×

回

大兴 (甲方) : 大冢材料科技有限公司

拉莱力 上海艮泰信息技术有限公司

原则,就甲方向乙方采购艮泰分子动力学计算模拟平台事宜,签订本合同书。 根据《中华人民共和国合同法》的有关规定,甲乙双方本着平等、自愿、协商

合同内容

1.产品名称、单位、数量、单价、金额 (附表)

The second of the second secon	艮泰分子动力学计算模拟平台	产品名称
	会	单位
	Н	数量
	54000.00	単价 (RMB)
	54000.00	金额 (RMB)

- 2.合同总价款: 人民币伍万肆仟圆整
- 3. 艮泰分子动力学计算模拟平台配置清单: 见附件

- 4.1 交货地点: 上海市甲方指定办公地点。
- 4.2 交货方式: 乙方为甲方安装调试完毕,并由甲方当场验收。
- 4.3 交货完工期: 款到后 25 个工作日内交付验收
- 4.4运输费用以及相应的保险费用由乙方承担

5.质量保证

- 条件下,应具备满足客户正常使用的性能。 5.1 乙方保证所提供的产品符合合同所规定的要求。 在正确安装, 正常使用和保养的
- 5.2 乙方为甲方提供三年的硬件包修与配件更换服务
- 5.3 乙方为甲方提供一年软件安装与使用的技术支持 (非 GPL 协议的软件由甲方提

日去

5.4 乙方为甲方在软件使用过程中的问题提供咨询与帮助

付款方式

Email:hpc@shgentai.com 上海艮泰信息技术有限公司上海市闵行区七莘路3599弄12号 http://www.shgentai.com 第1页

上海总部地址:

电话: 4006001251 /4000001251 合同价格有效期截至19/10/5

1

- 额增值税发票。 1.甲方于合同生效后 5个工作日内向乙方 一次性支付货款, 全款到后乙方向甲方开具等
- 2.支付方式:银行转账。

乙方开户行: 中国建设银行上海都市路支行

账户名: 上海艮泰信息技术有限公司

账号: 31001658712052502603

三、售后服务

- Н 在合同规定的期限内对所提供的系统提供24×7维修服务
- 2. 乙方为甲方的相关人员提供技术及操作培训。
- W 甲方应在系统安装地点配置相关的通信与网络设备, 以便乙方及时进行远程服务。
- 的问题。 4 乙方定期以电话或现场的方式对甲方系统的运行状态进行巡视, 及时解决可能发生

四、系统验收及异议的解决

- 甲方在验收过程中应当场将系统不符合约定的情况及处理方式以书面方式通知乙方
- 2 异议和处理意见 乙方应在收到甲方的书面异议后七天内负责处理问题,否则将视为默认甲方提出的
- 的系统符合合同规定 3. 如果甲方在验收时既不出具验收合格证明又未提出书面异议的,则视为乙方所交付
- 5.针对 3 块 4TB 4.由于关税等不可控力因素和服务器配件市场价格波动影响,此合同价格有效期限至 出硬盘 RAID5 性能之外的硬件损坏导致的数据丢失, 2019年 10月 σ 7200RPM SATA 企业级硬盘, 'n 超过此期限乙方有权要求重新协商调整合同价格或有权不予供货。 乙方提供硬盘的维修与更换服务, 乙方有权不承担相应责任
- 6 双方应以友好合作的方式尽各自最大的诚意全面履行本合同

五、 违约责任

- 取补救措施或赔偿损失等违约责任 任何一方不履行合同义务或者履行合同义务不符合约定的, 应当承担继续履行或采
- 2. 乙方违约责任
- 乙方无正当理由不能交货 (超过交货期7日视为不能交货) 应向甲方偿付合同

V

总价款 20%的违约金,违约金不足以补偿损失的, 甲方有权要求乙方补足

损失费用 照逾期交货部分货款的每天千分之四支付逾期交货违约金,同时承担甲方因此遭受的 2.2 乙方逾期交货的,应在发货前与甲方协商,甲方仍需求的,乙方应立即发货, 按

3. 甲方违约责任

- 为违约金, 违约金不足以补偿损失的, 3.1 在合同生效后, 甲方无正当理由要求退货的, 乙方有权要求甲方补足 应向乙方偿付合同总价款的20%作
- 六、保密义务 3.2 甲方逾期支付货款的按照逾期付款金额的每天千分之四支付逾期付款违约金

务不因本合同履行完毕而失效, 由此给乙方所造成的相应损失, 方将视情况要求甲方另行签订保密协议;若甲方违反本协议泄漏乙方商业秘密的,须赔偿 予以保密,不得向第三方通过任何途径出示、泄露,不得对相关信息进行复制、传播,乙 全规定,对合同过程中所接触、了解、获知的有关乙方的信息(包括价格、产品信息等) 合同履行过程中,甲乙双方应当互相遵守保密义务。甲方应当遵守乙方的有关信息安 并依法承担相关违约责任。本条所约定的双方承担保密义 具备永久保密性。

