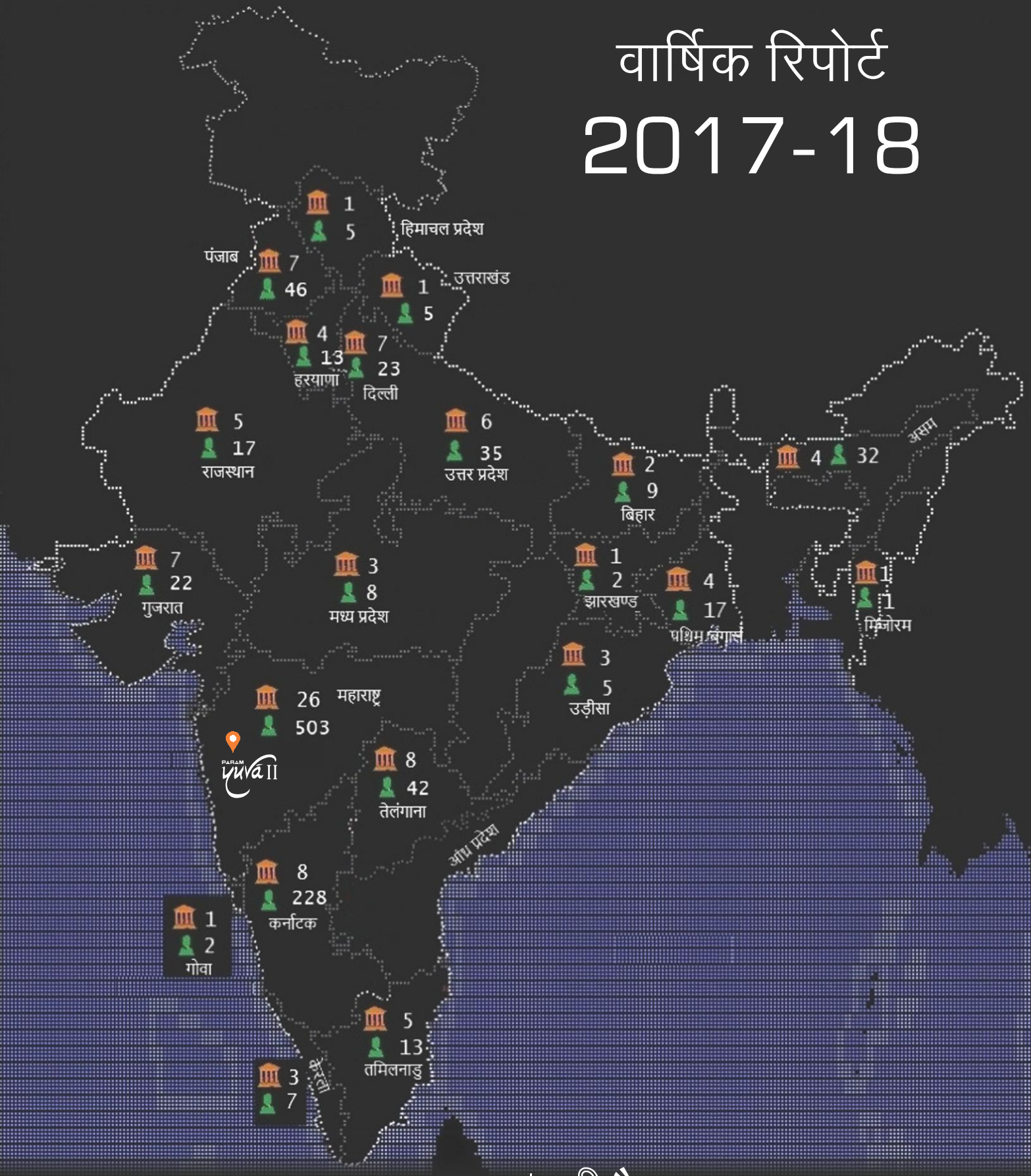
[root@npsf ~]$

राष्ट्रीय परम सुपर कंप्यूटिंग सुविधा

वार्षिक रिपोर्ट

2017-18



NPSF National PARAM Supercomputing Facility

सी डैक CDAC

प्रगत संगणन विकास केंद्र

www.cdac.in

महानिदेशक का संदेश

वर्ष 2018 सी-डैक के लिए यादगार वर्ष है क्योंकि राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग सुविधा (एनपीएसएफ) ने अपने प्रवर्तन से लेकर संचालन के "दो दशक" की उपलब्धि प्राप्त की है। एनपीएसएफ के तत्वावधान में सुपर-कंप्यूटरों की परम श्रृंखला के निर्माण को राष्ट्र को समर्पित किया गया है। इसमें परम 8000, परम 9000, परम 10000, परम युवा एवं परम युवा II प्रणालियां शामिल हैं। परम युवा II वर्तमान प्रणाली है, जिसने 1000+ एचपीसी उपयोगकर्ताओं के साथ 100 से अधिक संस्थानों से 2.6 लाख से अधिक एचपीसी जॉब संसाधित किया है।

अनुभव और सीखने की क्षमता के साथ अभियांत्रिकी कॉलेजों एवं विभिन्न अनुसंधान व विकास संस्थानों सहित एकदम से मूल स्तर तक पहुँचने के लिए सी-डैक परम शावक नामक परम के एक छोटे संस्करण को रोल आउट करने में सफल हुआ है।

मैं एनपीएसएफ के सभी उपयोगकर्ताओं को उनके सतत सहयोग तथा भारत के शैक्षिक एवं वैज्ञानिक समुदाय के लिए किए गए उत्कृष्ट योगदान के लिए आभार व्यक्त करता हूँ। ये उपलब्धियां सी-डैक को उन्नत सक्षम कंप्यूटिंग के क्षेत्र में नई चुनौतियों का सामना करने सक्षम बनाती हैं। राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग मिशन (एनएसएम) के माध्यम से सी-डैक एचपीसी उपयोगकर्ता समुदाय के लाभ के लिए कई प्रमुख संस्थानों में कुछ एचपीसी प्रणालियों को परिनियोजित करने के लिए प्रतिबद्ध है।

मैं आश्वासन देता हूँ कि भविष्य में, एचपीसी उपयोगकर्ता समुदाय को सी-डैक के ऐसे आगामी सुपर कंप्यूटरों का अनुभव मिलेगा, जो विज्ञान एवं प्रौद्योगिकी के प्रमुख क्षेत्रों में कुछ चुनौतीपूर्ण समस्याओं के समाधान के लिए अत्याधुनिक एचपीसी सुविधाएं प्रदान करेंगे। मैं आप सभी को भावी प्रयासों के लिए सफलता की कामना करता हूं !

डॉ हेमंत दरबारी

महानिदेशक, सी-डैक

विभागाध्यक्ष का संदेश

मुझे एनपीएसएफ वार्षिक रिपोर्ट जारी करने पर गर्व की अनुभूति हो रही है। दरअसल, यह रिपोर्ट विभिन्न वैज्ञानिक, अनुसंधान व विकास तथा शैक्षिक संस्थानों द्वारा हमारे राष्ट्र में संपादित वैज्ञानिक कार्यों को संजोए हुई है।

मैं एनपीएसएफ सुविधा का उपयोग करने वाले 100 से अधिक अनुसंधान व विकास तथा शैक्षिक संस्थानों के 1000 से अधिक उपयोगकर्ताओं के सहयोग में अथक और निरंतर योगदान देने वाली एनपीएसएफ टीम को बधाई देता हूँ। ये विशेषताएँ तो बस इस 2018 वार्षिक रिपोर्ट में शामिल प्रयासों एवं जानकारी रूपी निधि के नमूने हैं। प्रकाशन के अलावा, इस वर्ष हम एनपीएसएफ के उपयोग से कार्यान्वित हो रहे कुछ अच्छे कार्यों को भी शामिल कर रहे हैं।

हम आशा करते हैं कि आप हमारी हाल की गतिविधियों की झलक का आनंद उठाएंगे। राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग मिशन (एनएसएम) पर ध्यान देने के साथ ही उपयोगकर्ता आधार को कई गुना बढ़ने की उम्मीद है, जिसके लिए एचपीसी प्रणालियों के प्रभावी प्रबंधन हेतु प्रशिक्षित श्रमशक्ति की आवश्यकता हो सकती है। इस आवश्यकता को पूरा करने के लिए,एनपीएसएफ अपने दो दशकों से अधिक वाली विशेषज्ञता के साथ एचपीसी प्रबंधन पर प्रशिक्षण देना शुरू कर दिया है। इस तरह की प्रमुख गतिविधियों में से एक "एचपीसी - परिचय" पर एनटीआर प्रतिनिधियों को 15 दिन का प्रशिक्षण प्रदान करना है। एनपीएसएफ टीम ऐक्ट्स, सी-डैक द्वारा संचालित डीएचपीसीए पाठ्यक्रम में विभिन्न एचपीसी उप-क्षेत्रों जैसे कि शेड्यूलर, स्टोरेज आदि पर व्याख्यान देने में योगदान दे रही है।

एनपीएसएफ से जुड़े सभी हितधारकों एवं उपयोगकर्ताओं के लिए मैं आने वाले वर्ष को बहुत ही सृजनशील एवं मनोरम कंप्यूटिंग वर्ष होने की कामना करता हूँ।

विनोद कुमार एम.
केंद्र प्रमुख, सी-डैक मोहाली तथा
वरिष्ठ निदेशक एवं विभागाध्यक्ष, एचपीसी-आई व ई, सी-डैक, पुणे

विषय सूची

1. एनपीएसएफ - परिचय 1

2. समीक्षा में वर्ष 2017 - 2018 3

3. मूल बातें 7

4. आंकड़े 9

5. शोध प्रकाशन की रिपोर्ट्स और कार्य की रिपोर्ट्स 35

6. शोध प्रबंध 59

7. प्रकाशन 61

8. औद्योगिक यात्रा 71

परिशिष्ट 77

परिशिष्ट ए संस्थानों में उपयोगकर्ता 79

परिशिष्ट बी वर्ष 20171-8 के दौरान नामांकित परियोजनाएं 85

परिशिष्ट सी पिछले पांच वर्षों की झलक 93

परिशिष्ट डी उपयोगकर्ताओं से प्रशंसनीय सन्देश 97

परिशिष्ट ई आगंतुकों के विचार 101

परिशिष्ट ऍफ़ चित्रशाला 107

1

एनपीएसएफ - परिचय

एनपीएसएफ में क्लस्टर

परम युवा II: वर्ष 2013 से संचालित, Peak Perf. 529.4 TFlop/s, जून रैंक 69वाँ में 2013, टॉप500

परम युवा : संचालन वर्ष 2008-2012, Peak Perf. 54 TFlop/s, नवंबर 69वां रैंक में 2008, टॉप500

परम 10000 : संचालन वर्ष 1998-2005,Peak Perf. 100 GFlop/s

राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा डैक की स्थापना से लेकर उन्नत सक्षम कंप्यूटिंग-सी (एनपीएसएफ) में अनुसंधान व विकास के क्षेत्र में ढाई दशक से अधिक समय तक किए गए प्रयास का (एचपीसी) परिणाम है। विभिन्न शैक्षिक एवं अनुसंधान संस्थानों के वैज्ञानिक उपयोगकर्ता समुदाय के लिए अत्याधुनिक प्रदर्शन कंप्यूटिंग प्रणालियों एवं संसाधनों को सौंपने के लिए राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा का परिनियोजन 1998 में सीडैक-, पुणे में किया गया था ताकि देश में उन्हें ऐसी प्रणालियों के बारे में जानने, उनके उपयोग करने और एचपीसी जागरूकता को बढ़ाने में सहायता मिल सके।

राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा की परम 10000, परम युवा एवं परम युवा II नामक सुपरकंप्यूटिंग पहलों ने भारत में समांतर एवं वितरण प्रक्रिया प्रौद्योगिकियों में योगदान किया है, जिससे विभिन्न वैज्ञानिक एवं अभियांत्रिकी विषयों में अधिक प्रभावी रूप से अनुसंधान करने के लिए विभिन्न शोधकर्ताओं को सहायता मिली है।

परम युवा II

त्वरक / सह-प्रोसेसर तकनीक के साथ एचपीसी में हाल के रुझानों के समकक्ष रहने के क्रम में परम युवा का उन्नयन किया गया। यह उन्नत संस्करण परम युवा II कहलाया और इसका शुभारंभ भारत में बने सुपरकंप्यूटरों की प्रतिष्ठित परम शृंखलाओं के नवीनतम एडिसन में फरवरी 2013 में किया गया। परम युवा II अपने कंप्यूटिंग पावर को प्राप्त करने के लिए Intel Xeon के साथ Intel Xeon Phi के संयोजन से देश में पहली एचपीसी प्रणालियों में से एक है। इस शुभारंभ के साथ, भारत में सी-डैक भी पहली अनुसंधान व विकास संस्थान बन गया जिसने 500 TF माइलस्टोन को पार किया।

परम युवा

परम युवा) जिसे आगे परम युवा । कहा गया (था जिसे 2008 में निर्मित कर शुभारंभ किया गया। इसे सुपरकंप्यूटिंग सम्मेलन, ऑस्टिन, टेक्सास, संयुक्त राज्य अमेरिका में नवंबर 2008 में जारी सूची में टॉप500 में 69वां रैंक मिला।

परम 10000

100 जीफ्लॉप पीक प्रदर्शन वाले परम 10000 का शुभारंभ 1998 में हुआ ताकि भविष्य में विकास के लिए मार्ग प्रशस्त किया जा सके।

एक विशिष्ट प्रणाली में 160 सीपीयू होते हैं और वह 100 GFLOPS के लिए सक्षम होते हैं लेकिन यह आसानी से TFLOP रेंज के लिए स्केलेबल था। इसे रूस और सिंगापुर को निर्यात किया गया।

एनपीएसएफ की टेक्निकल एफिलिएशन स्कीम

विभिन्न विश्वविद्यालयों, आईआईटी और अन्य अनुसंधान एवं विकास संस्थानों के उपयोगकर्ताओं को एनपीएसएफ में कंप्यूटिंग संसाधनों को प्राप्त करने के लिए राष्ट्रीय ज्ञान नेटवर्क के साथ संबद्ध विश्वसनीयता और उपलब्धता का लाभ मिला है। वैज्ञानिक समुदाय इस कंप्यूटिंग सुविधा का उपयोग एनपीएसएफ, सी-डैक के टेक्निकल एफिलिएट स्कीम के माध्यम से करता है।

इसके तहत, मुख्य अन्वेषक) विश्वविद्यालय/संस्थान/शोध एवं विकास में संकाय सदस्य /वैज्ञानिक (टेक्निकल एफिलिएट स्कीम के रूप में नामांकन करता है, शोधकर्ता, अपने छात्रों/सहयोगियों के साथ एनपीएसएफ संसाधनों पर उपयोगकर्ता एकाउंट पा सकता है तथा अपने शोध कार्य के लिए कंप्यूटिंग समय का उपयोग कर सकता है। संभावित उपयोगकर्ता अपने सवाल npsfhelp@cdac.in पर भेज सकते हैं।

2

समीक्षा में वर्ष 2017 - 2018

इस वर्ष, एनपीएसएफ ने एचपीसी के विभिन्न क्षेत्रों में प्रशिक्षण प्रदान करने का प्रयास किया। इसके तहत, 20 नवंबर 2017 से 8 दिसंबर 2017 तक राष्ट्रीय तकनीकी अनुसंधान संगठन (एनटीआरओ) के लिए एचपीसी परिचय पर 15 दिन का प्रशिक्षण कार्यक्रम आयोजित किया गया।

1. 19 मई 2017 को विद्युत अवसंरचना में आनेवाली विफलताओं के कारण एनपीएसएफ एचपीसी सेवाएं प्रभावित हुईं। इसके परिणामस्वरूप सभी रनिंग जॉब समाप्त करते हुए एचपीसी सिस्टम को पूरी तरह से बंद कर दिया गया।

2. सुश्री निशा अग्रवाल और श्रद्धा जानी द्वारा Memory Bandwidth analysis of 2nd Generation Intel Xeon Phi Processor (Knights Landing) and Intel Xeon (Broadwell) Processor नामक शीर्षक पर शुरुआती शोध कार्य किया गया। पोस्टर के रूप में प्रस्तुत इस कार्य को ISC 2017 सम्मेलन, फ्रैंकफर्ट, जर्मनी में एचपीसी में महिलाएं में स्वीकार किया गया।

3. इस वर्ष, एनपीएसएफ ने एचपीसी के विभिन्न क्षेत्रों में प्रशिक्षण प्रदान करने का प्रयास किया। इसके तहत, 20 नवंबर 2017 से 8 दिसंबर 2017 तक राष्ट्रीय तकनीकी अनुसंधान संगठन (एनटीआरओ) के लिए एचपीसी परिचय पर 15 दिन का प्रशिक्षण कार्यक्रम आयोजित किया गया। प्रशिक्षण कार्यक्रम में शामिल विषय - MPI; OpenMP; OpenCL; CUDA; बिगडाटा एनालिटिक्स; क्लस्टर कमीशनिंग और प्रशासन; इमेज प्रोसेसिंग।

4. इसी सिलसिले में, एनपीएसएफ टीम के सदस्य उन्नत कंप्यूटिंग प्रशिक्षण विद्यालय (ऐक्ट्स), सी-डैक के तहत एचपीसी सिस्टम प्रबंधन (एचपीसी-एसए) में स्नातकोत्तर डिप्लोमा के लिए प्रयोगशाला अभ्यास सत्रों के दौरान व्याख्यान देने, निरीक्षण एवं मार्गदर्शन करने तथा अंत मॉड्यूल परीक्षा आयोजित करने में अपने को व्यस्त रखे।

5. एनपीएसएफ़ में परियोजनाओं के मुख्य अन्वेषक (सीआई) को अवगत कराने तथा इस वर्ष से एवं आगे लागू किए गए उपयोग शुल्क के रूप में सेवा देने के प्रयास के रूप में एनपीएसएफ ने मासिक सीपीयू समय उपयोग के लिए इनवॉइस भेजने शुरु कर दिए हैं। संबंधित संस्थान के प्रमुख को त्रैमासिक उपयोग विवरण भेजने की भी योजना है। इसी प्रकार का एक इनवॉइस नीचे दिया गया है-

NPSF सीडैक CDAC

NATIONAL PARAM SUPERCOMPUTING FACILITY
Center for Development of Advanced Computing
Pune, India

INVOICE No.: NPSF/2018/01/01 Date: 25-Jan-2018

Bill to:

Chief Investigator of the Project: Project Guide

Institute: Institute name

Address : Institute Full Address

Project Name: Project-Name-PR

Bill Duration: 01/12/2017 to 31/12/2017

CPU Time[*] consumed

XXXXX
(In CPU Hrs.)

Project Account Monthly Summary For December-2017

Opening CPU Time Balance	Credited CPU Time	Total CPU Time Amount	CPU Time Consumed	Closing CPU Time Balance
xxxxxxx	xxxx	xxxxxxx	xxxxx	xxxxxxx

Above figures are in CPU Hours

No. of Jobs processed: xx

eMoney[†] consumed

XXX
Debit Points[‡]

(This is a computer generated invoice and no signature is required.)
Authorized Signatory

[*]CPU Time = No. of CPU Cores x No. of Hours consumed.
[†]eMoney = CPU Time x INR 3.00/hour.
[‡]One Debit Point is equivalent to 1000 INR.

