

Datum: 10-03-15 [11:45:22]
Van: Caroline Volckaert <Caroline.Volckaert@herculesstichting.be>
Aan: "kurt.lejaeghere@ugent.be" <kurt.lejaeghere@ugent.be>
Cc: "veronique.vanspeybroeck@ugent.be" <veronique.vanspeybroeck@ugent.be>, "stefaan.cottenier@ugent.be" <stefaan.cottenier@ugent.be>, Ewald Pauwels <ewald.pauwels@ugent.be>, Marc Luwel <Marc.Luwel@herculesstichting.be>
Onderwerp: toekenning rekentijd Tier1 'Assessing the accuracy of a screened hybrid functional for property predictions of elemental solids'

Geachte promotor

De Tier 1 Evaluatiecommissie heeft uw aanvraag voor rekentijd grondig onderzocht en beslist u minimaal 1.742 nodedagen toe te kennen op de Tier1 samen met 163 GB scratch space. U dient deze rekentijd te gebruiken gedurende de volgende 6 maanden met als einddatum 15/09/2015.

De bevindingen van de Commissie waren als volgt:

The most interesting aspect of the project is an investigation into cases where DFT HSE06 approximation does not yield in reliable results. The Pls will collaborate with the VASP developers team in Vienna and therefore this project could have a potential beyond the goals listed in the given proposal.

The overall quality of the project is good. The board appreciates the effort to determine the optimal k-point/core ratio. Also clearly, two classes of materials cubic and non-cubic crystals will be used. 13 HSE06 optimizations should be done for each and the job size ranges between 1 to 4 nodes. The number of nodes is chosen according to the k-point parallelization possibilities, which in turn strongly depends on the crystal (number of k-points, here 72).

However, some points remain unclear:

The proposal does not use the template for determining the node days, memory and storage requirements nor does it provide scaling results for the target systems. For future applications the Board encourages to be more precise on these points.'

Voor het berekenen van de kosten wordt het tarief van 0,68 euro per nodedag gebruikt; scratch space van maximaal 1 TB is hierin inbegrepen; voor bijkomende opslagcapaciteit wordt 2€/maand gerekend (zie <https://vscentrum.be/nl/tier1-rekenen/voorbeelden-van-prijsberekening>). Op basis van een verbruik van 1.742 nodedagen, zou de totale kostprijs dan neerkomen op 1.184,56 euro. Overeenkomstig het reglement voor rekentijd, wordt u in bijlage een factuur toegezonden waar de helft van de aanrekening van de toegekende rekentijd (592,28 euro) wordt vermeld. Nadat de aanvraag is uitgevoerd, zal het verschil tussen de gebruikte en de reeds aangerekende rekentijd gefactureerd worden. Indien een aanvrager minder dan helft van de toegekende rekentijd gebruikt, wordt geen terugbetaling voorzien. Gelieve uw berekeningen dus tijdig te initiëren.

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.

Met vriendelijke groet,

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, verspreiden 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.