

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

patvirtintos paraiškos atviros prieigos centrui „HPC Saulėtekis“ 2016 rugsėjo 1 d. - 2017 sausio 31 d. laikotarpiui.

2016 rugsėjo mėn. 16 d.

Kitas preliminarus paraiškų ir ataskaitų padavimo terminas – 2017 sausio 25 d. (naujas laiko skyrimas: nuo 2017 vasario 1 d. iki birželio 1 d.)

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. Kadangi ankstesniuose projektuose dažniausiai nebuvo numatyti pinigai skaičiavimo laiko apmokėjimui, nuo šiol už patvirtintą paraišką bus imamas 30 Eurų mokestis. 30 Eurų mokestis neimamas iš projektų, kurie moka už panaudotą skaičiavimo laiką projekto lėšomis. Šiuo metu kaina – 17 Euro centų už 12 branduolių mazgo astronominę valandą (esant sistemos problemoms, panaudotas laikas visada apskaičiuojamas vartotojo naudai).
4. PRAŠOM ateities projektuose numatyti kažkiek lėšų HPC sąnaudoms padengti.

Jeigu turit nepridėtų atspausdintų darbų su padėka „HPC Saulėtekis“, prašom jų kopijas atsiųsti. Skirstant kompiuterio laiką bus atsižvelgiama į padėkas „HPC Saulėtekis“.

Nr.	Pareiškėjas	Organizacija (padalinys)	Projektas	Vartotojai	Paskirtas laikas 2016 rugsėjo 1 d. - 2017 sausio 31 d. laikotarpiui *, **	Apmokėjimas pagal VU taisykles***	Ataskaita už laikotarpį: nuo 2016 balandžio 1 d. iki rugpjūčio 31 d.	Pastabos
<b>Patvirtintos paraiškos</b> (Dėl vartotojo ir klasių sukūrimo kreiptis adresu <a href="mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt">mindaugas.macernis@ff.vu.lt</a> )								
1.	Vytautas Abramavičius	VU (FF TFK)	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Kvantinės dalelės banginės funkcijos atvirojoje sistemoje dinaminės savybės”	1 vartotojas	4000 mzg. val.	30 Eur	'apc14v' sunaudotas laikas: 87.32 mzg.val. 1 straipsnis (doi: 10.1038/srep32914);	Doktorantas. Pateikti straipsnio pdf kopiją
2.	Kęstutis Aidas	VU (FF BFSK)	VU Fizikos fakulteto Bendrosios fizikos ir spektroskopijos katedros vykdoma mokslinių tyrimų	5 vartotojai	2500 mzg. val.	30 Eur	'apc14t' sunaudotas laikas: 3606.61 mzg.val. 1 konferencija	Pateikti tezės pdf kopiją

			tema "Molekulinių vyksmų biologinėse ir mezoskopinėse sistemose spektriniai tyrimai"					
3.	Audrius Alkauskas	FTMC	Projektas M-ERA.NET-1/2015 („Deimanto defektų panaudojimas nanometrologijoje“) reikmėms (paraiškos registracijos numeris Nr. 2215; finansavimo sutarties Nr. M-ERA.NET-1/2015) – taškinių defektų deimante abinitio skaičivimai.	3 vartotojai	4000 mzg. val. (perkeltas likutis į naują laikotarpį)	Apmokėjimas pagal sutartį	'apc14j' sunaudotas laikas: 3233.02 mzg.val.	Sutvarkyti apmokėjimo formalumus
4.	Lina Davulienė	VU (TFK)	Hidrodinaminių procesų Lietuvos jūriniuose vandenyse modeliavimas	1 vartotojas	150 mzg.val	30 Eur	'apc14m' sunaudotas laikas: 149.07 mzg.val.	bando
5.	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	3000 mzg.val	30 Eur	dėl persikėlimo darbų praeita laikotarpį visiškai neatlikinėjo planuotų skaičiavimų	-
6.	Gediminas Gaigalas	VU (TFAI)	biudžetinė tema „Koreliaciniai ir reliatyvistiniai efektai sudėtinguose atomuose ir jonuose“	1 vartotojas	2712 mzg. val.	30 Eur	-	Naujas vartotojas
7.	Andrius Gelžinis	VU (FF TFK)	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Elektroninio sužadavimo molekulinuose agregatuose dinamikos modeliavimas tiksliais ir artutiniais	1 vartotojas: A. Gelžinis	15000 mzg. val.	30 Eur	apc14o' sunaudotas laikas: 12084.05 mzg.val. ; ruošiasi rašyti 1 str.	Doktorantas. Laikas skiriamas, jeigu kiti tuo metu nebus užėmę resursų.

