

VU FF Superkompiuterio APC išteklių valdymo grupės (tarybos)

Patvirtintos paraiškos atviros prieigos centrui „HPC Saulėtekis“ **2015vasario 17 – birželio 30d.** laikotarpiui.

2015-vasario mėn. 13 d.

Kitas preliminarus paraiškų ir ataskaitų padavimo terminas – **2015 birželio 15 d. (naujas laiko skyrimas: liepos – rugsėjo mėn.)**

Norim atkreipti dėmesį, kad labai svarbus atsiskaitymas už skaičiavimo laiką (straipsniai su padėka) už temas ir potemes, nes už skaičiavimo laiką šiuo metu nemokame.

Jeigu turit nepridėtų atspausdintų darbų su padėka“ HPC Sauletekis“, prašau per kitą savaitę atsiųsti.

Esant labai dideliame kompiuterio apkrovimui, prioritetas bus teikiamas temoms, kurių rezultatai geresni - yra atspausdintų darbų (HPC už kompiuterio panaudojimą turi taip pat atsiskaityti).

Aišku, jeigu už skaičiavimo laiką yra mokami pinigai iš projektų – tokiems darbams pirmenybė.

Nr.	Pareiškėjas	Organizacija	Projektas	Vartotojai	Paskirta 2015vasario 17 – birželio 30d. laikotarpiui	Ataskaita už laikotarpį 2014-0-10 - 2015-01	Pastabos
1.	Dr. Valdas Jonauskas	VU TFAI	„Volframo jonų plazmos spektrų tyrimas“ (VP1-3.1-ŠMM-07-K-02-015)	2 vartotojai (Valdas Jonauskas, Aušra Kynienė)	SGI - 40 parų; „Fizika“ - 200 mazgo parų (iki 10 mazgų vienam uždaviniui ??)	Yra, Tyrimo rezultatai bus apibendrinti ruošiamame straipsnyje nurodant padėką.	Iki šiol 2 publikacijos su padėka HPC: PHYSICAL REVIEW A 89, 052714 (2014); PHYSICAL REVIEW A 91, 012715 (2015).
2.	Andrius	VU FF TFK	Mokslinis darbas	1 vartotojas	Fizika – 83	Yra.	Iki šiol 2

	Gelžinis	doktorantas	disertacijos tema – “Elektroninio sužadavimo molekulinuose agregatuose dinamikos modeliavimas tiksliais ir artutiniais metodais”	A.Gelžinis	mazgo paros.	Didelių rezultatų pasiekti dar nepavyko, parašytas kodas.	publikacijos: dx.doi.org/10.1021/jp3118083 J. Phys. Chem. B 2013; <i>New Journal of Physics</i> 15 (2013) 075013 (http://www.njp.org/)
3.	Alytis Grudis	VU FF BFSK doc.	2012-2015 LMT Visuotinės dotacijos (Global grant), Multifunkcinių molekulių sistemų fotofizikinių savybių valdymas, vadovas Prof. Saulius Juršėnas	1 vartotojas	Fizika – 125 mazgo paros	Yra. Dar nebaigti skaičiavimai	Parengtos 2 publikacijos su nuoroda, kad naudotas HPC Saulėtekis APC: Dyes and Pigments 2013 (submitted); Physical Chemistry Chemical Physics 2014 (submitted)
4.	Dr. Arūnas Kučinskas	VU TFAI	Mažų matmenų turbulentiniai reiškiniai žvaigždžių atmosferose ir jų įtaka stebimoms žvaigždžių savyboms (Projektas??, gal biudžetinė tema??)	2 vartotojai: dr. Arūnas Kučinskas, Jonas Klevas	SGI – 40 mazgo parų	Yra. Trūksta rezultatų, prašoma pratęsti.	???
5.	Dr. Kęstutis Aidas	VU FF BFSK Pateikta bendra katedros tema: iš viso 4 atskiros potėmės	VU Fizikos fakulteto Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedros vykdoma mokslinių tyrimų tema "Molekulių vyksmų biologinėse ir mezoskopinėse sistemose spektriniais tyrimais": Potėmė - Kvarcino, prisijungusio prie žmogaus serumo albumino baltymo,	6 vartotojai: K. Aidas, M. Velička, D. Lengvinaitė, D. Petkevičius, K. Jakubavičiūtė, V. Čirba.	Visiems Nr. 5 vartotojams. SGI – 1 para per mėn. (iš viso 5 paros); Fizika – 63 mazgo paros per 1 mėn. (iš viso 315 mazgo parų)	Yra K.Aido., praktiškai studento kursinis darbas „Nanodarinių ir mezoskopinių struktūrų charakterizavimas ir savybių tyrimas	???

