

校采20190015



仪器设备（国产专用设备）采购申请表

单位（公章）：

填报日期：

受理日期：2019.5.20

项目名称	预装材料计算软件PWmat的平面波赝势方法HSE杂化泛函GPU计算服务器		代理机构		无
预算项目名称	专项经费，引进人才学科建设经费		预算项目编码		209604-224
预算金额总计	16万元		经费负责人签字		于树红
采购方式	单一来源		采购联系人	郭忠路	联系方式
使用方向	科研，用于氮化硼材料以及二维过渡金属碳化物MXene的结构模拟和物性计算				
品目代码	设备名称	数量	单价（万元）	预算金额（万元）	备注
合同包1：预算金额16万元					
	预装材料计算软件PWmat的平面波赝势方法HSE杂化泛函GPU计算服务器	1	16万元	16万元	
合同包2：预算金额××万元					

单位负责人（签字）：[Signature]

财务部门（签字）：[Signature]

主管部门（签字）：[Signature]

注：1、此表一式两份，一份报资产与实验室管理处，一份申请人保存备用；

2、大型仪器设备（单件10万元以上）需提交论证报告；

3、所报仪器设备要分类填写；采购项目名称不能包含品牌信息。

4、使用方向包括：教学、科研、行政、生活、生产、技术开发、社会服务、其它（使用方向如果为科研，请注明科研方向或所用于的

附:

1. 专家论证意见及专家姓名、工作单位、职称。

单一来源专家论证意见表

采购单位	河北工业大学
项目名称	预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器
专家 1 论证意见	姓名: 黄阳 职称: 教授 工作单位: 河北工业大学 预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器具备快速精确计算 200 个原子以上 HSE 杂化泛函的能力, 是目前市场上唯一具备上述性能的产品, 是目前功能材料计算模拟的重要研究工具。北京量子并行科技有限公司是该产品在中国境内的唯一代理商, 符合单一来源采购要求。 同意采用单一来源方式采购。
专家 2 论证意见	姓名: 刘如华 职称: 副教授 工作单位: 北京航空航天大学 GPU 材料计算模拟可有效和快速的解决功能材料研究中的材料结构模拟和性能预测等科研问题, 对于新材料的研发具有重大的促进意义。北京量子并行科技有限公司是预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器在中国境内的唯一代理商, 具有专属性和唯一性, 符合单一来源采购要求。 同意单一来源采购申请
专家 3 论证意见	姓名: 刘自成 职称: 副教授 工作单位: 福州大学 预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器与传统高性能计算服务器相比具有高密度、众核并行、省空间、空调制冷要求低等优点。北京量子并行科技有限公司为该设备在中国的唯一代理商, 具有专属性和唯一性, 符合单一来源采购要求。 同意单一来源采购申请
专家综合意见	预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器在单节点上可实现上万 GPU 微核心的并行计算, 避免了跨节点的数据通讯, 大大节省了计算开销, 缩短了新材料研发周期, 提升了科研效率, 是功能材料研究中不可或缺的研究工具。该设备具有专属性, 只能从唯一供应商处获取 (北京量子并行科技有限公司), 具备单一来源采购条件。 综合论证同意此项目单一来源采购方式申请。
使用单位意见	同意论证专家的意见, 建议进行单一来源方式的采购。

注: 专家论证意见要对此项目供应商是否具有唯一性提出明确意见。

河北工业大学“预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器”项目单一来源方式采购申请

河北省政府招标采购管理部门:

河北工业大学申请采购“预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器”，按中华人民共和国财政部令第 74 号《政府采购非招标采购方式管理办法》拟采用单一来源方式采购,该项目拟由 1 家公司承担。现将有关情况向省政府招标采购管理部门提出申请。

拟采购产品明细及唯一供应商:

序号	预算金额(万)	设备名称	单一来源供应商
1	16	预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器	北京量子并行科技有限公司

- 1、拟采购的货物或服务说明：河北工业大学采购“预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器”项目。
- 2、采用单一来源采购方式原因及相关说明：

本课题组正在进行的六方氮化硼和 MXene 在光电、催化和储能领域的研究涉及相关的材料结构模拟和材料物性计算，需要使用 HSE 杂化泛函来精确计算上述材料的 band structure（能带结构）和 DOS（电子态密度）。目前本课题组现有计算资源只能完成 20 个原子规模的 HSE 计算模拟，本课题组需要超过 200 原子规模的 HSE 计算能力，用于描述相关材料性质，完成既定研究目标。

预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器,具备计算 200 原子以上 HSE 杂化泛函的能力,例如对 216 原子砷化镓(GaAs)体系,基于 HSE06 杂化泛函使用平面波赝势方法进行 SCF 电子自洽计算,达到收敛精度总时间不超过 1000 秒,是目前市场上唯一具备上述性能的产品,无其他替代方案。

传统材料计算服务器在完成大体系多尺度计算的时候需要采用跨节点、多 MPI 并行等策略，随着计算尺度增大，计算开销呈指数级增长，国内典型平面波密度泛函计算软件一般到达 128 核并行规模，计算效率就会大大降低。预装 GPU 计算软件的 GPU 服务器在单节点上实现上万 GPU 核的并行计算，避免了跨节点的数据通讯，大大节省了计算开销，缩短了新材料研发周期，提升了科研效率。同时，预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器与传统高性能计算服务器相比具有高密度、众核并行、省空间、空调制冷要求低等优点，北京大学、中国科学院、清华大学、复旦大学等国内知名课题组均采购类似设备从事材料理论计算模拟研究，我课题组研究方向明确，教职工及学生计算任务重，此设备能够缓解计算量紧张的局面，所以申请购买。

北京量子并行科技有限公司是预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器在中国境内的唯一代理商，为此采购项目，我校组织了相关领域的专家进行了论证，专家意见见附件，特此申请河北工业大学“预装材料计算软件 PWmat 的平面波赝势方法 HSE 杂化泛函 GPU 计算服务器”项目按照单一来源方式采购！

以上申请望河北省政府招标采购管理部门审核批准！

申请单位（盖章）：河北工业大学
负责人签字：郭忠路
时间：2019.5.17



项目授权书

河北工业大学：

PWmat 基于平面波密度泛函理论 GPU 计算软件 V1.5是北京龙讯旷腾科技有限公司自主研发的计算软件，已取得计算机软件著作权，著作权号：2016SR021226，该软件只以预装在 GPU 服务器的方式进行销售，不单独售卖。

北京量子并行科技有限公司（以下简称“量子并行”）是 PWmat 基于平面波密度泛函理论 GPU 计算软件 V1.5 在中国境内唯一代理商，量子并行负责对外销售预装该软件产品的 GPU 服务器，特此说明。

北京龙讯旷腾科技有限公司

2019年4月15日