			metodais”					
8.	Alytis Gruodis	VU (FF BFSK)	LMT Bendri Lietuvos Japonijos projektai LJB-3/2015 „Organinio lazerinio tranzistoriaus sukūrimo linkme“ (2015-2017), projekto vadovas Prof. Saulius Juršėnas	1 vartotojas	3000 mzg. val.	30 Eur	,apc14u‘ sunaudotas laikas: 440.77 mzg.val. 1 straipsnis, 1 konferencija	Pateikti straipsnio ir tezės pdf kopiją
9.	Vygandas Jarutis	VU (FF KEK)	Doktorantūros tema „Pikosekundinio mikrolazerio impulsais kaupinamo parametrinio šviesos generatoriaus tyrimas“	1 vartotojas	300 mzg. val. (30 mzg val. su 10 mzg)	30 Eur	'apc16n' sunaudotas laikas: 2036.44 mzg.val.	Doktorantas. Trūksta ataskaitos.
10.	Valdas Jonauskas	VU TFAI	VU TFAI tema „Tvarkių ir netvarkių atominių sistemų savybių tyrimas“	2 vartotojai	3000 mzg. val. + SGI 1 mėn.	30 Eur	tst01' sunaudotas laikas: 21068.49 mzg.val. ir 1 mėn SGI; 1 straipsnis (pateiktas)	-
11.	Gintautas Saulis	VDU	"Antibakterinių ir citostatinių preparatų efektyvumo didinimas stiprinant jų sąveiką su ląstelėmis"	1 vartotojas	1000 mzg. val.	Apmokėjimas pagal sutartį	nenaudojo	-
12.	Vadimas Starikovičius	VGTU	„Trupmeninių išvestinių uždavinių lygiagretieji sprendimo algoritmai“	2 vartotojai	4000 mzg. val.	30 Eur	Nenaudojo. 1 straipsnis iš ankstesnio laikotarpio.	-
13.	Augustinas Stepšys	VU (FF TFK)	Disertacijos tema „Skaitinių metodų taikymai lengvųjų branduolių modelių kūrimui“	1 vartotojas	2000 mzg. val.	30 Eur	'apc15c' sunaudotas laikas: 376.44 mzg.val.; pristatymas seminare	Doktorantas; Pateikti straipsnio ir tezės pdf kopiją. Praėjusį laikotarpį minėta, kad ruošiamas straipsnis: kokia situacija?
14.	Jonas Striaukas	VU (EF) su Lietuvos banku	teoriniams DSGE modeliams ir statistinių	3 vartotojai	prašo viso klasterio visam laikotarpiui. Skiriama 5000 mzg.	30 Eur	-	Paraiškoje prašomas laikas per didelis (buvo prašoma viso

			/empirinių modelių skaičiavimams		val. (maksimaliai iki 5 mzg. per visą laikotarpį)			klasterio laiko). Laikas skiriamas, jeigu kiti tuo metu nebus užėmę resursų.
15	Stepas Toliautas	VU (FF TFK)	1. Vyksmų modeliavimo laboratorijos vykdoma mokslinė veikla; 2. Mokslo projektas „Fotoindukuotų vyksmų dinamika baltyminiuose kompleksuose ir modelinėse sistemose“; 3. Mokslo projektas „Optiškai aktyvių molekulinų sistemų koherentinių nuo laiko priklausančių spektrų modeliavimo metodų vystymas“.	3 vartotojai	2000 mzg. val.	30 Eur	apc14y' sunaudotas laikas: 0 mzg.val. 'apc14z' sunaudotas laikas: 9155.37 mzg.val. 1 str., 1 bakalaурinis darbas	Straipsnyje nėra padėkos, o tik paminėjimas tekste, kitą kartą gali būti neskiriamas skaičiavimo laikas.
16.	Aušra Vektarienė	VU (TFAI)	TFAI tema: „Atominių ir subatominių dalelių bei jų darinių, spinduliuotės, kosminių kūnų ir sudėtingų sistemų tyrimai“	2 vartotojai	4500 mzg. val.	30 Eur	apc15g' sunaudotas laikas: 1635.6 mzg.val.; planuoja 1 straipsnį	-
17.	Martynas Velička	VU (FF BFSK)	„Biologinių molekulių paviršiaus sustiprintos Ramano sklaidos spektrų skaičiavimas.“	1 vartotojas	2000 mzg. val.	30 Eur	Dirbo kartu su K. Aidu ir ataskaita bendra	doktorantas
18.	Ernestas Žąsinas	VU (TMI)	CERN – VU bendradarbiavimo projektas 2016	1 vartotojas	100 mzg. val.	30 Eur	-	-

