

## VU FF Superkompiuterio APC išteklių valdymo grupės (tarybos)

patvirtintos paraiškos atviros prieigos centrui „HPC Saulėtekis“ **2016 balandžio 01 – rugpjūčio 31 d.** laikotarpiui.

2016-kovo mėn. 25 d.

Kitas preliminarus paraiškų ir ataskaitų padavimo terminas – **2016 rugsėjo 05 d. (naujas laiko skyrimas: 2016 m. rugsėjo – 2016 m. gruodžio mėn.)**

Atkreipiame dėmesį, kad labai svarbus atsiskaitymas už skaičiavimo laiką:

1. Straipsniai su padėka „HPC Saulėtekis“;
2. Studentų darbų kopijos su padėkomis (kursiniai, baigiamieji, praktikos), jeigu jiems buvo paskirtas laikas;
3. Nuo rugsėjo mėn. skaičiavimo laikas bus mokamas. Tiek išorės tiek vidaus vartotojams. Kainos bus patikslintos diegiant VU visų kaštų sistemą.

Jeigu turit nepridėtų atspausdintų darbų su padėka „HPC Saulėtekis“, prašau atsiųsti. Skirstant kompiuterio laiką, prioritetas bus teikiamas pareiškėjams, kurie publikuoja rezultatus su padėka „HPC Saulėtekis“.

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

Nr.	Pareiškėjas	Organizacija	Projektas	Vartotojai	Paskirtas laikas 2016 balandžio mėn. 4 – rugsėjo 5 d. laikotarpiui *, **	Apmokėjimas pagal VU taisykles***	Ataskaita už laikotarpį 2015-09 - 2016-01	Pastabos
<b>Patvirtintos paraiškos</b> (Dėl vartotojo ir klasių sukūrimo kreiptis <a href="mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt">mindaugas.macernis@ff.vu.lt</a> )								
1.	Valdas Jonauskas	VU TFAI	VU TFAI tema „Tvarkių ir netvarkių atominių sistemų savybių tyrimas“	2 vartotojai: V. Jonauskas, A. Kynienė	1. SGI – 120 branduolių x 45 dienos; 2. Fizika – 4800 mazgo val.		Gauta dalis W <sup>5+</sup> jono jonizacijos elektronais tyrimo reikalingų rezultatų	Ankstesnės temos tęsinys
2.	Andrius Gelžinis	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Elektroninio sužadimo molekulinuose agregatuose dinamikos modeliavimas tiksliais ir artutiniais metodais”	1 vartotojas: A. Gelžinis	Fizika – 8000 mazgo val.		Atlikti skaičiavimai buvo panaudoti moksliniame straipsnyje, kuris priimtas į Nature Plants žurnalą <b>(reikia nuorodos)</b>	

3.	Arūnas Kučinskas	VU TFAI	Biudžetinė tema: Molekulių spektro linijų susidarymas raudonojoje milžinėje HD 122563	2 vartotojai: A. Kučinskas, J. Klevas	SGI – 120 branduolių x 45 dienos			
4.	Augustinas Stepšys	VU FF TFK doktorantas	Disertacijos tema „Skaitinių metodų taikymai lengvųjų branduolių modelių kūrimui“	1 vartotojas: A. Stepšys	Fizika – 2000 mazgo val.		Ruošiama publikacija ISI Web of Knowledge reitinguojamame žurnale.	
5.	Vytautas Abramavičius	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Kvantinės dalelės banginės funkcijos atvirojoje sistemoje dinaminės savybės”	1 vartotojas: V. Abramavičius	Fizika – 2000 mazgo val.		Publikacija „Role of coherence and delocalization in photo-induced electron transfer at organic interfaces” šiuo metu recenzuojama Nature Communications žurnale	Pateikti straipsnio pdf kopiją
6.	Gediminas Niaura	VU Biochemijos institutas	VU Biochemijos instituto Bioelektrochemijos ir biospektroskopijos skyriaus tema: Biologinių sistemų ir jų modelių spektroelektrocheminiai tyrimai	1 vartotojas: O. Eicher-Lorka	Fizika – 3000 val. (16 branduolių 1 mazgas)		Publikuotas straipsnis <i>Journal of Physical Chemistry C</i> su padėka HPC: I. Matulaitienė, Z. Kuodis, A. Matijoška, O. Eicher-Lorka, and G. Niaura, SERS of the positive charge bearing pyridinium ring terminated self-assembled monolayers: structure and bonding spectral markers, <i>J. Phys. Chem. C</i> , <b>2015</b> , 119, 26481-26492	
7.	Stepas Toliautas	VU FF TFK	1. TFK biudžetinė tema; 2. mokslo projektas „Fotoindukuotų vyksmų dinamika baltyminiuose kompleksuose ir modelinėse sistemose“ (LMT, MIP-15137)	1 vartotojas: S. Toliautas	1. Fizika – 240 mazgo val. (16 branduolių mazgai; 2 mazgų uždaviniai, WebMo prieiga); 2. Fizika – 1920 mazgo val. (12 branduolių mazgai, SSH prieiga)		Mokslinis straipsnis „A femtosecond stimulated Raman spectroscopic study on the oxazine ring opening dynamics of structurally-modified indolobenzoxazines“ (K. Redeckas, S. Toliautas ir kt.). Straipsnis pateiktas žurnalui „Chemical Physics Letters“	

