用单副本实测为NAMD多副本模拟制定资源预算

完整操作教程 · 参考固定 · 往返恢复验收

NAMD多副本资源预算，应先区分独立重复模拟与副本交换。前者可以独立调度，后者涉及同步通信，不能用同一份并发脚本替代。本篇限定NAMD3的单机multicore CPU构建，运行两个已验证的独立周期性DNA或蛋

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。

NAMD多副本资源预算，应先区分独立重复模拟与副本交换。前者可以独立调度，后者涉及同步通信，不能用同一份并发脚本替代。本篇限定NAMD3的单机multicore CPU构建，运行两个已验证的独立周期性DNA或蛋白体系协议，先测单副本再计算批次数。

每个副本拥有独立输入合同

R1.conf、R2.conf须已由负责人验证，包含适用的体系、温压、积分、初始状态与运行长度。输入PSF/PDB/参数等采用可访问的绝对路径；输出前缀统一写相对的run，避免跨目录覆盖。独立随机初始化或重启状态应有明确来源，不把复制同一轨迹改名当独立重复。

记录项	单副本填写	用途
计算	核数、完整墙钟、模拟时长	比较同协议吞吐
内存	作业峰值RAM	计算可并行副本上限
磁盘	轨迹、restart与临时共存	不是最终DCD大小
方法	seed/初始状态及协议指纹	确认重复模拟的独立性
构建	multicore CPU版本	不与GPU或多节点路线混算

用两个新目录顺序运行

NAMDBIN填写已验收CPU multicore可执行路径。+p4是单机线程示例，只适用于本篇构建；netlrts、多节点和GPU部署需按各自手册验收。本例协议启用二进制最终坐标、速度及周期性盒子输出，使用run.coor、run.vel、run.xsc作最低文件门槛。

```
set -euo pipefail
: "${NAMDBIN:?■■■■■multicore CPU namd3■■■■}"
[[ "$NAMDBIN" = /* ]] || exit 2
test -x "$NAMDBIN"
mkdir namd-replicas-001
root="$PWD/namd-replicas-001"
sha256sum "$NAMDBIN" > "$root/binary.sha256"
for rep in R1 R2; do
  conf="/project/$rep.conf"
  test -s "$conf"
  mkdir "$root/$rep"
  cp "$conf" "$root/$rep/input.conf"
  (
    cd "$root/$rep"
    /usr/bin/time -v -o resources.txt "$NAMDBIN" +p4 input.conf > run.log 2>&1
    test -s run.coor
    test -s run.vel
    test -s run.xsc
  )
done
```

先确认完成长度，再计算并发上限

检查日志中的NAMD构建、实际线程、最终步数、能量/温度、警告及输出时间。最终坐标存在不代表完成设定的模拟长度；restart文件也可能停在较早检查点。两个副本都达到自己的终点且状态有效后，才计入完成量。原子数相同也不保证协议或资源相同。

下面是可填写的容量演算，数字全为示例：可用于计算的RAM为50 GiB，每副本按已留余量的预算10 GiB；可用于此批CPU为16，每副本4；当前磁盘可用于4个副本并存，则允许同时运行数为三种限制的最小值，即4。这个上限还未证明I/O或吞吐最优。

```
from math import floor,ceil
cpu_available=16;cpu_per_replica=4
ram_available_gib=50;ram_budget_per_replica_gib=10
disk_slots=4;replicas=12
assert min(cpu_available,cpu_per_replica,ram_available_gib,ram_budget_per_replica_
gib,disk_slots,replicas)>0
slots=min(floor(cpu_available/cpu_per_replica),
          floor(ram_available_gib/ram_budget_per_replica_gib),disk_slots)
assert slots>=1,"■■■■■■■■■■■■■■■■■■"
print("capacity slots",slots,"minimum waves",ceil(replicas/slots))
```

公式只给容量约束下的排程参考。四个副本同时写轨迹，可能比顺序运行更慢；先试少量并发比较单位时间完成的有效模拟长度，并固定输出频率和物理方法。不可把缩短轨迹、降低输出或改变精度后得到的时间直接归为相同任务加速。

失败恢复和GPU路线另立记录

若某副本失败，保留日志和最后有效restart，按同版本支持的重启协议确认步数、速度、盒子及随机状态，再用新尝试目录续跑。不要把另一副本restart拿来填缺口，也不删除中间标记掩盖未完成。预期副本清单与最终验收表应逐项对应。

本篇CPU预算不能外推GPU-resident、GPU-offload或副本交换模式；这些模式的支持功能、绑定、通信与显存另行核对。需要GPU时以目标版本、实际物理方法和端到端基准为条件，服务器总核数或总GPU数都不能直接当作可运行副本数。

周期性盒子输出是本例协议的一部分；非周期体系应先另定输出验收文件。

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

NAMD官方单机multicore启动与+p参数 · 来源资料

NAMD配置与多副本接口 · 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。