

Informacija apie APC teikiamas paslaugas

VU Aukšto našumo skaičiavimo centro atviros prieigos (APC) superkompiuteris (HPC Saulėtekis)

Eil. Nr.	Paslauga	Tikslus paslaugos aprašymas	Panaudojimo galimybės (konkrečios veiklos)	Personalas, teikiantis paslaugą (vardas, pavardė, tel., el. paštas)	Paslaugos teikimo laikas, skiriamas atvirai prieigai (val. per mėn.)	Paslaugos naudojimosi įkainiai (Eurais už 1 mazgą, (už 1 mazgo 1 astronominę val.))		Paslaugos teikimo vieta (adresas)
						Taikant visą kainą	Taikant lengvatines sąlygas (VU projektams ir bendriems darbams)	
1	Kvantinės chemijos ir molekulių mechanikos skaičiavimai	Panaudojant programas Gamess, NwChem, Dalton, WebMO.	Visi resursai, nekomercinei veiklai.	Teorinės fizikos katedra. Kreiptis: Juozas Šulskus El. paštas: juozas.sulskus@ff.vu.lt http://supercomputing.ff.vu.lt Dr. Mindaugas Mačernis, +370 5 2366049 mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Pagal susitarimą	0,9 + darbuotojų užmokestis	0,17 + darbuotojų užmokestis	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 310-311 kab. Saulėtekio al. 9, Vilnius
2	Kvantinės chemijos skaičiavimai	Gaussian09, WebMO	Visi resursai, tik VU vartotojų nekomercinei veiklai.	Teorinės fizikos katedra. Kreiptis: Juozas Šulskus El. paštas: juozas.sulskus@ff.vu.lt http://supercomputing.ff.vu.lt Dr. Mindaugas Mačernis, +370 5 2366049 mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Pagal susitarimą	0,9 + darbuotojų užmokestis	0,17 + darbuotojų užmokestis	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 310-311 kab. Saulėtekio al. 9, Vilnius

HPC Saulėtekis

3	Molekulių dinamikos skaičiavimai	Amber12, Crystal	Visi resursai, tik VU FF vartotojų nekomercinei veiklai.	Teorinės fizikos katedra. Kreiptis: Juozas Šulskus El. paštas: juozas.sulskus@ff.vu.lt http://supercomputing.ff.vu.lt Dr. Mindaugas Mačernis, +370 5 2366049 mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Pagal susitarimą	0,9 + darbuotojų užmokestis	0,17 + darbuotojų užmokestis	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 310-311 kab. Saulėtekio al. 9, Vilnius
4	Kvantinės chemijos ir molekulių mechanikos skaičiavimai	Panaudojant programas Molcas, Molpro, VASP, Qchem, WebMO	Visi resursai, pagal licencijas tik bendriems darbams su VU FF Teorinės fizikos katedra.	Teorinės fizikos katedra. Kreiptis: Juozas Šulskus El. paštas: juozas.sulskus@ff.vu.lt http://supercomputing.ff.vu.lt Dr. Mindaugas Mačernis, +370 5 2366049 mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Pagal susitarimą	0,9 + darbuotojų užmokestis	0,17 + darbuotojų užmokestis	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 310-311 kab. Saulėtekio al. 9, Vilnius
5	Konsultavimas ir pagalba panaudojant APC kompiliatorius, derinant programas.	Kompiliatoriai PGI, Intel, PGI, Allinea DDT. MPI ir OpenMP programavimo sistemos.	Programų derinimas, kompiliavimas, įdiegimas APC.	Teorinės fizikos katedra. Kreiptis: Juozas Šulskus El. paštas: juozas.sulskus@ff.vu.lt http://supercomputing.ff.vu.lt Dr. Mindaugas Mačernis, +370 5 2366049 mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Pagal susitarimą	0,9 + darbuotojų užmokestis	0,17 + darbuotojų užmokestis	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 310-311 kab. Saulėtekio al. 9, Vilnius
6	Matlab skaičiavimai	Panaudojant Matlab paketus: MATLAB, Simulink, Parallel Computing Toolbox, Symbolic Math Toolbox. Linuks aplinkoje, panaudojant iki 224 skaičiavimo branduolių.	Visi resursai, tik VU FF vartotojų nekomercinei veiklai.	Teorinės fizikos katedra. Kreiptis: Juozas Šulskus El. paštas: juozas.sulskus@ff.vu.lt http://supercomputing.ff.vu.lt Dr. Mindaugas Mačernis, +370 5 2366049 mindaugas.macernis@ff.vu.lt	Pagal susitarimą	0,9 + darbuotojų užmokestis	0,17 + darbuotojų užmokestis	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 310-311 kab. Saulėtekio al. 9, Vilnius