

VU FF Superkompiuterio APC išteklių valdymo grupės (tarybos)

patvirtintos paraiškos atviros prieigos centrui „HPC Saulėtekis“ **2015 spalio 09 – sausio 31 d.** laikotarpiui.

2015-spalio mėn. 09 d.

Kitas preliminarus paraiškų ir ataskaitų padavimo terminas – **2016 vasario 01 d. (naujas laiko skyrimas: 2016 m. vasario – 2016 m. gegužės 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 neprisidėtų 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 rugsėjo 30 – gruodžio 31 d. laikotarpiui *	Paskirto laiko 2015 liepos 07 – rugsėjo 30 d. kaina, Eur**	Ataskaita už laikotarpį 2015-07-07 - 2015-09-30	Pastabos
1.	dr. Valdas Jonasuskas	VU TFAI	VU TFAI tema „Tvarikių ir netvarikių atominų sistemų savybių tyrimas“	2 vartotojai: Valdas Jonasuskas, Aušra Kynienė	SGI – 120 branduolių x 40 dienų x 24 valandos; 10 skaičiavimo mazgas (klasteris “Fizika”) – 10 x 16 branduolių x 20 dienų x 24 valandos		Yra. Planuojame užbaigti šiuos skaičiavimus iki gruodžio mėnesio pabaigos ir paruošti straipsnį Physical Review A žurnale. 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: Andrius Gelžinis	„Fizika“ – 8000 mazgo val..		Yra. Atlikti skaičiavimai buvo panaudoti moksliniame straipsnyje, kuris šiuo metu yra recenzuojamas. Iki šiol 2 publikacijos: dx.doi.org/10.1021/jp3118083 J. Phys. Chem. B 2013; New Journal of Physics 15 (2013) 075013 (http://www.njp.org/)	
3.	doc. dr. Alytis Gruodis	VU FF BFSK	2012-2015 LMT Visuotinės dotacijos (Global grant), Multifunkcinių molekulinų sistemų fotofizikinių savybių valdymas, vadovas Prof. Saulius Juršėnas	1 vartotojas: Alytis Gruodis	„Fizika“ – 3000 mazgo val.		Yra. Ruošiamos dvi publikacijos, bus atspausdintos po kelių mėnesių. 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 "Molekulinų vyksmų biologinėse ir mezoskopinėse sistemose spektriniai tyrimai"	6 vartotojai: doc. dr. Justinas Čeponkus, Rasa Platakytė, vyr. m. darb. dr. Kęstutis Aidas, Dovilė Lengvinaitė, Kristina Jakubavičiūtė,	SGI – 500 ast. val. branduoliui per mėn.; (skirti 1000 SGI valandų, daugiau laiko nėra.) „Fizika“ – 500 ast. val. mazgui per mėn.		Journal of Computational Chemistry 2015, DOI: 10.1002/jcc.23998 1 straipsnis (reikia atsiųsti pdf) (Low Temp. Phys. 40 (2014), 1384.); 2 baigiamieji darbai (atsiųsti pdf); 2 pranešimai konferencijose (1 žodinė; 1 stendinė (7th international theoretical biophysics symposium”, 2015 m. birželio mėn. 8-12 d., Kaljaris, Italija))	Atsiųsti straipsnio ir baigiamųjų darbų pdf failus; Jeigu yra – straipsnio nuoroda internete (http://scitation.aip.org/content/aip/journal/tp/40/12/10.1063/1.4902228)
5.	hab. dr. G. Niaura	VU Biochemijos instituto Bioelektrochemi	VU Biochemijos instituto Bioelektrochemijos ir biospektroskopijos	1 vartotojas dr. Olegas Eicher-Lorka	„Fizika“ – 3000 mazgo val. (1mazgas 16 brand.) Išeina 4 16 brand.		Yra atsakaita. Paruoštas ir išsiustas straipsnis Journal of Physical Chemistry C	Reikia straipsnio pdf kopijos ir nuorodos internete.

