

규 격 / 사 양 서

1. 개요	품명	전자구조계산 시스템		
	수량	2 대	제조사	
2. 용도 및 특징	- 밀도범함수이론(DFT) 기반의 전자구조 계산 소프트웨어(VASP, Quantum ESPRESSO, ABINIT 등 오픈소스 및 상용코드 포함)의 안정적 운영 및 대규모 계산 수행 - MKL등 하드웨어에 최적화된 고성능 수치연산 라이브러리를 활용한 병렬 계산 및 하드웨어 최적화 기반의 과학기술 시뮬레이션 지원 - 분자동역학(Molecular Dynamics, MD) 시뮬레이션을 통한 물질 거동, 원자/분자 상호작용 및 열역학적 특성 분석 - 다중 노드 및 병렬처리 환경(MPI/OpenMP 기반)을 활용한 대용량 계산 및 고성능 연산 수행 - 계산과학, 응집물질물리, 재료과학 및 화학 분야의 가상모사 연구를 위한 고성능 연구 인프라 제공			
3. 기기구성	대당 기기 구성 - 2U 케이스 이하(설치공간제한), PCIe 5.0 slots 6개 이상 - Two CPU 지원(SMP), 히트싱크 포함 - PCIe Gen5 급 슬롯 지원 - DDR5급 24개 이상 메모리 뱅크, ECC/REG 지원 - 3.5인치급 HOT-SWAP HDD(SAS, SATA, U.2) bay 12개 이상 지원 - OCP SLOT 2개 이상 지원 - Display port 1개 이상 지원, USB포트 4개 이상 지원 - 8ch 이상급 RAID CONTROLLER 1개 - 10Gigabit Network Ethernet Controller, X710기반, RJ45 2PORT 이상 - 서버파워 1300WATT이상급 redundant power distribution 1개이상 (모듈형태, 운영중 교체가능해야 함) - Onboard dedicated RJ45 management port - MANAGEMENT PORT를 통한 Web Management interface, supporting IPMI2.0 ,SNMP, RedFish, KVM Over IP 지원			
4. 규격 및 사양	대당 기기 구성 ● Processor - 2개 CPU (core당 BASE CLOCK 속도 3.25GHz 이상, CPU당 32core 이상, AVX512 지원) ● Memory - DDR5 ECC/REG 시스템 메모리 16GB 4개 이상 ● Hard disk : Provides multiple front storage bays, hot swapping, HDDs, and SSDs. - 12x3.5"slots, supporting SAS/SATA/U.2 ● External IO :			

	- Four USBs (two USBs at the rear and one USB3.0 + one USB2.0 at the front) - Two VGA interfaces (one front end and one back end) - One 3.5 MM serial port - One IPMI GE management interface ● SSD NVMe : M.2 NVMe 1TB 이상급 또는 U.2 NVMe 960GB 이상급 1개 이상 ● NIC : DUAL PORT 10G 1EA ● NIC : 100Gb/s bandwidth이상급 통신카드 1개 (QSFP타입, 선 포함, 2m 이상) ● Rack Rail : Ball Bearing Rail Kit(Direct delivery material) 1EA ● Power : 1 x 1300W CRPS standard power supply devices, hot-swappable, and 1+1 redundancy ● RAID : 8 internal SAS/SATA ports, RAID 5,6 support ● Software : - 시스템관리소프트웨어 및 계산 노드용 OS / 웹을 통한 SLURM 잡케줄러 통제, 웹을 통한 노드별 사용량 그래프 통계 자료(년,월,일) 출력/사용자별 웹을 통한 터미널 및 폴더 관리 지원/웹을 통한 분자구조 설계 및 뷰어 및 SLURM 계산 예약 지원
5. 설치, 교육 및 사후관리	계약자는 기기의 운영 및 기초원리와 조작기술교육을 납품일로부터 10일 이내 실시하여야 한다.
6. 품질보증 기간 (Warranty)	최종검수일로부터 1년 H/W & S/W 무상보증
7. 납기일자	발주 후 40일 이내
8. 계약업체 제출 서류	- 낙찰된 업체로부터의 제조사 기술지원 약속서 - 국세 및 지방세 납세 증명서 및 4대보험 완납 증명서
9. 참가자격	
10. 참가자격 제출 서류	
11. 기타사항	● 품질보증기간 이후 유지보수(하드웨어, 소프트웨어)를 할 수 있도록 전체 클러스터 운영을 통제하는 웹기반 상용 소프트웨어 요구된다. ● 납품되는 시스템은 동일한 OS 환경을 만들어야 하며, 기존 장비와 연결하는데 추가되는 비용은 모두 업체가 부담한다. ● 모든 계산 노드들은 SLURM으로 통제되며, FAIRSHARE설정을 위한 SLURMDBD 및 CGROUP설정을 포함한다. ● 납품 업체는 납품 후 1년 동안 사용자들의 효과적인 자원 배분을 위해 SLURM FAIRSHARE관련 정책 변경 설정 작업을 교육과 함께 지원해야 한다. ● 전체 시스템 통제 소프트웨어, 클러스터 전체 라이브러리 버전 일치해야한다. Linux Kernel 6.6.93이상 ● BASE GNU Compiler 12.2.1 이상, BASE GNU 개발툴 설정 ● "--enable-languages=c,c++,fortran,objc,obj-c++,ada,go,d,lto"포함되어야 함. ● environment module 설치 및 설정 (발주처 요구에 맞추어 납품 후 1년간 지원) 모든 모듈을 포함해서 1년간 구매자(학과)가 지정하는 서버에 출장 설치를

	해야 한다. (Linux 재설치 시에도 출장 설치 포함) ● VASP 프로그램을 버전별 기능별 바이너리를 제공해야 하며 납품 후 1년 동안 VASP 프로그램 소스코드수정을 사용자 요청에 따라 무상 수정, 컴파일 해주어야 한다. 본 지원 관리에 따르는 비용(필요시 파견직원 포함)은 모두 업체 부담한다. ● 납품하는 컴파일러, MPI, 수학라이브러리들은 학교 자체 또는 외부 무료 소프트웨어들에 대해 모두 지원할 수 있도록 설정 및 지원해야 한다. ● Web을 통한 클러스터 통합 관리 유료프로그램(유저관리, 전체 시스템 작동상태 그래프, SLURM JOB 관리 등)을 설치해야 한다. ● HPC cluster로 작업제출 및 관리 가능-웹기반의 GUI 지원 ● VASP 전처리과정 INPUT파일 작성, 웹을 통한 3D-Viewer, 구조최적화 및 DOS, BAND 그래프 출력, 웹상에서 분석할 수 있는 툴 지원 ● VASP의 HDF5 파일을 통한 시뮬레이션 결과 확인 및 DOS, BAND구조 웹상에서 분석 지원 ● 담당자: 자연과학대학 물리학과 박창원 교수 내선번호: 02-3277-2373/ 핸드폰: 010-3324-6012
--	--