8.	Kastytis Zubovas	VU FF AO Dr.	VU tema: „Stochastiniai efektai žvaigždžių sistemose“.	2 vartotojai: Kastytis Zubovas; Eimantas Ledinauskas (studentas, dirba temoje)	SGI 120 branduolių mazgas, 30 parų (6 paros per mėn.)			
9.	Kostas Sabulis	VU FF AO, doktorantas	Biudžetinė VU AO tema: „Stochastiniai efektai žvaigždžių sistemose“		SGI 120 branduolių mazgas, 28 paros			

### Paraiškos po patiukslinimo

Paraiškas galima patikslinti iki 2016-04-11 (atsiųsti [mindaugas.macernis@ff.vu.lt](mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt) , [juozas.sulskus@ff.vu.lt](mailto:juozas.sulskus@ff.vu.lt) )

10.	Audrius Alkauskas	FTMC	Projektas M-ERA.NET-1/2015 („Deimanto defektų panaudojimas nano-metrologijoje“) reikmėms (paraiškos registracijos numeris Nr. 2215; finansavimo sutarties Nr. M-ERA.NET-1/2015) – taškinių defektų deimante ab-initio skaičavimai.	3 vartotojai: A. Alkauskas, M. Mackoit, L. Razinkovas	Fizika – 4200 mazgo val. (iki 10 mazgų 1 uždaviniui)	Apmokėjimas pagal sutartį		
11.	Darius Abramavičius	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Grafeno spektro modeliavimas”	1 vartotojas: Darius Abramavičius	Fizika – 2000 mazgo val. MATLAB programa		Nauja paraiška	
12.	Aušra Vektarienė	VU TFAI	TFAI tema: „Atominių ir subatominių dalelių bei jų darinių, spinduliuotės, kosminių kūnų ir sudėtingų sistemų	2 vartotojai: A. Vektarienė, G. Vektaris	Fizika – 4800 mazgo val. SSH prieiga, Gaussian 09		Theoretical study on the mechanism of thieno[3,2-b]benzofuran bromination: the importance of Lewis and non-Lewis type NBOs interactions along the	

			tyrimai“				reaction path. Journal of Physical Organic Chemistry <b>29</b> , 21-28 (2016). DOI:10.1002/poc.3483	
13.	Vytautas Butkus	VU TFK	Tema „Fotoindukuotų vyksmų dinamika baltyminiuose kompleksuose ir modelinėse sistemose“ (užduotis: Vibroninė sąveikos ir statinės netvarkos įtaka fotosintetinio bakterijų reakcijų centro spektriniam signalams)	1 vartotojas: V. Butkus	Fizika – 2000 mazgo val., SSH prieiga		Nauja paraiška	
14.	Valdemaras Aleksa	VU BFSK	Mokslo projektas „Funkcinių organinių ciklinių silicio ir germanio darinių charakterizavimas spektriniais metodais“; paraiškos registracijos Nr. MIP-13176, vykdomas pagal Tarybos remiamos veiklos kryptį „Mokslininkų grupių projektai“	1 vartotojas: V. Aleksa	Fizika – 5000 mazgo val., WebMo.			Atskyrė paraišką nuo K. Aido paraiškos
15.	Milda Pučetaitė	VU BFSK	Tema: Heksafluoroacetilacetono ir jo izotopologų sąveikos su vandens bei deuteruoto vandens molekulėmis tyrimas.	2 vartotojai: Justinas Čėponkus, Rasa Platakytė	Fizika – 1000 mazgo val., WebMo, Gaussian 09			Atskyrė paraišką nuo K. Aido paraiškos
16.	Justinas Čėponkus	VU BFSK	Tema: L-cistino virpesinių spektrų kvantmechaniniai skaičiavimai	2 vartotojai: Milda Pučetaitė, Vida Daukšaitė	Fizika – 4000 mazgo val., WebMo, Gaussian 09			Atskyrė paraišką nuo K. Aido paraiškos
17.	Alytis Gruodis		LMT Bendri Lietuvos Japonijos projektai	1 vartotojas: A. Gruodis	Fizika – 3000 mazgo val., GAUSSIAN09,			Buvom praleidę, pas mane nubuvo

