核对AMBER可用组件、许可与GPU运行条件后迁移样例

完整操作教程 · 参考固定 · 往返恢复验收

已有AMBER任务迁到GPU，先核程序组件、使用条件和具体计算是否受支持，再测迁移结果。AmberTools与Amber里的pmemd不是同一个软件包；安装一个名叫ambertools的环境，不表示已获得pme

运行边界：示例代码需按安装版本和真实项目输入复核；未提供真实生物数据，语法或小样本检查不代表科学结果和性能验收。

已有AMBER任务迁到GPU，先核程序组件、使用条件和具体计算是否受支持，再测迁移结果。AmberTools与Amber里的pmemd不是同一个软件包；安装一个名叫ambertools的环境，不表示已获得pmemd.cuda。本篇从用户已有、可合法使用且经过验证的GPU程序与输入开始。

先把程序和使用范围说清楚

截至本次核查，官方已发布Amber26与AmberTools26，后者多数开放源码且免费，Amber26另有许可与费用结构。官方许可对组织内使用、第三方服务和软件转租分别有条件；服务器租赁不自动附带软件许可。用户应按自己版本与组织的有效许可确认运行范围，不把公共镜像可下载视为授权证明。

核对对象	需要记录	不能代替
实际程序	pmemd.cuda路径、版本和二进制指纹	仅检查AMBERHOME目录
硬件	程序构建、GPU架构、驱动与运行库	只看有一张NVIDIA卡
输入协议	拓扑、restart、mdin及约束	任意新建通用MD参数
验收	能量、步数、restart与稳定性	仅看输出文件存在

先在隔离目录跑原有短协议

准备pilot.in、system.prmtop、equilibrated.rst7，均来自同一已验证体系。pilot.in是负责人确认的短迁移测试协议，不是随意截断生产文件；其输出频率应保证产生所需验收材料。AMBER_PMEMD_CUDA填写已授权可用的绝对可执行路径，保留调度器分配的CUDA_VISIBLE_DEVICES。

```
set -euo pipefail
: "${AMBER_PMEMD_CUDA:?■■■■■■GPU■■■■■■■}"
: "${CUDA_VISIBLE_DEVICES:?■■■■■■■■■■GPU■■■■■}"
[[ "$AMBER_PMEMD_CUDA" = /* ]] || exit 2
test -x "$AMBER_PMEMD_CUDA"
test -s pilot.in
test -s system.prmtop
test -s equilibrated.rst7
mkdir amber-gpu-probe-001
root="$PWD/amber-gpu-probe-001"
cp pilot.in system.prmtop equilibrated.rst7 "$root/"
sha256sum pilot.in system.prmtop equilibrated.rst7 "$AMBER_PMEMD_CUDA" > "$root/
inputs.sha256"
nvidia-smi --query-gpu=uuid,name,driver_version,memory.total --format=csv > "$root/
devices.csv"
cd "$root"
/usr/bin/time -v -o resources.txt "$AMBER_PMEMD_CUDA" -O \
  -i pilot.in -o pilot.mdout -p system.prmtop -c equilibrated.rst7 \
  -r pilot.rst7 -x pilot.nc -inf pilot.mdinfo > stdout.txt 2> stderr.txt
test -s pilot.mdout
test -s pilot.rst7
```

读取程序报告，再核对模拟状态

检查mdout中的实际程序与设备信息、总步数、温度和能量，确认完成了预期阶段且无数值异常。restart需由兼容工具重读，坐标、速度及盒子信息应符合该协议；轨迹应覆盖预期保存时段。最小化和动力学输出不同，不能对所有输入强制要求同一种轨迹。

CPU与GPU比较使用同一拓扑、初始状态和物理协议，先比较初始能量、力或短时稳定性，再按项目标准评估。热浴、随机种子及浮点精度可能导致轨迹分离，不能要求长期轨迹逐位一致；反过来，日志没有NaN也不能证明采样已平衡。

程序启动即失败时，先查GPU架构、驱动/运行库、链接与安装测试。进入计算后失败，则定位输入格式、模型或该版本GPU实现对所选功能的限制；不能把所有错误归为显存小。官方test.cuda等安装测试需按本版本说明执行，单个测试通过不覆盖所有高级方法。

按完整任务比较资源收益

记录预热、计算、输出和重启读取的完整时间，同时记录GPU显存、主机RAM、CPU与存储。只比较某一小段内核时间会漏掉I/O和初始化。不同体系大小、约束或自由能功能可能有不同收益，不从程序名推定任何AMBER步骤都适合GPU。

先完成单任务，再测同卡多任务或多卡程序路径，不能把单卡pmemd.cuda直接当多卡分布式版本。每份任务保留独立输出目录、协议校验和、程序与设备记录；改变软件、GPU或方法后重新验收，迁移时不覆盖原有参考结果与失败日志。

配套练习包

本PDF对应的ZIP包含本文代码块、主题练习模板或合成数据、README和SHA256校验文件。请从同一教程页面下载练习包；先核对校验值，再在独立目录复现。

参考资料

Amber26/AmberTools26组件与当前使用条件 · 来源资料

官方GPU程序支持入口 · 来源资料

官方GPU安装测试与启动说明 · 来源资料

操作建议：先在合成小样本上验证流程，再依据项目参考、标签合同、存储策略与获配资源验收真实数据。