

VU FF Superkompiuterio APC išteklių valdymo grupės (tarybos)

patvirtintos paraiškos atviros prieigos centrui „HPC Saulėtekis“ 2015 liepos 07 – rugsėjo 30 d. laikotarpiui.

2015-liepos mėn. 01 d.

Kitas preliminarus paraiškų ir ataskaitų padavimo terminas – **2015 rugsėjo 15 d. (naujas laiko skyrimas: 2015 m. spalio – 2016 m. sausio mėn.)**

Norim atkreipti dėmesį, kad labai svarbus atsiskaitymas už skaičiavimo laiką:

1. Straipsniai su padėka „HPC Saulėtekis“;
2. Taip pat studentų darbų kopijos su padėkomis (kursiniai, baigiamieji, praktikos), jeigu jiems buvi prašytas laikas;

Jeigu turit nepridėtų atspausdintų darbų su padėka „HPC Sauletekis“, prašau 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.

Nuo šiol paskirtą laiką lentelėje taip pat įvertinsime pinigais pagal VU patvirtintus įkainius.

Nr.	Pareiškėjas	Organizacija	Projektas	Vartotojai	Paskirtas laikas 2015 liepos 07 – rugsėjo 30 d. laikotarpiui *	Paskirto laiko 2015 liepos 07 – rugsėjo 30 d. kaina, Eur**	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 – 960 val.; „Fizika“ – 4800 mazgo val.	10 676,55 4 448,56,00	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 Gelžinis	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Elektroninio sužadavimo molekulinuose agregatuose dinamikos modeliavimas tiksliais ir artutiniais metodais”	1 vartotojas A.Gelžinis	Fizika – 5000 mazgo val..	4 633,92	Yra. Pradėta ruošti mokslinė publikacija. Iki šiol 2 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 Gruodis	VU FF BFSK doc.	2012-2015 LMT Visuotinės dotacijos (Global grant), Multifunkcinių molekulių sistemų fotofizikinių savybių valdymas, vadovas Prof. Saulius Juršėnas	1 vartotojas	Fizika – 3000 mazgo val.	2 780,35	Yra. 2 2014 m. publikacijos (pateikti pdf failai); 1 2005 m. publikacija (straipsnio kopijos nėra)	Atsiųsti 2015 m. straipsnio ir baigiamųjų darbų pdf failus.
4.	Dr. Kęstutis Aidas	VU FF BFSK	Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedros vykdoma mokslinių tyrimų tema "Molekulių vyksmų biologinėse ir mezoskopinėse	3 vartotojai: K. Aidas, M. Velička, D. Lengvinaitė, D.	SGI- 1200 val.; Klasterio – 1200 mazgo val.;	13 345,69 1 112,14	1 straipsnis (reikia atsiųsti pdf) (Low Temp. Phys. 40 (2014), 1384.); 2 baigiamieji darbai (atsiųsti	Atsiųsti straipsnio ir baigiamųjų darbų pdf failus; Jeigu yra – straipsnio nuorodą

			sistemose spektriniai tyrimai"				pdf); 2 pranešimai konferencijose (1 žodinė; 1 stendinė (7 th international theoretical biophysics symposium", 2015 m. birželio mėn. 8-12 d., Kaljaris, Italija))	internete.
5.	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 – 4000 mazgo val. (16 brand.) Išeina 4 16 brand. Mazgai.	5 560,70	Yra atsakaita. 1 straipsnis (<i>Polyhedron</i> , 90 (2015) 41-46.)	Reikia straipsnio pdf kopijos ir nuorodos internete. Paraiškoje reikia nurodyti tikrus skaičiuotojus (O.Lorka)
6.	Dr. Stepas Toliautas	VU FF TFK	1. Tfk biudžetinė tema); 2. mokslo projektas „Fotoindukuotų vyksmų dinamika baltyminiuose kompleksuose ir modelinėse sistemose“ (LMT, MIP-15137)	2 vartotojai: Stepas Toliautas;	1. Fizika WebMo – 2400 mazgo val. (16 branduolių mazgai); 2. Fizika SSH-1920 mazgo val. (12 branduolių mazgai)	3 336,42 1 779,42	Yra. 2 pranešimai konferencijose (MPM (Nantas, Prancūzija ir LNFK-41, Vilnius, Lietuva). Iš anksčiau yra 3 publikacijos: Chemical Physics, Chemical physics.	Pateikti diplominio darbo su nuoroda į kompiuterio naudojimą pdf kopiją

							Amsterdam. 2012, Vol. 404, p. 64-73.; Chemical physics 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.	
7.	Vytautas Abramavič ius	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Kvantinės dalelės banginės funkcijos atvirojoje sistemoje dinaminės savybės”	1 vartotojas	Fizika – 2000 mazgo val.	1 853,57	Planuojama straipsnį užbaigti ir pateikti į recenzuojamą žurnalą per artimiausią mėnesį.	Reikės pateikti straipsnio pdf kopiją
8.	Jevgenij Chmeliov	VU FF TFK doktorantas	Disertacijos tema „Pavienių fotosintetinių kompleksų fluorescencijos intensyvumo modeliavimas“	1 vartotojas	Fizika – 4 000 mazgo val.	3 707,14	Nauja paraiška	
9.	Augustinas Stepšys	VU FF TFK doktorantas	Disertacijos tema „Skaitinių metodų taikymai lengvųjų branduolių modelių kūrimui“	1 vartotojas	Fizika – 1200 mazgo val.	1 112,14	Nauja paraiška	
10.	Dr. Aušra Vektarienė	VU TFAI	Darbas vykdomas dalyvaujant VU ilgalaikėje mokslinių tyrimų ir eksperimentinės (socialinės, kultūrinės) plėtros programoje:	2 vartotojai: dr. A. Vektarienė, dr. G.Vektaris	Fizika – 3000 mazgo val.. WebMO/SSH (?)	2 780,35	Nauja paraiška	

			43. Atominių ir subatominių dalelių bei jų darinių, spinduliuotės, kosminių kūnų ir sudėtingų sistemų tyrimai					
--	--	--	---	--	--	--	--	--

*(12 branduolių mazgai, jeigu neparašyta kitaip)

** (16 branduolių mazgų kaina yra 1,5 karto didesnė lyginant su 12 branduolių mazgais; SGI mazgas atitinka 12 standartinių (12 branduolių) klasterio mazgų)