			LJB-3/2015 „Organinio lazerinio tranzistoriaus sukūrimo linkme“ (2015-2017), projekto vadovas Prof. Saulius Juršėnas		DALTON02			paraiškos (J.Š.)
18.	Vygandas Jarutis	Dr. doktoranto vadovas	Juliaus Vengelio doktorantūros tema „Pikosekundinio mikrolazerio impulsais kaupinamo parametrinio šviesos generatoriaus tyrimas“	1 vartotojas: V. Jarutis	Fizika – 10 mazgų; 30 mazgo valandų; Matlab aplinka, SSH prieiga			
19.	Kęstutis Aidas	VU FF BFSK	VU Fizikos fakulteto Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedros vykdoma mokslinių tyrimų tema "Molekulinių vyksmų biologinėse ir mezoskopinėse sistemose spektriniai tyrimai"	9 vartotojai – Kęstutis Aidas, VU FF Aplinkos ir cheminės fizikos magistrantūros studentai: Dovilė Lengvinaitė, Kristina Jakubavičiūtė, Martynas Velička, Ieva Davalgaitė; VU Chemijos fak. studentai: Greta Majauskaitė, Sonata Kvedaravičiūtė, Milda Koreivaitė, Liudvika Masaitytė	Fizika – 2500 mazgo valandų; Gaussian, Dalton, Orca.		<b>Tema „Acetilacetono ir jo izotopologų sąveikos su vandeniu molekulinis tyrimas“</b> , skaičiavimų metu gauti rezultatai publikuoti straipsnyje (su padėka HPC) J. Cėponkus et al Vibrational Spectroscopy 81, 136–143, 2015. Tema „ <b>Kvercitino, prisijungusio prie žmogaus serumo albumino baltymo, elektroninės sugerties modeliavimas</b> “, atlikus papildomus modelinės sistemos, alanino dipeptido, BMR parametrų skaičiavimus, jų ir ankstesnių skaičiavimų pagrindu ruošiamas mokslinė publikacija	K. Aidas pataisė. Jis teigia, kad visi tie studentai iš tikrųjų jam atlieka skaičiavimus moksliniame projekte. Mano, kad iki rudens apie pusę jų atkris. Tačiau tai nėra mokymasis dirbti superkompiuteriu, o konkrečią projekto uždavinių leidimas.
20.	Gintautas Saulis - VDU	VDU	"Antibakterinių ir citostatinių preparatų efektyvumo didinimas stiprinant jų sąveiką su	1 vartotojas: G. Saulis	Fizika – 3000 mazgo val., GAMESS-US	Apmokėjimas pagal sutartį		G. Saulis tvarkingai pataisė pagal mūsų reikalavimus: sutiko mokėti už paslaigas ir naudoti tik laisvo

			ląstelėmis" (MIP-040/2015, (vadovas. prof. dr. R. Daugelavičius, VDU Gamtos mokslų fakultetas, Biochemijos katedra)						kodo programą.
<b>Šiuo metu nepatvirtintos paraiškos</b> Paraiškas galima perrašyti iki 2016-04-11 (atsiūsti <a href="mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt">mindaugas.macernis@ff.vu.lt</a> , <a href="mailto:juozas.sulskus@ff.vu.lt">juozas.sulskus@ff.vu.lt</a> )									
21.	Vadimas Starikovičius	VGTU Lygiagrečiųjų skaičiavimų laboratorija	<b>Dar tikslina</b>	1 vartotojas: V. Sytarikovičius	Fizika – iki 8 mazgų iki 2 val. uždaviniai pradžiai ( <b>patikslinti laiką, nes nebus galimybės skirti bet kiek laiko</b> )	Apmokėjimas pagal sutartį	??		<b>Patikslinti paraišką:</b> - koks projektas; - kokie darbai; - patikslinti laiką

\*(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);

\*\*\* Mokėjimas bus patikslintas diegiant VU visų kaštų sistemą.