检查GNINA运行模式并用样例记录设备和吞吐量

完整操作教程 · 参考固定 · 往返恢复验收

GNINA中的GPU主要用于CNN相关计算，不能把整个对接流程笼统理解为GPU搜索。本篇固定cnn_scoring=rescore，在完成经验势搜索后进行CNN重打分，用一份代表配体SDF记录设备与完整时间，再

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。

GNINA中的GPU主要用于CNN相关计算，不能把整个对接流程笼统理解为GPU搜索。本篇固定cnn_scoring=rescore，在完成经验势搜索后进行CNN重打分，用一份代表配体SDF记录设备与完整时间，再和同模式--no_gpu对照。不同运行模式不能混在一起计算加速比。

先固定对接问题和实际模式

受体rec.pdb、批量ligands.sdf及已知口袋参考site_ligand.sdf均完成适用准备；配体ID和化学状态已核对。autobox_ligand用参考配体定义搜索框，不意味着输入了正确结合位点。保存版本、二进制/模型指纹、框、随机种子、exhaustiveness及输出姿势数，避免比较时变更搜索问题。

设置	本例处理	设备解释
cnn_scoring	rescore	经验势搜索后CNN评分
refinement/all	不在本例启用	CNN参与更多步骤，计算量不同
CPU对照	同参数加--no_gpu	保留CNN而非改成none
监控	运行日志及持续设备采样	单次显存截图不能证明吞吐
验收	逐配体姿势与评分字段	高CNN分数不是实验亲和力

在分配的设备上运行代表批次

需要兼容GPU构建及驱动。GNINA填已验证的绝对程序路径，CUDA_VISIBLE_DEVICES保留作业分配；device=0指可见设备中的逻辑编号。两CPU线程、种子2026、搜索强度4和三个输出姿势仅为教学值。nvidia-smi dmon每秒采样，极短CNN阶段可能被漏掉。

```
set -euo pipefail
: "${GNINA:?■■■■GPU■gnina■■■■}"
: "${CUDA_VISIBLE_DEVICES:?■■■■■■■■■■GPU}"
[[ "$GNINA" = /* ]] || exit 2
test -x "$GNINA"
test -s rec.pdb
test -s ligands.sdf
test -s site_ligand.sdf
mkdir gnina-probe-001
root="$PWD/gnina-probe-001"
"$GNINA" --version > "$root/version.txt" 2>&1
"$GNINA" --help > "$root/help.txt" 2>&1
nvidia-smi -L > "$root/devices.txt"
nvidia-smi dmon -s pucm -d 1 -o DT > "$root/gpu-monitor.txt" 2> "$root/monitor.log" &
monitor=$!
status=0
/usr/bin/time -v -o "$root/resources.txt" "$GNINA" \
  -r rec.pdb -l ligands.sdf --autobox_ligand site_ligand.sdf \
  --cnn_scoring rescore --device 0 --cpu 2 --seed 2026 \
  --exhaustiveness 4 --num_modes 3 -o "$root/poses.sdf" \
  > "$root/run.log" 2>&1 || status=$?
kill "$monitor" 2>/dev/null || true
wait "$monitor" 2>/dev/null || true
test "$status" -eq 0 || exit "$status"
test -s "$root/poses.sdf"
```

将程序日志与监控时间对应

核对日志是否识别正确设备、加载预期CNN且无CUDA失败或回退提示。检查监控是否实际启动，运行时间段内的利用率/显存变化再与该进程关联；共享GPU上其他进程的活动不能当作本任务证据。若没有足够采样，先扩大代表批次或采用更细粒度监控，不凭零采样就断言未使用GPU。

再用同一输入、框、CNN与种子，在另一个新输出目录运行相同命令加--no_gpu，移除--device参数。不能用cnn_scoring=none作“CPU对照”，那改变了评分方法。比较预热、完整墙钟和每个有效完成配体耗时，记录并发及输出I/O；不直接引用上游文档的示例倍数当本机结果。

验收配体和姿势，而非只验设备

重读输出SDF，按输入ID核对每个配体的姿势、有限三维坐标、CNNscore和CNNaffinity等所需字段，区分无有效姿势与进程失败。输出姿势可能少于请求数，应结合过滤与日志解释；不能只看总SDF记录数就认为所有配体都完成。

评分不是实验活性或结合自由能，CPU/GPU浮点差异也不要求输出姿势逐位一致。应按方法认可的评分、姿势合理性和参考重对接等证据评估；同一化合物的质子化、受体构象或口袋改变时，不把分数变化只归为GPU环境问题。

依据阶段瓶颈决定是否扩卡

rescore可能仍花较多时间在CPU搜索与输入准备。GPU利用率低时先判断CNN占比、批次大小、CPU供给和I/O，不能只增加GPU数量；其他CNN模式会改变工作量及准确性验证任务。先测目标模式的端到端收益，再安排获配范围内的少量并发。

保留输入与模型指纹、设备映射、日志、监控、结果和逐配体状态。失败不让最后一条监控清理命令覆盖原退出码。只有设备、方法和输出都通过验收，才用这份记录规划整库吞吐与显存，租用兼容GPU也不能代替对接问题本身的验证。

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

GNINA官方模式、device与no_gpu参数 · 来源资料

NVIDIA nvidia-smi监控说明 · 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。