			elektroninės sugerties modeliavimas. Vykdotojai: K. Aidas, M. Velička, D. Lengvinaitė, D. Petkevičius, K. Jakubavičiūtė, V. Čirba.			virpesinės ir BMR spektroskopijos metodais“, rašoma, kad planuojama tęsti, tačiau paraiška kita tema.	
			Potemė - Joninių skysčių struktūros, dinamikos ir spektrinių parametrų tyrimas. Vykdotojai: J. Čeponkus, J. Jakubauskaitė.	2 vartotojai: J. Čeponkus, J. Jakubauskaitė.		Nauja paraiška	-
			Potemė – Šlapimo rūgšties molekulinės struktūros ir virpesinių spektrų modeliavimas. Vykdotojai: V. Šablinskas, M. Pučetaitė.	2 vartotojai: Šablinskas, M. Pučetaitė.		Nauja paraiška	-
			Potemė - Joninio skysčio molekulių solvatacinėje aplinkoje struktūros ir dinamikos modeliavimas.	1 vartotojas: V. Aleksa.		Nauja paraiška	A. Gruodis jau turi vartotoją, reikės derintis kaip atskirti nuo kitos temos.

			Vykdytojai: A. Gruodis, V. Aleksa.				
6.	Hab. Dr. G.Niaura	VU Biochemijos instituto Bioelektrochemijos ir biospektroskopijos skyrius	VU Biochemijos instituto Bioelektrochemijos ir biospektroskopijos skyriaus tema: Biologinių sistemų ir jų modelių spektroelektrocheminiai tyrimai	1 vartotojas Dr. Olegas Eicher-Lorka	Fizika – 2 mazgai per mėnesį (iš viso 625 mazgo paros);	Yra atsakaita.	Parašytas 1 straipsnis su padėka HPC Saulėtekiui į žurnalą Polyhedron - “TD-DFT study of the electronic absorption spectra of iron(III) monoisothiocyanate”. Šio metu straipsnis atsakymų į recenzentų pastabas stadijoje.
7.	Dr. Olga Rancova	Vu ff TFK	Mokslinis darbas - Vyksmų fotoaktyviose organinėse medžiagose ir nanodariniuose modeliavimas (tfk biudžetinė tema))	1 vartotojas Olga Rancova	Fizika – 84 vieno mazgo paros.	Praeitam etape nuturėjo.	
8.	Dr. Stepas Toliautas	VU FF TFK	1. Vyksmų modeliavimo laboratorijos vykdoma mokslinė veikla (tfk biudžetinė tema); 2. Mokslo projektas „Nepusiausvyrieji	2 vartotojai: Stepas Toliautas; Jonas Narkeliūnas – studentas.	1. Fizika WebMo – 15 mago parų/ mėn. (iš viso 75 mazgo paros) 2. Fizika SSH-	Yra. Kol kas rezultatai skiriami dviems magistriniams	Iš anksčiau yra 3 publikacijos: Chemical Physics, Chemical physics. Amsterdam. 2012, Vol. 404, p. 64-73.; Chemical physics

					80 vieno mazgo parų/mėn. (iš viso 400 vieno mazgo parų)	moksliniams darbams.	letters. 2614. 2014, vol. 591, no. 1, p. 52-57.; The Journal of Physical Chemistry C: nanomaterials, interfaces and hard matter. 2014, Vol. 118, no. 40.
9.	Vytautas Abramavičius	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – "Kvantinės dalelės banginės funkcijos atvirojoje sistemoje dinaminės savybės"	1 vartotojas	SGI – 30 parų Fizika – 42 mazgo paros	Yra. Planuojama publikacija.	-
10.	Gintaras Valiulis	VU FF KEK	Projektas „Naujos kartos pramoninių lazerinių medžiagų apdirbimo procesu, panaudojant ultratrumpųjų impulsų lazerinius šaltinius, sukūrimas ir panaudojimas pramoniniams taikymams“	1 vartotojas Karolis Kalantojus	Fizika – 2 vieno mazgo paros.	Yra. Naudojantis superkompiuteriu uždavinyš iš neišsprendžiamo tapo išsprendžiamu per 1 parą. Pasinaudojant lygiagrečiu skaičiavimu šį laiką numatoma dar sumažinti. Prašoma darbus tęsti.	-
11.	Dr.	FTMC		2 vartotojai	Fizika – 10		Paskirta pradžiai

	Audrius Alkauskas				mazgo parų.		bandymams. Rašomas projektas.
12.	dr. Lina Davulienė	VU FF TFK	TFK tema	Planuojami 2 vartotojai	Fizika – 10 mazgo parų.		Paskirta pradžiai bandymams
13.	Dr. Ernestas Žašinas	VU TMI	Visuotinės dotacijos projektas „Radiaciniai nanoklasteriai Si ir GaN“, VP1-3.1-ŠMM-07-K-03-010	1 vartotojas	Fizika – 100 mazgo parų.	Naujas vartotojas	-
14.	Hab. Dr. Jonas Mockus	VU MII	MII doktorantai.	1 vartotojas	Fizika – 10 mazgo parų.		Paskirta pradžiai bandymams