

浙江师范大学
ZHEJIANG NORMAL UNIVERSITY

大型仪器设备购置论证报告

仪器设备名称

复杂体系模拟计算机组

项目名称

2021 年杭高院科研设备购置项目

项目负责人

陈丽平

填表日期

2021-3-15

实验室管理处制

填表说明

1. 单价 10 万元及以上仪器设备的申购均需填写此表，并与申购计划一起上报有关部门。

2. 所在学院（部门）组织 3—7 人单数技术专家进行论证，并通知项目经费管理、设备管理等部门参加论证。申请单一来源采购的需 3 人以上单数非本校专家参加论证；未列入全省统一论证进口产品范围的进口产品需 5 人以上单数非本校专家参加论证。

3. 论证会由专家组组长主持，主要程序为：申购人报告、现场考察、专家质询与讨论、专家组形成论证意见并签名。

4. 专家论证同意，经学院（部门）、项目经费管理部门签字并盖章后，报本科教学部（实验室管理处）网上公示一周无异议后实施。

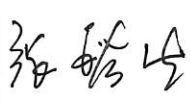
5. 此表一式 1 份（如设备为进口设备，请提交 2 份）。

设备名称	中文	复杂体系模拟计算机组			
	英文				
规格型号					
申购数量	1 套	现行单价	人民币	181000	
			美元		
购置经费来源	学校经费和个人经费配套	运行经费来源	个人经费		
主要技术指标与功能	主要设备 计算节点*2: CPU: AMD EPYC 7742 2.25GHz/256M/64C/225W; 2 颗 内存: 32GB DDR4-3200Hz ECC REG RDIMM; 16 条 NVMe SSD 硬盘: 3.84TB PCIe NVMe 3D-NAND SSD; 1 块 电源: 2U8 盘位 800W AC 白金电源(1+1 冗电源) 盘位类型: 2U1 节点 Rome 单路 8 盘位 A 背板(180W 以上 TDP 选配) 控制器类型: AMD EPYC 双路 16DIMM 板载 SATA 控制器 (R5210 A12)				
用房情况	地 点	面积	辅助设施配备	是否需改建	落实情况

	浙江师范大学 萧山校区 杭州高等研 究院	30m ²			否	
管理和使 用技术人 员配备	姓 名	职称	专管 或兼管	是否 使用过	熟练 程度	是否 需培训
	陈 丽 平	助 理 研 究 员	专 管	是	熟 练	否
主要用途和 适用学科范 围	主要用于科研的理论计算，部分用于研究生教学，满足电子结构、分子结构、分子间相互作用、催化剂和材料性能等理论计算研究。通过使用独立的、高速并行的计算系统，完成复杂的模拟预测任务，适应相关教师承担的国家科研项目研究、研究生理论计算能力的提高和完成高水平的科研课题的需要。 共享学科为化学、物理、生物等。					

购置必要性	目前有大量的研究课题需要通过计算模拟来完成，亟需独立的、高速并行的计算环境，以完成复杂且运行时具有相对独占性的模拟预测任务。原有的小型计算机组已经远远无法满足课题组的计算规模、时间、精度等各方面的需求，亟需补充购置该设备，增加原有计算机组的并行运算和模拟能力，缩短计算时间，提高工作效率。 此外，该设备可以为杭高院激光团队和催化团队提供理论支撑和方向指导(例如：分子反应动力学、催化剂和材料性能筛选)，以满足杭高院近期的研究需求。
本校是否有同类设备、数量及不能共享的理由	本课题组原有小型计算机组一套，含 8 个计算节点。 由于课题需要，原有小型计算机组规模太小，不足以支撑目前运行发展需要。
安装场地满足条件（水、电、气等是否齐全）、安全保护措施落实情况、是否涉及放射源物品和剧毒品等危险性材料	环境全部满足、安全措施到位、不涉及放射源和危险性材料

国内外同类设备、品牌、规格、性能、技术指标、特色、附件、价格、售后服务、应用支持等的比较	可供货厂商技术指标比较： 1) 惠普，产品为 HP DL380 高性能服务器，经调研，HP DL380 设备运行稳定，质量可靠，全球市场占有率高，本地售后及时，所有硬件设备和配件提供不少于 3 年保修，软件提供不少于 5 年免费升级，提供原厂所有硬件设备的安装集成、整系统优化和软件调试服务。 2) 浪潮集团有限公司，产品为浪潮 NF5280，高性能服务器系统，经调研，价格便宜，设备稳定性稍逊于惠普和 DELL，售后服务完善，原厂安装调试服务、原厂 3 年售后服务、提供相关培训和一次市内移机服务。 3) 戴尔（中国）有限公司，产品为戴尔高性能服务器 R740。经调研，戴尔机器运行稳定，售后机制完善，及时响应性好，主要靠代理服务为主，组装货多。
使用效益预测及风险分析	预期使用效益：计算集群安装运行后，以 7*24 小时方式进行工作。（1）教学成果：按照目前杭高院研究生招生规模，为物理化学进展课程提供上机实验服务。（2）科研成果：提高相关研究人员的理论计算水平，拓展研究领域，为完成各项科研成果提供技术支撑和硬件保障。 风险预测和规避：设备选型选取主流机型和配置，并适度超前，预计今后 5~8 年左右，能够满足主流应用的需要，利用率方面不存在风险。选择的品牌和厂商都在目前计算机集群行业竞争力很强，售后服务都不错，不存在因产品和技术问题降低使用效果甚至停止使用的情况。

开放共享实施方案和共享承诺	同意共享。 项目负责人签字： 			
专家论证意见	化学正在经历一场革命性的变化，现在理论计算和实验表征对化学家一样重要。目前高研院的小型计算机组已经无法满足课题组的科研需求，制约了相关学科的发展，拟补充购买计算机组用于科研和教学，该设备将大大地提升原有设备的计算能力。另外，该设备能紧密地与激光团队和催化团队研究领域相结合，具有采购的必要性，建议尽早采购。 组长签字：  2021 年 3 月 17 日			
专家组成员	姓 名	职称或职务	单 位	签 名
	陈达如	研究员	杭州高等研究院	
	俞盛锐	副研究员	杭州高等研究院	
	张裕生	助理研究员	杭州高等研究院	

所在学院部门意见	负责人签字:  单位盖章: 2021年 3 月 17日
项目经费管理部门意见	负责人签字: 单位盖章: 年 月 日
设备管理部门意见	负责人签字: 单位盖章: 年 月 日