6. 4 जनवरी 2018 को श्री वाई.एस. स्वरूप ने एमआईटी डब्लूपीयू कोथरुड, पुणे में "Overview of PARAM Yuva II" पर आमंत्रित व्याख्यान दिए।

7. 16 फरवरी 2018 को, सुश्री निशा अग्रवाल ने पुणे इंस्टीट्यूट ऑफ कंप्यूटर टेक्नोलॉजी (पीआईसीटी), पुणे के संकायों और छात्रों के लिए एमपीआई प्रोग्रामिंग पर आमंत्रित व्याख्यान दिया।

8. सी-डैक की परंपरा के अंग के रूप में, इस वर्ष 28 फरवरी 2018 को सी-डैक में आयोजित राष्ट्रीय विज्ञान दिवस समारोह के दौरान एनपीएसएफ टीम ने भाग लिया एवं एनपीएसएफ से संबंधित गतिविधियों का प्रदर्शन किया। परम युवा II मॉडल ने छात्रों एवं आम जनता का सबसे अधिक ध्यान आकर्षित किया। पुणे एवं आस-पास के जिलों जैसे मुंबई आदि से आए कुल लगभग 1600 दर्शकों (विभिन्न कॉलेजों एवं स्कूलों के छात्र) ने तकनीकी सत्रों एवं एनपीएसएफ के विस्तृत वर्णन का आनंद उठाया।

राष्ट्रीय विज्ञान दिवस समारोह, सी-डैक, पुणे में एनपीएसएफ स्वयंसेवक

3

मूल बातें

कुल कंप्यूटर नोड 290 (221 नोडयुवा परम , II का + कुछ संरक्षित पुराने नोड) कोर के साथ 60 |
परम युवा II के प्रत्येक कंप्यूट नोड में दो Intel Xeon Phi 5110P एक्सेलरेटर लगाए गए है ।
ऐसे प्रत्येक एक्सेलरेटर में 61 सीपीयू कोर हैं और यह 1 TF देता है ।
ओपन स्रोत 50वैज्ञानिक अनुप्रयोग/लाइब्रेरियां/उपकरणों को उपलब्ध कराया गया ।

तीन उपक्लस्टर

उपक्लस्टर 1	**परम युवा II** इंटेल सर्वर सिस्टम R2000GZ का 221 नोड क्लस्टर तथा Dual socket Intel Xeon E5 2670 (Sandy Bridge) प्रोसेसर प्रति नोड आठ CPU कोर प्रति साकेट, 2.6 GHz दो Intel Xeon Phi 5110P प्रति नोड Infiniband FDR इंटरकनेक्ट विभाजन: TESTp, FDRp, BIGJOBp, SDSp
उपक्लस्टर 2	60+ nodes cluster of HP Proliant DL580 G5 तथा साथ में Quad socket Intel Xeon X7350 प्रोसेसर प्रति नोड चार CPU कोर प्रति साकेट, 2.93 GHz सिस्टम इंटरकनेक्ट: PARAMNet3, Infiniband DDR विभाजन: DDRp
उपक्लस्टर 3	Supermicro SuperServer 1027GR-TRF का चार नोड क्लस्टर तथा साथ में Dual socket Intel Xeon E5 2650 (Sandy Bridge) प्रोसेसर प्रति नोड आठ CPU कोर प्रति साकेट, 2.6 GHz

	दो NVIDIA GPU Tesla M2090 प्रति नोड, Infiniband में FDR इंटरकनेक्ट विभाजन: GPUp
स्टोरेज	PFS based scratch space with10 GB/s write bandwidth होम एरिया: 178TB आर्काइवल : 400TB
सॉफ्टवेयर	आपरेटिंग सिस्टम: CentOS v6.2, Kernel v2.6.32-220 इंटेल क्लस्टर स्टूडियो XE 2013 इंटेल क्लस्टर स्टूडियो XE 2015 पीजीआई क्लस्टर विकास किट
अनुप्रयोग	File formats, data bases और math के लिए लाइब्रेरियां और साफ्टवेयर भौतिक विज्ञान / क्वांटम केमिस्ट्री, आणविक मॉडलिंग, यूआईडी डायनामिक्स, क्लाइमेट मॉडलिंग, सर्किट सिमुलेशन और एयरोस्पेस इंजीनियरिंग की तरह कई वैज्ञानिक अनुप्रयोग उपलब्ध हैं ।

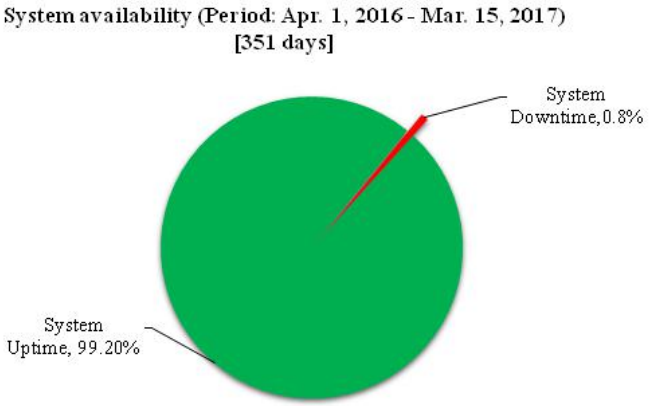
4

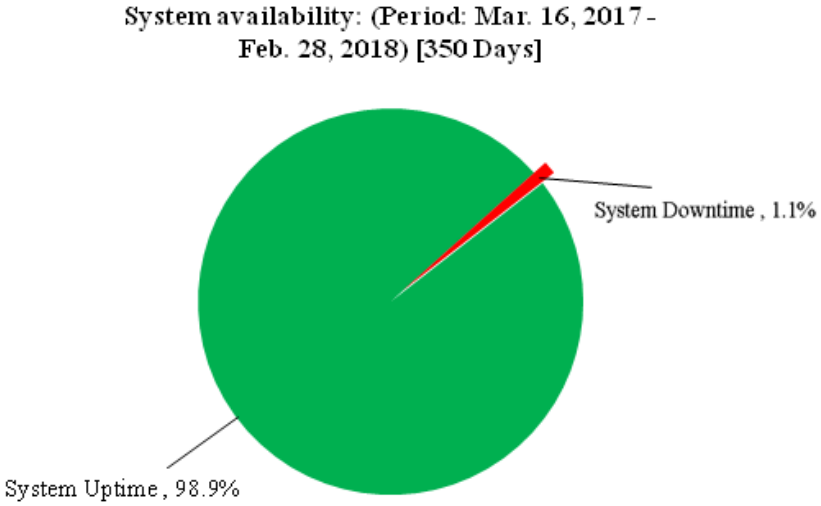
आंकड़े

वर्ष 2017-18 में : जोडे गए उपयोगकर्ता : 96 ; जोडे गए संस्थान: 16 ; संसाधित जॉब : 42 ,564

4.1 सिस्टम

सिस्टम की उपलब्धता

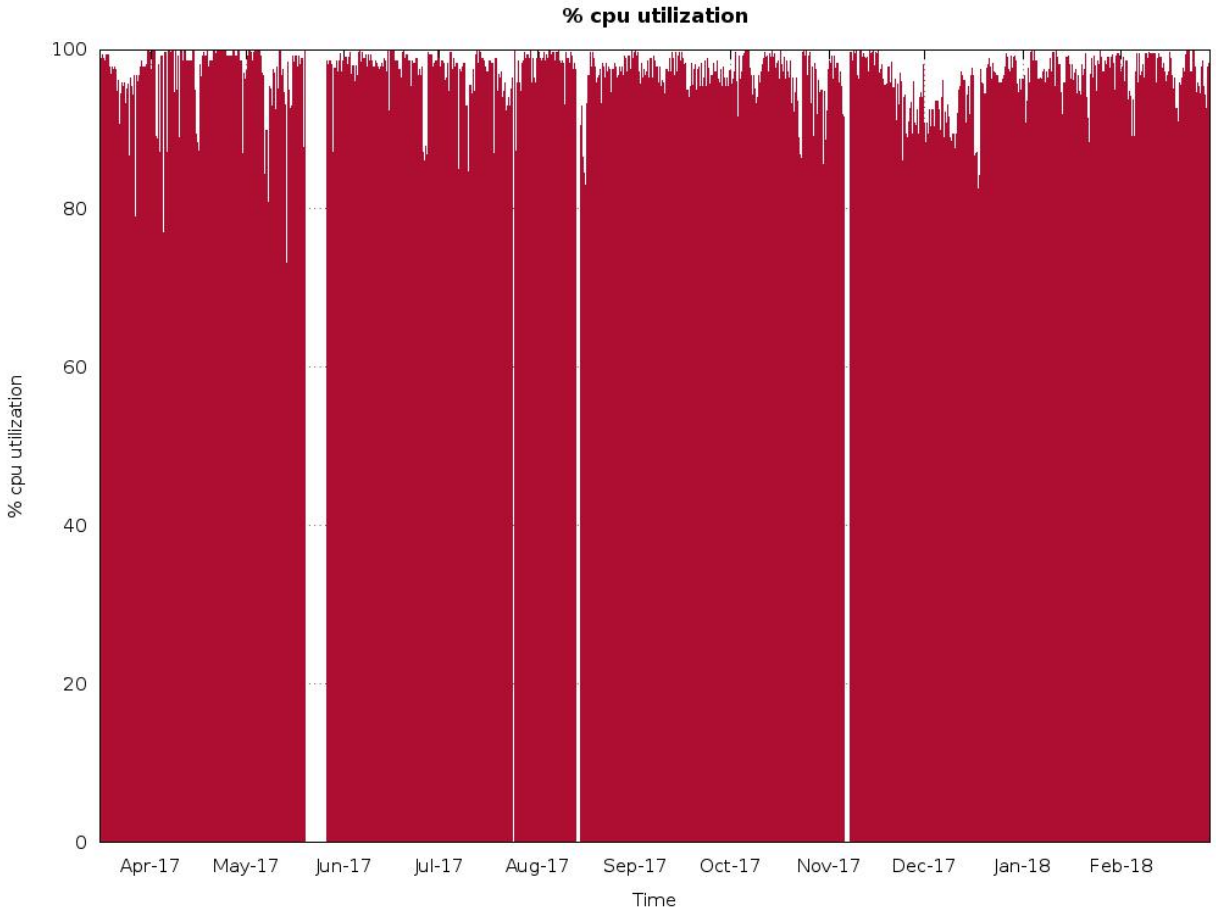




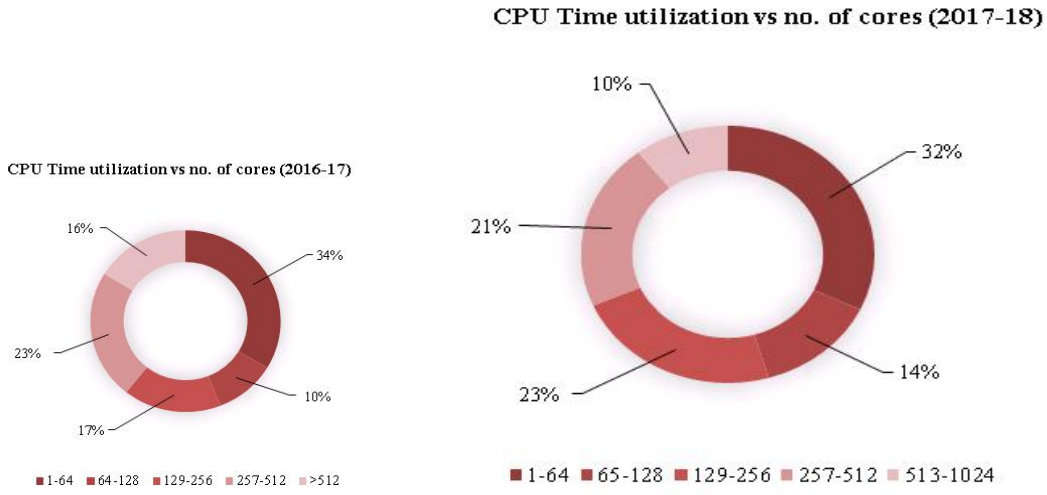
तालिका: सिस्टम उपलब्धता

अवधि	कुल समय	डाउन टाइम
16 मार्च'17 से 28 फरवरी'18	350 दिन (8400 घंटे)	3 दिन,21 घंटे(93 घंटे)
1 अप्रैल'16-15 मार्च'17	351 दिन (8424 घंटे)	2 दिन,18 घंटे (66 घंटे)

सिस्टम की उपयोगिता



सीपीयू समय उपयोगिता बनाम जॉब आकार

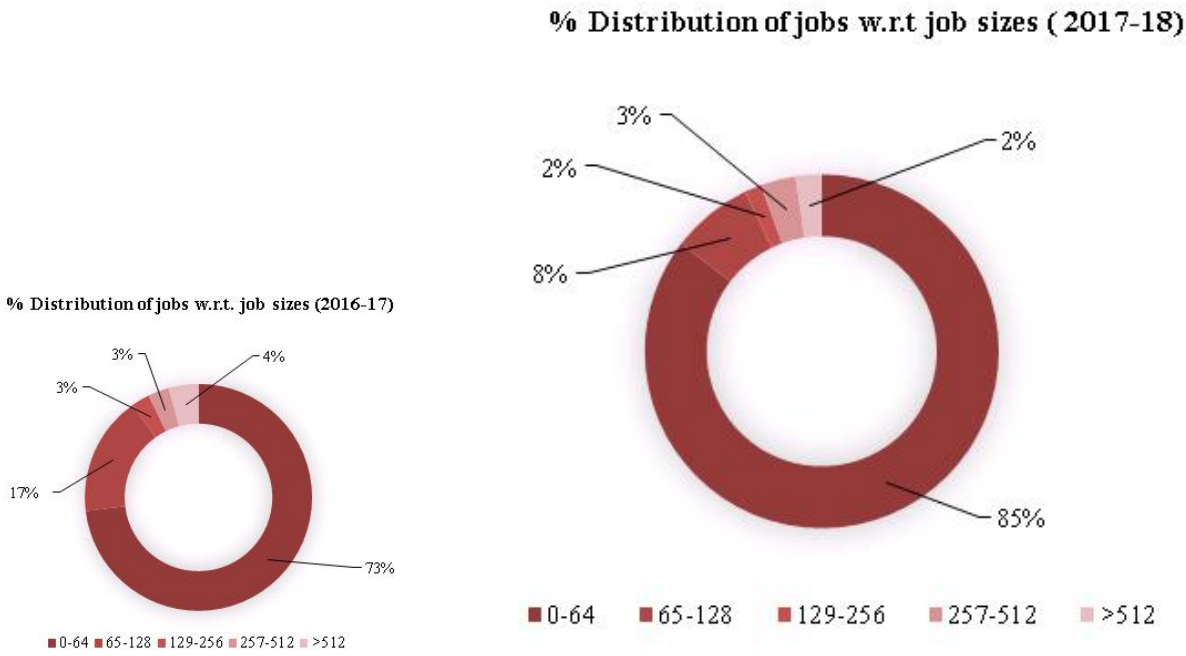


ऊपर का ग्राफ प्रस्तुत करता है की कैसे आवंटित सीपीयू का समय, जॉब के आकार के संबंध में खपत होता है।

तालिका: सीपीयू समय उपयोगिता बनाम जॉब आकार

	सीपीयू समय उपयोगिता (सेकंड में)	
जॉब आकार	2016-18	2017-18
1-64	40084868227	37931720605
65-128	12499978368	15937841856
129-256	19899317592	27205492336
257-512	27450739824	24952112240
>512	19464235056	12348922448

जॉब्स के आकार के संबंध में जॉब्स का वितरण (% में)



जॉब्स के आकार के संबंध में % जॉब्स के वितरण को ऊपर का ग्राफ प्रस्तुत करता है जिसमे 85 % जॉब्स ने 64 या उससे कम सीपीयू कोर के लिए अनुरोध किया है | यह अवलोकन % कतार अनुसार वितरण से पूरित है। यह ध्यान दिया जाना चाहिए कि 64 कोर या कम आकर के जॉब्स में पिछले वर्ष से 12% की वृद्धि हुई है और 65-128 कोर के जॉब्स में 9% की कमी आयी है |

तालिका: जॉब्स के आकार के संबंध में जॉब्स का वितरण

	जॉब्स की संख्या	
जॉब आकार	**2016-17**	**2017-18**
1-64	23560	36345
65-128	5499	3181
129-256	837	663
257-512	972	1366
>512	1364	1009

सक्रिय जॉब्स, निष्क्रिय जॉब्स और सिस्टम बैकलॉग

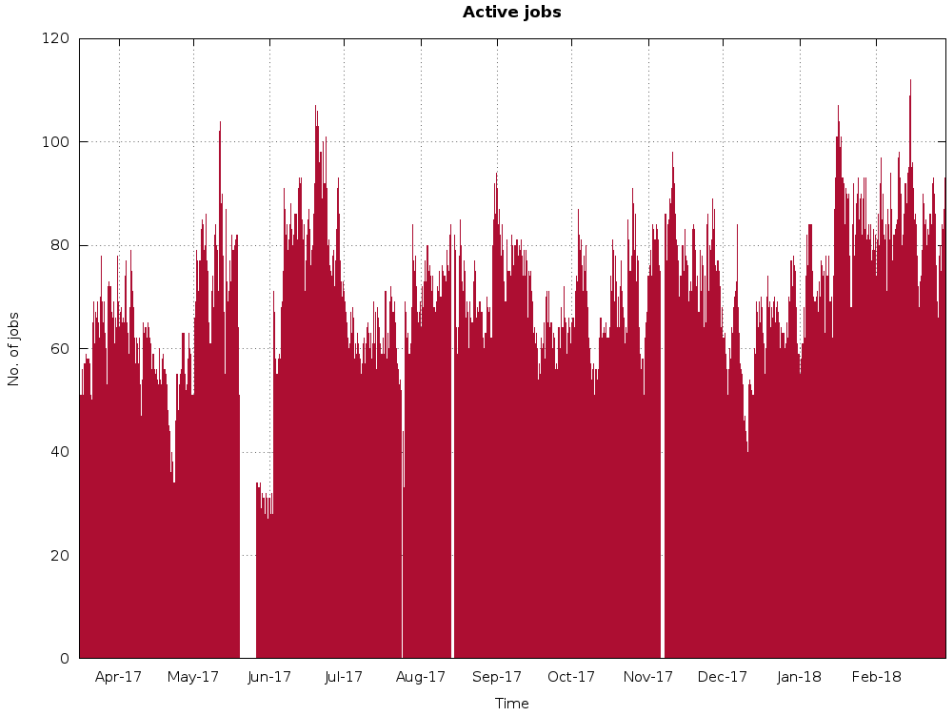
नीचे के दो ग्राफ्स

१) सक्रिय जॉब्स जो की वर्तमान में संसाधित किये जा रहे है और

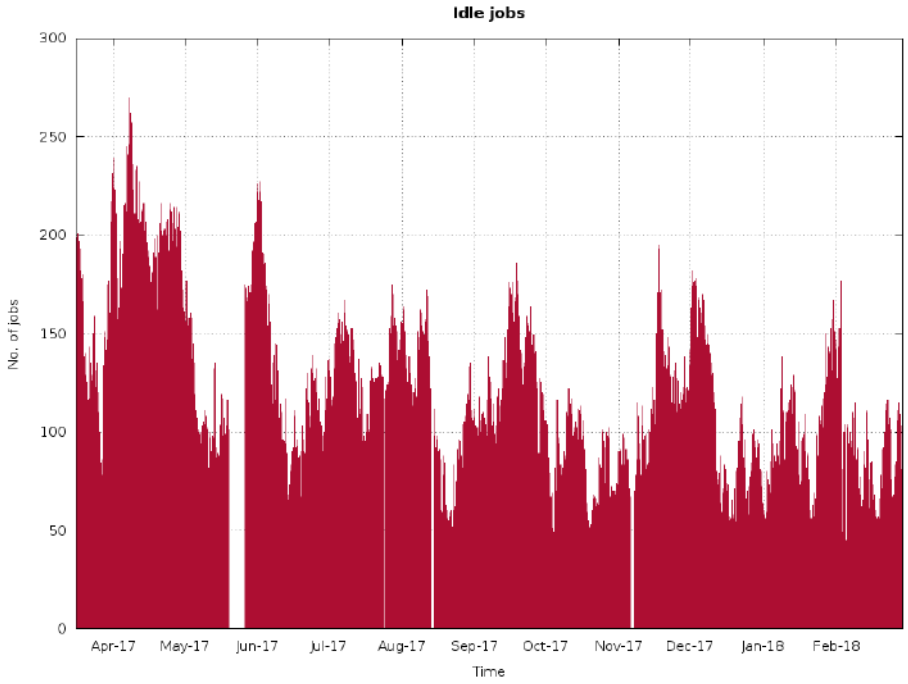
२) निष्क्रिय जॉब्स जो की निष्पादन के लिए पात्र है एवं आवंटित संसाधनों का इंतजार कर रहे है

