**上海科技大学**

**AI4M研学一体创新平台Ⅰ期**

**技术服务采购需求**

上海科技大学

# 采购需求

## 总体目标

本次采购旨在建设“AI4M研学一体创新平台I期”软件系统，服务于上海科技大学“数字材料”双一流学科建设战略，围绕材料科学研究范式转型与人才培养模式升级的双重需求，构建一个面向AI for Materials（AI4M） 研究与教学的数智化研学平台。平台将作为支撑“科研—教学—服务”融合发展的智能中枢，汇聚材料实验与模拟数据、AI算法工具、算力资源和教学内容，推动“数据驱动—表征牵引”的材料研究范式落地。

平台将整合并扩展我校前期已建成的AIMS智能分析平台、Materials Data Valley、高性能计算资源等软硬件基础能力，重点围绕能源催化、拓扑量子、半导体器件等材料体系，部署结构建模、光谱学分析、物理性能预测等典型研究任务所需的模拟与AI工具链，如第一性原理计算、分子动力学、图神经网络、生成模型、光谱反演等。平台需具备Notebook代码实训、AI模型微调、科学任务管理等一体化功能，支持课程学习与科研探索深度融合。

在教学方面，平台将建设覆盖“计算材料学”“材料性质AI建模”“谱图分析与解谱”“AI辅助科研”等方向的核心课程与Notebook案例库，内容涵盖算法原理、数据处理、模型训练、结果可视化、文献解析等环节，形成可复现、可互动的AI4M课程体系，支持我校材料、物理、化学等专业学生的实操能力提升与计算思维培养。

平台定位于双一流数字材料学科建设的关键基础设施，将为科技部国家重点研发计划等重大科研任务提供“表征数据—AI建模—科研验证”全链条支撑，为AI4S专项研究提供教学示范与数据训练平台，为我校培养面向未来的材料+AI交叉复合型人才提供系统支撑。平台建设将显著提升我校在AI for Science 前沿方向的基础能力与生态布局，构筑“科研数据—算法模型—教学资源”转化闭环，为打造国际一流材料科学研究与教育体系奠定基础。

# 建设需求

## 设计原则

系统在设计过程中除考虑满足当前招标书建设要求外，还应当满足后续系统平滑扩展升级要求，因此总方案设计遵循如下设计原则。

（1）开放性

引入业界开放的、成熟的标准，从而保证系统成为符合标准又不失灵活性的开放平台，为未来的系统的灵活开放奠定基础。

（2）先进性

各工具基于统一的整体架构，采用先进的、成熟的、可靠的技术与软硬件平台，保证基础数据平台系统易扩展、易升级、易操作、易维护等特性。

（3）可扩展性

随着新的业务需求的不断产生，支持基础数据模型、应用分析模型、前端应用的扩展性；支持在统一系统架构中服务器、存储、I/O设备等的可扩展性。

（4）安全性

按国家标准、行业标准、安全规范等实现数据安全管理。

（5）可维护性

建立统一化可视化的运维体系，数据处理各个环节，能对系统进行相应的性能管理和日志监控。

## 平台架构要求

### 系统架构

项目需要参考大学的应用架构规划和业务各项需求的关联性，保持系统架构以高内聚、低耦合为系统建设标准，最终使应用系统具有清晰的和相对独立的软件层次，系统内各个模块之间耦合度小为基本架构，兼具高弹性、高性能、高可靠性并具有较高业务敏捷性的业务支撑平台。

支持多种开放技术标准，应该提供标准的接口接入能力，便于扩展应用功能与其它系统的互联。

### 数据架构

应根据上海科技大学现有的数据情况，设计合理的数据体系，并在业务操作性上有一个合理的平衡和可扩充性。数据体系的设计应兼顾大学现有相关系统的接口要求。

应基于数据存储需求，并在对各类数据的数据量大小、业务应用特点进行充分分析的基础上，设计合理的数据存储方案，方案中应充分考虑每一类数据的存储位置、存储方式、数据访问方式等。

数据访问层设计应满足可移植的、适应数据结构变化的设计。

### 应用架构

应用系统需采用集群或者分布式的部署方式，满足目前相关的性能指标，由于业务发展导致系统性能不能满足业务要求时，可通过横向增加服务节点，满足新的性能需求。

系统需要考虑校内后续扩展性要求，能够对出现问题的应用服务，保证不影响对外服务。并在处理完相关问题后已恢复的应用服务或实例能够在不影响现有服务情况下重新对外提供服务。

