模块与全流程管理能力，成功构建了面向分子生成的智能计算场景。在该平台设定了管理员、开发者、普通用户三类角色。管理员拥有系统管理、用户权限分配、资源监控与日志审计等功能；开发者可上传算法模型、配置接口参数、进行在线训练与调试；普通用户则负责项目创建、模型选择、参数配置、计算任务提交及可视化查看分析结果。

任务流程围绕药物分子设计，涵盖从蛋白靶点结构导入、靶标口袋识别，到结构虚筛、AI 分子生成、ADMET 属性预测的一整套闭环。平台支持上传 PDB 文件，自动识别并可视化显示结合口袋位置，同时通过用户定义的 SMILES 分子库或内置化合物库进行虚拟筛选。分子生成模型结合图神经网络与构象增强策略，可在靶标特征基础上生成结构新颖、性质优良的候选分子。

同时，ADMET 模块可对生成分子的药代动力学和毒性指标进行预测与评估，辅助研究人员提前判断其药物可行性。在数据层，平台支持数据库和结构文件的灵活管理，在可视化层则提供三维结构编辑与交互能力，助力科学决策。

该场景充分展现了 ZeoOne 在“算力+算法+数据”耦合调度方面的优势，实现 AI 驱动的药物发现流程标准化、自动化与可控化。

5.2 其他应用场景（表格整理）

应用方向	核心功能描述	典型案例
计算化学 分子模拟与反 应路径预测	- 支持 Gaussian、ORCA、VASP、DeepChem - 分子动力学模拟与势能面扫描 - DFT/TDDFT 第一性原理自动分发	某高校化学团队采用混合 AI 模型预测催化反应路径，相较传统方式提速 8 倍，提升迭代效率

	- AI 辅助反应路径搜索与分子生成	
计算材料学 晶体结构与性能预测	- 支持晶体结构优化、缺陷态建模 - AI 预测导热性、热稳定性、电磁性能 - 高通量仿真与候选筛选流程自动化 - 融合晶体数据库 + 图神经网络模型	为某材料企业搭建私有平台，使用 VASP+GNN 模型将材料筛选周期从 3 周缩短至 5 天
政企私有化 科研平台建设	- 支持国产软硬件（海光芯片 + 麒麟/UOS 系统） - 多级权限管理与日志审计 - 本地模型仓库与离线部署- 满足信创与合规要求	某科研平台部署 ZeoOne 离线版，统一调度多张 GPU 卡，支撑生物医药与材料双领域高强度计算任务
产业 AI 加速 企业级模型平台建设	- 支持 LLM、GNN、Diffusion 模型微调训练 - 模型灰度发布、版本管理、在线评估 - 与业务系统集成模型推理接口 - 打通算法研发到部署闭环	某企业建立图神经网络平台，自动评估 10 万分子特性，新品筛选效率提升 12 倍，成本下降 40%

5.3 应用延展：科研-产业转化与教育平台搭建

ZeoOne 平台不仅具备高性能科研支撑能力，还在“科研成果转化”与“教育实验平台”建设中展现出高度适配性。在科研-产业一体化路径中，平台可服务于联合实验室、博士后流动站、科研转化中心等，打通从模型研发、成果验证到场景落地的转化链条。

此外，平台支持轻量部署与多用户管理，适合构建高校 AI 课程教学平台、生物计算实验教学平台等场景。结合可视化界面与标准模型库，教师可快速组织实验任务，学生可自主完成项目训练、分子模拟与结果分析，极大提升教学效率与学生实践能力。

通过科研与教学一体化的部署实践，ZeoOne 平台正成为科研机构、高校与企业构建“产学研融合生态”的关键基础平台。

六、部署模式与系统集成能力

子图智算 ZeoOne 平台坚持“灵活部署、安全可控、快速集成”的技术路线，支持从轻量级试验环境到大规模科研级集群的多形态部署方式，全面满足科研机构、企业单位、高校实验室及政府部门在不同使用场景下的应用需求。

6.1 多形态部署方式

ZeoOne 平台支持以下三种主要部署形态，用户可根据算力规模、安全策略与组织架构灵活选择：

部署方式	适用场景	部署环境	关键特点
私有化部署 (离线/内网)	政府、高校、科研院所、国企	本地集群服务器、内网数据中心、信创环境	数据自主管理、安全隔离、支持国产芯片与操作系统、定制灵活
混合云部署 (边云协同)	算力波峰显著、预 算敏感场景	本地 GPU 服务器 + 公有云资源池	弹性高、按需扩缩容、支持多云接入与动态算力迁移
轻量试用部署 (Docker/K8s)	教学演示、研发测试、小型团队	单 机 服 务 器 、 轻 量 Kubernetes 或容器化环境	快速部署、配置简洁、支持在线实验与 Notebook 集成