को दर्शाता है

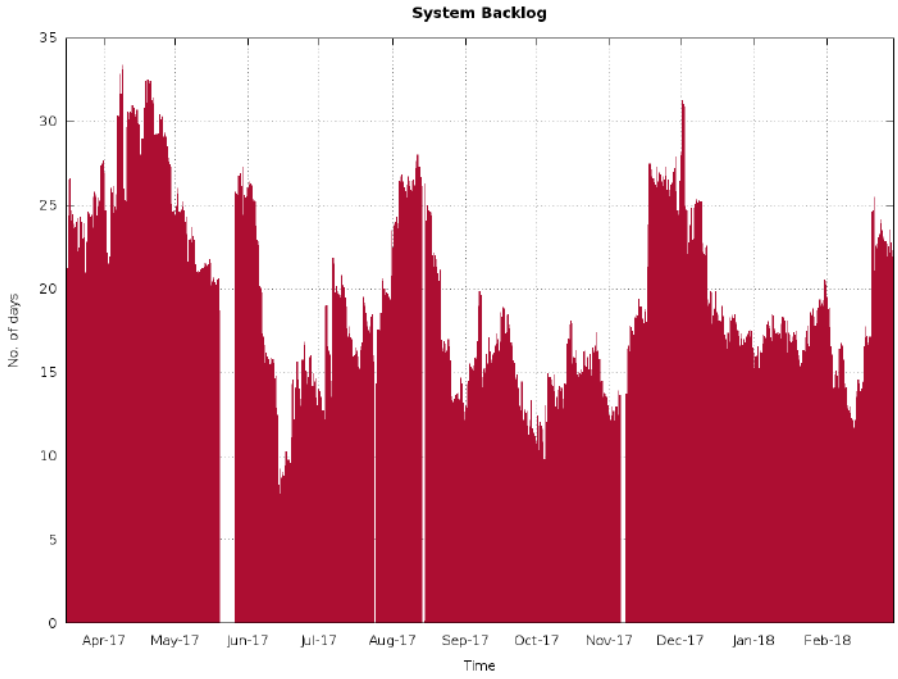
सक्रिय जॉब्स



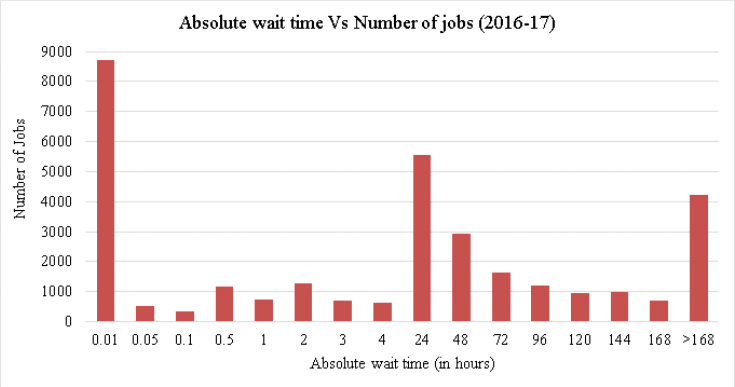
निष्क्रिय जॉब्स

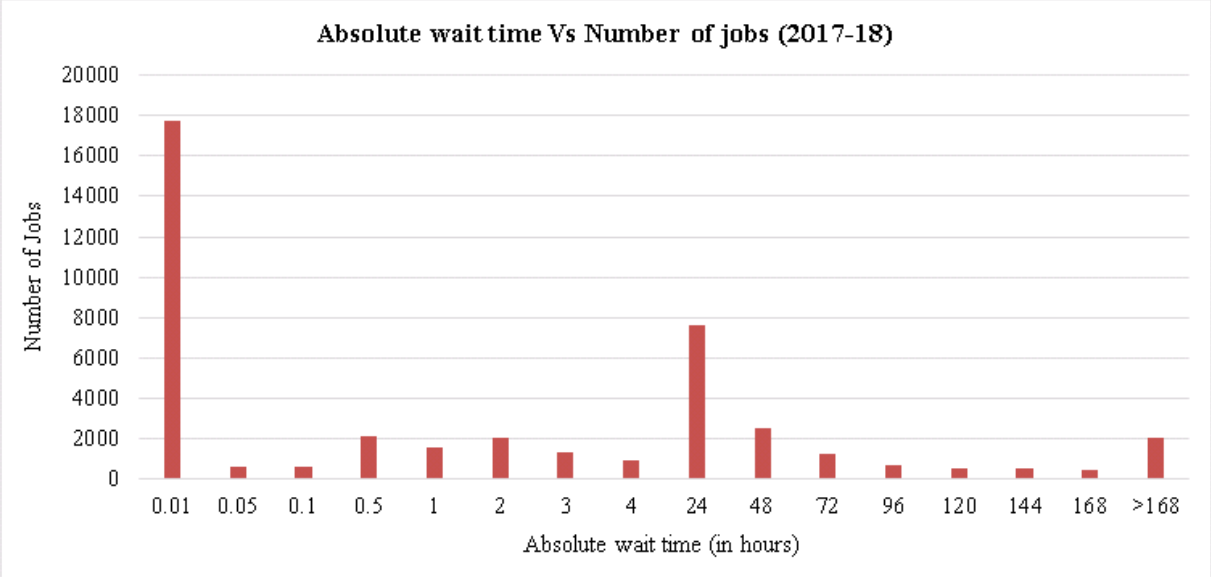


सिस्टम बैकलॉग



पूर्ण प्रतीक्षा समय बनाम जॉब्स की संख्या





ऊपर के ग्राफ्स दर्शाते है की अधिकतर जॉब्स के पूर्ण प्रतीक्षा समय में समग्र कमी आयी है | ऊपर की प्रस्तुति जॉब्स के आकार का विचार किए बिना दर्शायी गयी है|

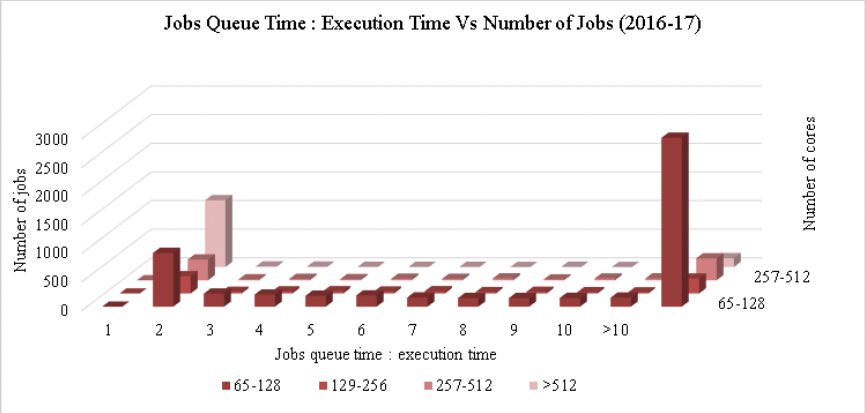
तालिका : पूर्ण प्रतीक्षा समय बनाम जॉब्स की संख्या

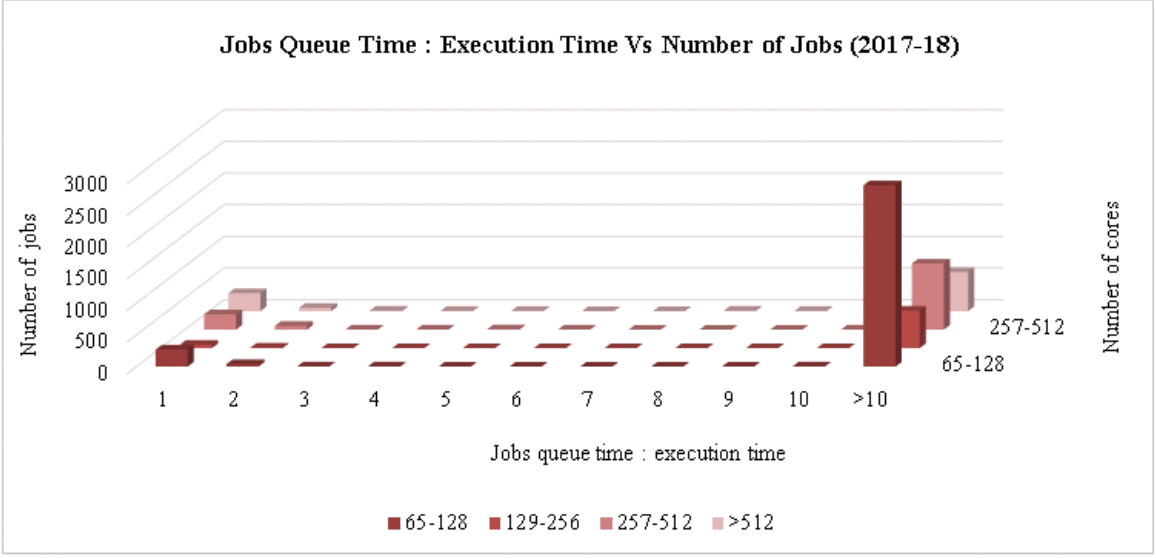
	जॉब्स की संख्या	
पूर्ण प्रतीक्षा समय (घंटे में)	2016-17	2017-18
0.01	8703	17730
0.05	535	622
0.1	328	580

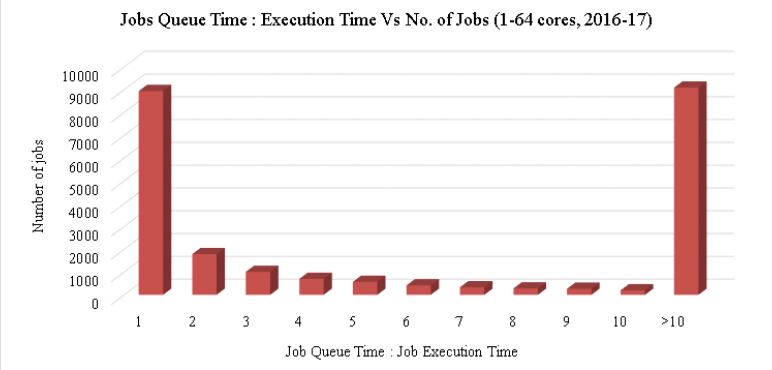
0.5	1180	2136
1	733	1538
2	1284	2075
3	695	1310
4	637	951
24	5546	7628
48	2918	2518
72	1633	1238
96	1218	702
120	956	553
144	1001	517
168	713	474
>168	4215	2038

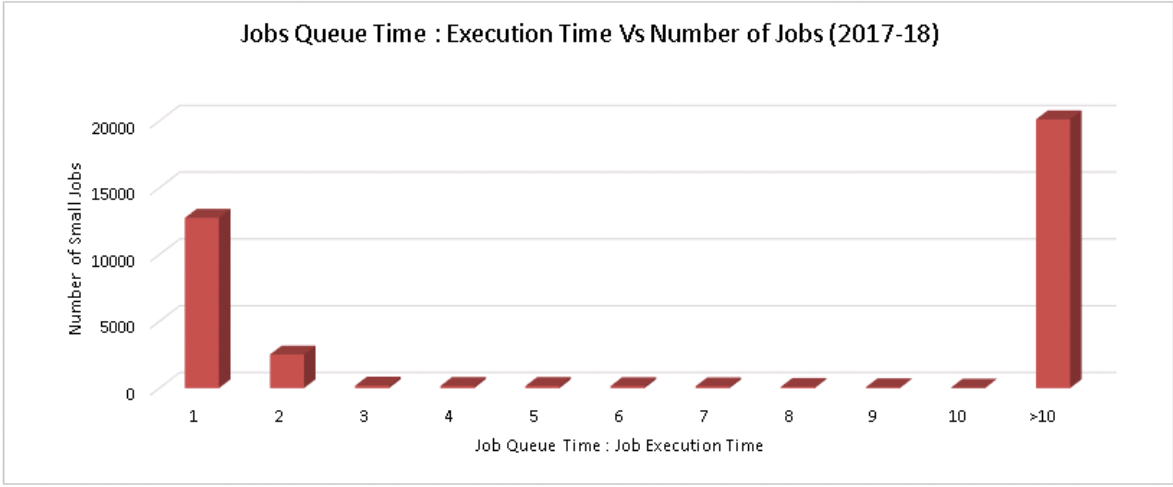
जॉब्स के आकरा नुसार जॉब प्रतीक्षा समय बनाम उनका निष्पादन समय का सापेक्ष उपाय

जॉब्स के आकरा नुसार जॉब प्रतीक्षा समय बनाम उनका निष्पादन समय के सापेक्ष उपाय का नीचे के ग्राफ प्रतिनिधित्व करते है |




Jobs Queue Time : Execution Time Vs Number of Jobs (2017-18)
Number of jobs
3000
2500
2000
1500
1000
500
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
>10
257-512
65-128
Number of cores
Jobs queue time : execution time
65-128
129-256
257-512
>512


Jobs Queue Time : Execution Time Vs No. of Jobs (1-64 cores, 2016-17)
Number of jobs
10000
9000
8000
7000
6000
5000
4000
3000
2000
1000
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
>10
Job Queue Time : Job Execution Time


Jobs Queue Time : Execution Time Vs Number of Jobs (2017-18)
Number of Small Jobs
20000
15000
10000
5000
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
>10
Job Queue Time : Job Execution Time

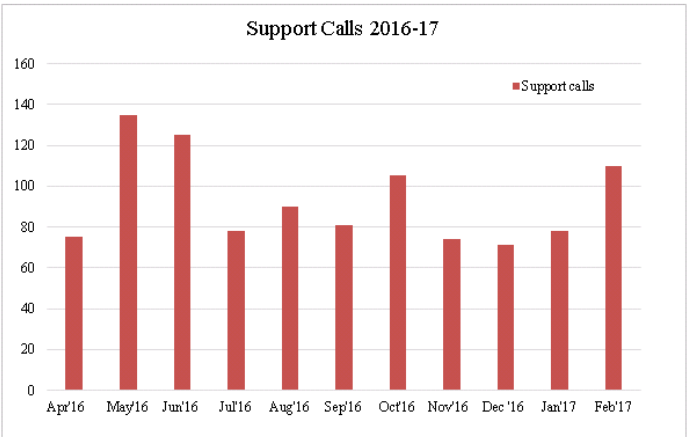
तालिका : जॉब प्रतीक्षा समय : निष्पादन समय का अनुपात बनाम जॉब्स की संख्या

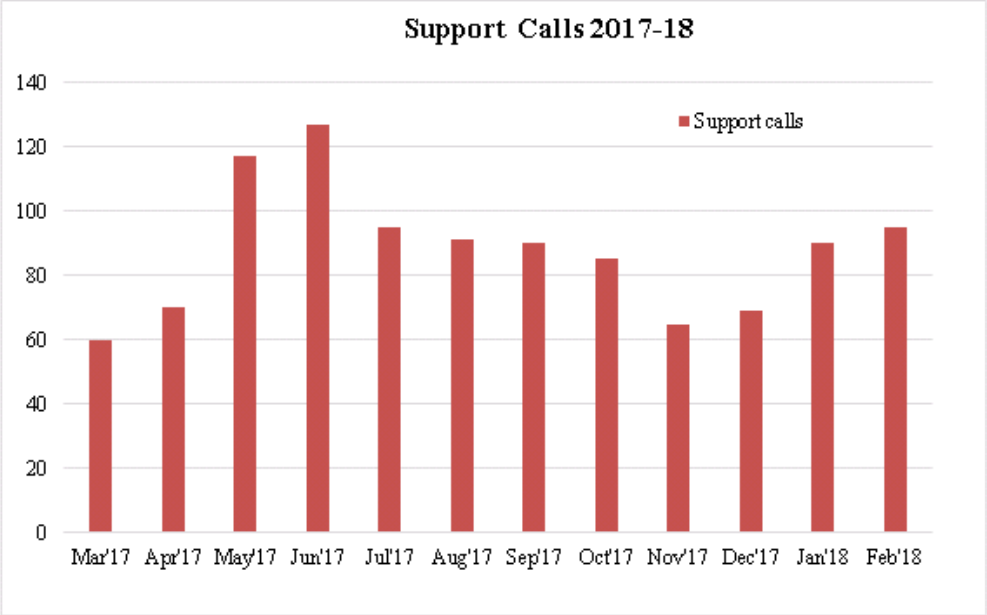
2016-17	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	>10
1-64	8944	1788	1011	703	573	417	334	284	271	201	9095
65-128	940	230	213	191	198	161	151	151	153	159	2950
129-256	302	30	37	40	35	39	25	29	22	20	260
257-512	363	17	25	20	27	26	34	16	31	33	383
>512	1168	12	8	5	4	4	0	3	1	2	155

तालिका : जॉब प्रतीक्षा समय : निष्पादन समय का अनुपात बनाम जॉब्स की संख्या

2017-18	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	>10
1-64	12752	2514	185	158	160	148	137	92	69	35	20123
65-128	270	40	5	5	2	2	2	0	1	4	2861
129-256	54	11	1	1	2	1	1	1	1	0	593
257-512	242	61	3	4	6	3	0	2	0	4	1044
>512	285	56	10	6	6	3	4	8	5	7	619

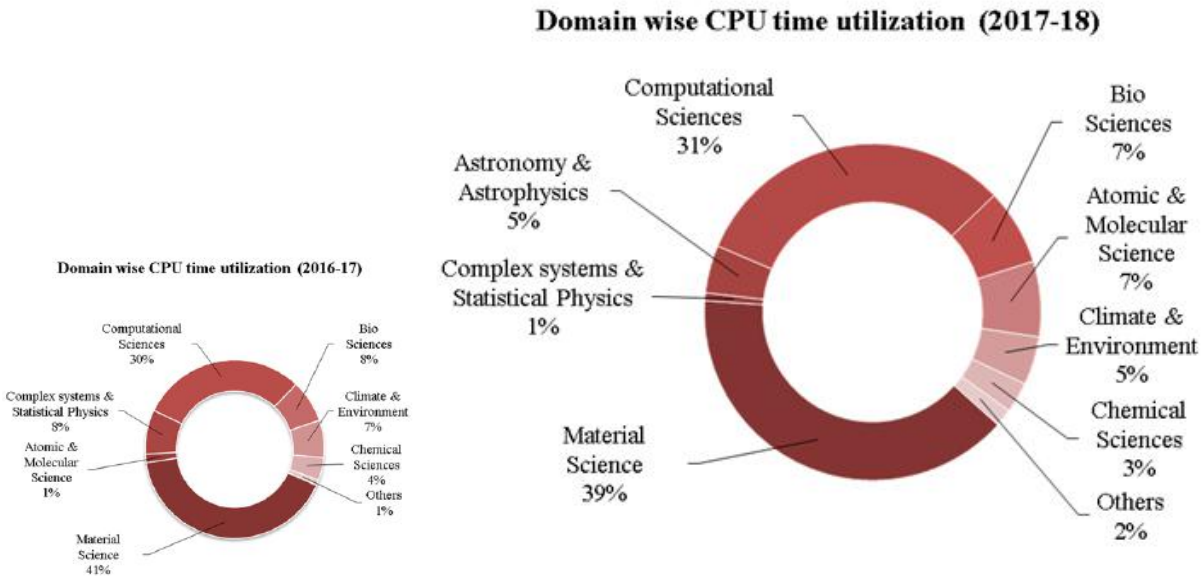
उपयोगकर्ता सहायता कॉल





4.2: डोमेन और संस्थान

डोमेन अनुसार सीपीयू समय उपयोगिता

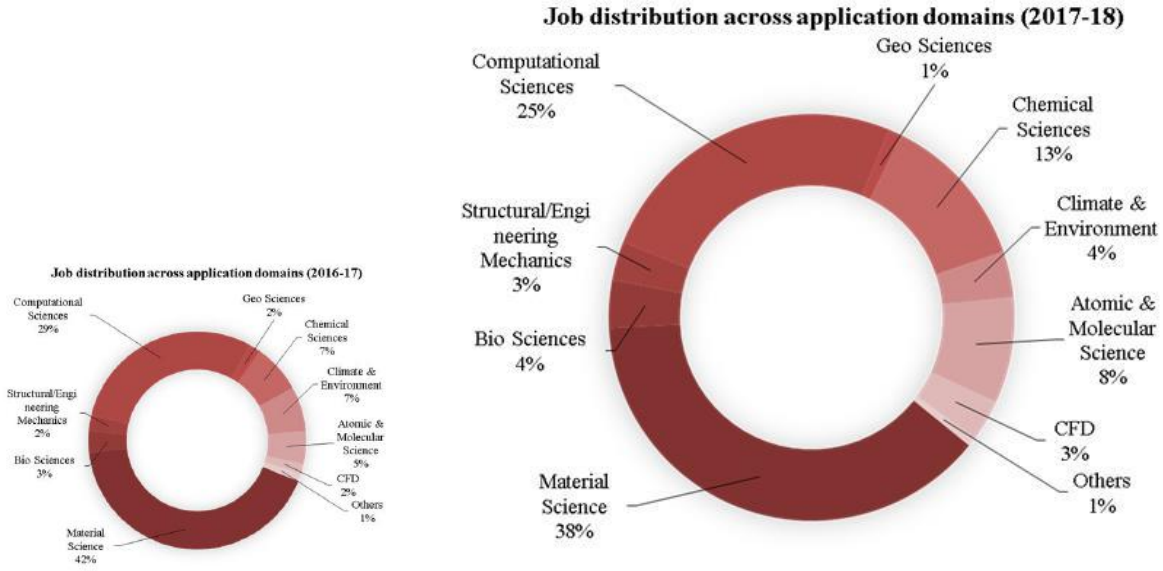


ऊपर के ग्राफ्स सीपीयू समय उपयोगिता का विभिन्न एप्लिकेशन डोमेन में वितरण दर्शाते है|

तालिका : डोमेन अनुसार सीपीयू समय उपयोगिता

	सीपीयू समय(सेकंड में)	
	2016-17	2017-18
मटेरियल साइंस	46651494317	47088257133
एटॉमिक एंड मोलेक्यूलर साइंस	1778142694	8660588966
काम्प्लेक्स सिस्टम एंड मोलेक्यूलर फिजिक्स	9151249044	906016828
कम्प्यूटेशनल साइंसेज	34080912784	37525824164
बायो साइंस	8839738945	8722410029
क्लाइमेट एंड एनवायरनमेंट	7774204697	5546385762
केमिकल साइंसेज	4628141946	3540023654
एस्ट्रोनॉमी एंड एस्ट्रोफिजिक्स	0	5475440608
अन्य	1166849614	2008782612

एप्लिकेशन डोमेन अनुसार जॉब्स का विभाजन

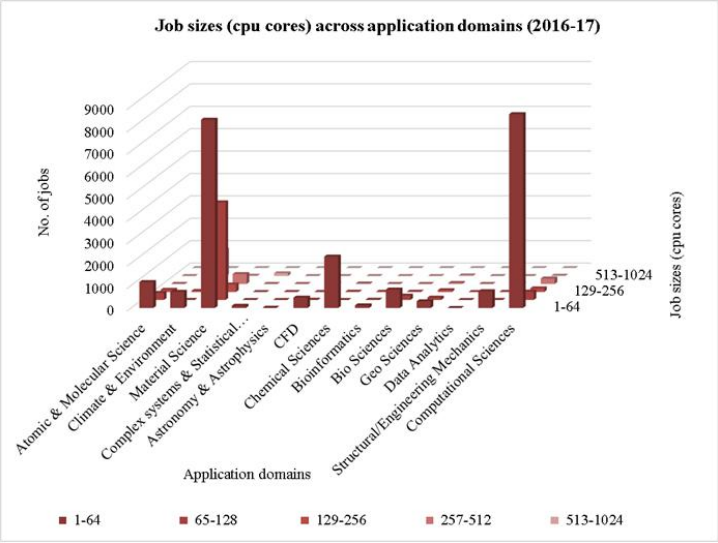


ऊपर के ग्राफ्स एप्लिकेशन डोमेन अनुसार संसाधित जॉब्स की संख्या का प्रतिशत वितरण दर्शाते है |