## 核心功能要求

### 课程相关模块

1. **教学权限管理**：实现教师与学生的角色区分，教师具备课程开设、课件管理、学生管理、作业管理、数据集管理等权限。
2. **课程创建与展示**：支持教师快速上传Notebook、视频、PPT课件等多种教学材料；课程主页应包含课程介绍、讲师信息；课程应提供讨论区。
3. **作业管理**：支持教师在班级中创建、修改、删除作业，支持布置单人作业和小组作业（可规定小组人数），并可在线查看作业提交情况及批改。
4. **检索：**支持通过课程名等进行课程的模糊匹配。
5. **预装课程资源**：需要依托科研与教学团队，获取知识产权与课程内容的授权，不可简单依赖已有公开资源。提供不少于10门AI for Materials等相关课程资源，覆盖“材料3D结构预训练模型”“材料性质AI建模”“实验室自动化与智能化”“AI辅助科研”“AI辅助材料产业”等方向的核心课程。

### 在线编程代码本Notebook相关模块

1. **编程环境：**提供支持 Python 的在线编程与代码提交环境，具备编译与运行功能。在线运行环境必须确保不同用户作业的隔离与安全，技术上需要容器化与分布式调度支持。
2. **多模态Notebook：**Notebook 中支持编写代码、编辑文本、插入图片等；可连接计算节点直接执行代码，须支持预装课程中Notebook跑通。
3. Notebook导入与编辑：支持在线创建与导入本地Notebook，支持编辑、自动保存功能。
4. **公开 Notebook 展示与推荐：**支持 Notebook 公开发布，平台可按点赞数、发布时间筛选推荐，展示作者信息及互动数据。
5. **预装Notebook资源：**Notebook 资源需覆盖前沿研究方向，需由项目团队编制200篇以上的实训案例，且需保证运行环境长期可维护。要求覆盖电池、催化等材料体系，及材料筛选、物理性能预测等典型研究任务；对于所提供的Notebook实训案例，给出推荐的实训环境、所需资源规格等信息，保证实训案例代码在网页上也能直接编辑和运行。
6. 要求在过往产品中已具备可公开阅读、运行代码、保存的Notebook不少于1000篇。

### 文件资源管理模块

1. **空间管理：**存储资源与项目绑定，划分为项目共享空间（/share）与个人私有空间（/personal），便于团队协作与个体管理。
2. **目录及导航：**提供清晰可视化的**目录结构浏览**与导航能力。

还具备完整的文件管理功能，如下：

1. **文件来源：**支持本地上传、数据集挂载等多渠道接入文件；支持通过平台上的开发机执行GitHub操作。
2. **文件操作**：支持文件/目录的在线新建、复制、移动、重命名、下载等基本操作。
3. **可视化编辑**：支持 .py、.html 等多种格式文件的在线预览与编辑。
4. 要求支持为项目创建共享数据集，并具备成员可见性权限设置与数据集版本控制的功能，不同于普通网盘类产品，数据集挂载、版本控制与权限设置涉及复杂的存储与分布式文件系统管理。
5. 支持材料学预训练模型数据集。

### 科研计算与任务管理模块

1. **项目管理：**支持自行创建项目和参与他人创建的项目；项目中支持添加多个成员；支持给成员设置管理员和普通成员的角色；支持项目与存储绑定，所有成员均可共享统一存储；支持项目与节点绑定；支持项目与数据集绑定。
2. **任务调度管理：**任务应展示任务ID、任务状态、运行时间等基本信息；支持通过任务状态、任务运行时间等信息进行筛选；应用任务支持全选、终止、删除等操作。
3. **镜像管理：**提供基于云原生技术的容器镜像制备、修改、删除、分享；预装镜像支持可视化查看包含的软件、镜像大小、创建时间；要求支持通过创建人、名称等对镜像进行检索。
4. **预装镜像资源：**要求根据课程实训需求，预装PyTorch、TensorFlow 等机器学习框架；提供30款以上镜像环境，必须包含AIforMaterials相关 镜像资源，包括DeePMD-kit、DPGEN、LAMMPS、CP2K、ABACUS等，以满足师生在材料学数据准备、编译调试、任务计算等场景中的使用需求。
5. **算力资源对接：**要求具备对接校内算力资源池的能力，并在任务调度中使用该资源；平台内具备完整费用结算闭环机制。同时要求满足灵活的算力调度策略配置，支持按照用户、镜像、规格等多维度设置策略，多集群可以按照优先级、百分比、水位线等方式进行调度。

