

Aanvraag 2018_07: Advanced electronic structure calculations of a metal-organic framework

Caroline Volckaert <Caroline.Volckaert@fwo.be>

ma 5-3-2018 09:32

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

cc: Ewald Pauwels <Ewald.Pauwels@UGent.be>; Jan Ooghe <jan.ooghe@kuleuven.be>; Ingrid Barcena Roig <ingrid.barcenaroig@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 1022 nodedagen toe te kennen op de Tier1 samen met 1514 GiB scratch space. U dient deze rekentijd te gebruiken gedurende de volgende 8 maanden met als einddatum 05/11/2018. Om een efficiënt gebruik van de toegekende rekentijd in de voorziene rekenperiode te stimuleren, en te vermijden dat toegekende rekentijd niet wordt opgebruikt, zal eenmaal de helft van de toegekende periode verstreken is, de aanvrager 30% van het initieel toegekende aantal nodedagen verliezen voor zover deze nog niet waren verbruikt. Dit laat toe om nog nauwkeuriger en meer projecten bij een allocatieronde toe te kennen. We raden u dan ook tijdig met uw rekenwerk te starten.

De bevindingen van de Commissie waren als volgt:

'Both mandated persons have several years Tier-1 and Tier-0 experience and they have a strong record of publications. A report on VASP benchmarking and performance analysis is included in the proposal.

The use of Tier-1 is well substantiated: memory requirements result in a minimal node count of 90 nodes with 256 GB.

The resource estimate is straightforward. The majority of the work, some 75%, requires nodes with 256 GB.

An attempt is done to provide scaling data, however for the most demanding task it is justified that this is not possible using similar data / parallel behavior. It could be argued that this should probably be possible by using 180 nodes with 128 GB but it is clear that this will also result in a less parallel efficient problem.

Overall this is a challenging proposal from an experienced group, that has a good understanding of the requirements that are hitting the limits of what is feasible on BrENIAC.'

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.

Caroline Volckaert
FWO - Research Infrastructures
Egmontstraat 5, 1000 Brussel
T +32 2 550 15 42
caroline.volckaert@fwo.be
www.fwo.be



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