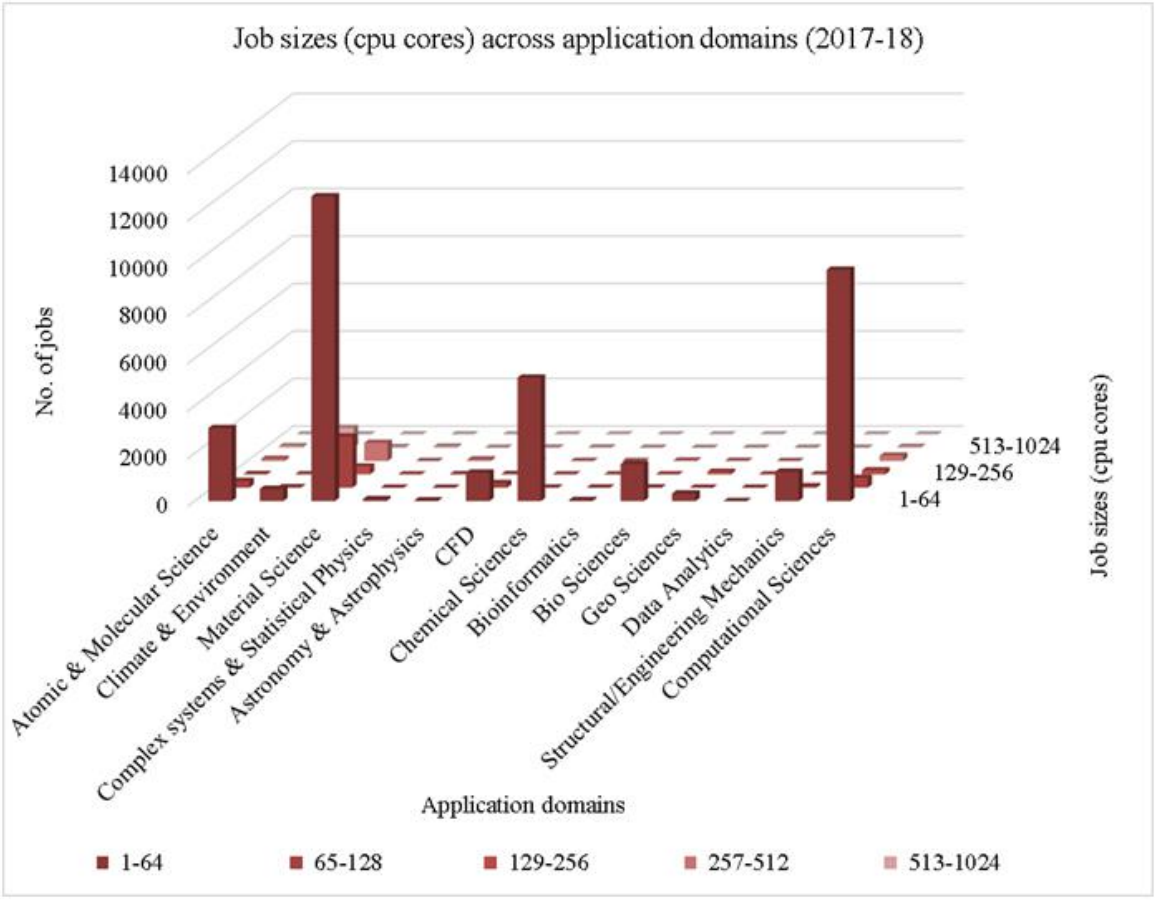
तालिका : एप्लिकेशन डोमेन अनुसार जॉब्स का विभाजन

	जॉब्स की संख्या	
एप्लीकेशन डोमेन	2016-17	2017-18
मटेरियल साइंस	13556	16114
बायो साइंस	1033	1594
स्ट्रक्चरल/इंजीनियरिंग मैकेनिक्स	758	1303
कम्प्यूटेशनल साइंसेज	9442	10591
जीओ साइंसेज	554	449
केमिकल साइंसेज	2333	5222
क्लाइमेट एंड एनवायरनमैंट	2135	1539
एटॉमिक एंड मोलेक्यूलर साइंस	1570	3534
कम्प्यूटेशनल फ्लूइड डायनामिक्स	480	1410
अन्य	371	287

एप्लिकेशन डोमेन में जॉब्स के आकार



ऊपर के ग्राफ्स, अनुरोधित कोरो की संख्या अनुसार जॉब्स के वितरण को दर्शाते है जो की1-64, 65-128, 129-256, 257-512, and 513 और अधिक की श्रेणी अनुसार विभाजित है



तालिका : एप्लिकेशन डोमेन में जॉब्स के आकार 2016-17

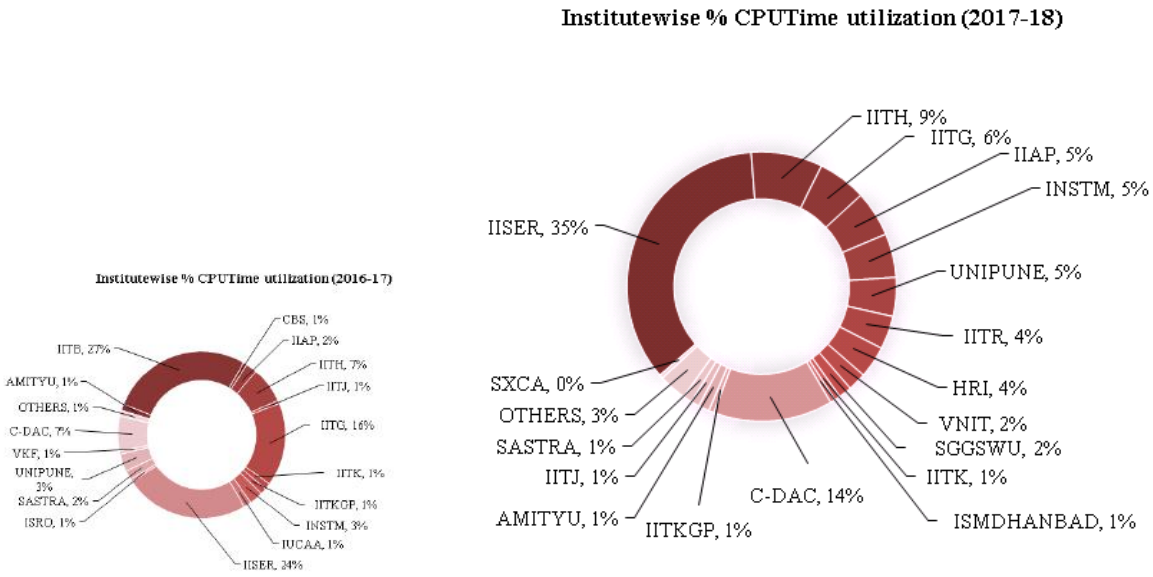
2016-17	1-64	65-128	129-256	257-512	513-1024
एटॉमिक एंड मोलेक्यूलर साइंस	1156	314	97	3	0
क्लाइमेट एंड एनवायरनमेंट	724	5	47	183	1176
मटेरियल साइंस	8407	4359	334	444	12
काम्प्लेक्स सिस्टम एंड मोलेक्यूलर फिजिक्स	99	0	0	0	120
एस्ट्रोनॉमी एंड एस्ट्रोफिजिक्स	9	2	1	0	0
कम्प्यूटेशनल फ्लूइड डायनामिक्स	462	13	3	1	0

केमिकल साइंसेज	2294	0	15	24	0
बायोइन्फरमेटिक्स	117	13	10	0	0
बायो साइंस	822	198	13	0	0
जीओ साइंसेज	299	103	79	45	28
डाटा एनालिटिक्स	0	0	0	0	0
स्ट्रक्चरल/इंजीनियरिंग मैकेनिक्स	748	5	5	0	0
कम्प्यूटेशनल साइंसेज	8654	372	161	243	12

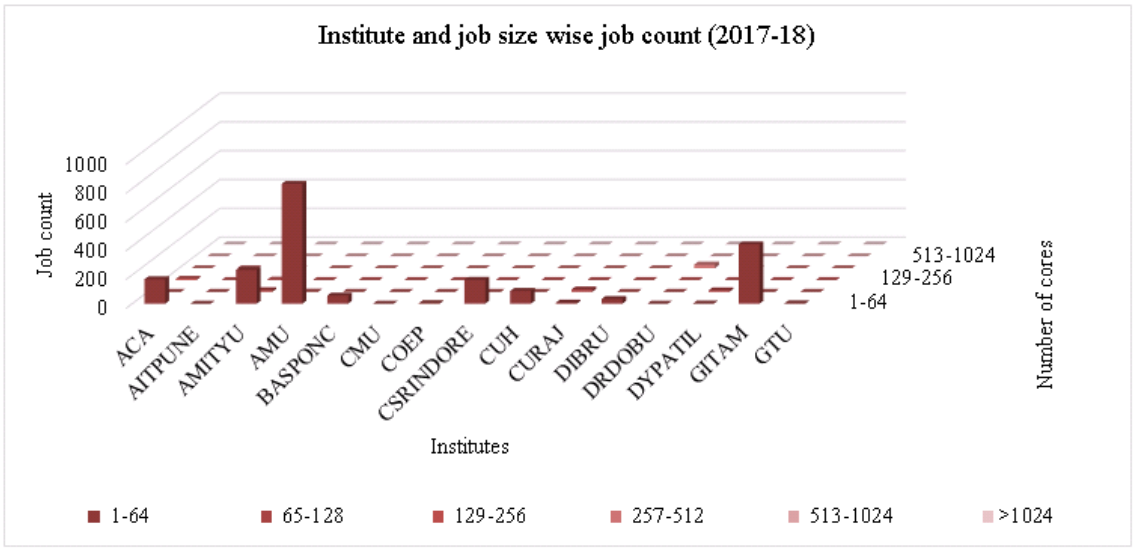
तालिका : एप्लिकेशन डोमेन में जॉब्स के आकार 2017-18

2017-18	1-64	65-128	129-256	257-512	513-1024
एटॉमिक एंड मोलेक्यूलर साइंस	3075	286	15	96	62
क्लाइमेट एंड एनवायरनमेंट	515	26	6	162	830
मटेरियल साइंस	12828	2156	336	769	25
काम्प्लेक्स सिस्टम एंड मोलेक्यूलर फिजिक्स	83	0	0	0	45
एस्ट्रोनॉमी एंड एस्ट्रोफिजिक्स	32	1	7	67	0
कम्प्यूटेशनल फ्लूइड डायनामिक्स	1199	197	13	0	1
केमिकल साइंसेज	5199	9	1	4	9
बायोइन्फरमेटिक्स	45	6	1	0	0
बायो साइंस	1557	11	1	25	0
जीओ साइंसेज	324	0	111	14	0
डाटा एनालिटिक्स	0	0	0	0	0
स्ट्रक्चरल/इंजीनियरिंग मैकेनिक्स	1239	62	1	1	0
कम्प्यूटेशनल साइंसेज	9741	414	171	228	37

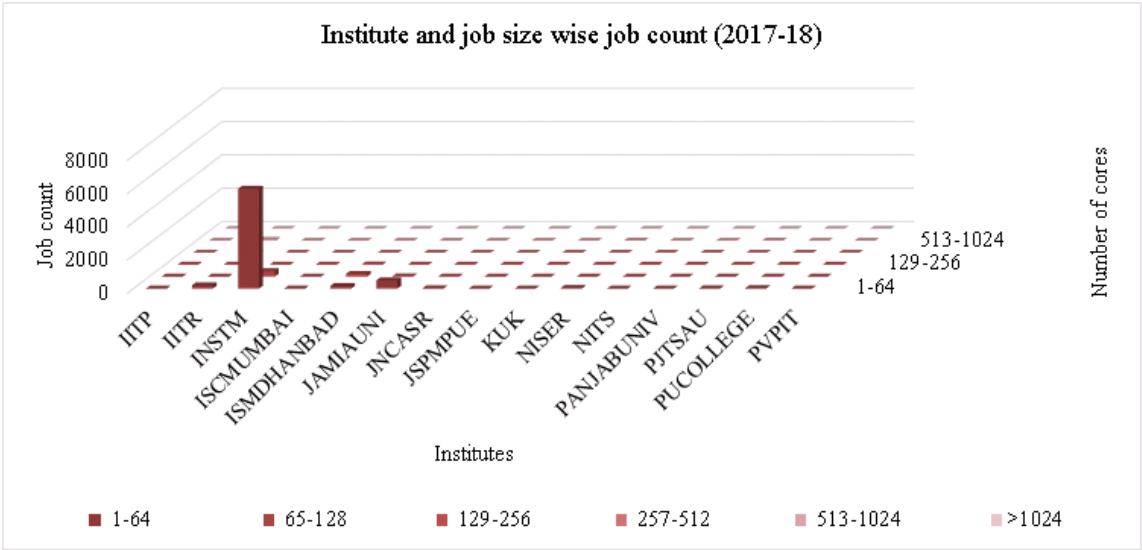
संस्थान अनुसार सीपीयू का समय उपयोग

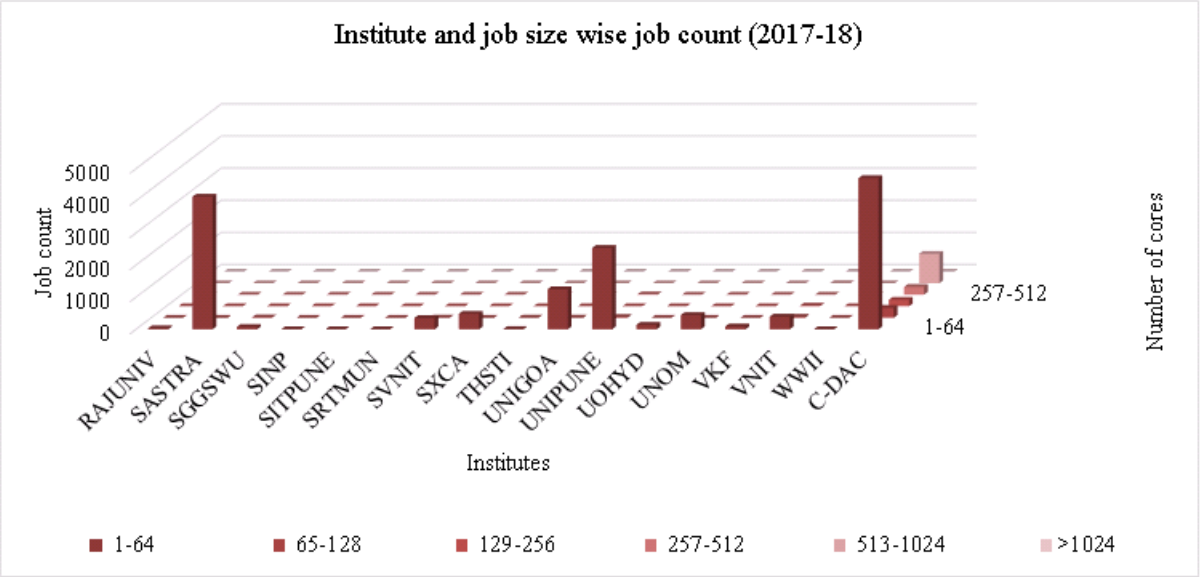


संस्थान और जॉब आकार अनुसार जॉब की संख्या



Institute and job size wise job count (2017-18)
Job count
8000
6000
4000
2000
0
HPUNIV
HPTRYK
HRI
IACS
IIAP
IIIT
IIITM
IISERP
IITB
IITG
IITH
IITJ
IITK
IITKGP
Institutes
513-1024
129-256
1-64
Number of cores
1-64
65-128
129-256
257-512
513-1024
>1024


Institute and job size wise job count (2017-18)
Job count
8000
6000
4000
2000
0
IITP
IITR
INSTM
ISCMUMBAI
ISMDHANBAD
JAMIAUNI
JNCASR
JSPMPUE
KUK
NISER
NITS
PANJABUNIV
PJTSAU
PUCOLLEGE
PVPIT
Institutes
513-1024
129-256
1-64
Number of cores
1-64
65-128
129-256
257-512
513-1024
>1024



4.3 कतारे

जॉब्स प्रस्तुत करने की कतारे

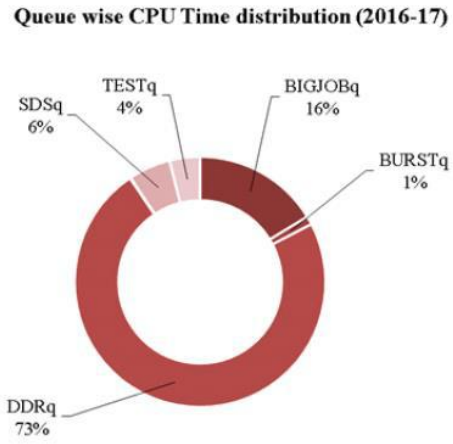
उपयोगकर्ताओं द्वारा विभिन्न कंप्यूटिंग अभ्यास के लिए, विभिन्न कतार संसाधन आवश्यकता के अनुसार सेवा की गुणवत्ता का एक स्पेक्ट्रम सुनिश्चित करता है |

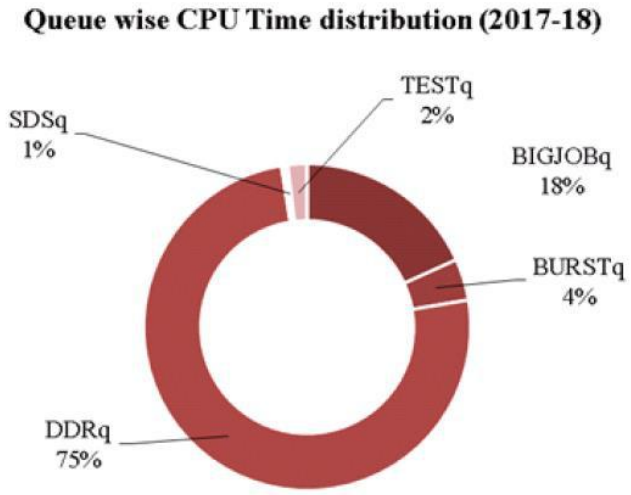
तालिका: एनपीएसएफ़ पर कतारों का सारांश

Queue	Wall Time Limit	Accelerator(s) in the node in the partition
batch	7 Days	Xeon Phi
TESTq	2 Hours	Xeon Phi
GPUq	7 Days	GPU
SDSq	6 Hours	Xeon Phi
BURSTq	17 Hours 55 Minutes	Xeon Phi

- TESTq: उपयोगकर्ताओं को वास्तविक जॉब्स चलने से पहले, परीक्षण जॉब्स को चलाने के लिए लंबे समय तक इंतजार किए बिना संसाधन प्राप्त होते हैं | वर्तमान में, TESTq कतार के लिए हर जॉब् की अधिकतम वॉल समयसीमा 2 घंटे है |
- GPUq: GPU नोड्स / एसएमपी नोड के साथ कार्य के लिए कतार |
- SDSq: उन्नत आरक्षण के साथ संसाधनों पर जॉब्स के लिए कतार | दैनिक आधार पर प्रोडक्शन जॉब्स चलाने के लिए SDSq के संसाधन को मुख्य रूप से विभिन्न उपयोगकर्ताओं के प्रति प्रतिबद्धता के अनुसार एक निश्चित अवधि के लिए दिया गया है
- BURSTq: कतार जो कम वॉल समय सीमा और बड़ी कोर संख्या जॉब्स के लिए है |

कतारों के संबंध में % सीपीयू उपयोग का वितरण



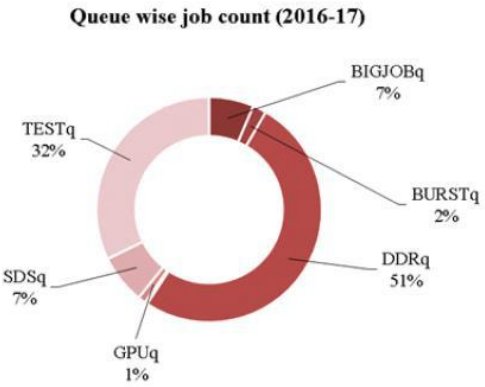


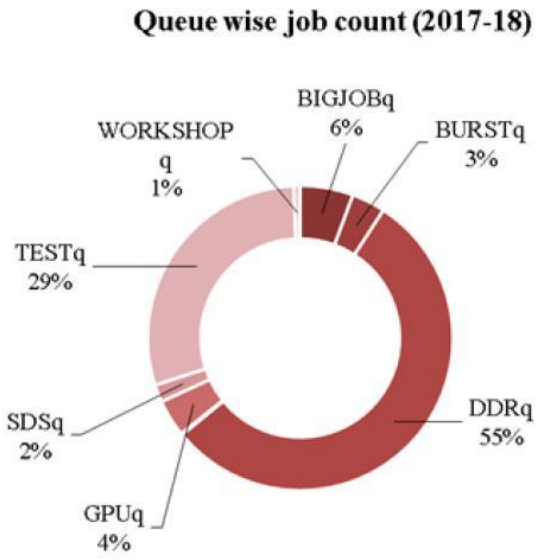
ऊपर ग्राफ़ संबंधित कतारों में जॉब्स द्वारा उपयोग किए गए सीपीयू समय के प्रतिशत में वितरण को दर्शाता है।

तालिका: जॉब्स द्वारा उपयोग किए गए सीपीयू समय का वितरण

	CPU Hours	
Queue	2016-17	2017-18
BIGJOBq	27735366438	39607197720
BURSTq	1857597056	8902900224
DDRq	1.24652E+11	1.63083E+11
FDRq	47360	15204
GPUq	179382368	588302112
SDSq	9221228808	769674332
TESTq	6676972900	4124914568
WORKSHOPq	27735366438	946974

