

Simulazioni MD-REM di GPM12

1 Descrizione

Si applica il metodo di scambio di repliche (REM) ad una simulazione MD. Il metodo adottato è lo "Hamiltonian Replica Exchange": le varie repliche, invece di avere temperatura crescente, hanno potenziale scalato di un fattore decrescente. Il risultato è lo stesso, ma così

- si riduce il flusso di dati che vengono scambiati.
- si lavora sempre a temperatura ambiente: le molecole non sono calde e non c'è bisogno di ridurre il time step, o simili

Nella terminologia del programma ORAC, una "**replica**" ($1, 2, \dots, n$) individua un determinato campo di forze, cioè fattore di scala del potenziale; ciascuna **traiettoria**, che viene registrata su una directory separata (PAR0000...), è soggetta via via a scambi di potenziale, cioè di replica. Per ricostruire la statistica della replica 1 (a potenziale pieno) si devono raccogliere tratti di traiettoria della replica nelle varie directory.

I dati aggiuntivi necessari per una simulazione MD-REM sono:

1. numero di repliche
2. fattore di potenziale di ciascuna replica
3. l'intervallo di tempo per i tentativi di scambio

2 Esecuzione

2.1 preparare ambiente parallelo e dati

Si deve usare la versione parallela di ORAC (ad es. `orac-p`) e gestire l'esecuzione parallela con MPI

1. preparare un file `mpd.hosts` contenente la lista dei nodi da usare:

```
_____ mpd.hosts _____  
nd12  
nd14  
nd17  
nd18
```

2. far partire MPI con il numero di nodi richiesto (N.B. ogni nodo ha più processori; il numero delle repliche viene specificato quando si lancia il programma):

```
#> mpdboot -n 4
```

3. input (partenza fredda)

```
_____ rem-cold.in _____  
&REM  
  SETUP 0.75 1  
  REMSTEP 100.  
  PRINT 100000.  
&END  
...
```

Nella riga **SETUP** si specifica soltanto il valore minimo del fattore di scala del potenziale (0.75); i fattori sono scalati in modo uniforme nell'intervallo $1 - 0.75$

Con valori dell'ultimo parametro $\neq 1$ i fattori sono letti dal file **REM.set** ($= 2$), oppure ricavati da un restart ($= 0$).

4. lanciare il job parallelo

Per lanciare il programma con 16 repliche:

```
#> mpiexec -n 16 orac-p < rem-cold.in
```

5. restart

Per proseguire un run precedente, oltre al normale input per un restart (nei blocchi **&RUN** e **&INOUT**) va modificato anche il blocco **&REM** specificando che si tratta di un restart:

```
rem-warm.in
&REM
  SETUP 0.75 0
  ...
&END
...
&RUN
  CONTROL 1
  ...
&END
&INOUT
  RESTART
    read ...
  END
&END
```

2.2 Simulazioni

- NVT (con NpT nella replica più “calda” l’acqua bolle)
- 8 repliche
- tempo totale = 20 ns, in tratti di 1 ns l’uno
- due simulazioni:
 - partendo da struttura piegata
 - partendo da struttura elongata