		jos ir biospektroskopijos skyrius	skyriaus tema: Biologinių sistemų ir jų modelių spektroelektrocheminiai tyrimai		Mazgai.		redakcijai su padėka HPC: Ring Terminated Self-Assembled Monolayers: Structure and Bonding Spectral Markers Yra padėka HPC KTU disertacijoje (darbai bendri su O.Lorka) 1 straipsnis (<i>Polyhedron</i> , 90 (2015) 41-46.)	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- 7680 mazgo val. (12 branduolių mazgai)		Yra. parengtas ir pristatytas pranešimas mokslinėje konferencijoje DFT2015 (Debrecenas, Vengrija). Iš anksčiau yra: 2 pranešimai konferencijose (MPM (Nantas, Prancūzija ir LNFK-41, Vilnius, Lietuva); 3 publikacijos: Chemical Physics, Chemical physics. 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. HPC panaudotas S.Toliauto disertacijos skaičiavimuose..	Pateikti tezių pdf failą.
7.	Vytautas Abramavičius	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Kvantinės dalelės	1 vartotojas	Fizika – 2000 mazgo val.		Yra: Straipsnio tekstas šiuo metu yra derinamas su	Reikės pateikti straipsnio pdf kopiją

			banginės funkcijos atvirojoje sistemoje dinaminės savybės”				užsienio bendraautoriais. Buvo: Planuojama straipsnį užbaigti ir pateikti į recenzuojamą žurnalą per artimiausią mėnesį.	
8.	Jevgenij Chmeliov	VU FF TFK doktorantas	Disertacijos tema „Pavienių fotosintetinių kompleksų fluorescencijos intensyvumo modeliavimas“	1 vartotojas	-		Yra: Neprašo naujo laiko Buvo: Nauja paraiška	
9.	Augustinas Stepšys	VU FF TFK doktorantas	Disertacijos tema „Skaitinių metodų taikymai lengvųjų branduolių modelių kūrimui“	1 vartotojas	Fizika – 2000 mazgo val.		Yra: Rezultatai pristatyti 41-oje Lietuvos nacionalinės fizikos konferencijoje pranešime „Šešių kūnų ab-initio skaičiavimai“, autoriai Augustinas Stepšys, Saulius Mickevičius, Darius Germanas, Ramutis Kazys Kalinauskas. Buvo: Nauja paraiška	Pateikti tezių pdf failą.
10.	dr. Aušra Vektarienė	VU TFAI	Darbas vykdomas dalyvaujant VU ilgalaikėje mokslinių tyrimų ir eksperimentinės (socialinės, kultūrinės) plėtros programoje: 43. Atominių ir subatominių dalelių bei jų darinių, spinduliuotės, kosminių kūnų ir sudėtingų sistemų tyrimai	2 vartotojai: dr. A. Vektarienė, dr. G.Vektaris	Fizika – 9600 mazgo val.. WebMO/SSH(?)		Yra: rezultatai buvo panaudoti atsakant į recenzentų klausimus darbe publikuojamame „Journal of Physical Organic Chemistry“. Taip pat planuojama dalyvauti 2-oje tarptautinėje konferencijoje „Nanochemija ir nanomedžiagos“ kuri vyks 2015 spalio mėn. Buvo:	

							Nauja paraiška	
11	Dr. A.Kučinskas	VU TFAI	Biudžetinė tema: Magnetiniai laukai raudonųjų milžinių atmosferose ir jų įtaka stebimoms žvaigždžių savybėms	2 vartotojai: dr. A. Kučinskas, J. Klevas	SGI mazgas - 120 branduolių x 45 dienos x 24 h			
12	Vladimir Chorošajev	VU TFK	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Elektroninių molekulinų sužadinių variacinė pernašos ir relaksacijos teorija”	1 vartotojas V.Chorošajev	Klasteris „Fizika: - 8000 h		Nauja paraiška	
13	Kinan Nasser	VU TFK	TFK Erasmus studentas	1 vartotojas	Laiko kaip supratau reikės nedaug. Tik darbo pradžia		Vasarą tik pradėjo, realiai nedirbo. Planuoja dirbti rudenį	

*(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)

Valdas.Jonauskas@tfai.vu.lt, andrius.gelzinis@ff.vu.lt, alytis.gruodis@ff.vu.lt, kestutis.aidas@ff.vu.lt, lorka@ktl.mii.lt, ausra.vektariene@tfai.vu.lt, augustinas.stepsys@ff.vu.lt, jevgenij.chmeliov@f.vu.lt, stepas.toliautas@ff.vu.lt, vytautas.ab@gmail.com, gnaura@ktl.mii.lt