

## RISeT – Rete Informativa Scienza e Tecnologia

<i>Mittente</i>	IIC San Francisco - Ufficio Scientifico e Tecnologico
-----------------	---

<i>Titolo:</i> SOFTWARE PER LA SIMULAZIONE DELLA DINAMICA MOLECOLARE	
<i>Parole chiave</i>	Bioinformatica, chimica computazionale, GPU, open source
<i>Settori/sotto settori</i>	1-3-5-6-11-14-16
<i>Tipo di informazione</i>	Codice per simulazione

<i>Redazione</i>	Terenzio Scapolla
<i>E-mail Tel./fax</i>	<a href="mailto:tscapolla@sfiic.org">tscapolla@sfiic.org</a> T 415 788 7142 F 415 788 6389

### Testo

Nell'ambito del progetto [Open Molecular Mechanics](#) (OpenMM), in corso a Stanford sotto la guida di [Vijay Pande](#), è stato sviluppato un codice software (SW), scritto in linguaggio 'open source', che rende possibile l'esecuzione su PC di complesse simulazioni di dinamica molecolare (DM).

La simulazione DM può fornire rilevanti informazioni per la preparazione di vaccini e la decodifica di alcune malattie, come quelle di Alzheimer e Parkinson, che derivano dalla distorsione di movimenti molecolari. La simulazione DM ha sino ad oggi richiesto grandi potenze di calcolo, ottenute ad esempio da un supercalcolatore o da una rete di grandi calcolatori.

Secondo Pande simulazioni che prima richiedevano tre anni possono ora essere effettuate in pochi giorni. La prima versione di OpenMM, dedicata alla simulazione di piccoli sistemi molecolari, ha consentito la riduzione dei tempi di esecuzione sino ad un fattore 100.

Il risultato è ottenuto con l'impiego dei più recenti processori grafici (GPU), dotati di grandi prestazioni e costi contenuti. Si sfrutta, in modo particolare, l'accelerazione ottenuta con tecnologie hardware e SW che consentono alla GPU di sincronizzarsi con la CPU per ottimizzare le prestazioni.

Il SW non è legato ad un particolare tipo di GPU. Grazie ad un'interfaccia comune OpenMM consente la simulazione DM sulla maggior parte dei PC dotati di GPU, sfruttando tutti i vantaggi offerti dalla relativa architettura. In particolare, i programmi esistenti potranno essere eseguiti con le accelerazioni consentite da un calcolo parallelo massivo.

Il codice OpenMM è, ad esempio, alla base del progetto [Folding@home](#), che impiega le potenze di GPU e CPU di calcolatori sparsi in tutto il mondo per simulare il processo di "protein folding".

OpenMM è un progetto condotto in collaborazione con il centro [Simbios](#) (National Center for Physics-based SIMulation of BIOlogical Structures) realizzato a Stanford con fondi National Institutes of Health (NIH). Uno degli obiettivi di Simbios è la preparazione di strumenti computazionali in grado di far progredire la ricerca in biologia e medicina. Simbios è uno dei [National Centers for Biomedical Computing](#) realizzati nell'ambito dell'iniziativa NIH [Roadmap for Bioinformatics and Computational Biology](#).

Per scaricare il programma OpenMM: <https://simtk.org/home/openmm>

<i>Sito web</i>	<a href="https://simtk.org/xml/index.xml">https://simtk.org/xml/index.xml</a>
<i>Fonte</i>	Stanford University
<i>Data</i>	17 Febbraio 2009