6.2 系统集成能力

ZeoOne 平台具备强大的系统集成能力，支持与科研工具链、业务系统、数据平台、DevOps 平台等进行深度融合，外部系统集成方式如下：

系统类型	接入方式	支持能力
AI 框架/科学工具	容器化部署、插件式集成	PyTorch / TensorFlow / MindSpore / VASP / Gaussian / AlphaFold 等
任务调度平台	原生 Kubernetes、Slurm、YARN	可接管/复用现有资源管理体系
数据平台	对象存储（S3）、本地挂载、分布式文件系统	数据共享、自动挂载、版本管理
DevOps 工具	CLI、SDK、Webhook、GitLab/GitHub	支持自动训练触发、版本回滚、CI/CD 流水线
安全与审计系统	LDAP、SSO、OAuth2	企业统一身份与权限接入
外部业务系统	RESTful API、GraphQL、WebSocket	支持模型服务开放调用与任务编排对接

6.3 运维与升级支持

平台提供完善的运维与持续集成功能，保障系统长期稳定运行和版本可控：（1）可视化运维面板：实时监控任务执行、资源负载、集群状态；（2）异常告警机制：支持邮件/短信/平台告警多通道配置；（3）自动化升级机制：提供热更新、灰度发布与一键回滚支持；（4）安全策略强化：日志审计、操作轨迹追踪、行为分析；（5）定制服务支持：私有插件开发、二次集成 API、国产适配扩展。

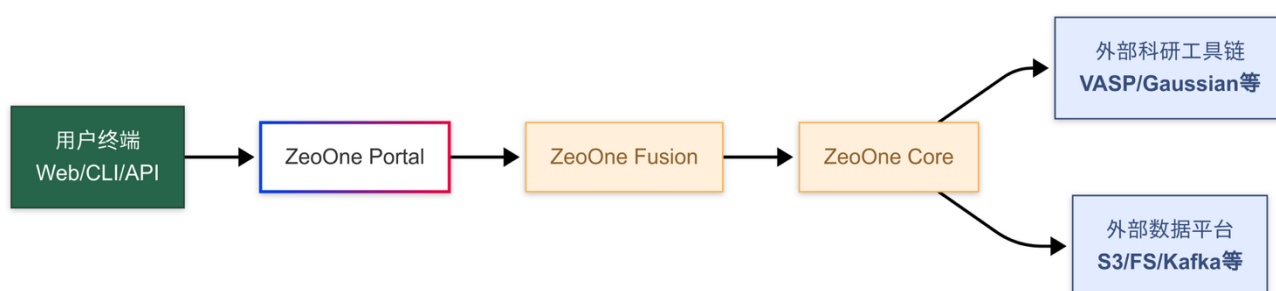
6.4 DevOps 支持与自动部署体系

平台具备完整的 DevOps 支撑能力，可快速接入用户自有科研/业务流程：（1）提供 Helm Charts、Ansible 脚本、K8s 部署模板等自动化部署组件；（2）支持私有模型仓库、本地缓存

镜像、模型版本控制；（3）可与 Jenkins、ArgoCD 等工具链集成，支持全流程自动化上线与回滚。

6.5 典型部署拓扑图

ZeoOne 平台采用模块化分层架构，整体部署结构清晰、可扩展性强。典型部署拓扑分为用户访问层、平台服务层、算力资源层与外部系统集成层。用户可通过 Web、CLI 或 API 接口访问平台门户，提交任务、配置模型；平台服务中台负责调度计算任务、管理算法模型并协调微服务；底层算力资源池支持多种异构设备统一接入与调度；同时平台还可对接外部科研工具链与数据平台，形成完整的科研计算闭环。



七、产品总结

在“AI+科学计算”深度融合的大趋势下，子图智算 ZeoOne 平台应运而生，致力于为科研机构、政府单位与科技企业构建一个高性能、智能化、安全可控的一体化算力平台。平台聚焦于计算生物学、计算化学、计算材料学等高算力、高精度领域，解决科研与产业落地过程中所面临的资源瓶颈、调度复杂、部署繁琐等核心难题。

通过 ZeoOne Portal、ZeoOne Fusion、ZeoOne Core 三大模块协同运作，ZeoOne 实现了从任务管理、模型服务到底层算力调度的全流程闭环支持。平台具备异构融合、信创适配、多形态部署、可视化运维等能力，已在科研机构、政府项目和产业客户中取得良好应用成果。

平台的建设不仅是算力技术的升级，更是支撑“新质生产力”与“科研范式转型”的关键基础设施之一。它将持续支撑 AI 模型与科学工具深度融合，加快科研成果的产业转化路径，推动智能时代下的技术创新与自主科研能力提升。

联系我们

联系人：张亚 137 6487 2727 邮箱：kevin.zhang@zeotruer.com