


**From:** 2014全国并行应用挑战赛 PAC@paratera.com   
**Subject:** PAC2014并行优化决赛通知  
**Date:** September 30, 2014 at 7:04 PM  
**To:** 2014全国并行应用挑战赛 PAC@paratera.com

---

各位参赛队员：

大家好！

祝贺各位通过层层选拔，进入PAC2014并行优化比赛决赛阶段！

经过大赛评审委员会讨论，决定选用“分子模拟软件**Gromacs**”在集群上的性能优化作为决赛题目。组委会为大家提供远程机器，每个队伍可享有8个计算节点（使用原有账户，登陆端口号改为10096）

“分子模拟软件**Gromacs**”在集群上的性能优化

可用资源：
8*天河架构计算节点
Gromacs软件cpu版和mic symmetric模式源代码
优化目标：
在保证精确度的前提下，参赛队伍可以任意形式利用组委会提供的计算资源，对Gromacs代码进行优化，使给定计算负载获得尽可能高的加速比。

附件提供Gromacs软件的编译运行方法和超算资源用户使用手册，请认真学习。

附件同时为大家提供一个Gromacs软件的workload作为测试算例，正式比赛用workload将于**10月15日**左右发布。

注意：

- 1 由于网络原因，天河机群暂不支持symmetric模式运行，如使用mic设备，参赛队需将代码修改为offload模式；
- 2 请勿使用未公开的网络调优手段，如发现此类情况会取消掉该步骤带来的加速；
- 3 如在比赛过程中发现题目或系统环境等资源存在不利于比赛的问题，大赛组委会保留进行调整的权利。

祝大家工作顺利，玩得开心，11月5日广州见！

祝好！

**PAC2014大赛组委会**

敬请关注PAC官方微信、微博，了解大赛最新动态！

微信：通讯录->添加->搜号码->输入微信号：**PACChina-HPC**

微博：广场->找人->输入昵称：**PACChina**





How Compiler  
GROMACS.DOCX



超算资源用户使用手册.p  
df



ZIP