

Семинар 12: Использование пакета ACEMD

1 О программном пакете ACEMD

ACEMD – программный продукт, позволяющий производить вычисления молекулярной динамики на графических процессорах. Отличительной особенностью этого программного продукта является то, что он использует форматы файлов NAMD, что позволяет без труда сравнивать производительность NAMD и ACEMD.

2 Конфигурационный файл ACEMD

```
# CHARMM/AMBER joint benchmark as prepared by Charles Brooks 18-Oct-2000

# protocol params

# initial config
coordinates      5dhfr_cube.pdb
temperature      300

# integrator params

timestep         4
hydrogenscale    4
```

```
rigidbonds      all

# force field params
structure       5dhfr_cube.psf
parameters      par_all22_prot.inp
exclude         scaled1-4
1-4scaling     1.0
switching       on
switchdist      7.5
cutoff          9
fullelectfrequency 2

# output params
outputname      dhfr_out
dcdfreq         1000

# periodic cell
celldimension  62.23 62.23 62.23

# full electrostatics
pme             on
pmegridsizex   64
pmegridsizey   64
pmegridsizez   64

langevin on
langevintemp 300
langevindamping 0.1
```

```
energyfreq 1000
```

```
run 2000
```

3 Конфигурационный файл АСЕМД

```
# CHARMM/AMBER joint benchmark as prepared by Charles Brooks 18-Oct-2000
```

```
# protocol params
```

```
numsteps 250 # changed from 100 to get load balanced data -JCP
```

```
# initial config
```

```
coordinates 5dhfr_cube.pdb
```

```
temperature 300K
```

```
seed 314159
```

```
# integrator params
```

```
timestep 2.0
```

```
# force field params
```

```
structure 5dhfr_cube.psf
```

```
paraTypeXplor off
```

```
paraTypeCharmm on
```

```
parameters par_all22_prot.inp
```

```
exclude scaled1-4
```

```
1-4scaling 1.0
```

```
# CHARMM and Amber use rigid water and SHAKE H-bonds.
```

```
rigidBonds      all
switching       on
switchdist      7.5
cutoff          9.0
pairlistdist    11.0
# CHARMM and Amber use heuristic update that provides update about every 10 steps.
stepspercycle   10

# output params
outputname      dhfr_out
binaryoutput    no
outputTiming    10

# periodic cell
cellBasisVector1 62.23 0 0
cellBasisVector2 0 62.23 0
cellBasisVector3 0 0 62.23
cellOrigin       0 0 0

# full electrostatics
PME              on
PMEGridSizeX    64
PMEGridSizeY    64
PMEGridSizeZ    64
```