



Для эксплуатации приложения GEMS (Grid Enabled Molecular Simulator – "Молекулярный симулятор на основе грид-технологий") основана виртуальная организация вычислительной химии (Computational Chemistry Virtual Organisation (CompChem VO)). В грид-инфраструктуре размещены и работают в режиме нормальной эксплуатации ещё несколько приложений для вычислительной химии. Готовится размещение в инфраструктуре EGEE новых приложений; принимаются меры к расширению сотрудничества между научными группами, работающими в области вычислительной химии.

Приложение **GEMS** используется для моделирования динамики реакций в сложных химических системах.

**ABCtraj** рассчитывает наблюдаемые величины атом-диатомного взаимодействия в газообразной фазе. События генерируются методом Монте-Карло. Программа подключена к среде молекулярной виртуальной реальности, где на мониторы выводятся результаты моделирования.

**Venus** рассчитывает сечения и коэффициенты скорости элементарных химических реакций, моделируя столкновения атомов и молекул при начальных условиях, полученных методом Монте-Карло. Для каждого столкновения – от исходных элементов до продуктов реакции – решаются уравнения Хэмилтона, описывающие движение атомов.

Приложение **DL-Poly** моделирует молекулярную динамику сложных систем. Оно стало стандартом де-факто в сообществах вычислительной химии и вычислительной биологии.

Приложение **RWAVEP** выполняет квантовомеханические расчёты вероятности разных химических реакций, применяя подход, основанный на понятии волнового пакета. Для разных наборов исходных состояний генерируются разные события.

**GAMESS** – программа для выполнения *ab initio* расчётов в области квантовой молекулярной химии, позволяющая вычислять волновые функции SCF. Возможны следующие корреляционные поправки к этим волновым функциям: учёт зависимости взаимодействия от конфигурации; поправки на основе теории возмущений второго порядка; поправки на основе представлений о спаренных кластерах; возможно также приближение в рамках функциональной теории плотности.

**Gaussian** – пакет программ для работы над электронной структурой, широко распространённый среди учёных, ведущих исследования как в установившихся, так и в появляющихся областях химии. Исходя из основ квантовой механики, Gaussian предсказывает свойства молекулярных систем в разных условиях. Gaussian – коммерческий продукт, и из-за лицензионных ограничений доступ к нему возможен только через виртуальную организацию Gaussian. Подробнее о возможности участия в этой организации: <http://egee.grid.cyfronet.pl/Gaussian>

В ближайшем будущем виртуальная организация CompChem развернёт новые приложения, например:

- **COLUMBUS** – комплект программ для сложных расчётов *ab initio* электронной структуры молекул. Программы предназначены, главным образом, для расширенных многоссылочных расчётов основного и возбуждённых состояний электронной оболочки атомов и молекул.
- **Dalton** – мощная программа для расчётов в квантовой химии. Определяет молекулярные свойства, исходя из волновых функций SCF, MP2, MCSCF. Области наибольшей эффективности этой программы – магнитные и зависящие от частоты электрические свойства, а также поверхности молекулярной потенциальной энергии – как для статических, так и для динамических исследований.
- **CPMD** (Car-Parrinello Molecular Dynamics) – основанная на понятии плоской волны и псевдопотенциалов распределённая реализация теории функционалов плотности. Разработано, в частности, для расчётов *ab initio* молекулярной динамики.

Последнее обновление: 04/02/2008

- **ACES II** (Advanced Concepts in Electronic Structure – "Передовые концепции электронной структуры") – пакет программ для сложных вычислений ab initio в области квантовой химии. Его главное достоинство – точный расчёт энергий и свойств атомов и молекул на основе методик многих тел – например, пертурбационной теории многих тел и методики спаренных кластеров для учёта корреляции электронов.
- **Turbomole** – пакет программ для расчётов ab initio электронной структуры. Наиболее значительные особенности Turbomole – полупрямые алгоритмы с настраиваемыми потребностями в памяти и пространстве на диске; полное использование всех точечных групп; эффективное вычисление интегралов; устойчивая и точная работа гридов для численного интегрирования. Turbomole – коммерческий продукт, и доступ к нему будет открыт через отдельную виртуальную организацию.
- **NAMD** – распараллеленная объектно-ориентированная программа для расчётов в области молекулярной динамики, а именно: требующего значительных ресурсов моделирования больших биомолекулярных систем.

Кроме того, виртуальная организация CompChem будет экспериментировать с системой **CHARON**, чтобы создать настраиваемый пользователем интерфейс с гридом, отвечающий специфическим требованиям сообщества вычислительной химии.

В EGEE приветствуются заявки на размещение новых приложений. Узнать подробнее о том, как включиться в проект, а также о приложениях, работающих в EGEE, можно на пользовательском портале о приложениях: <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>