### 数据库相关模块

1. 数据库检索：支持元素周期表检索形式；支持直接输入化学式或分子式进行检索；支持提供绘制分子2D结构，并对绘制的分子2D结构直接检索功能。
2. **数据导入导出：**支持数据以表格格式（xlsx及csv）导入导出；支持数据的导入以及计算结果入库。
3. **数据统计分析及可视化：**支持线性/非线性回归、方差分析等统计方法；具备多种图形展示（柱状图、饼图、散点图、小提琴图等）；支持均值、中位数、方差等统计计算。
4. **数据清洗：**自动检测与处理缺失值、异常值，支持多种清洗策略（均值、中位数、自定义值填充等），异常值高亮标识。
5. **数据表管理：**支持自定义表结构修改，支持新建多个数据表，支持数据多表关联。
6. **数据安全管理：**支持权限角色划分和管理、数据库操作审批、操作记录查询检索、导出日志等数据安全功能。支持对平台上发生的异步操作来给相关用户发送通知；支持用户对特定消息进行查看和筛选。
7. **数据文件预览**：要求实现分子轨迹文件dump、lammpstrj，分子结构信息 pdb、sdf、mol、mol2文件的在线预览。

## 性能要求

### 稳定可靠

运行稳定、安全可靠、实用性强，若软件部署环境可用率可满足在99.5%以上，系统在访问高峰期的接口可用率达到99%以上。

### 高效响应

在软件部署环境支持下：可根据数据、资源访问可用率对数据、资源进行冷热物理存储分离，有效使用匹配基础设施资源；同时，前台用户级应用型页面响应时间1秒以内，后台用户级带有复杂算法查询的页面在3秒以内响应。

### 兼容适应性

浏览器兼容性好，支持Chrome、Edge等主流桌面操作系统内核浏览器应用软件浏览和操作。

## 数据安全要求

除了保证平台的流畅性和良好的操作性能外，由于平台中包含用户的人员信息和数据资产，涉及到学校和学生的信息安全和个人隐私，因此安全性尤为重要。为确保系统安全，该平台应满足以下几点要求：

### 访问控制

对用户访问网络资源的权限进行严格的认证和控制。例如，进行用户身份认证，对口令等信息进行加密、更新和鉴别，设置用户访问数据的权限等等。

### 权限安全

在平台上，权限是基于最小权限原则进行分配的，即用户只能获得完成其任务所必需的最少权限。这不仅可以减少安全风险，还可以避免不必要的操作错误。权限的具体分配包括：

**任务管理权限**：允许用户提交、修改、删除和查询计算任务。

**配置权限**：允许用户或管理员修改系统设置功能。

### 数据备份

数据备份是信息系统安全策略中必须的一步，是增强数据可靠性的一项重要内容，能够最大限度地减少因软硬件故障造成数据丢失导致的不良后果。平台应具备自动化的数据备份机制，确保关键数据的定期备份，并保证备份数据的安全性。

### 访问控制安全

访问控制是数据库基本安全的重要核心，包含用户帐号管理、密码控制策略、用户权限控制和用户身份认证等方面。平台必须实现基于角色的访问控制，确保用户访问权限的合理分配，并进行严格的身份验证。

# 工程实施服务要求

## 时间进度要求

本项目建设周期为自合同签订生效之日起3个月内完成本项目建设并通过验收，交付进度要求如下：

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 进度名称 | 主要工作内容 | 完成时间（合同签订后起算） |
|  | 项目立项 | 完成项目立项 | 1周内 |
|  | 系统详细设计 | 了解业务含义和业务流程，并进行需求分析、详细设计。 | 2周内 |
|  | 开发测试 | 代码开发、单元测试、集成测试 | 2个月内 |
|  | 中期验收 | 检查项目进度，需求完成度 | 2个月内 |
|  | 系统交货 | 系统交货，用户使用 | 3个月内 |
|  | 试运行 | 系统试运行 | 3个月内 |
|  | 终验 | 系统终验 | 3个月内 |

## 实施方案

本项目应组建完整、优秀的项目团队，包括：

1. 项目经理1名，本科及以上学历，有丰富的项目管理经验，提供信息系统项目管理师（高级）证书的优先考虑；
2. 团队成员为理工科专业的博士学位，具备相关软件开发或研发类经验的优先考虑；
3. 团队成员至少11人（包括项目经理）；
4. 项目建设期间，驻场的项目团队成员不少于1人。

## 实施过程管控要求

### 项目管理要求

（1） 项目目标

* 中标人应充分理解项目的目标、范围和交付成果。
* 中标人应按照项目的时间表、里程碑和关键路径交付。

（2） 项目计划和组织

* 中标人应提供详细的项目计划，包括项目启动、执行、控制和收尾的阶段。
* 中标人应指定项目经理和团队成员的角色和职责。
* 中标人应确保项目团队具备必要的技能和经验。