七、争议解决

- 本合同在执行过程中发生的争议, 均应通过双方友好协商解决
- 2 协商不成的,双方一致同意提交上海仲裁委员会申请仲裁

八、其他

- 1. 本合同自双方签字盖章之日起生效。
- 2. 本合同一式肆份, 甲方执叁份, 乙方执壹份。

九、未尽事宜

如有未尽事宜 联系电 併 方协商 致后签订补充协议书 代表人: 联条电话 乙方签章 III 4086901251

1-11-1

Email:hpc@shgentai.com 上海市闵行区七莘路3599 弄12号 http://www.shgentai.com 第3页 上海艮泰信息技术有限公司

> 电话: 4006001251 /4000001251 合同价格有效期截至 <u>19/10/5</u>

84

0

艮泰分子动力学计算模拟平台技术参数表

		N			然 格	当 文	数平			城 ——					中	₩.		
系统及相 2									林女恭	服务与技						E E E	型号	产品
软件开发环境	并行环境	高性能編译器	科学计算库	操作系统	解决问题。	提供三年质量保证	为用户提供已有证	为用户提供相关证	为用户安装其他转	系统结构、常规 Linux 使用介绍等	提供系统管理、	提供网络安全、系统配置服务。	提供网络文件系统	提供 MPI 并行计		94 SOCIO		
大河・C、C++、FORTAIN、FYTHON、JAVA 李維強失態, bu Eclinea OTA OpenCl Talth Crown 解発	MPICH2 等并行计算环境	GCC、G77、GFortran 等高性能编译器	BLAS · ATLAS · LAPACK · ScaLAPACK · FFTW	预装 Linux 64 位操作系统		提供三年质量保证及一年免费技术支持。24 小时内响应,3 个工作日内	为用户提供已有设备的网络搭建工作。	为用户提供相关设备升级、扩容服务。	为用户安装其他软件提供技术支持及相关服务。	-inux 使用介绍等。	提供系统管理、系统使用培训,包括开关机系统、文件系统维护、文件	系统配置服务。	提供网络文件系统和并行计算系统设置及维护。	提供MPI并行计算环境、浮点计算数学库及相关编译工具。	ŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢŢ		GTS2-RIS216N	分子动力学计算模拟平台
(d	t t			-		自	一曲		
		<u>⊢</u>						H	7					声	数			

上海艮泰信息技术有限公司 上海总部地址:上海市闵行区七莘路 3599 弄 12 号 Email:hpc@shgentai.com http://www.shgentai.com 第 4 页

7/X

一一分分五五二日

3

ω		
学计算模		
分子动力学计算模拟环境	大型通用数值计算环境	其他软件
提供分子动力学计算模拟环境、可以模拟液体中的粒子、固体和气体的系综、支持多种势函数、可采用不同的力场和边界条件模拟全原子、聚合物、生物、金属、粒状和粗斜化体系、可以计算的体系小至几个粒子、大到上百万甚至上亿个粒子。支持多种粒子和模拟类型以及力场;支持多种系综、约束条件、边界条件;提供一系列的数据预处理和后处理工具。支持并行运行,具有高度可移植的C++,含 MPI 库和单处理器的 FFT 库,支持GPU(CUDA 和 OpenGL)和 OpenMP 并行计算,可以从一个脚本同时运行一个或多个模拟(并行),作为库来构建,通过库接口提供 Python 的封装调用,可与其它代码相互调用。	包含有1700多个用于工程和科学应用的数学函数。有一个高级的编程语言允许访问高级数据结构,2D和3D图形函数。包括几大主要功能:1.数学与仿真:用于常用的工程和科学应用,包括数学运算和数据分析;2.2D和3D可视化:图形函数可视化,注释和输出数据、以及很多方式可以创建和自定义各种类型的图和图表;3.优化:解决约束和非约束的连续和离散优化问题的算法;5分析:用于控制系统研究的标准算法和工具;6.信号少种:用于控制系统研究的标准算法和工具;6.信号处理:时域和频域信号的可视化,分析和过滤;7.应用程序开发:增加原生功能和管理与外部工具的数据交换;8.Xcos-混合动态系统建模工具和仿真器:可进行机械系统,数字电路,液压回路和控制系统建模等。	办公套件(包含字处理、电子表格、演示文稿和绘图等组件),专业图形图像处理软件,邮件系统等
	H	

上海艮泰信息技术有限公司 上海总部地址:上海市闵行区七莘路3599弄12号 Email:hpc@shgentai.com http://www.shgentai.com 第5页

