**구매 규격서**

1. 기기명:

양자 동역학 컴퓨팅 시뮬레이터 (Quantum Dynamics Computing Simulator)

1. 특징:

상기 기기는 양자 다체계 문제(Quantum many body problem)를 계산하는 기법 중에 하나인 양자 동역학 시뮬레이션을 수행하는 연산용 기기이며, 계를 구성하는 입자에 작용하는 힘을 양자적으로 계산하고 입자들의 상태방정식을 반복적으로 풀어서 그들의 위치를 시간에 따라 계산하는데 사용된다. 동역학 시뮬레이션 과정은 실제 실험실에서 이루어지는 실험과정과 아주 유사하며, 흔히 보는 실험실에서는 실험을 위한 샘플을 준비하고, 이를 온도계나 점성도계 등과 같은 계측기에 연결하여 주어진 시간 동안 관심 물리량을 측정하고, 많은 샘플로 동일한 실험을 반복하여 통계적 오차를 최대 한 제거한다. 이러한 이론 실험을 다양한 변수 값과 많은 샘플 데이터를 적용하여 시뮬레이션 할 수 있는 컴퓨팅 연산 시스템이 사용되고 있다.

1. 규격:
	1. **품명: TIGER CLUSTER SYSTEM**
	2. **HPCC Compute Node – 2SET**
* CPU: XEON Gold 6126 Processor 2.6GHz 12Core 19.25MB 캐시 x 2ea
* RAM: 16GB RDIMM, 2666MHz x 6ea (16DIMMs 이상)
* STORAGE: 256GB SSD x 1ea, 4x Hot-swap bay 지원
* NETWORK: 2 x 10Gbe, 1 x OPA 100Gb/s HFA (PCI-e X16) & 3M QSFP cable
* 크기: 1U Rack Mount
* Power: 700W 이상 Redundant, Hot-swap x 2ea
	1. **HPCC Rack Cabinet – 1SET**
* 19“Standard 36U Server Rack Cabinet
* Top/Slide 1.2mm spot panel, Auto Caster, Power Distributor, Load Capacity 1,000kg
	1. **Modeling Simulation Environment Drivers:**

**동역학 시뮬레이션 관련 프로그램을 설치 및 최적화 한다.**

* + - Plane-wave codes: Quantum Espresso, WEST, VASP, WIEN2K, Abinit,
		- Quantum Chemistry: Q-Chem, CPMD, GAUSSIAN, GAMESS, ADF, CRYSTAL 17
		- Quantum MD Simulations: LAMMPS, DL\_POLY, MOLDY, CPMD
		- Material Studio: CASTEP, FORCITE
		- Anaconda Python 3.6 package, Matlab
		- NWChem 6.3 or 6.5 source code compile parallel performance CR-EOMCCSD method tuning
		- NAMD 2.9 or 2.10 GPU combine, GROMACS 4.6.x or 5.0, AMBER 14 GPU combine solver in-code

상기 소프트웨어를 향후 구축 될 통합 분석 파이프라인에 사용하기 위한 패키지 형태로 변환 시 최상의 연산 환경을 제공할 수 있도록 최적화 하여 설치하여야 한다.

* 1. **High-Performance Computing Cluster Environment Driver:**
* HPC Cluster System Management & Monitoring Tools
	+ Agent-less Manageability at Scale
	+ Power and Thermal Monitoring
	+ Remote Debug with Event Logs
	+ Sensor Monitoring
	+ Remote BMC configuration
	+ Integration into Opensource Plugins (Nagios, Ganglia)
* Parallel Tools: MPICH, PVM, OpenMPI, OpenMP
* Queueing system: SGE
* OS: CentOS 7.x
* Parallel Clustering Computing environment 설치
* Rsh script Cluster system management environment 설치
* Kernel Level Firewall 설치
* 사용 예정인 분석 프로그램들이 도커를 활용하여 다양한 OS환경(fedora, ubuntu, centos)에서 정상적으로 구동되도록 지원 및 이미지를 빌드, 배포 및 관리(모니터링) 할 수 있는 컨테이너 기반 운영 방법과 클러스터 작업 제출을 위한 스크립트 등을 제공.
* 기 구성된 시스템과 연동 작업 필요; HPC make Setting (w/software & Disk, Network Configuration)
	1. **지원**
	+ 기존 시스템과 완벽하게 호환 운영되도록 운영체계 및 각종 어플리케이션을 최적화 해야 함
	+ 설치 완료 후 목표성능 테스트를 위해 HPL 벤치마크 결과 제출해야 함
	+ 설치완료(SW튜닝 포함) 후 운영 2주간 전체 장비 가동율이 99% 이상이 되어야 하며, 동 기간 중 연속 무장애 운영이 1주 이상이 되어야 함
	+ 상기 명시된 운영 목표 미달 시에는 계약자의 부담으로 미달된 부분을 보강하여야 한다.
	+ 제품공급 전 설치 장소에 대한 아래 정보를 제공해야 함

Estimated rack design

Site plan

Product weight and volume

Product electric power and amount of heat

* + 시스템 관리자 및 연구소 사용자 지원을 위하여 해당 분야에서 10년 이상 경력의 전문요원 1명을 직접 보유하고 있어야 한다.
	+ 제품에 사용되는 모든 부품은 제조사의 정품 신제품이어야 하며, 중고부품(used), 수리품(refurbished), 또는 무상보증에 의하여 교환된 신제품(warranty serviced part)의 사용을 금함. 계약자는 계약 시 모든 제품 (HW, SW)의 ‘제조사 및 공급자 증명원 (Manufacturer’s & Supplier’s certificate)’ 및 기술지원 확약서 (Technical support certificate)’를 제출하여야 한다.
	1. **교육**
* 장비와 관련된 교육은 별도로 유저와 협의하여 실시함
* 다음과 같은 교육은 별도의 협의가 없더라도 필수적으로 수행해야 하고, 시스템 구축 이후 내부 인력에 의한 작업 수행이 원활하게 이루어질 수 있도록 충분한 기술지원을 해야함.

Product operation training

Maintenance training

Programming training

* 1. **Remark**

장비의 무상보증 기간은 3년으로 함 (H/W, S/W). 무상보장 기간 중 정상적인 작동 상태에서 발생하는 모든 결함은 계약자 및 제조사의 책임 하에 무상으로 수리되어야 한다.

보고된 전 항목 또는 일부 항목에 대하여 공급받은 자의 입회를 포함한 재검사를 요구할 수 있으며, 계약자는 그 요구에 응하여야 한다.

계약자는 수요자가 요구하는 시간 및 장소에 장비를 설치해야한다.