कतारों के संबंध में % जॉब्स की गणना



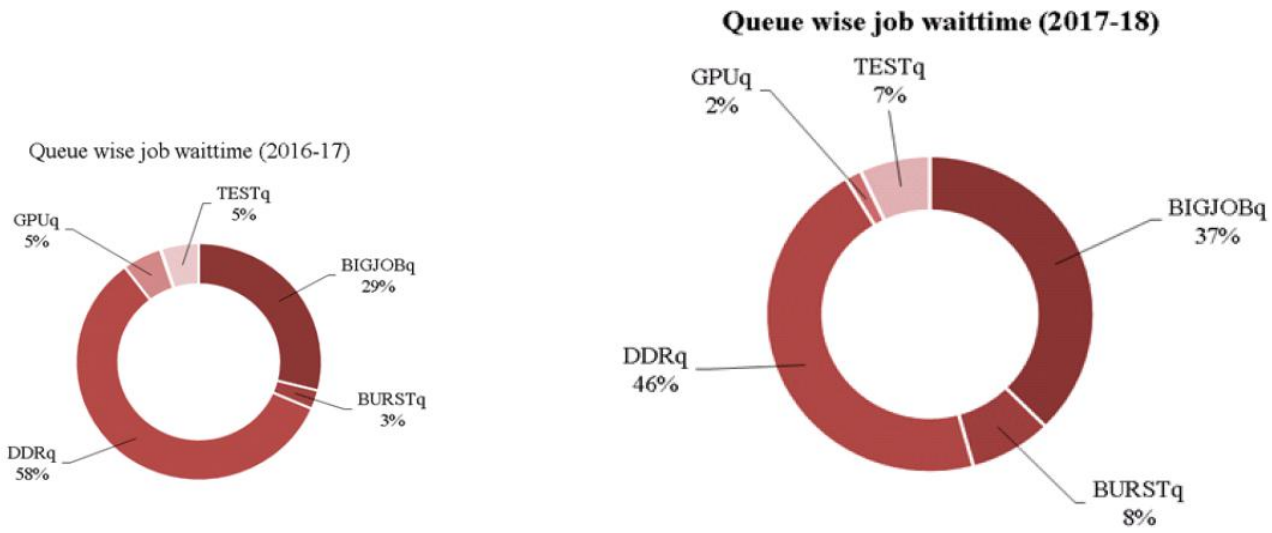


ग्राफ, निष्पादन कतारों में जॉब्स प्रतिशत वितरण को दर्शाता है। यह देखा गया है कि अधिकांश जॉब्स DDRq को निर्देशित होती है, जोकि कुल निष्पादन का 55% है, जिनका जॉब् आकार 65 CPU कोर से कम था |

तालिका : निष्पादन कतारों के बीच जॉब्स का वितरण

	Job Count	
Queue	2016-17	2017-18
BIGJOBq	2069	2390
BURSTq	628	1513
DDRq	16405	23370
FDRq	117	61
GPUq	354	1675
SDSq	2284	787
TESTq	10375	12477

कतारों के संबंध में % जॉब्स की प्रतीक्षा अवधि



ग्राफ जॉब्स के जमा होने क बाद और सिस्टम में निष्पादन में जाने से पहले, बिताये गए समय के वितरण प्रतिशत को प्रतिनिधित्व करता है | पॉलिसी के अनुसार जॉब्स के लिए अधिकतम वॉल समय में प्रतिबंध

होने के कारण, TESTq के अनुभव प्रस्तुत किए गए जहाँ जॉब्स कम से कम प्रतीक्षा करें | DDRq में जॉब्स के लिए वॉल समय की प्रतीक्षा सबसे बड़ी है | कृपया ध्यान दें, अनुरोध किए गए सीपीयू कोर प्रतीक्षा की गणना से कोई सम्बन्ध नहीं है |

तालिका : निष्पादन कतारों के बीच जॉब्स की प्रतीक्षा अवधि का वितरण

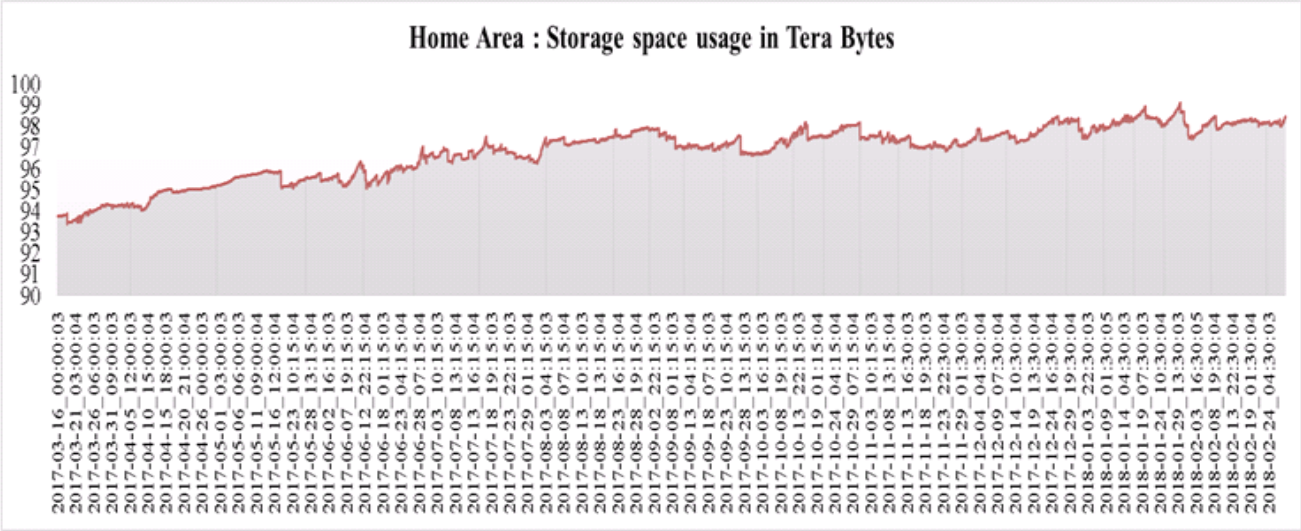
	Job Wait Time	
Queue	2016-17	2017-18
BIGJOBq	75387.96611	450482.0942
BURSTq	1701836.04	97860.94333
DDRq	122.1055556	548202.7439
FDRq	150904.5736	11.82888889
GPUq	4496.0275	19122.91639
SDSq	144643.11	352.0522222
TESTq	75387.96611	83236.03667

4.4 स्टोरेज

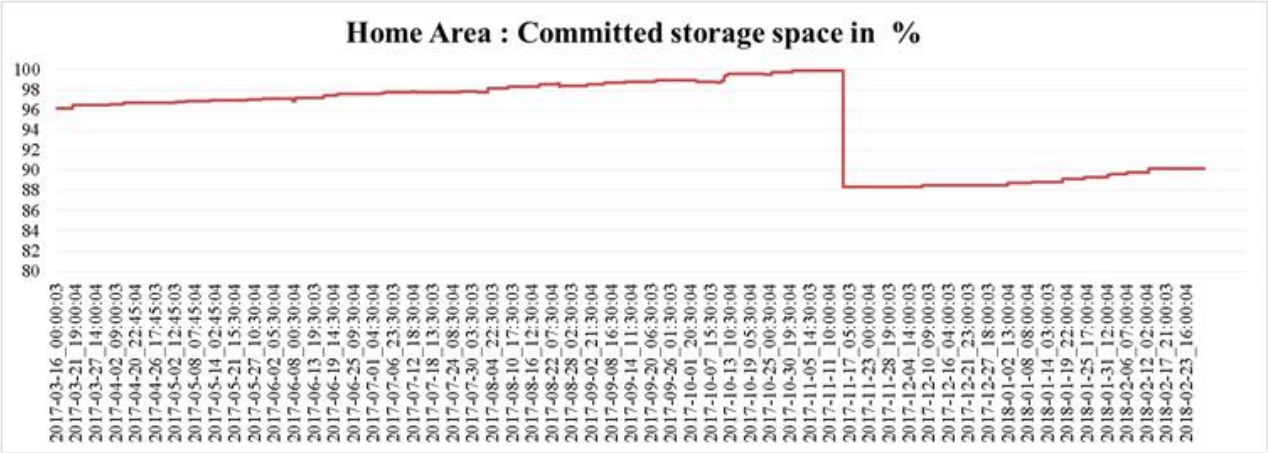
एक एचपीसी प्रणाली हमेशा एक या एक से अधिक डिस्क स्टोरेज प्रणालियों के साथ जुड़ी रहती है | ऐसे स्टोरेज सिस्टम से अपेक्षित प्रदर्शन को देखते हुए, एनपीएसएफ़ में, दो ऐसे स्टोरेज प्रणालियां कमीशन की गई है 1) होम एरिया and 2) स्क्रैच एरिया | यह दोनों स्टोरेज एरिया POSIX के अनुरूप वितरित और समानांतर फाइल सिस्टम के साथ स्तरित हैं (हाई बैंडविड्थ लौ-लेटेंसी इनफिनिबेन्ड नेटवर्क वितरण के साथ) | होम डेटा हानि कम करने के लिए क्षेत्र, एक तीसरा भंडारण प्रणाली टेप आधारित बैकअप का उपयोग किया जाता है |

1 और 2 दोनों स्टोरेज अधिभोग औपचारिक उपयोग के लिए नीतियों के तहत किया गया है | स्क्रैच एरिया केवल जॉब्स निष्पादन के दौरान उपलब्ध होती है , होम एरिया के लिए प्रत्येक उपयोगकर्ता को डिफ़ॉल्ट 100GB कोटा के साथ आवंटन हो रहा है | होम एरिया के आंकड़ों 1) कुल अधिभोग आकार और फ़ाइलों

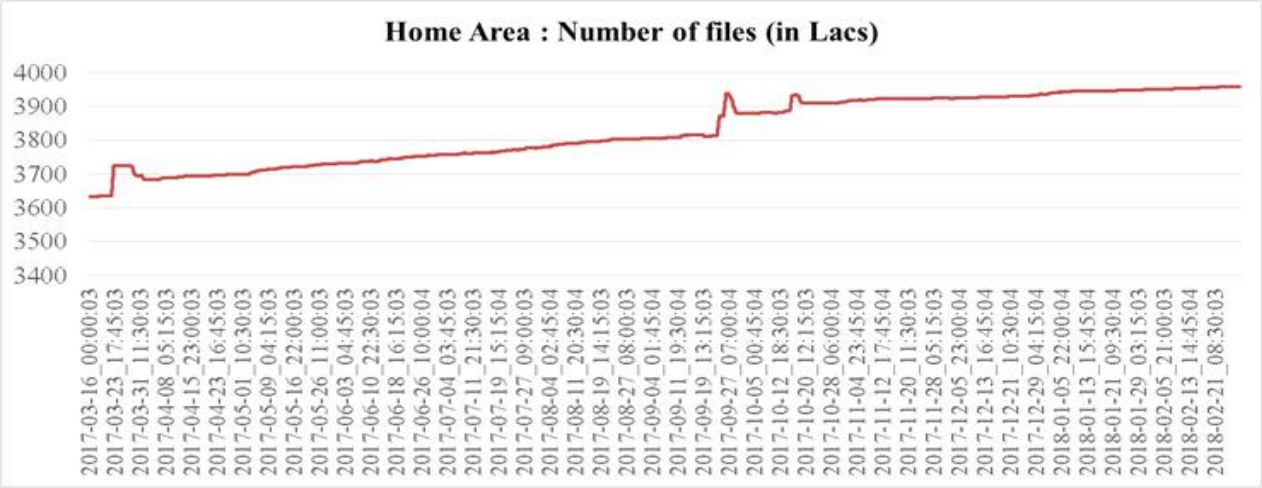
की संख्या के संबंध अनुसार 2) प्रतिबद्ध कोटा कुल उपलब्ध स्टोरेज प्रतिशतता में 3) अधिभोग और फ़ाइलों की संख्या में अंतराल पर प्रतिशत परिवर्तन



लाइन प्लाट से होम एरिया के कुल अधिभोग में बदलाव दर्शाए गए हैं| कुल उपलब्ध आकार 197 TB है|

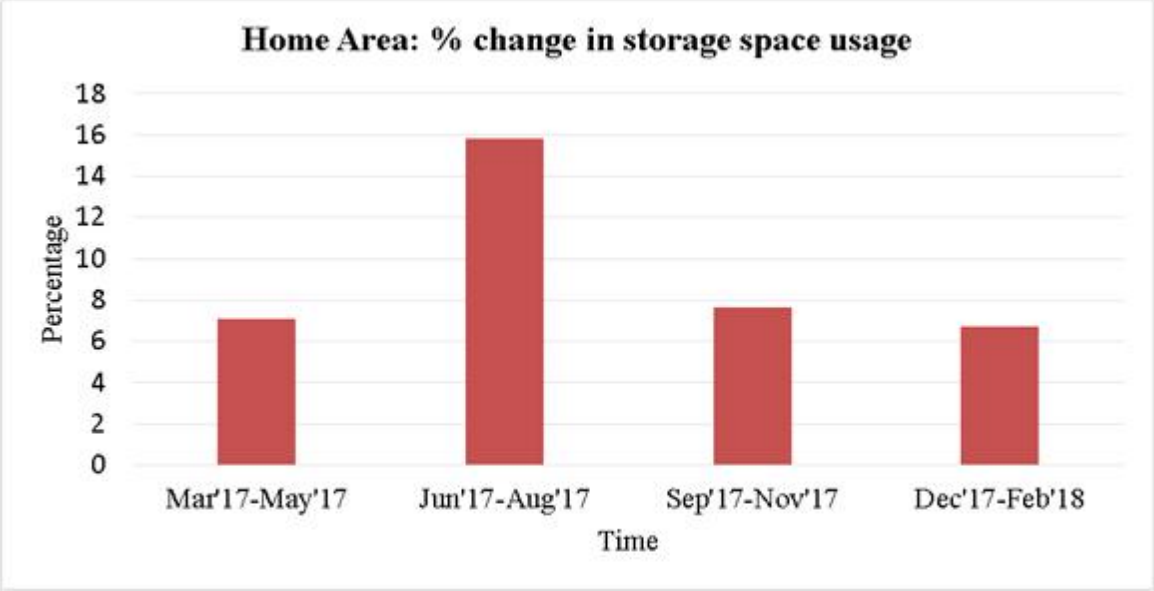


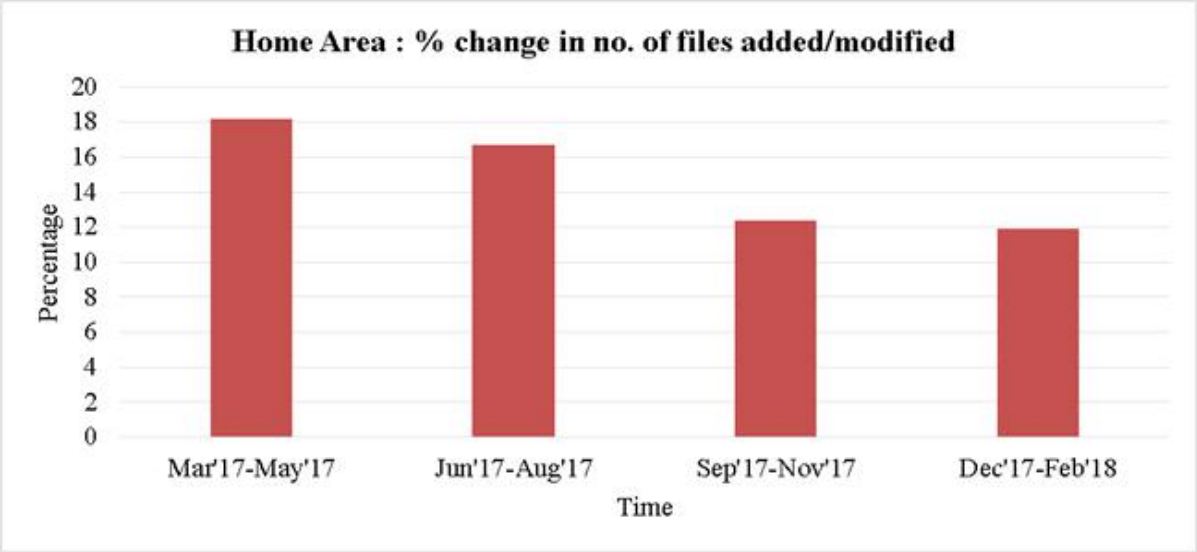
लाइन प्लॉट से कुल क्षमता के प्रतिशत के रूप में पिछले साल के दौरान कुल कोटा आवंटन प्रस्तुत किया गया है।



लाइन प्लॉट से फाइलों की संख्या के अनुसार होम एरिया के अधिभोग में भिन्नता दर्शायी गई है।

नीचे दिए गए आंकड़े डेटा आकार में % परिवर्तन और फाइलों की संख्या में % परिवर्तन दर्शाता है, जो वृद्धिशील बैकअप के साथ नियमित अंतराल पर डेटा का समर्थन करने की आवश्यकता को परिभाषित करता है।




Home Area : % change in no. of files added/modified
Percentage
20
18
16
14
12
10
8
6
4
2
0
Mar'17-May'17
Jun'17-Aug'17
Sep'17-Nov'17
Dec'17-Feb'18
Time

5

शोध प्रकाशन की रिपोर्ट्स और कार्य की रिपोर्ट्स

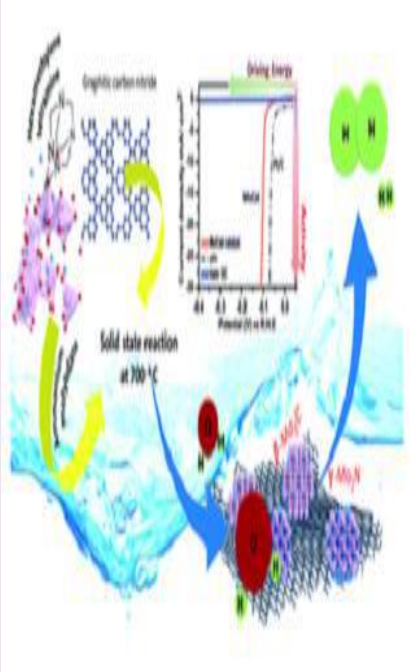
परम यूवा II पर किए गए काम और उच्च प्रभाव पत्रिकाओं में शोध प्रकाशनों के आधार पर कुछ प्रकाशन रिपोर्ट और कार्य रिपोर्ट

एनर्जी कन्वर्ज़न / हार्वेस्टिंग इन 2D मैटेरियल्स , नैनोकेटालियसिस

मुख्य अन्वेषक: डॉ अबीर दे सर्कार abir@inst.ac.in, abirdesarkar@gmail.com

इंस्टीट्यूशन: इंस्टीट्यूट ऑफ नैनो साइंस एंड टेक्नोलॉजी (आईएनएसटी), मोहाली

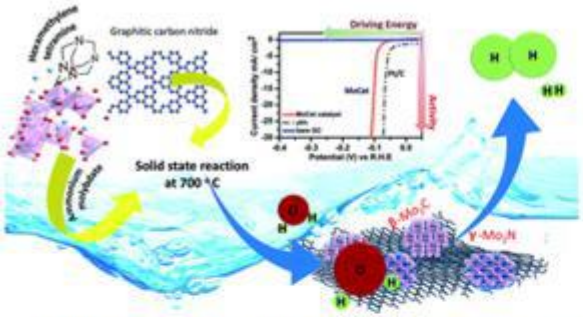
अनुसंधान क्षेत्र : ननोमाटेरिअल्स फॉर क्लीन ,रिन्यूएबल एंड अल्टरनेटिव एनर्जीस, एंड क्लीन एनवायरनमेंट



Research Challenge: Density functional theory based calculations are highly computationally intensive and demanding. Therefore, the challenge lies in studying large systems and running some calculations for a long duration of time (say, more than 72 hrs).

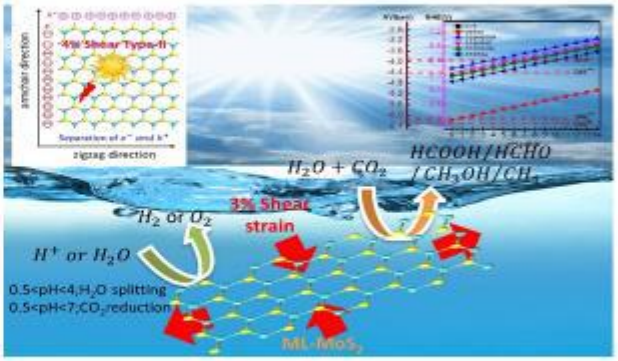
Approach: Density functional theory based methods.

Results (Graphs etc.):



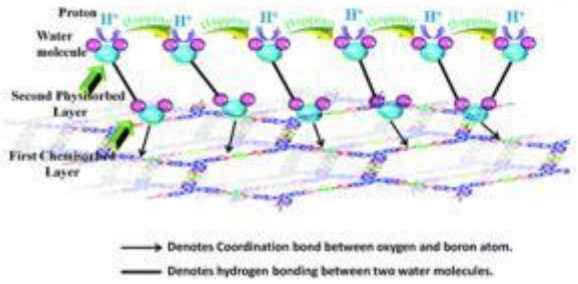
Nano-structured hybrid molybdenum carbides/nitrides generated *in situ* for hydrogen evolution reaction

J. Mater. Chem. A, 2017, **5**, 7764-7768



Strain and pH facilitated artificial photosynthesis in monolayer MoS_2 nanosheets

J. Mater. Chem. A, 2017, **5**, 22265-22276



A porous, crystalline truxene-based covalent organic framework and its application in humidity sensing

J. Mater. Chem. A, 2017,**5**, 21820-21827

Impact:

Our computational findings have significantly advanced the current understanding on energy conversion/harvesting in 2D Materials. Our results provide very useful pointers and guidance to experimentalists and technologists. Besides our independent pursuit of research projects, we provide strong theoretical support to experimentalists.

