Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Curriculum "Struttura, dinamica e reattività chimica"

Struttura e Dinamica Molecolare di Sistemi Biologici - 2010/2011

Laboratorio 5 - (10 gennaio 2011)

Simulazioni MD-REM

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 tra i processi
- 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**" $(1, 2, ..., n)$ 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
   ```
   nd21
   nd22
   nd23
   nd24
   nd25
   nd26
   nd27
   nd28
   ```

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 8
   ```

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'intevallo $1 - 0.75$

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

Si possono anche specificare diversi fattori di scala per diverse porzioni del potenziale:

- *stretching, bending,* torsioni improprie
- torsioni proprie (diedri) e interazioni 1-4
- potenziale *non bonded*

rem-cold.in

```
&REM
  SETUP 1.0 0.01 0.5 1
  REMSTEP 100.
  PRINT 100000.
&END
...
```

in questo esempio si sono applicati fattori di scala minimi di 1.0 (niente scalatura), 0.01, e 0.5, rispettivamente, alle tre porzioni di potenziale. Una scalatura sulle torsioni molto maggiore di quella sul potenziale *non bonded* è efficiente in sistemi di cui si studi la stabilità conformazionale in soluzione.

4. lanciare il job parallelo

   Per lanciare il programma con 32 repliche:

   ```
   #> mpiexec -n 32 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)
- 32 repliche
- tempo totale = 20 ns, in tratti di 1 ns l'uno
- due simulazioni:
  - partendo da struttura piegata
  - partendo da struttura elongata