			metams.					
19.	Justinas Čeponkus	VU BFSK	Tema: Heksafluoroacetilacetono ir jo izotopologų sąveikos su vandens bei deuteruoto vandens molekūlėmis tyrimas.	2 vartotojai: Milda Pučetaitė, Vida Daukšaitė	1000 mzg. val.	30 Eur	apc 16p' sunaudotas laikas: 131.28 mzg.val. 2 konferencijos, planuojamas 1 str. prašo 1000 val. (200 val./mėn)	Pateikti tezių pdf kopijas
<b>Pateiktos ataskaitos</b> Ataskaitas galima patikslinti iki 2016-10-15 (atsiųsti <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> )								
20.	Milda Pučetaitė	VU BFSK	Tema: L-cistino virpesinių spektrų kvantmechaniniai skaičiavimai	-	-	-	'apc 16o' sunaudotas laikas: 57.98 mzg.val. 1 bakalurinis darbas	Bakalauriniame darbe nėra aiškios padėkos.
<b>Nepateiktos ataskaitos</b> Ataskaitas galima pateikti iki 2016-10-15 (atsiųsti <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	Arūnas Kučinskas	VU TFAI	Biudžetinė tema: Molekulių spektro linijų susidarymas raudonojoje milžinėje HD 122563	2 vartotojai: A. Kučinskas, J. Klevas	-	-	1 mėn. SGI	Pateikti ataskaitą
22	Kastytis Zubovas	VU FF AO Dr.	VU tema: „Stochastiniai efektai žvaigždžių sistemose“.	2 vartotoja:; Kastytis Zubovas; Eimantas Ledinauskas (studentas, dirba temoje)	-	-	1 mėn. SGI	Pateikti ataskaitą
23	Kostas Sabulis	VU FF AO, doktorantas	Biudžetinė VU AO tema: „Stochastiniai efektai žvaigždžių sistemose“	1 vartotojas	-	-	1 mėn. SGI	Pateikti ataskaitą
24.	Darius Abramavičius	VU FF TFK doktorantas	Mokslinis darbas disertacijos tema – “Grafeno spektro modeliavimas”	1 vartotojas: Darius Abramavičius	-	-	Sunaudotas laikas valadomis: 0 mzg.val.	Neskaičiavo
25.	Vytautas Butkus	VU TFK	Tema „Fotoindukuotų vyksmų dinamika baltyminiuose kompleksuose ir modelinėse sistemose“ (užduotis: Vibroninė	1 vartotojas: V. Butkus	-	-	Sunaudotas laikas valadomis: 0 mzg.val.	Neskaičiavo

			sąveikos ir statinės netvarkos įtaka fotosintetinio bakterijų reakcijų centro spektriniam signalams)					
26.	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	-	-	Sunaudotas laikas valdomis: 0 mzg.val.	Neskaičiavo
.	Vygandas Jarutis	Dr. doktoranto vadovas	Juliaus Vengelio doktorantūros tema „Pikosekundinio mikrolazerio impulsais kaupinamo parametrinio šviesos generatoriaus tyrimas“	1 vartotojas: V. Jarutis	-	-	'apc16n' sunaudotas laikas: 2036.44 mzg.val.	Pateikti ataskaitą

\*(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.