Synergistic effects have been found in combining molybdenum carbide with molybdenum nitride nanoparticles, if synthesized in situ via a controlled solid-state reaction; thereby leading to an excellent hydrogen evolution reaction (HER) activity. Theoretical studies corroborate the experimental findings. An appreciable charge transfer at the interface of Mo_2C and Mo_2N nanoparticles facilitate the HER. This is further substantiated by the calculations of Gibbs free energy, which reaches very close to that of the commercially available Pt/C catalyst.

Photoconversion of carbon dioxide with water into renewable solar fuels using a single integrated system is the primary goal of artificial photosynthesis. The ease of applying mechanical strain reversibly in low dimensional materials can be exploited in optimizing their artificial photosynthetic or photocatalytic properties. Strain effects on the concerted interplay of all the factors controlling the photocatalytic ability have been comprehensively studied on monolayer MoS_2 nanosheets and calibrated, using density functional theory, to ascertain the type and magnitude of strain under which the artificial photosynthetic properties are optimally utilizable. Additionally, the role of pH has been carefully addressed.

The first example has been demonstrated in which truxene has been used as a building block to successfully synthesize novel covalent organic frameworks (COFs). DFT calculations have shown a good agreement between the experimental and simulated powder X-ray diffraction (PXRD) patterns and pore size distribution of this framework. COFs have shown great potential in emerging sensing applications.

I have been invited to present my research group's work at National and International Conferences. Our paper published in Journal of Physics: Condensed Matter 29 (2017) 225501 (7pp) has been selected for the 2017 Journal highlights. My Ph.D. students have presented their work in the form of Poster in Conferences.

How this research work is benefited using NPSF

PARAM Yuva II has helped me immensely in guiding my Ph.D. students and Postdoc on these research problems. Without the strong support of PARAM Yuva II, coming up with such good Publications would not have been possible.

Experiences using NPSF (system, support etc.)

The helpdesk has responded with great promptitude in installing different programs & modules required by us from time to time. In short, helpdesk has been remarkably supportive. We owe the deepest debt of gratitude to CDAC-Pune and the support team of PARAM Yuva II. We have mainly been using VASP software.

Any other information

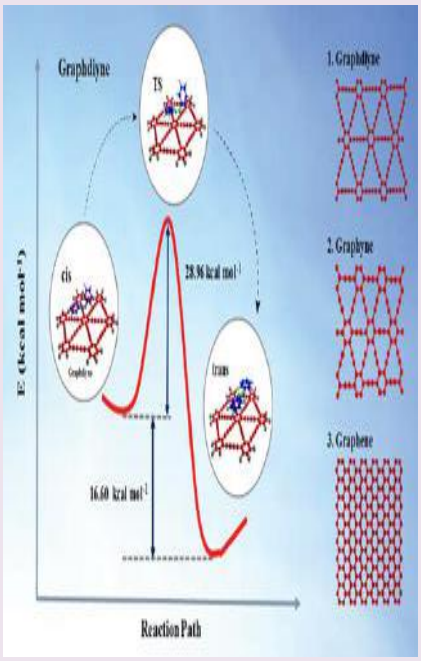
CDAC, Pune has been doing a wonderful job for many years in helping Computational Scientists in their active pursuit of research, across India. The strong computational support provided by CDAC-Pune enables us to pursue good quality research. I would like to appeal to the Govt. of India to allocate substantial funds to CDAC-Pune to support the latter in their future endeavors, which includes upgrading their HPC systems. Any HPC system gets outdated in five years. Moreover, the usage of Param Yuva II is really high, as it caters to users from all over India. CDAC-Pune is in dire need of a strong funding support from the Govt. of India. Integration of the latest computational resources into the current HPC system is the crying need of the hour.

मॉलिक्यूलर स्विचिंग ऑन ग्राफीन एंड ग्राफ्डियन : रेअलाइज़िंग फंक्शनल कार्बन नेटवर्क्स इन सायएनर्जी विथ ग्राफीन

मुख्य अन्वेषक: डॉ. आर एस स्वाति
swathi@iisertvm.ac.in

इंस्टीट्यूशन: इंडियन इंस्टिट्यूट ऑफ़ साइंस एजुकेशन एंड रिसर्च, तिरुवनंतपुरम

अनुसंधान क्षेत्र : सोलर थर्मल फ्यूल्स एंड डाटा स्टोरेज डिवाइसेस

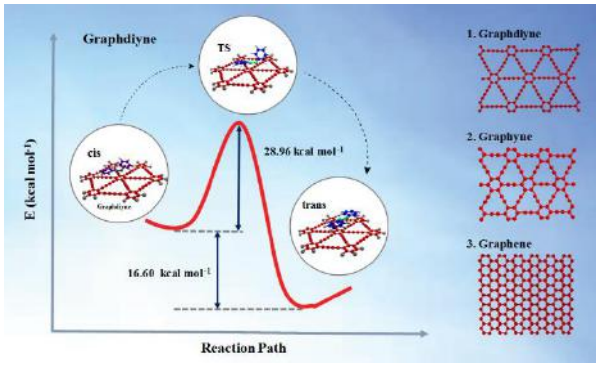


Research Challenge: Photoisomerization of molecules directly adsorbed on substrates is found to be either suppressed or enhanced depending upon the type of the substrate. A major goal, relevant to the development of future applications, is therefore to understand and control structural changes of molecular switches such as azobenzene (AZO) and its derivatives when adsorbed on suitable substrates.

Approach: Employing electronic structure calculations, we probe structures, energetics, kinetics and reaction pathways of thermal cis-trans isomerization of AZO and disperse orange 3 (DO3) adsorbed on the surfaces of graphyne (GY) and graphdiyne (GDY), newbies in the family of two-dimensional carbon networks and compared our results with those of graphene.

Results (Graphs etc.): Initially, we considered the adsorption of cis- and trans- forms of AZO and DO3 on the carbon networks. Our studies reveal that the trans isomers form most stable complexes due to π-π stacking. Additionally, the presence of substituent groups in DO3 contributes to the formation of more stable complexes than in case of AZO. The computed adsorption energies of molecular switches on the carbon networks lie between the range of physisorption and chemisorption energies, suggesting that the carbon networks can be excellent substrates on which the switches can undergo facile isomerization. Therefore, we investigated the thermodynamics, kinetics and reaction pathways of the isomerization process on the carbon networks and compared the results with those obtained for isolated molecular

switches. The minimal change in the computed activation barriers and high thermal storage capacity on adsorption indicate that GY and GDY could be used as substrates in conjunction with graphene in real devices.



Impact: The current work represents the first attempt, theoretical or experimental, in probing molecular switching on GY and GDY, which can have potential impact in the areas of solar thermal fuels and data storage devices. We also believe that our study motivates further theoretical and experimental studies to probe isomerization involving various other derivatives of AZO. Ultimate objective of such studies is to guide in the realization of various photoswitching molecules for real devices.

How this research work is benefited using NPSF:

The carbon networks (graphene, GY and GDY) studied in the current work are represented by cluster-based model systems. However, to study the effect of the size of the model systems representing the carbon networks, we need to consider larger cluster models, which are computationally very demanding. With the help of PARAM Yuva II, we were able to consider the molecules such as $C_{54}H_{18}$, $C_{66}H_{18}$ and $C_{90}H_{18}$ as representatives for graphene, GY and GDY, respectively and could calculate the energetics, thermodynamics and kinetics. Our study on photoswitching of two diverse azo-based systems, AZO and DO3 on carbon nanostructures is an interesting step forward along these lines. In our studies, for the first time, we obtained the TSs for the cis-trans isomerization of AZO and DO3 on the surfaces of GY and GDY. Such an analysis has not been so far carried out, even on graphene surface and would not have been possible without the excellent resources from PARAM Yuva II. Thus, using the facility, our computations demonstrated that GY and GDY can render excellent platforms for the isomerization of azo-based compounds.

Experiences using NPSF (system, support etc.)

PARAM Yuva II provided us easy access, less waiting time to run the jobs, and good technical support.

किए गए काम का शीर्षक : एनर्जी कन्वर्ज़न इन सिंगल लेयर MoS2

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: डॉ अबीर दे सर्कार, वैज्ञानिक-ई / सह-प्राध्यापक

ईमेल : abir@inst.ac.in, abirdesarkar@gmail.com

इंस्टीट्यूशन: इंस्टीट्यूट ऑफ नैनो साइंस एंड टेक्नोलॉजी (आईएनएसटी), मोहाली

Research Challenge/s: Studying large systems, which can be highly computationally intensive and demanding & also running some calculations for a long duration of time (say, more than 72 hrs)

Work carried / Milestone/Achievements: Presented Invited talks, Published papers, Our paper published in the Journal of Physics: Condensed Matter 29 (2017) 225501 (7pp) has been selected for the 2017 Journal highlights, Students have presented posters in Conferences

Publications / Articles etc. (If any):

1. Dimple, Nityasagar Jena, Ashima Rawat, **Abir De Sarkar***, "Strain and pH facilitated artificial photosynthesis in monolayer MoS_2 nanosheet", Journal of Materials Chemistry A, 5 (2017) 22265-22276
2. Harpreet Singh, Vijay K. Tomer, Nityasagar Jena, Indu Bala, Nidhi Sharma, Devadutta Nepak, **Abir De Sarkar***, Kamalakannan Kailasam*, Santanu Pal*, "Truxene based Porous, Crystalline Covalent Organic Frameworks and it's Applications in Humidity Sensing", Journal of Materials Chemistry A, 5 (2017) 21820-21827
3. Nityasagar Jena, Dimple, Shounak Dhananjay Behere, **Abir De Sarkar***, "Strain Induced Optimization of Nanoelectromechanical Energy Harvesting and Nanopiezotronic Response in MoS_2 Monolayer Nanosheet", Journal of Physical Chemistry C 121 (2017) 9181–9190
4. Dimple, Nityasagar Jena, **Abir De Sarkar***, "Compressive strain induced enhancement in thermoelectric-power-factor in monolayer MoS_2 nanosheet", Journal of Physics: Condensed Matter 29 (2017) 225501 (7pp) (**Selected for 2017 Journal highlights**)
5. Rajinder Kumar, Ritu Rai, Seema Gautam, **Abir De Sarkar**, N. Tiwari, Shambhu Nath Jha, Dibyendu Bhattacharyya, Ashok K Ganguli and Vivek Bagchi, "Nano-structured hybrid Molybdenum Carbides/Nitrides generated in-situ for HER Applications", Journal of Materials Chemistry A 5 (2017) 7764-7768
6. Neha Wadehra, Ruchi Tomar, Soumyadip Halder, Minaxi Sharma, Inderjit Singh, Nityasagar Jena, Bhanu Prakash, **Abir De Sarkar**, Chandan Bera, Ananth Venkatesan, S Chakraverty, "Electronic

structure modification of the $KTaO_3$ single-crystal surface by Ar^+ bombardment", Physical Review B, 96 (2017) 115423

Appreciation / Recognition (if any): Have been invited to present my work at both National and International levels

Benefits & experience of using NPSF:

PARAM Yuva II has helped me immensely in guiding my Ph.D. students and my Postdoc on a wide range of research problems. The helpdesk has responded with great promptitude in installing different programs & modules required by us from time to time. In short, helpdesk has been remarkably supportive. We owe the deepest debt of gratitude to CDAC-Pune and the support team of PARAM Yuva II.

Any other relevant information (if any):

CDAC, Pune has been doing a wonderful job for many years in helping Computational Scientists across India in their active pursuit of research. The strong computational support provided by CDAC-Pune enables us to pursue good quality research. I would like to appeal to the Govt. of India to allocate substantial funds to CDAC-Pune to support the latter in their future endeavors, which includes upgrading their HPC systems. Any HPC system gets outdated in five years. Moreover, the usage of Param Yuva II is really high. Param Yuva II caters to users from all over India. CDAC-Pune is in dire need of a strong funding support from the Govt. of India. Integration of the latest computational resources into the current HPC system is the crying need of the hour.

किए गए काम का शीर्षक : स्पिन - इंडियूज़्ड ट्रांजीशन मेटल (TM) डोप्ड SnO2 अ डाइल्यूट मैग्नेटिक सेमीकंडक्टर (DMS): ए फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडी

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: दिब्या प्रकाश राय (डी. पी. राय)

ईमेल **:** dibyaprakashrai@gmail.com

इंस्टीट्यूशन**:** पाछुंगा यूनिवर्सिटी कॉलेज , आइजॉल मिजोरम इंडिया

Work carried / Milestone/Achievements: is submitted to Journal of Physics and Chemistry of Solids, Elsevier (Under Review)

Publications / Articles etc. (If any): This work is submitted to Journal of Physics and Chemistry of Solids, Elsevier (Under Review)

Awards (If any): Received outstanding Reviewer award for 2017 from Material Research Express (IOP).

Appreciation / Recognition (if any): Received outstanding Reviewer award for 2017 from Material Research Express (IOP).

Benefits & experience of using NPSF:

It is beneficial. But I don't know why most of the time when I submit the job it goes in queue. It takes long time to complete the job. Please kindly look into the matter.

किए गए काम का शीर्षक : मॉलिक्यूलर सिमुलेशन स्टडी ऑफ़ दी फेज बिहैवियर ऑफ़ काम्प्लेक्स कंपाउंड्स इन एडवांस्ड बायोफ्यूल्स

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: झुम्पा अधिकारी, प्राध्यापक

ईमेल : adhikari@che.iitb.ac.in

इंस्टीट्यूशन: आईआईटी बॉम्बे

Research Challenge/s: Predict phase behavior of oxygen-containing compounds present in biofuels, such as glycerol, levulinic acid and their mixtures using molecular simulation techniques.

Work carried / Milestone/Achievements: Extended GC-TMMC code for mixtures of simple model fluids to investigate behavior of complex molecules

Publications / Articles etc. (If any):

Phase Equilibria and Critical Point Predictions of Mixtures of Molecular Fluids Using Grand Canonical Transition Matrix Monte Carlo

Tamaghna Chakraborti and Jhumpa Adhikari

Industrial & Engineering Chemistry Research 2017 56 (22), 6520-6534

DOI: 10.1021/acs.iecr.7b01114

Benefits & experience of using NPSF:

The cluster is well-maintained and has UPS facilities which allow us uninterrupted use of computational facilities. We are grateful for the facilities made available to us.

किए गए काम का शीर्षक :

(1) थ्योरेटिकल स्टडी ऑफ़ दी डिकम्पोज़िशन पाथवेज़ ऑफ़ पेर्बेन्ज़ोआते अन्ययन .

(2) यूनि मॉलिक्यूलर डिकम्पोज़िशन ऑफ़ फॉर्मामिड वाया डायरेक्ट केमिकल डायनामिक्स सिम्युलेशन्स

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: डॉ. मणिकंदन परंज्योति, सहायक प्राध्यापक

ईमेल: pmanikandan@iitj.ac.in

इंस्टीट्यूशन: आईआईटी जोधपुर

Research Challenge/s: The technology we use in our research group is called "Direct Dynamics Simulations" which we employ to study organic reaction mechanisms, decomposition pathways, branching ratios, etc, for interesting chemical and biochemical reactions. This technique requires integration of Newton's equations and the required potentials and forces for the integration are computed on-the-fly using a chosen level of electronic structure theory (quantum chemistry). In general, one requires to generate atleast 100 classical trajectories in a simulation. Assuming integration to be carried out till 3 picosecond (3000 femtosecond) and an integration stepsize of 1 femtosecond, we need to perform 3000 single point electronic structure calculations for one trajectory. For 100 trajectories, we need to perform 3000*100 = 300000 single point electronic structure calculations. Please note that the values reported here are bare minimum requirements for classical trajectory simulations and only with increase in number of trajectories, the accuracy of the results improve. To carry out such an enormous amount of calculations, we utilized the CDAC PARAM Yuva II facility.

Work carried / Milestone/Achievements: Between the period 16/03/2017 to 28/02/2018, we computed direct dynamics trajectories for two systems (1) Perbenzoate anion which contains 15 atoms (71 electrons) and (2) formamide which contains 6 atoms (24 electrons). We generated 40 (out of 100 total) trajectories and 150 (out of total 300) trajectories using the PARAM Yuva II facility during the mentioned period. These calculations were carried out using the B3LYP functional with a medium sized basis set. Without the PARAM Yuva II facility, it is possible that these calculations would have taken much longer periods of time with the small facility we have in IIT Jodhpur.

Publications / Articles etc.

We have published two nice papers in high quality research journals reporting the results partially generated using the PARAN yuva II facility.

1. Y. Krishnan, P. Rajbhangshi, and *M. Paranjothy*, Theoretical study of perbenzoate anion decomposition pathways in the gas phase, *Int. J. Mass Spectrom.* **428,** 8 (2018).
2. A. Gaulaut and *M. Paranjothy*, Unimolecular decomposition of formamide via direct chemical dynamics simulations, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (In press).

References:

Benefits & experience of using PARAM Yuva II: As mentioned above, our simulations are memory and processor intensive which we could smoothly carry out in the PARAM Yuva II facility. Many different compilers are available in the facility and we could select the right compiler for our codes. We definitely look forward to using the facility continuously.

किए गए काम का शीर्षक : टू स्टडी दी प्रॉपर्टीज ऑफ़ डोपिंग ऑफ़ Al, Cu एंड Mn इन ZnO थिन फिल्म्स यूसिंग DFT एंड टू स्टडी ऑफ़ मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ आइसिंग थिन फिल्म्स यूसिंग कंप्यूटर सिमुलेशन

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: डॉ . प्रदीप भाऊसाहेब शेलके, प्रमुख और सह - प्राध्यापक

ईमेल : shelke.pradip@gmail.com

इंस्टीट्यूशन: भौतिकी विभाग, अहमदनगर कॉलेज अहमदनगर

Research Challenge/s:

Our area of research is Material Simulation using Density Functional Theory (DFT) and Monte Carlo simulation methods. This work is a intense work requiring a good computational facility with parallel environment. Presently, we do not have such facility in our institute. However, due to invaluable help of CDAC we are able to overcome this challenge.

Work carried / Milestone/Achievements:

Using computational facility of CDAC we have carried out following work.

We have studied the graphatic phase formation in few layer ultrathin ZnO thin films using DFT. Also, we have studied effects of doping of elements like Al, Cu, and Mn in graphitic thin films. Now, we are analyzing the data and preparing manuscript.

Also, we have studied magnetic properties of Ising thin films using Computer Simulation.

Publications / Articles etc. (If any):

1. Magnetic properties of patterned thin ising films, communicated to **Journal of Modern Physics B (world Scientific Publishers, Singapore)**

2. Dynamics of Random Sequential Adsorption (RSA) of linear chains consisting of n circular discs - Role of aspect ratio and departure from convexity, Pradip B. Shelke, A.V. Limaye, ***Surface Science 637–638 (2015) 1–4***.

3. Random sequential adsorption of coupled three-circle objects for various radius ratios, Pradip B. Shelke and A. V. Limaye , ***Physical Review E* 83, 061607 (2011)**.

4. Blocking effects in irreversible adsorption of linear macromolecules,Pradip B. Shelke, A.G. Banpurka, S.B. Ogale, A.V. Limaye, Surface Science **601 (2007) 274–279**.

5. Simulation studies of Cooperative Sequential Adsorption (CSA) of binary mixture, Pradip B. Shelke, NCANAP2013 PROCEEDING **(Feb.2013) 149 - 150**

Awards (If any):

Received Bhaskar Raye award for best senior college Physics teacher from Indian Physics Association Pune Chapter on 4th September 2017 at Department of Physics, Savitribai Phule Pune University.

References:

Dr. A. V. Limaye, Department of Physics, Savitribai Phule Pune University

Benefits & experience of using NPSF:

PARAM Yuva II facility is really beneficial for us. Especially, we like the facility of submitting test run without queue.

Any other relevant information (if any):

Under my guidance two students are working for their Ph.D. and two students for their M.Phil. degrees.

किए गए काम का शीर्षक : क्वांटम ट्रांसपोर्ट इन एलेमेंटल डोप्ड 2D मोनोलेएर एंड एटॉमिक क्लस्टर्स

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: डॉ संजीव कुमार गुप्ता,
सहायक प्राध्यापक

ईमेल : sanjeev.gupta@sxca.edu.in

इंस्टीट्यूशन: सेंट जेवियर्स कॉलेज, अहमदाबाद, गुजरात

Research Challenge/s: Our cost-effective and less time consuming strategy proposed in this work will assist in improving the realistic functional design of photovoltaic materials in the laboratory towards the next stage.

Work carried / Milestone/Achievements:

During the time period from 16th March, 2017 to 28th February, 2018, we have completed three major projects.

1. First, we have systematically investigated the electronic and optical properties of single-layer arsenene with two types of functionalized organic molecules; an electrophilic molecule [tetracyanoquinodimethane (TCNQ)] and a nucleophilic molecule [tetrathiafulvalene (TTF)], as an electron acceptor and electron donor, respectively. The interfacial charge transfer between the arsenene monolayer and TCNQ/TTF molecules extensively reduces the band gap of arsenene and accordingly resulted in a p- or n-type semiconducting behavior, respectively. We have also performed the interfacial charge transfer from organic molecules to monolayer arsenene and vice versa. The interfacial surface molecular modification has established an efficient way to develop the light harvesting of arsenene in different polarization directions. Our theoretical investigation suggests that such n- and p-type arsenene semiconductors would broaden the applications in the field of nanoelectronic and optoelectronic devices such as photodiodes and it is also useful for constructing functional electronic systems.