（3） 项目沟通和协调

* 中标人应建立有效的沟通机制，确保项目团队之间和招标人等的信息流畅。
* 中标人应定期组织会议、报告和进展更新，以确保所有相关方了解项目的状态和进展。

（4） 质量管理

* 中标人应制定质量管理计划，确保项目交付的成果符合质量标准和相关规范。
* 中标人设定质量指标和评估方法，对项目过程和结果进行监控和评估。

（5） 变更管理

* 中标人应建立变更控制程序，确保所有项目变更经过适当的评估、批准和跟踪。
* 中标人应最小化项目变更对进度、成本和资源的影响，并及时通知相关方。

（6） 项目文件管理

* 中标人应建立有效的项目文档管理系统，确保项目文件的存档、保密和共享。
* 中标人应对项目文件进行版本控制，确保所有相关方都使用最新版本的文档。

### 项目风险及控制要求

中标人应对项目的风险要有详细的分析，无论是环境因素、人力因素还是物质因素的原因，都应有先期预见性，要有可靠的控制手段加以防范，将风险所造成的危害降到最低点。

（1） 风险识别与评估

* 中标人应对项目进行全面的风险识别和评估，包括内部和外部的潜在风险。
* 中标人应确定每个风险的概率、影响程度和优先级，以便有效地管理和控制风险。

（2） 风险计划和应对策略

* 中标人应制定详细的风险管理计划，明确各种风险的应对策略和控制措施。
* 中标人应确定适当的风险避免、降低、转移或接受策略，并制定相应的应急计划。

（3） 监测和控制风险

* 中标人应建立有效的风险监测和控制机制，定期跟踪风险的状态和进展。
* 中标人应及时识别新出现的风险，评估其影响，并采取适当的措施进行控制和调整。

（4） 风险沟通与报告

* 中标人应建立透明的风险沟通渠道，确保及时向项目相关方传达风险信息。
* 中标人应编制风险报告，包括风险的描述、影响程度、应对措施和进展情况，并及时通报相关利益相关者。

（5） 培训与意识提升

* 中标人应为项目团队提供风险管理培训，增强他们对风险管理的意识和能力。
* 中标人应鼓励项目团队主动参与风险识别和控制，提供适当的激励措施。

（6） 定期回顾与改进：

* 中标人应定期回顾项目的风险管理实践，总结经验教训并进行改进。
* 中标人不断优化风险管理策略和控制措施，以规避项目可能遇到的问题及不可控因素。

## 配套技术服务要求

1. 要求对接学校统一认证系统。
2. 要求辅助平台建设3门AI4M相关课程，包括课程内容、课件案例等准备的建议与答疑。
3. 要求配合学校信息安全要求对主机系统和软件平台漏洞进行修复。

## 验收交付要求

招标人有权委托第三方组织对本项目进行全程监督管理，有权委托第三方组织协助招标人完成项目的功能测评、安全测评和验收工作。中标人应按照第三方和招标人的要求配合完成相关工作。

文档提供的要求：

（1）《需求规格说明书》

（2）《概要设计说明书》

（3）《详细设计说明书》

（4）《系统部署文档》

（5）《系统测试报告》

（6）《接口设计文档》

（7）《用户使用手册》

## 培训要求

系统培训需以中文授课方式提供周详、合理的培训内容，同时还需提供至少一次首次培训和后期持续培训的安排，可实施，有针对性，投标人应将所有培训费用（含路费、住宿费及培训教材费）计入总价。

培训对象：普通业务人员的应用培训、系统维护人员的专业技术培训等。

培训内容：系统设计思想和结构、开发工具、安装指南、业务平台功能操作和运营后台管理平台操作等。系统正式运行前，要制订详细的培训计划，包括但不限于系统管理员培训，安全培训及相关产品根据不同业务角色进行相关内容的使用培训等不同层面的培训。

所需的费用应包含在投标报价中。

中标人认为有利于采购人的其他优惠条款应单独列明。

# 售后服务要求

1. 供应商应在保证安全和质量的前提下提供技术服务。

2）供应商应提供按合同规定验收合格之日起不少于5年的免费维保服务。

3）在需求发生变化时，在双方协商的基础上，供应商根据协商结果对系统进行修改。

# 验收要求

（1）本项目验收将由采购人组织进行。乙方提供系统开发、测试、部署等服务，并且运行正常，提供测试报告，通过甲方组织的验收评审会。

（2）本项目连续2次验收未获通过，采购人有权解除合同并按照合同约定的违约条款处理。

# 企业能力要求

1. 供应商具有ISO9001认证证书、ISO20000认证证书、ISO27001认证证书的优先考虑。
2. 供应商具有材料计算领域相关专利或软件著作权证书的优先考虑。