

Datum: 03-07-14 [13:41:33]
Van: Caroline Volckaert <Caroline.Volckaert@herculesstichting.be>
Aan: "'Danny.Vanpoucke@UGent.be'" <Danny.Vanpoucke@UGent.be>
Cc: Ewald Pauwels <ewald.pauwels@ugent.be>, Marc Luwel <Marc.Luwel@herculesstichting.be>
Onderwerp: aanvraag rekentijd deadline 2 juni 2014

Geachte promotor

De Tier 1 Evaluatiecommissie heeft uw aanvraag voor rekentijd grondig onderzocht en beslist u maximaal 4725 nodedagen toe te kennen op de Tier1 samen met 245 GB scratch space. U dient deze rekentijd te gebruiken gedurende de volgende 6 maanden met als einddatum 31/12/2014.

Voor het berekenen van de kosten wordt het tarief van 0,58 euro per nodedag gebruikt; de scratch space is hierin inbegrepen (zie <https://vscentrum.be/nl/tier1-rekenen/voorbeelden-van-prijsberekening>).

De bevindingen van de Commissie waren als volgt:

The Tier 1 Allocation Board (TAB) awards 4725 node days with 245 GB scratch space using VASP5.3.3 for 6 months to this Tier1 application.

The project is of good quality and the team masters well the skills to use the VASP code. Several tasks spanning from geometric optimization to the calculation of band structures are well documented in terms of computational needs.

Moreover, Optimal settings (NPAR and KPAR) of VASP were tested on other machines, such as MUK for example.

The work is well prepared: distributing geometry relaxation and phonon calculations over 12 nodes whereas DOS will be over 11 nodes and Band structure over 32. These differences are justified by the kind of parallelization of the algorithms involved in each of these tasks.

The Tier1 resources are justified since getting resources for large jobs (12 nodes or more) can lead to one week of queuing time.

No doubt that this work will be well conducted on TIER1.

U kan steeds in een latere fase een vervolgaanvraag indienen voor extra experimenten en bijkomende nodedagen.

Mogen wij u er ook op wijzen dat in publicaties het VSC als volgt dient vermeld te worden:

"The computational resources and services used in this work were provided by the VSC (Flemish Supercomputer Center), funded by the Hercules Foundation and the Flemish Government – department EWI."

"De rekeninfrastructuur en dienstverlening gebruikt in dit werk, werd voorzien door het VSC (Vlaams Supercomputer Centrum), gefinancierd door de Herculesstichting en de Vlaamse regering – departement EWI."

Begin volgende week worden uw toegangsrechten voor Tier1 effectief toegekend. U krijgt kortelings een mail van één van de HPC coördinatoren waarin de praktische toegangsmodaliteiten verder worden toegelicht.

Marc Luwel

Met vriendelijke groeten

Caroline Volckaert

stafmedewerker

Tel ++ 32 (0)2 212 94 05

caroline.volckaert@herculesstichting.be

www.herculesstichting.be

De informatie in dit bericht is vertrouwelijk. Ze is uitsluitend bestemd om gebruikt te worden door de persoon of entiteit waaraan ze is gericht. Indien u dit bericht per vergissing heeft ontvangen, vragen wij u de Herculesstichting te verwittigen. Indien dit bericht niet voor u bestemd is, bent u hierbij ingelicht dat het bekendmaken, kopiëren, verdelen of het ondernemen van eender welke actie steunend op de inhoud ervan strikt verboden is en onwettelijk kan zijn.

The information contained in this communication is confidential. It is intended solely for the use of the individual or entity to whom it is addressed. If you have received this message in error please notify the Hercules Foundation. If you are not the intended recipient you are hereby notified that any disclosure, copying, distribution or taking any action in reliance of the contents of this information is strictly prohibited and may be unlawful.
