

Aanvraag 2016-51 Assessing the accuracy of an efficient meta-GGA functional for property predictions of elemental

Caroline Volckaert <Caroline.Volckaert@fwo.be>

vr 21-10-2016 18:27

Aan: Kurt Lejaeghere <Kurt.Lejaeghere@UGent.be>; Veronique Van Speybroeck <Veronique.VanSpeybroeck@UGent.be>;
Stefaan Cottenier <Stefaan.Cottenier@UGent.be>;

cc: Ewald Pauwels <Ewald.Pauwels@UGent.be>; Jan Ooghe <jan.ooghe@kuleuven.be>; Hans Willems
<Hans.Willems@fwo.be>; Bart van Beek <Bart.vanBeek@fwo.be>;

Geachte promotor

De Tier 1 Evaluatiecommissie heeft uw aanvraag voor rekentijd grondig onderzocht en beslist u 640 nodedagen toe te kennen op de Tier1 samen met 200 GB scratch space. U dient deze rekentijd te gebruiken gedurende de volgende 6 maanden met als einddatum 30/04/2017.

De bevindingen van de Commissie waren als volgt:

'The proposal is well written and provides justification of requested resources with a clear plan of work. The project aims at assessing the accuracy of a new functional for the study of the elastic properties of nanoporous and dense framework materials. The goal is to go beyond the PBE approach and to perform a similar error qualification for DFT in the SCAN approximation as done by this team for PBE. This project will be jointly conducted with the VASP development team.'

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 Research Foundation Flanders (FWO) and the Flemish Government - department EWI."

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

Binnenkort 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.

Mvg

[Caroline Volckaert](#)

FWO

Egmontstraat 5, 1000 Brussel

T +32 2 550 15 42

caroline.volckaert@fwo.be

www.fwo.be

<http://www.fwo.be/disclaimer.html>