

Как работать с WHAM

# Установка

- WHAM имеет разные реализации, попробуем использовать основную для нас Grossfield Lab WHAM ([http://membrane.urmc.rochester.edu/?page\\_id=126](http://membrane.urmc.rochester.edu/?page_id=126))
- Она сделана под линукс
- План установки
  - Сначала скачиваем архивчик с программой
  - Затем распаковываем его
    - `tar zxvf wham-release-2.0.9.tgz`
  - Переходим в нужную папку и устанавливаем одномерную версию
    - `cd ./wham/wham`
    - `make clean`
    - `make`
  - После этого в папке `wham` появится исполняемый файл (без расширения), его и будем в дальнейшем использовать

# Запуск WHAM (из мануала программы)

- Команда для запуска выглядит так:
- `wham [P|Ppi|Pval] hist_min hist_max num_bins tol temperature numpad  
metadatafile freefile [num_MC_trials randSeed]`
  - Где [P|Ppi|Pval] указывает периодичность координаты реакции, в нашем случае она не имеет периодичности, поэтому этот параметр опускаем
  - `hist_min [Å]` – минимальное значение координаты реакции (точки со значение координаты реакции ниже `hist_min` не будут рассматриваться)
  - `hist_max [Å]` - максимальное значение координаты реакции (точки со значение координаты реакции выше `hist_max` не будут рассматриваться)
  - `num_bins` – число столбцов (корзин, бинов) на которые бьется гистограмма (не должно быть слишком большим – малое кол-во точек в каждой корзине (могут оказаться пустыми), или слишком маленьким – неточный профиль)
  - `tol [ккал/моль]` – критерий сходимости по энергии (итерации заканчиваются, если энергия между итерациями изменилась меньше, чем на `tol`)
  - `temperature [K]` – температура, используемая для моделирования (300 K)

# Запуск WHAM (из мануала программы)

- Команда для запуска выглядит так:
- `wham [P|Ppi|Pval] hist_min hist_max num_bins tol temperature numpad metadatafile freefile [num_MC_trials randSeed]`
  - `numpad` – параметр количества выводимых значений для периодических координат реакции (у нас 0)
  - `metadatafile` – название файла с метаданными (см. след. слайд)
  - `freefile` – название выходного файла
  - `[num_MC_trials randSeed]` – параметры нужные для анализа ошибок

Итого наша команда выглядит примерно так:

```
wham 1.8 4.8 150 0.01 300 0 meta_Li Li_PMF_bin150.out
```

*Цветами раскрасила для простоты понимания=)*

# Файл метаданных

- Файл метаданных состоит из N строк, где N – количество промоделированных окон.
- Каждая строка имеет вид:
- `/path/to/timeseries/file loc_win_min spring [correl time] [temperature]`
  - Где `/path/to/timeseries/file` путь до файлов с данными моделирования
  - `loc_win_min [Å]` – положение минимума приложенного квадратичного потенциала ( $x_0$ )
  - `spring [ккал/(моль*Å2)]` – константа жесткости приложенного потенциала ( $k$ )
  - `[correl time]` и `[temperature]` мы использовать не будем!
- Значения разделяются знаками табуляции, а не пробелами!!!
- Все строки, что начинаются с # считаются комментариями

Напоминаю форму приложенного потенциала:

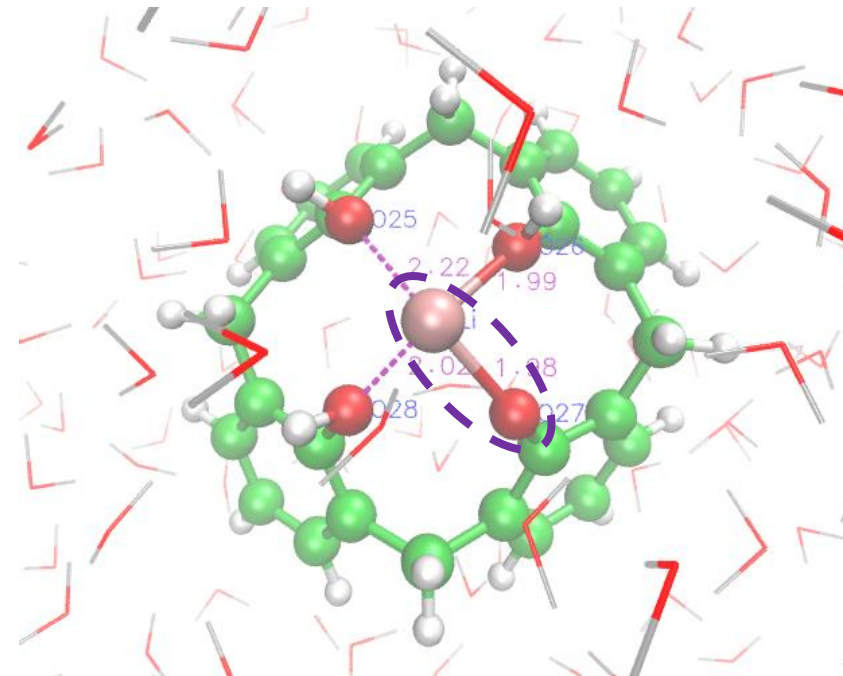
$$V = \frac{1}{2} k * (x - x_0)^2$$

# Файл данных моделирования для WHAM

- Файл данных должен иметь следующую структуру:
- В каждой строке (для каждой конфигурации системы) указываются
  - 1 столбец – время (шаг) моделирования. Эта информация фактически не используется.
  - 2 столбец – значение координаты реакции на данном шаге [Å]
- Если в файле с метаданными была указана **temperature**, то в третьем столбце указывается потенциальная энергия системы в данной конфигурации
- Все числа должны быть в формате с плавающей запятой.
- Строки, начинающиеся с "#", игнорируются как комментарии.
- Дополнительные столбцы данных игнорируются.

# Файл данных моделирования из sr2k

- Файл данных имеет следующую структуру:
  - 1 столбец – время моделирования в фемтосекундах
  - 2 столбец – значение координаты реакции на данном шаге [в борах]
  - 3,4,5,6 столбцы – нули
- В качестве координаты реакции выбрано расстояние между металлом и атомом кислорода O27



# Что нужно сделать

Для всех металлов (Li, Na, K, Cs, Rb)

- Переформатировать файлы данных, лежащие в папках ./ui/dist (создать новые файлы в отдельных папках)
  - 1 столбец оставить, 2-ой переделать из бор в ангстремы, 3-6 столбцы – удалить
  - Для всех файлов в названии указаны равновесное значение координаты реакции **loc\_win\_min** в десятых долях ангстрема, и константа жесткости **spring** в ккал/моль\*Å<sup>2</sup>. Главное помнить, что значение в заголовке файлов указано для потенциала  $k(x-x_0)^2$
- Создать файлы с метаданными
- Запустить WHAM
- Из выходного файла извлечь профиль (первые два столбца из **num\_bins** строк) и построить график
- Из профилей извлечь точки минимумов (значение координаты реакции – энергия)
- Поварьировать значение **num\_bins** и посмотреть как это влияет на профиль

*Первое задание можно выполнять как умеете – вручную, написав скрипт или даже просто используя Excel.*