



Sveučilište u Zagrebu  
Sveučilišni računski centar

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

### **Grupa V.**

## **Znanstveni softver za računalnu i kvantnu kemiju optimiziran za grafičke procesore**

-

## **FUNKCIONALNA SPECIFIKACIJA**

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

Zagreb, kolovoz 2022. godine

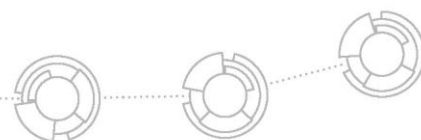


Projekt je sufinanciran sredstvima Europske unije  
iz Europskog fonda za regionalni razvoj



## Sadržaj

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



## **1. Tehnički uvjeti**

Znanstveni softver za računalnu i kvantnu kemiju optimiziran za grafičke procesore (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 infrastrukturu 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) na sustavu s više GPU-ova.

Softver mora omogućiti rad u komandno linijskom 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 složenih izračuna u području računalne i kvantne kemije s naglaskom na optimalno korištenje GPU-ova.

Softver mora omogućiti računalno-kemijske proračune za složene molekulske sustave, koristeći se metodama Hartree-Fock i teoriji funkcionala gustoće (DFT).

Softver mora omogućiti provođenje simulacije "ab-initio" molekulske dinamike.

Softver mora posjedovati punu podršku za osnovne funkcije s, p i d tipa.

Softver mora omogućiti provođenje optimizacije molekulske geometrije te optimizacije molekulske geometrije prijelaznih stanja za minimume potencijalne plohe, uz fiksne geometrijske parametre i posjedovati mogućnost skeniranja potencijalne plohe po jednom ili više geometrijskih parametara.

Softver mora omogućiti proračune optimizacije pobuđenih stanja.

Softver mora omogućiti proračun vibracijskih frekvencija i vertikalnih pobuđenih stanja, kako u vakuumu, tako i u kontinuiranom polarizabilnom mediju.

