

第一性原理计算模拟平台招标参数表

1.1 软件要求:

多物理场耦合平台预装 linux Centos7 及以上系统, 安装科学计算所需的开发环境, 配置好多用户的环境变量管理, 并提供相应的技术支持和必要的编译服务; 协助安装相应科学仿真软件; 开发环境支持 C, C++, Fortran, 包括并行计算功能。gcc, g77, gfortran, infortran 等编译器, 并行编译 MPICH2, 完成 MPI 并行计算环境的搭建。提供安装 VASP (包括 VTST, VASPsol 的编译安装)、Gaussian、MS、Matlab 等软件提供技术支持及相关服务。

1.2 硬件要求:

- 1) CPU: 两颗 Intel Xeon, 第四代 8400 最新的官网可查正式版本号, 共 96 个计算物理核心, 频率不低于 3.8GHz, 具备 AI 加速功能, FCLGA4189, 浮点计算能力不低于 7065.6Gflops 支持 AVX512 指令集, 支持六通 DDR5-4800 (最大 2TB) 内存
- 2) 单计算节点挂载两颗处理器, 总核心数不低于 96 核心, 192 线程,
- 3) 内存: 三星内存类型不低于 8*32GB DDR5 REGECC 4800MHz 服务器专用高速内存, 支持 8 通道运行方式, 预留 8 个插槽;
- 4) 硬盘: 支持 RAID 0, 1, 5, 10; 可支持多块托架的 SATA/SAS 存储硬盘, 主节点系统运行盘不低于 1TB M.2 固态硬盘, 支持 NVME 协议, 数据存储不低于 8TB 硬盘用来储存数据, 且必须为高安全系数企业级标准;
- 5) 为保证平台稳定可靠运行, 电源采用全模组额定功率不低于 1650W 金牌电源;
- 6) 散热: L4677 4U 服务器散热专用, 室温全核满载温度不高于 80°C, 数量不低于 2 个;
- 7) 显卡: Nvidia 专业制图 4G 显存 GDDR6 显存位宽 192bit;
- 8) 人机交换采用 24 寸 2K 液晶显示器, IPS 屏
- 9) Linux Centos 7 系统平台作业调度系统:
 - 9.1 作业调度系统需满足远程使用要求, 提供后期免费升级服务, 提供厂家自主研发或商业作业管理软件, 提供系统快速部署和管理软件, 支持各个平台状态监控, 能够对平台运行进行动态监控和历史数据分析, 包括上电时间、平均负载、CPU 利用率、可用物理内存、磁盘空间占用率以及网络通讯状态等信息; 平台用户账号统一管理统一建立, 实现整体平台的概念;
 - 9.2 支持 Linux 架构的 HPC 计算平台; 支持 (如 Suse Linux、Redhat Linux、Centos Linux) 多版本的操作系统; 支持定义作业的优先级, 提供先来先服务、优先级抢占、公平共享、平台资源独占等多种调度策略; 作业调度支持多队列管理, 各个队列可设置不同管理策略、可根据用户作业的运行情况动态调整用户优先级; 提供资源管理和作业调度的编程接口, 支持批量作业的快速上传下载, 采用正版 HPCJT 作业管理系统及远程操作工具;
 - 9.3 支持 HPCJT 作业和普通 HPC 作业混合调度, 能够对于现有平台进行相关管理, 包括创建、更新、销毁等功能, 支持作业的暂停、恢复、杀死、置顶/置底、断点续算、重新运行等操作, 支持跨平台并行作业的动态安全设置, 并行作业计算相关的平台 ssh 等安全设置仅在作业运行期间, 对该作业生效。以增强系统的安全性;

- 9.4 支持多级容错，包含系统级容错、作业级容错，即系统发生故障（如网络中断、系统宕机）或作业因为偶然故障（如磁盘空间不足，获取许可证失败）引起的作业失败时，该作业能被重新调度到其它机器上执行。
- 10) 可协助用户安装科研中所需要的软件，提供材料计算相关方面的软件，以及基于 GNU 软件的安装调试和优化，以及相关软件在 CUDA 的编译，做到并行加速的效果，供应商负责原有数据库的迁移。

1.3 质保期：

- 1) 供货方所供应产品质保期不少于 3 年，质保期内，因产品质量而导致的缺陷，必须免费提供包修、包换、包退服务。
- 2) 供货方须在“三包”范围内无偿提供该货物的技术培训和他技术支持。
- 3) 供货方就所提供的货物必须在 24 小时内响应，72 小时内到达现场维修。

1.4 培训要求：

- 1) 需免费提供项目远程操作的使用培训，时间地点可根据使用方协商安排。
- 2) 需安排技术工程师通过现场演示和实际操作两部分进行使用培训。
- 3) 需为用户提供 Linux 操作系统日常操作培训，包括常用命令使用等。
- 4) 需为用户提供 OpenSSH、Slurm、OpenPBS 包括作业管理系统及远程操作工具基本使用培训。
- 5) 技术工程师为用户提供日常平台维护、保养等日常管理和注意事项培训。厂家技术工程师需要免费提供 7*24 小时远程平台使用技术指导，强化和巩固客户培训效果，确保平台管理员尽快熟练管理操作计算平台，缩短使用周期减少资源浪费。

同意！



阿不都卡里