											7u, 1												le le				
	图环境	数据分析与绘																									
格式,交互式图形用户界面,易于快速入门。	滑、各种曲线的拟合、绘图等操作,支持多种图形输出	科学数据分析和 2D/3D 绘图工具,可以对数据进行平	方案。	拟环境,是可执行的且可高效利用的一个密度矩阵推断	供基于 Born-Oppenheimer 法的从头计算分子动力学模	可利用线性标度方法进行密度矩阵的优化;除此之外提	的矩阵表示形式,随着系统规模的增加而变得逐渐分散、	可行的。该环境下提供基于 Kohn-Sham 矩阵和密度矩阵	无论是用于静态属性计算还是用于动力学性质分析都是	体、晶体、蛋白质对接这类的复杂系统)的先进方法,	效的并行执行。提供用于高效、准确的DFT计算(如液	论)的总体框架,使用Fortran95语言编写而且能够有	平面波混合基组、经典的成对和多体势的密度泛函理	子模拟环境,使用具有一个用于不同方式(如高斯基和	提供用于进行固态、液态、分子和生物体系的原子和分	Markovian 元动力学分析。	(激发态,激发态分子动力学) 计算、粗细粒度的非	子动力学、响应函数、电子性质的计算; 密度泛函理论	子动力学模拟(恒定能量、恒温、恒压)、路径积分分	行波函数的优化、直接最小化和对角化、几何优化、分	有周期性边界条件的系统;分子与晶体的对称性;可进	修正方案;可实现自由能密度泛函;具有隔离系统和具	保护或超软赝势的工程;具有LDA、LSD和普遍的梯度	的计算机架构中,而且能够很好地并行运行;具有规范	力进行计算的并行环境。其主要特性是: 能运行在不同	波基矢和密度泛函理论(DFT)对原子(分子)间作用	提供基于第一性原理分子动力学方法,采用赝势、平面
																							套				
																							<u>⊢</u>				

上海艮泰信息技术有限公司 上海总部地址:上海市闵行区七莘路3599 弄12 号 Email:hpc@shgentai.com http://www.shgentai.com 第 6 页

11 L-14 ...

4													
以													
中台 注 注 注 注	外观												
2颗 Intel Xeon Scalable Gold 5218 正式版 CPU, 最新 Cascade Lake 架构、16 Core、32 Thread、2.3 GHz, Turbo 3.9 GHz、22 MB L3 Intel Smart Cache; 平台基于领先的14 纳米制程工艺打造; 支持第三代 Intel AVX 512 指令集; 支持 QuickAssist、QuickData、Deep Learning 等新技术。 基于良泰GTS2-RIS2000 系列、支持 2 颗 Intel Xeon Scalable 系列处理器; 集成四通道 DDR4 内存控制器,最多支持1TB DDR4 ECC Registered 内存; 采用全新 Intel C621 芯片组;基于最新 PCIE3 通讯总线技术,支持多种 PCI-E 3.0 扩展接口;支持多个 SATA3 6Gbps 硬盘驱动器接口,支持RAID 0, 1. 5, 10;集成高速 USB 3.0 接口;Intel 双千兆网络控制器;ACPI 4.0 高级电源管理接口;高稳定性电源系统,主动式。PFC、100-240V 全电压宽幅输入,90%转换效率(视频输出连接线) 128GB(8*16GB) DDR4 ECC Registered Shared Memory,速度快、安全性高、稳定性好,适用于中高端服务器及图形工作站 512GB SSD 固态硬盘作系统加速盘 512GB SSD 固态硬盘作系统加速盘 3 块 4TB 7200RPM SATA 企业级硬盘(良泰设备),与本方案中 3 块 4TB 7200RPM SATA 企业级硬盘,组建RAID 5 作数块 4TB 7200RPM SATA 企业级硬盘,组建RAID 5 作数	机架式												
ļ-à													

上海艮泰信息技术有限公司 上海总部地址:上海市闵行区七莘路 3599 弄 12 号 Email:hpc@shgentai.com http://www.shgentai.com 第 7 页

Mark to the state of the state		5						1 P 4 C 2 C
		客 在				- 7- S		
	UPS					附頭曾		
证负载运行的安全性和可靠性。电网断电后,能够自动按设定的顺序进行关机操作,充分保障用户的数据安全。	模式的转换时间为零,且采用宽幅电压和频率,有效保	为平台提供断电保护,而且可以根据设备的精密程度来一选择可承受的切换时间。在市电不稳定的情况下。但由	3000VA 在线式不间断供电系统确保对平台的持续供电,	GDDR5显示存储,896个CUDA并行计算处理核心	Nvidia GeForce GTX 1650 显卡,TURING 架构,4GB	8 口千兆以太网交换机	盘))	RAID 5,1 块 4TB 7200RPM SATA 企业级硬盘做热备
		套						
								

上海艮泰信息技术有限公司 上海总部地址:上海市闵行区七莘路 3599 弄 12 号 Email:hpc@shgentai.com http://www.shgentai.com 第 8 页

电话: 4006001251 /4000001251 合同价格有效期截至 19/10/5

