



Sveučilište u Zagrebu
Sveučilišni računski centar

Znanstveni softver za potrebe projekta Hrvatski znanstveni i obrazovni oblak (HR-ZOO)

Grupa III.

Znanstveni softver za simulaciju biomolekula

-

FUNKCIONALNA SPECIFIKACIJA

Ovaj projekt sufinanciran je sredstvima Europske unije iz Europskog fonda za regionalni razvoj

Zagreb, kolovoz 2022. godine

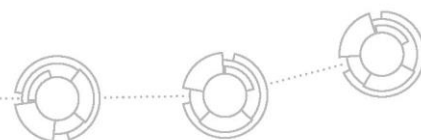


Projekt je sufinanciran sredstvima Europske unije
iz Europskog fonda za regionalni razvoj



Sadržaj

1. TEHNIČKI UVJETI	3
2. LICENCA.....	3
3. FUNKCIONALNOSTI	3



1. Tehnički uvjeti

Znanstveni softver za simulaciju biomolekula (u daljnjem tekstu Softver) mora podržavati operacijski sustav Red Hat Enterprise Linux 8, koji će se koristiti na HR-ZOO infrastrukturi i napredne računalne resurse HR-ZOO infrastrukture.

Softver će biti instaliran isključivo na računalnim resursima u HR-ZOO infrastrukture na sjedištu HR-ZOO ZG2.

Softver mora omogućiti paralelno izvođenje na računalnom klasteru za računarstvo visokih performansi.

Softver mora sadržavati podršku za ubrzavanje izvođenja pomoću grafičkih procesora (GPU).

Softver mora omogućiti rad u komandno linijском sučelju.

2. Licenca

Softver moraju moći koristiti svi korisnici HR-ZOO infrastrukture – članovi znanstvene i akademske zajednice za potrebe istraživanja i obrazovanja. Korisnici neće koristiti Softver u komercijalne svrhe.

Licenca mora omogućiti korištenje svih funkcionalnosti Softvera na neograničeno vremensko razdoblje te na neograničenoj količini računalnih resursa.

Licenca mora omogućiti pristup svim nadogradnjama unutar minimalno 4 godine.

Ponuditelj je dužan osigurati kontakt za podršku u periodu od minimalno 4 godine putem kojeg će biti moguće prijaviti i riješiti sve potencijalne nejasnoće i probleme u korištenju Softvera.

3. Funkcionalnosti

Softver mora omogućiti provođenje simulacija molekulske dinamike temeljene na molekulskoj mehanici.

Softver mora omogućiti simulacije kvantne i molekulske mehanike na načine:

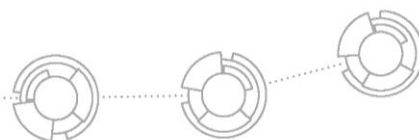
- semi-empirijskog zanemarivanja diatomskeg diferencijalnog poklapanja (NDDO) i metode funkcionala gustoće čvrste veze (DFTB)
- simulacija koje se temelje na "ab initio" teoriji valne funkcije (WFT) i teoriji funkcionala gustoće (DFT)
- "ab initio" kvantno-mehaničke tj. molekulsko-mehaničke simulacije koje se temelje na metodama Hartree-Fock.

Softver mora omogućiti simulacije optimizirane za paralelno računanje implementacijom metoda PMEMD (engl. *Particle Mesh Ewald Molecular Dynamics*) i generaliziranom Born.

Softver mora omogućiti simulacije REMD (engl. *Replica Exchange Method*).

Softver mora omogućiti specifikaciju različitih polja sile:

- bjelančevina,
- DNK,
- RNK,
- ugljikohidrata,
- lipida,



- vodenih otopina s ionima,
- organskih molekula,
- modificiranih aminokiselina,
- nukleotida.

Softver mora omogućiti simulacije koristeći kompleksna polja sile AMOEBA i GEM.

Softver mora omogućiti stvaranje i optimizaciju parametara polja sila metalnog centra.

Softver mora omogućiti proračun elektronske strukture na organskom i biomolekularnom sistemu s opcijama:

- proračuna DFT s dostupnim funkcionalima GGA, LDA i hibridni-GGA,
- optimizacije gradijenta i geometrije,
- energije Hartree-Fock,
- analize Mullikenovog naboja.