2. Secondly, we have presented a thorough study of electronic and optical properties and interface charge dynamics, that revealed $CaMnO_3$ as a better candidate for the electron transport material in thin film hole transporting material free hybrid perovskite solar cells with the planar architecture than the most common anatase TiO_2. The interfacial charge transfer between the arsenene monolayer and TCNQ/TTF molecules extensively reduces the band gap of arsenene and accordingly resulted in a p- or n-type semiconducting behavior, respectively. We have also performed the interfacial charge transfer from organic molecules to monolayer arsenene and vice

versa. The interfacial surface molecular modification has established an efficient way to develop the light harvesting of arsenene in different polarization directions. Our theoretical investigation suggests that such n- and p-type arsenene semiconductors would broaden the applications in the field of nanoelectronic and optoelectronic devices such as photodiodes and it is also useful for constructing functional electronic systems.

3. And recently, we have studied the structural, electronic and optical properties of single-layer carbon phosphide (CP) allotropes (a-, b- and c-phases) based on density functional theory. The thermoelectric properties like electrical conductivity, thermal conductivity, thermoelectric power, figure of merit (ZT) and compatibility factor as a function of temperature are calculated by using BoltzTrap code. The electronic band structures reveal the direct band gap of a- and b-CP monolayer (i.e., semiconducting nature), while c-CP monolayer is semimetallic with Dirac fermions. The significant absorption is observed in a-, b- and c-CP monolayer, which can be used as an ultraviolet– optical–nanodevice, and all three phases of monolayer of CP are directionally transparent. The transmission spectrum of monolayer of b- and c-phase in the visible region is much higher; therefore, it is used in an anti-reflecting layer in solar cell also. The a-phase of CP monolayer in the ZT increases linearly up to 1500 K, and beyond it reached maximum values as compared to other phases. The results show that below 550 K, CP allotropes (both n- and p-types) are hitherto the best-promising thermoelectric materials. These theoretical investigations suggest that the different phases of semiconducting materials of CP are better candidate for potential application in micro-/nanoscale device, photovoltaic and optoelectronics.

Publications / Articles etc. (If any):

1. Singh, D., Kansara, S., Gupta, S.K. and Sonvane, Y., Single layer of carbon phosphide as an efficient material for optoelectronic devices. Journal of Materials Science, pp.1-14.
2. Pandey, K., Singh, D., Gupta, S.K., Yadav, P., Sonvane, Y., Lukačević, I., Kumar, M., Kumar, M. and Ahuja, R., 2018. Improving electron transport in the hybrid perovskite solar cells using $CaMnO_3$-based buffer layer. Nano Energy.
3. Singh, D., Gupta, S.K., Sonvane, Y. and Sahoo, S., 2017. Modulating the electronic and optical properties of monolayer arsenene phases by organic molecular doping. Nanotechnology, 28(49), p.495202.

Appreciation / Recognition (if any): Received award and citation "Researcher of the year 2017", for the outstanding contribution in the field of physics, St. Xavier's College, Ahmedabad, Gujarat

References:

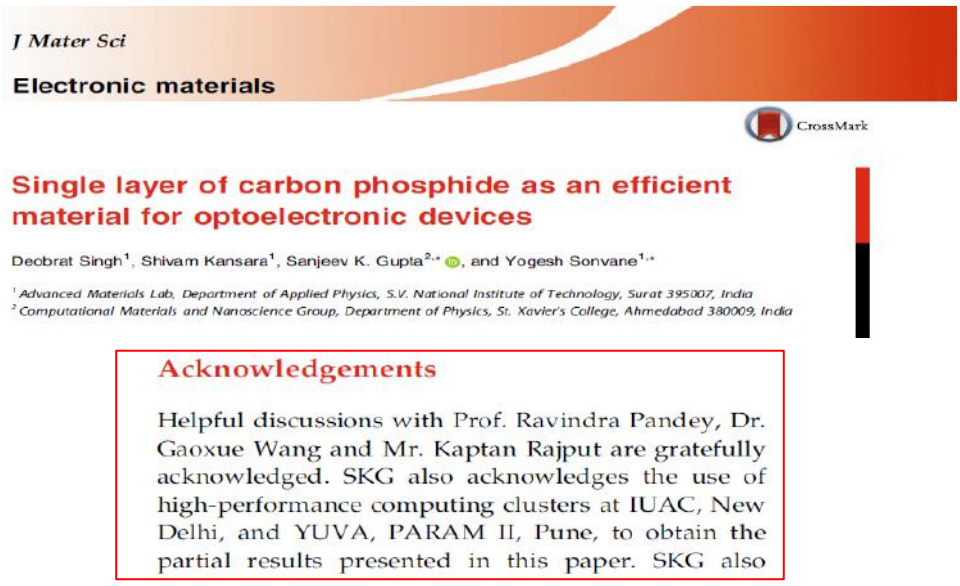
1. Singh, D., Kansara, S., Gupta, S.K. and Sonvane, Y., Single layer of carbon phosphide as an efficient material for optoelectronic devices. Journal of Materials Science, pp.1-14.
2. Pandey, K., Singh, D., Gupta, S.K., Yadav, P., Sonvane, Y., Lukačević, I., Kumar, M., Kumar, M. and Ahuja, R., 2018. Improving electron transport in the hybrid perovskite solar cells using CaMnO 3-based buffer layer. Nano Energy.

3. Singh, D., Gupta, S.K., Sonvane, Y. and Sahoo, S., 2017. Modulating the electronic and optical properties of monolayer arsenene phases by organic molecular doping. Nanotechnology, 28(49), p.495202.

Benefits & experience of using PARAM Yuva II:

The proposed work is one of the important directions both in the fundamental and applied sciences. In addition, the outcome will be beneficial for the research students participating in the projects giving them opportunity to perform scientific investigation at national/international level and to meet and discuss with scientist and students from other international laboratory. This supercomputing collaboration can also be extended for the future. It is expected that the studies performed will lead to publications in refereed international journals and will be suitable for presentation at local and international conferences.

Any other relevant information (if any):


J Mater Sci

Electronic materials

CrossMark

Single layer of carbon phosphide as an efficient material for optoelectronic devices

Deobrat Singh[1], Shivam Kansara[1], Sanjeev K. Gupta[2,*], and Yogesh Sonvane[1,*]

[1] Advanced Materials Lab, Department of Applied Physics, S.V. National Institute of Technology, Surat 395007, India
[2] Computational Materials and Nanoscience Group, Department of Physics, St. Xavier's College, Ahmedabad 380009, India

Acknowledgements

Helpful discussions with Prof. Ravindra Pandey, Dr. Gaoxue Wang and Mr. Kaptan Rajput are gratefully acknowledged. SKG also acknowledges the use of high-performance computing clusters at IUAC, New Delhi, and YUVA, PARAM II, Pune, to obtain the partial results presented in this paper. SKG also

Nano Energy 45 (2018) 287–297

Contents lists available at ScienceDirect

Nano Energy

journal homepage: www.elsevier.com/locate/nanoen

Full paper

Improving electron transport in the hybrid perovskite solar cells using $CaMnO_3$-based buffer layer

Kavita Pandey[a], Deobrat Singh[b], S.K. Gupta[c,*], Pankaj Yadav[a,*], Yogesh Sonvane[b], Igor Lukačević[d,*], Manjeet Kumar[e], Manoj Kumar[a], Rajeev Ahuja[f]

Acknowledgements

Authors I.L. and S.K.G. acknowledge the financial support from the "Gost istraživač" project (INGI-2015-7). S.K.G. acknowledges the usage of high performance computing clusters: (a) K2-IUAC, New Delhi, India, (b) YUVA, PARAM-II, Pune, India to obtain the partial results presented

IOP Publishing Nanotechnology

Nanotechnology **28** (2017) 495202 (11pp) https://doi.org/10.1088/1361-6528/aa9430

Modulating the electronic and optical properties of monolayer arsenene phases by organic molecular doping

Deobrat Singh[1], Sanjeev K Gupta[2,4], Yogesh Sonvane[1,4] and Satyaprakash Sahoo[3]

respectively). S K G also acknowledges the use of high performance computing clusters at IUAC, New Delhi and YUVA, PARAM II, Pune to obtain the partial results presented in this paper. D S would like to thank the University Grant Commission (UGC), New Delhi, India, for the financial

किए गए काम का शीर्षक : डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी /टाइम डिपेंडेंट डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी (DFT/TDDFT) स्टडी ऑफ़ बोरोन क्लस्टर्स .

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: डॉ . सिद्धेश्वर चोपड़ा , सहायक प्राध्यापक

ईमेल : sidhusai@gmail.com

इंस्टीट्यूशन: एमिटी यूनिवर्सिटी

Research Challenge/s: DFT/ TDDFT calculations which need high computational resources.

Work carried / Milestone/Achievements: Optical properties were determined using DFT, TDDFT calculations.

Benefits & experience of using NPSF:

I have been using this facility for 3 years or so, and I can undoubtedly rate it the best facility due to its computational power and most importantly the superb support team where people are always ready to assist you in case of any difficulty. I never faced any problems ever.

किए गए काम का शीर्षक :

1. फ्लक्चुएशन डाइनेमो एक्शन इन कम्प्रेसिब्ले टर्बुलेन्स (शरण्या सुर)
2. हीटिंग ऑफ़ दी सोलर अट्मॉस्फेरे (पियाली चटर्जी)

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: शरण्या सुर, पाठक

ईमेल : sharanya.sur@iiap.res.in, piyali.chatterjee@iiap.res.in

इंस्टीट्यूशन: भारतीय तारा भौतिकी संस्थान

Research Challenge/s:

1. Shocks and contact discontinuities are two basic kinds of noncontinuous features encountered in astrophysical flows. Treatment of shocks in compressible turbulent flows are challenging as they involve discontinuous changes in the density, pressure, temperature and velocities. Unless preventive measures are taken, shocks can trigger self-amplifying instabilities which can kill the simulation. In our work, we have simulated fluctuation dynamos in high Mach number turbulent flows (as occurs in galaxies) with the help of Riemann solvers in the publicly available FLASH code.

2. Short time steps (~0.1 ms) due to field aligned Spitzer conductivity and time step constraints due to numerical solution of detailed radiative transfer equation at low opacity using long characteristics method. Grid size of ~25 km required near the transition region of the sun where the temperature rises steeply from 8000 K to40000K.

Work carried / Milestone/Achievements:

a) Fluctuation dynamo action in compressible turbulence

1) Simulating fluctuation dynamos in high Mach number turbulent flows.

2) Probing the degree of coherence of the generated field and the Faraday rotation measure (RM) obtained from such fields.

3) Extent to which the computed RM compares with observational estimates from MgII absorption systems.

b) Heating of the solar atmosphere

1) Development of a 3-dimensional realistic solar atmosphere using the pencil code.

2) Non uniform grid and radiative transfer.

3) Non local mean field stellar dynamos

Publications / Articles etc. (If any):

1) "Strong nonlocality variations in a spherical mean-field dynamo", Brandenburg A. & Chatterjee, P. 2018, to appear in Astron Nachr (eprint arXiv:1802.04231)

2) Applying the weighted horizontal magnetic gradient method to a simulated flaring Active Region, Korsos, M., Chatterjee, P. & Erdelyi, R. 2018 (under review/revision in ApJ)

3) "Faraday rotation signatures of fluctuation dynamos in young galaxies", Sharanya Sur, Pallavi Bhat & Kandaswamy Subramanian, 2018, MNRAS Letters, 475, L72 - L76 (eprint arXiv:1711.08865).

Any other relevant information (if any):

1. Quick availability of a debugging queue using about 128 cores for at least 2 hours without having to wait too long in the queue will be of great help.

2. Long waiting time in the queue (usually 14 days, sometimes up to 21 days) when running jobs using more than 512 cores. This implies, that only 1-2 such high resolution simulations can be performed in a month. It will be beneficial if the wall clock time limit in the 'BURSTq' mode is increased to at least 72 hrs from the current limit of 17:55.

3. Segregate jobs which use less than 1 - 128 cores to run on a separate machine and reserve 2500 cores for running jobs which require 512 - 2048 cores.

किए गए काम का शीर्षक : मॉलिक्यूलर डायनामिक्स एनालिसिस ऑफ़ नैनोकंपोजिट्स

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: डॉ . मुहम्मद राबियस सनी, सहायक प्राध्यापक, डिपार्टमेंट ऑफ़ एयरोस्पेस इंजीनियरिंग , आई आई टी खरगपुर

ईमेल : sunny@aero.iitkgp.ernet.in

इंस्टीट्यूशन: आई आई टी खरगपुर

Research Challenge/s:

Nanocomposite models are in the scale of Nano-meters, it's merely impossible to carry out the experimental study on Nano-level. We have chosen Molecular Dynamics as our soft-experiment tool to analyze the Nanocomposites. Molecular Dynamics study involves the interactions of each and every particle present in the system, so it leads high computational cost.

Work carried / Milestone/Achievements:

We have carried out our research study on the Nanocomposite comprises of Carbon Nanotube and Polymer matrix.

References:

1. Zhu, R., Pan, E., Roy, a. K. K., & a.K. Roy. (2007). Molecular dynamics study of the stress–strain behavior of carbon-nanotube reinforced Epon 862 composites. Materials Science and Engineering: A, 447(1–2), 51–57.
2. Kim, B.-H., Lee, K.-R., Chung, Y.-C., & Gunn Lee, J. (2012). Effects of interfacial bonding in the Si-carbon nanotube nanocomposite: A molecular dynamics approach. Journal of Applied Physics, 112(4), 44312.
3. Adnan, A., Sun, C. T., & Mahfuz, H. (2007). A molecular dynamics simulation study to investigate the effect of filler size on elastic properties of polymer nanocomposites. Composites Science and Technology, 67(3–4), 348–356.
4. Rahman, R. (2012). Molecular Dynamics Modeling and Characterization of Graphene/Polymer Nanocomposites, 120.
5. Rahman, R., & Haque, A. (2011). Molecular Dynamics Simulation of Cross-linked Graphene-Epoxy Nanocomposites, (Md), 34.

6. Yu, S., Yang, S., & Cho, M. (2009). Multi-scale modeling of cross-linked epoxy nanocomposites. Polymer, 50(3), 945–952.
7. Arash, B., Wang, Q., & Varadan, V. K. (2014). Mechanical properties of carbon nanotube/polymer composites. Scientific Reports, 4, 6479.

Benefits & experience of using NPSF:

The PARAM Yuva II facility was very useful and robust. We didn't find any difficulty to access the facility. The maintenance of job queues was very comfortable. Also the helpdesk support was flawless.

किए गए काम का शीर्षक :

1. प्रोजेक्ट: स्पेक्ट्रल डिकम्पोज़िशन ऑफ़ सिस्मिक डाटा एंड इट्स एप्लीकेशन फॉर गैस हायड्रेट्स एक्सप्लोरेशन।
2. काम: डेवलपमेंट ऑफ़ पैरेलल एनवायरनमेंट फॉर परफार्मिंग लोकल टाइम फ्रीक्वेंसी ट्रांसफॉर्म (LTF) ऑफ़ 2D/3D सिस्मिक डाटा।

मुख्य अन्वेषक का नाम और पदनाम: ऋचा रस्तोगी

ईमेल : richar@cdac.in

इंस्टीट्यूशन: हाई परफॉरमेंस कंप्यूटिंग – साइंटिफिक एंड इंजीनियरिंग एप्लीकेशन ग्रुप (HPC-S&EA), सीडैक

Work carried / Milestone/Achievements:

Aim of this activity was to carry out Local time frequency decomposition (LTFD) of seismic 2D and 3D data sets. This spectral decomposition methods gives time-frequency images of input data which are in time-space domain. ISO-frequency sections are calculated for each input data set which are used to analyze amplitude variations of seismic data. LTFD technique is a compute intensive method.

We have written a parallel application for LTFD (SeisLTFD) using distributed computing environment of PARAM YUVA II. The developed application uses "sfltft" an open source program from Madagascar package and Message Passing Interface (MPI) for input data distribution among nodes. OpenMP APIs are also used for taking advantage of shared memory environment within each nodes. MPI-IO is utilized for enabling parallel io in the program.

This application was used to analyze amplitude variation in ISO-frequency sections of real field seismic data from Krishna Godavari basin, Blake ridge region and Netherland offshore region.

References:

Liu, Y. and Fomel, S., 2013, Seismic data analysis using local time-frequency decomposition; Geophysical Prospecting, 61, 516–525. doi:10.1111/j.1365-2478.2012.01062.x

Benefits & experience of using NPSF:

Performing a LTFD of seismic trace is a compute intensive task. For a 2D sparker data (consisting of approximately 2000 traces) collected in Krishna Godavari basin, India, estimated execution time on single processor was approximately 2.5 days. However actual execution time with parallel program was 130 min

using 2 node with 16 OpenMP threads per node. Analysis of sixteen 2D sparker data from Krishna Godavari basin was performed using parallel program. This reduction of execution time helped in completion of the project within specified time frame.

Any other relevant information (if any):

The parallel program will be provided under GNU General Public License.

6

शोध प्रबंध

वर्ष 2017-18 में पीएचडी शोधकर्ताओं की कुल संख्या :03

1. **अटॉमिस्टिक सिम्युलेशन्स ऑफ़ नैनोस्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ फास्फोरिक एसिड -बेन्ज़ीमिडाज़ोल सिस्टम्स : अ फ्यूल सेल इनिशिएटिव**

   पीएचडी छात्रा : मिनल पेडनेकर

   मुख्य अन्वेषक : डॉ. अरुण वेंकटनाथन

   संस्थान : आईआईएसईआर, पुणे

2. **इफ़ेक्ट ऑफ़ फंक्शनलाइज़ेशन एंड डिफेक्ट इंजीनियरिंग ऑन दी प्रॉपर्टीज ऑफ़ hBN/नैनोकम्पोजिट**

   पीएचडी छात्र : राजेश कुमार

   मुख्य अन्वेषक : प्रोफ. अविनाश पराशर

   संस्थान : आईआईटी, रूडकी

3. **इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ स्ट्रक्चरल डायनामिक्स एंड एल्लोस्टेरिक मैकेनिज्म ऑफ़ SAMHD1 प्रोटीन काम्प्लेक्स वाया मॉलिक्यूलर डायनामिक्स स्टडीज**

   पीएचडी छात्र : कज्वाल कुमार पात्रा

   मुख्य अन्वेषक : प्रोफ. अविनाश पराशर

   संस्थान : आईआईटी, रूडकी

7

प्रकाशन

वर्ष 2017 -18 में एनपीएसएफ प्रयोगकर्ताओं द्वारा कुल प्रकाशनों की संख्या: 66

सहकर्मी द्वारा समीक्षा किए गए राष्ट्रीय और अंतर्राष्ट्रीय पत्रिकाओं में प्रकाशन (उनके साथ प्रभाव कारक)

केमिस्ट्री ऑफ़ मटेरियल्स (9.466)

सचिन रोन्दिया, नितिन वडनेरकर, योगेश जाधव, सन्देश जड़कर, संतोष हरम एंड मुकुल कबीर, स्ट्रक्चरल, इलेक्ट्रॉनिक एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ Cu2NiSnS4: अ कंबाइंड एक्सपेरिमेंटल एंड थ्योरेटिकल स्टडी टुवर्ड फोटोवोल्टाइक ऍप्लिकेशन्स केमिस्ट्री ऑफ़ मटेरियल्स 29, 3133 (2017)

जॉर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री लेटर्स (9.353)

एस. दास, ए. डे. जी. रेड्डी एंड डी.डी. शर्मा, सप्रेशन ऑफ़ दी कॉफ़ी-रिंग इफ़ेक्ट एंड ईवेपोरशन ड्राइव डिसऑर्डर टू आर्डर ट्रांजीशन इन कोलॉइडल ड्रॉप्लेट्स, जॉर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री लेटर्स, 8, 4704, 2017

जॉर्नल ऑफ़ मटेरियल्स केमिस्ट्री ए (8.867)

राजिंदर कुमार, ऋतू राइ, सीमा गौतम, अबीर डे सर्कार, एन. तिवारी, शम्भू नाथ झा, दिब्येंदु भट्टाचार्य्या, अशोक के गांगुली एंड विवेक बागची, नैनो-स्ट्रक्चर्ड हाइब्रिड मॉलिब्डेनम कार्बिडेस/निट्राइडेस जनरेटेड इन-सितु फॉर HER ऍप्लिकेशन्स, जर्नल ऑफ़ मटेरियल्स केमिस्ट्री ए, 5 (2017) 7764-7768

हरप्रीत सिंह, विजय के. तोमर, नित्यासागर जेना, इंदु बाला, निधि शर्मा, देवदत्ता नेपक, अबीर डे सर्कार, कमलाकन्नन कैलासम एंड सांतनु पल, तृक्षेणे बेस्ड पोरस , क्रिस्टलाइन कोवलेंट आर्गेनिक फ़्रेमवर्क्स एंड इटस ऍप्लिकेशन्स इन हुमिडीटी सेंसिंग , जर्नल ऑफ़ मटेरियल्स केमिस्ट्री ए, 5 (2017) 21820-21827

