从编译记录到小样例核对PLUMED联用环境

完整操作教程 · 参考固定 · 往返恢复验收

GROMACS与PLUMED联用，不能只检查两个命令都能显示版本。真正需要验证的是GROMACS接口能否加载指定kernel、计算本项目所需动作并产生合理输出。本篇固定GROMACS2026.4的原生-plum

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。

GROMACS与PLUMED联用，不能只检查两个命令都能显示版本。真正需要验证的是GROMACS接口能否加载指定kernel、计算本项目所需动作并产生合理输出。本篇固定GROMACS2026.4的原生-plumed接口，用已验收的小TPR打印一个距离，不先加入会改变动力学的偏置。

先确认接口路线与编译记录

当前GROMACS手册提供-plumed入口，并通过PLUMED_KERNEL定位libPlumedKernel.so。较旧组合可能需要补丁和重编译，应按对应版本说明处理，不能对所有GROMACS都盲目执行plumed patch。保存GROMACS构建信息、PLUMED版本、编译器、MPI及加载库路径，避免同名命令来自不同环境。

检查项	本例做法	验收范围
GROMACS	2026.4且接口可用	不是任意旧版自动兼容
PLUMED	匹配2.10安装的kernel	库与命令来自同一环境
小体系	原子1、2确实存在	索引一基，选择有物理意义
动作	DISTANCE并PRINT	先检查无偏CV计算
后续	项目实际偏置和插件	另核功能限制与数值

用PRINT验证加载和CV数值

准备/project/verified-pilot.tpr，确认原子1/2的身份，且原有短运行在同一GROMACS中有效。NOPBC在这里按直接坐标距离计算，仅适用于不跨周期边界的小例；生产体系通常需按所选CV的周期性定义处理。打印间隔一步是教学设置，不是生产推荐。

```
set -euo pipefail
: "${PLUMED_KERNEL:?■■■■■■■■libPlumedKernel.so■■■■}"
[[ "$PLUMED_KERNEL" = /* ]] || exit 2
test -s "$PLUMED_KERNEL"
test -s /project/verified-pilot.tpr
mkdir plumed-probe-001
cd plumed-probe-001
gmx --version > gromacs-version.txt 2>&1
plumed info --version > plumed-version.txt 2>&1
sha256sum "$PLUMED_KERNEL" /project/verified-pilot.tpr > inputs.sha256
cat > plumed.dat <<'EOF'
d: DISTANCE ATOMS=1,2 NOPBC
PRINT ARG=d STRIDE=1 FILE=COLVAR
EOF
/usr/bin/time -v -o resources.txt gmx mdrun \
  -s /project/verified-pilot.tpr -deffnm probe -plumed plumed.dat \
  -nsteps 10 -ntmpi 1 -ntomp 1 -nb cpu > stdout.txt 2> stderr.txt
test -s COLVAR
test -s probe.log
```

读取输出，而非只看COLVAR非空

检查日志中的PLUMED加载、版本、动作解析及最终步数，COLVAR应包含时间与d两列。首帧距离应与对应初始坐标按相同单位和NOPBC规则计算一致；原子编号是TPR中的编号，不是随便取PDB文件行号。距离单位按当前MD接口及PLUMED设置核对，改变UNITS后不能直接照旧比较。

```
import math
times=[]
with open("COLVAR") as f:
    for line in f:
        if not line.strip() or line.startswith("#"):continue
        row=list(map(float,line.split()))
        assert len(row)==2 and all(math.isfinite(x) for x in row)
        assert row[1]>=0;times.append(row[0])
assert len(times)>=2 and all(b>a for a,b in zip(times,times[1:]))
print("CV table basic checks passed",len(times))
```

缺kernel或符号报错时检查PLUMED_KERNEL、运行库和构建组合；unknown action则核动作名称、模块是否启用及插件依赖。不要在原共享环境反复覆盖库，修复后保留新环境与完整日志。能计算DISTANCE不说明机器学习CV、特定外部模块或其他高级方法都可运行。

再验收真实偏置及设备组合

PRINT只计算并记录CV，没有添加偏置力。项目实际使用RESTRAINT、METAD等时，应另用可解释的小例核偏置能、力、单位、周期边界和重启状态，再迁到目标体系；不能因这个小例通过就宣称增强采样协议已经正确。恢复时还要确认偏置历史与MD状态对应。

CPU小例通过后，若计划GPU路径，再按该GROMACS/PLUMED组合支持范围测试并读日志。联用可能改变任务分工与吞吐，不能将无PLUMED的GPU速度直接用于带偏置任务。记录CV计算、输出频率、主机RAM及设备开销，按完整代表任务评价。

交付清单包括二进制/库版本、构建记录、kernel指纹、小TPR、plumed.dat、COLVAR和判定依据。项目输入、偏置设计与算力环境分别验收；输出能打开、进程退出零与采样具有科学意义并不是同一项，保留这些区别可减少迁移后难以定位的问题。

十步试跑仅检查接口与简单CV，不能提供稳定的性能或采样结论。先保存无PLUMED的同体系短运行，再比较日志、起点与时间范围，避免把原TPR本身的失败归为插件问题。

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

GROMACS2026.4原生PLUMED接口 · 来源资料

PLUMED2.10安装、模块及补丁条件 · 来源资料

PLUMED DISTANCE动作 · 来源资料

PLUMED PRINT动作 · 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。