डिम्पल, नित्यासागर जेना, आशिमा रावत एंड अबीर डे सर्कार, स्ट्रेन एंड पीएच फसिलिटटेड आर्टिफिसियल फोटोसिंथेसिस इन मोनोलाएर MoS2 नैनोशीट, जर्नल ऑफ़ मटेरियल्स केमिस्ट्री A, 5 (2017) 22265-22276

फिजिक्स रिव्यु लेटर्स (8.462)

जी. जे. श्रीजीत, स्टेफेन पॉवेल एंड आदम नाहं, इमर्जेंट SO (5) सिमिट्री एट थी कॉलमनर ऑर्डरिंग ट्रांजीशन इन थी क्लासिकल क्यूबिक डिमर मॉडल. (सब्मिटेड)

ACS एप्लाइड मटेरियल्स एंड इंटरफेसेस (7.504)

मयांगलंबम मनोलता देवी, कुलजीत कौर, अंकिता गुप्ता, चन्दन बेरा, अशोक कुमार गांगुली एंड मेनका झा, कन्वर्शन ऑफ़ वेस्ट टीन कंटेनर्स टू हाइली एफ्फिसिएंट फोटो कैटलिस्ट बेस्ड ऑन SnO2-Fe3O4 हेटेरो स्ट्रक्टर्स (सब्मिटेड)

कार्बन (6.337)

एस चंद्र शेखर, आर. एस. स्वाति, मॉलिक्यूलर स्विचिंग ऑन ग्राफ़ीने एंड ग्राफ्डियने: रेअलीज़िंग फंक्शनल कार्बन नेटवर्क्स इन सिनर्जी विथ ग्राफेन. कार्बन2018, 126, 489-499

थी एस्ट्रोफिसिकाल जर्नल (5.333)

कोरसोस, एम्., चटर्जी पी एंड एर्डलयी आर, एप्पलाइंग थी वेटेड हॉरिजॉन्टल मैग्नेटिक ग्रेडिएंट मेथड टू अ सिमुलेटेड फ्लैरिंग एक्टिव रीजन, 2018 (अंडर रिव्यु)

केमिस्ट्री - ए यूरोपियन जर्नल (5.317)

गोपालन राजारमन, रवि कुमार एंड एजाज़ अंसारी, एक्सियल vs. इक्वेटोरियल लीजैंड राइवैलरी इन कंट्रोलिंग थी रेअक्टिवित्य ऑफ़ आयरन (IV)-Oxo स्पीशीज : सिंगल-स्टेट vs. टू-स्टेट रेअक्टिविटी, J. (एक्सेप्टेड)

एम्एनआरऐइस लेटर्स (4.961)

शरण्या सुर, पल्लवी भट एंड कन्दस्वामी सुब्रमनियन, फैराडे रोटेशन सिग्नेचर्स ऑफ़ फ्लक्चुएशन डयनमोस इन यंग गैलेक्सीज", 2018, एम्एनआरऐइस लेटर्स, 475, L72 - L76 (eprint arXiv: 1711.08865

जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री C (4.536)

रेजाउल शेक, श्रीलता अर्रा, बरुन धारा, जोएल एस मिलर, मुकुल कबीर, अपर्णा देशपांडे, एनहांसिंग थी इंटरमोलेक्युलर इंटरेक्शन बाय क्यानो सब्स्टिटूशन इन CuPc , जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री C, 122, 429 (2018)

नित्यासागर जेना,डिंपल,शौनक धनंजय बेहेरे एंड अबीर डे सर्कार "स्ट्रेन इनदूजेड ऑप्टिमाइजेशन ऑफ़ ननोएलेक्ट्रोमैकेनिकल एनर्जी हार्वेस्टिंग एंड नैनोपिएजोट्रॉनिक रिस्पांस इन MoS2 मोनोलाएर नैनोशीट", जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री C 121 (2017) 9181-9190

जॉर्नल ऑफ़ मॉलिक्युलर बायोलॉजी(4.333)

एल. पोनूप प्रसाद पात्रों, अभिषेक कुमार, नरेंदर कोलिमी एंड थेनमलारचेल्वी रथिनवेलन, 3D-NuS: अ वेब सर्वर फॉर ऑटोमेटेड मॉडेलिंग एंड विसुअलिज़शन ऑफ़ नॉन-कॅनॉनिकाल 3- डायमेंशनल नुक्लेइक एसिड स्ट्रक्टर्स, जॉर्नल ऑफ़ मॉलिक्युलर बायोलॉजी http://dx.doi.org/10.1016/j.jmb.2017.06.013

एच. मैती एंड जी. रेड्डी, थर्मोडायनामिक्स एंड कइनेटिक्स ऑफ़ सिंगल चैन मोनेल्लिन फोल्डिंग विथ स्ट्रक्चरल इनसाइट्स ईंटो स्पेसिफिक कोअलापस इन थी दीनेचरड स्टेट एन्सेम्बल, J. जॉर्नल ऑफ़ मॉलिक्युलर बायोलॉजी, 2018 16;430(4):465-478 DOI: 10.1016/j.jmb.2017.09.009, 2017

केमइलेक्ट्रोकेम (4.136)

पी. के. गंगाधरन, एस. एम्. उन्नी, एन. कुमार, पी. घोष एंड एस. कुरंगोट, नाइट्रोजन-डोप्ड ग्राफेन विथ थ्री-डायमेंशनल आर्किटेक्चर असिस्टेड बय कार्बन नाइट्राइड टेट्रापोडस एस एन एफ्फिसिएंट मेटल-फ्री एलेक्ट्रोकाटलीस्ट फॉर हाइड्रोजन एवोलुशन, केमइलेक्ट्रोकेम, 4, 2643 (2017)

जर्नल ऑफ़ बायोलॉजिकल केमिस्ट्री (4.125)

A B-Z जंक्शन इनदेउसड बय एन A … A मिसमैच इन GAC रिपीट्स इन थी जीन फ़ोर कार्टिलेज ओलिगोमेरिक मैट्रिक्स प्रोटीन प्रोमोटर्स बॉन्डिंग विथ थी hZαADAR1 प्रोटीन. The जर्नल ऑफ़ बायोलॉजिकल केमिस्ट्री 292, 18732-18746. doi:10.1074/jbc.M117.796235

फिजिकल केमिस्ट्री केमिकल फिजिक्स (4.123)

वी. कुमार एंड डी. आर. रॉय, स्ट्रक्चर, इलेक्ट्रॉनिक, विब्रेशनल प्रॉपर्टीज ऑफ़ सिंगल-लेयर स्टेनअने एंड इट्स एप्लीकेशन एस अ पोटेंशियल गैस सेंसर फॉर NO2, SO2, CO2 and NH3, फिजिकल केमिस्ट्री केमिकल फिजिक्स (2018) (सब्मिटेड)

चन्दन बेरा, सुरेंद्र बी .देवराकोण्डा, विशाल कुमार, अशोक के. गांगुली एंड रूपक के. बनर्जी, थी मैकेनिज्म ऑफ़ नैनोपार्टिकल-मेडिएटेड एनहांसड एनर्जी ट्रांसफर डुरिंग हाई-इंटेंसिटी फोकस्ड अल्ट्रासाउंड सोनिकेशन. फिजिकल केमिस्ट्री केमिकल फिजिक्स. 19, 19075-19082 (2017).

प्रभजोत कौर, चन्दन बेरा, इफ़ेक्ट ऑफ़ अलोयिंग ऑन थर्मल कंडक्टिविटी एंड थर्मोइलेक्ट्रिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ CoAsS एंड CoSbS, फिजिकल केमिस्ट्री केमिकल फिजिक्स. 19, 24928-24933 (2017).

डेल्टन ट्रांसक्शन्स (4.029)

सखाराम बी. तायड़े, विशाल एम्. धावले, अविनाश एस. कुम्भार, श्रीकुमार कुरंगोट, पीटर लोंनेके, एवम्रिए हे-हॉकिंसड एंड भालचंद्र पुजारी, प्रोटोन कंडक्शन इन अ हाइड्रोजन-बोंडेड काम्प्लेक्स ऑफ़ कॉपर (II)-बाईप्यरीडीने ग्लाइकोलउरिल नाइट्रेट. डेल्टन ट्रांसक्शन्स 2017, 46, 6968-6974, DOI: 10.1039/C7DT00425G.

कंप्यूटर फिजिक्स कम्युनिकेशन्स (3.936)

आर. लोपेज़, जे. ऍफ़. रीको, जी. रामरेज़, आई. एमा, डी. ज़र्रिल्ला, ए. कुमार, एस. डी. एओले, एस. आर . गदरे, टोपोलॉजी ऑफ़ मॉलिक्यूलर इलेक्ट्रान डेंसिटी एंड इलेक्ट्रोस्टेटिक पोटेंशियल विथ DAMQT, कंप्यूटर फिजिक्स कम्युनिकेशन्स. 214, 207 (2017)

फिजिकल रिव्यु बी (3.718)

रोहित बाबर एंड मुकुल कबीर, इंजीनियरिंग थी कोंडो स्टेट इन टू-डायमेंशनल सेमीकंडक्टिंग फोस्फोरेने, फिजिकल रिव्यु बी 97, 045132 (2018)

नेहा वडेहरा, रूचि तोमर, सौम्यदीप हलदर, मीनाक्षी शर्मा, इंदरजीत सिंह, नित्यासागर जेना, भानु प्रकाश, अबीर डे सरकार, चन्दन बेरा, अनंथ वेंकटेशन एंड एस चक्रवर्ती, इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर मॉडिफिकेशन ऑफ़ थी KTaO3 सिंगल-क्रिस्टल सरफेस बय Ar+ बॉम्बार्डमेंट , Physical Review B, 96 (2017) 115423

इंटरनेशनल जर्नल ऑफ़ बायोलॉजिकल मैक्रोमोलेक्युल्स (3.671)

नारंग एस. एस, शुऐब, एस, गोयल बी , मॉलिक्यूलर इनसाइट्स इनटू थी इन्हिबिटरी मैकेनिज्म ऑफ़ रिफामयसीन SV अगेन्स्ट β2-मइक्रोग्लोबुलीन एग्रीगेशन : अ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी , इंटरनेशनल जर्नल ऑफ़ बायोलॉजिकल मैक्रोमोलेक्युल्स 2017, 102, 1025-1034

एटमोस्फियरिक एनवायरनमेंट (3.629)

सुमिता केडिआ, राजेश कुमार, शाहिदुल इस्लाम, योगेश साठे एंड अक्षरा कागिनालकर, रेडिएटिव इम्पैक्ट ऑफ़ अ हैवी डस्ट स्टॉर्म ओवर इंडिया एंड सर्राउंडिंग ओशनिक रेजियन्स , एटमोस्फियरिक एनवायरनमेंट (सब्मिटेड)

जर्नल ऑफ़ सेलुलर बायोकेमिस्ट्री (3.446)

नारंग, एस. एस, शुऐब, एस, गोयल डी, गोयल बी. अस्सेस्सिंग थी इफ़ेक्ट ऑफ़ D59P म्युटेशन इन थी DE लूप रीजन इन अमीलॉइड एग्रीगेशन प्रोपेन्सिटी ऑफ़ β2-मइक्रोग्लोबुलीन : अ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी. जर्नल ऑफ़ सेलुलर बायोकेमिस्ट्री 2018, 119, 782-792.

सैनी, आर के, शुऐब एस, गोयल डी, गोयल बी, मॉलिक्यूलर इनसाइट्स इनटू थी इफ़ेक्ट L17A/F19A डबल म्युटेशन ऑन थी स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ Aβ40: अ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी , जर्नल ऑफ़ सेलुलर बायोकेमिस्ट्री 2018, (अंडर रिव्यु).

एप्लाइड फिजिक्स लेटर्स (3.411)

रेनू रानी, डिंपल, नित्यासागर जेना, अनिरबन कुंडू, अबीर डे सरकार एंड किरण शंकर हज़रा , कंट्रोल्ड फार्मेशन ऑफ़ नैनोस्ट्रक्टर्स ऑन MoS2 लेयर्स बय फोकस्ड लेज़र इररेडिएशन , एप्लाइड फिजिक्स लेटर्स , 110 (2017) 083101

पॉलीमर (3.364)
राजेश कुमार, अविनाश पराशर, इफ़ेक्ट ऑफ़ जॉमेट्रिकल डिफेक्ट्स एंड फंक्शनलिज़तिओन ऑन थी इंटरफेसियल स्ट्रेंथ ऑफ़ h-BN / पोलीएथीलेने बेस्ड नैनो कम्पोज़िट, पॉलीमर 2018 (अंडर रिव्यु)

जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री बी (3.177)

बप्पा घोष एंड सरबंती चौधरी, इन्फ्लुएंस ऑफ़ थी लोकेशन ऑफ़ अट्रैक्टिव पॉलीमर पोर इंटरेक्शन्स ऑन ट्रांसलोकेशन डायनामिक्स , जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री बी, 122,360-368 (2018)

डे एंड जी. रेड्डी, टोरॉइडल कंडेंसटेस बय सेमिफ्लेक्सिबले पॉलीमर चेन्स: इनसाइट्स इनटू नुक्लिएशन, ग्रोथ एंड पैकिंग डिफेक्ट्स, जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री बी, 121, 9291, 2017.

सांगखा बोरह एंड पद्मा कुमार पद्मनाभन , फर्स्ट प्रिंसिपल मॉलिक्यूलर डायनामिक्स इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ वाटरबॉर्न As-V स्पीशीज , जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री बी (सब्मिटेड)

जर्नल ऑफ़ केमिकल फिजिक्स (2.965)

दीपश्री सराफ, अशोक कुमार, दिलीप कान्हेरे एंड अंजलि क्षीरसागर, साइज डिपेंडेंट टनल डायोड इफेक्ट्स इन गोल्ड टिप्पड CdSe ननोडंबबेल्स , जर्नल ऑफ़ केमिकल फिजिक्स, 146, 054703 (2017).

जी. सिंह, ऐ. नंदी, एस. आर. गद्रे , टी. छिबा, ऐ. फुजी J, ऐ कंबाइंड थ्योरेटिकल एंड एक्सपेरिमेंटल स्टडी ऑफ़ फिनॉल (एसिटिलीन)n (n 7) क्लस्टर्स, जर्नल ऑफ़ केमिकल फिजिक्स 146, 154303, 2017

कटैलिसीस टुडे (2.94)

एल. जॉर्ज, एस. सप्पाटी, पी. घोष एंड आर नंदिनी देवी, सेंसिटीज़िंग विथ शार्ट कोंजूगेटेड मोलेक्युल्स : मल्टीमॉडल एंकरिंग ऑन ZnO नैनोपार्टिकल्स फॉर एनहांसेड इलेक्ट्रान ट्रांसफर करैक्टरिस्टिक्स, स्टेबिलिटी एंड H2 एवोलूशन , कटैलिसीस टुडे. DOI:10.1016/j.cattod.2017.09.052

जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री ऐ (2.847)

दातर ऐ, हज़रा ऐ , पाथवेज़ फॉर एक्ससिटेड-स्टेट नोनरडीएटिव डीकेय ऑफ़ 5, 6 दीहीड्रोक्सीइडोल , ऐ बिल्डिंग ब्लॉक ऑफ़ एउमेलनीन . जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री ऐ, 2017, 121, 2790-2797

वाई . कृष्णन , एन शर्मा, यू लोरडेराज एंड एम् परंज्योति , क्लासिकल डायनामिक्स सिम्युलेशन्स ऑफ़ डिससोसिएशन ऑफ़ प्रोटोनटेड ट्रयपटोफन इन थी गैस फेज, जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री ऐ, 2017, 121, 4389 – 4396

माने, एम् . ऐ ; हज़रा, ऐ. "इंटरप्ले बिट्वीन कोंजूगेशन एंड साइज-ड्रिवेन डीलोकलाइजेशन लीडस् टू करैक्टरिस्टिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ सब्स्टिटूटेड थैमिन्स." जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री ऐ, 2017, 121, 8147-8153

इंडस्ट्रियल एंड इंजीनियरिंग केमिस्ट्री रिसर्च (2.843)

तमघना चक्रबोर्ती एंड झुम्पा अधिकारी, फेज इक्विलिब्रिअ एंड क्रिटिकल पॉइंट प्रिडिक्शन्स ऑफ़ मिक्सचर्स ऑफ़ मॉलिक्यूलर फ्लुइड्स यूसींग ग्रैंड कॅनॉनिकाल ट्रांजीशन मैट्रिक्स मोन्टे कार्लो, इंडस्ट्रियल एंड

इंजीनियरिंग केमिस्ट्री रिसर्च., 2017, 56 (22), pp 6520-6534, DOI: 10.1021/acs.iecr.7b01114

कंडेंस्ड मैटर (2.649)

डिंपल, नित्यासागर जेना एंड अबीर डे सरकार, कम्प्रेस्सिवे स्ट्रेन इनडूसेड एनहैंसमेंट इन थर्मोइलेक्ट्रिक-पावर-फैक्टर इन मोनोलाएर MoS2 नैनोशीट, कंडेंस्ड मैटर 29 (2017) 225501 (7pp)

मीत एच. नायक, मनीष जैन, सब्सट्रेट स्क्रीनिंग इफेक्ट्स ऑन थी क्वासिपार्टिकल बैंड गैप एंड डिफेक्ट चार्ज ट्रांजीशन लेवल्स इन MoS2, कंडेंस्ड मैटर, arXiv:1710.09569

वी. रवि चंद्रा, ज्योतिष्मान साहू, दी स्पिन 1/2 हैसेंबेर्ग अँटीफरोमॅग्नेट ऑन थी पय्रोक्लोरे लैटिस: एन एक्सएक्ट डायगोनलइसेसं स्टडी, कंडेंस्ड मैटर. arXiv:1710.11316

जर्नल ऑफ़ मटेरियल्स साइंस (2.599)

वी. कुमार एंड डी. आर. रॉय, स्ट्रक्चर, बॉन्डिंग, स्टेबिलिटी, इलेक्ट्रॉनिक, थर्मोडीनमिक थर्मोइलेक्ट्रिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ सिक्स डिफरेंट फेसेस ऑफ़ इंडियम नाइट्राइड, (अंडर रिव्यु) जर्नल ऑफ़ मटेरियल्स साइंस: JMSC-D-17-05053

मटेरियल्स लेटर्स (2.59)

राजीव के एंड डॉ. राधाकृष्णन आर, इलेक्ट्रॉनिक, ऑप्टिकल एंड मैकेनिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ लीड-फ्री हैलाइड डबल परोव्स्किट्स यूसींग फर्स्ट-प्रिंसिपल्स डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी, मटेरियल्स लेटर्स

कम्प्यूटर्स एंड फ्लुइड्स (2.313)

राजेश रंजन, एस.एम्. देशपांडे, रोद्दम नरसिम्हा, न्यू इनसाइट्स फ्रॉम हाई-रेसोलुशन कम्प्रेसिब्ले DNS स्टडीज ऑन एन LPT ब्लेड बाउंड्री लेयर, कम्प्यूटर्स एंड फ्लुइड्स 153 (2017),49-60

जर्नल ऑफ़ बायोमॉलिक्यूलर स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स (2.300)

शुऐब, एस, गोयल बी, स्क्रूटिनी ऑफ़ थी मैकेनिज्म ऑफ़ स्माल मॉलिक्यूल इनहिबिटर प्रीवेंटिंग कन्फोर्मेशनल ट्रांजीशन ऑफ़ अमीलॉइड-β42 मोनोमर: इनसाइट्स फ्रॉम मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिम्युलेशन्स . जर्नल ऑफ़ बायोमॉलिक्यूलर स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स. 2017, DOI:10.1080/07391102.2017.1291363.

जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर रिकग्निशन (2.175)

सैनी, आर. के, शुऐब एस, गोयल बी, मॉलिक्यूलर इनसाइट्स इनटू Aβ42 प्रोटोफिब्रील दीस्टेबिलाइजेशन विथ अ फ्लुओरीनटेड कंपाउंड D744: अ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी, जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर रिकग्निशन. 2017, 30, e2656.

मटेरियल्स केमिस्ट्री एंड फिजिक्स (2.084)

के.सी.भामू एंड के.आर.प्रिओलकार, इलेक्ट्रॉनिक एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ AgAlO2: अ फर्स्ट - प्रिंसिपल्स स्टडी, मटेरियल्स केमिस्ट्री एंड फिजिक्स, 190, 1 April 2017, 114-119

जर्नल ऑफ़ फिजिक्स एंड केमिस्ट्री ऑफ़ सॉलिड्स (2.048)

क्यू .महमूद, एम् .हसन एस.एच.ऐ. अहमद, के.सी .भामू , आसिफ महमूद , शाहिद एम्.रामय ,स्टडी ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक, मैग्नेटिक एंड थर्मोइलेक्ट्रिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ AV2O4 (A = Zn, Cd, Hg) बाय यूसींग DFT एप्रोच, जर्नल ऑफ़ फिजिक्स एंड केमिस्ट्री ऑफ़ सॉलिड्स (इन प्रेस) https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2017.08.007

इ पी एल (1.9)

जलाल सरबदानी, बप्पा घोष, सरबंती चौधरी एंड टपिओ अला-निस्सीला, डायनामिक्स ऑफ़ एन्ड -पुल्लड पॉलीमर ट्रांसलोकेशन थ्रू अ नैनोपोर , इ पी एल , 120, 38004(2017)

मोलेक्यूलर फिजिक्स (1.837)

सिद्धेश्वर चोपड़ा एंड फेलिक्स प्लेस्सेर, UV अब्सॉर्प्शन इन मेटल डेकोरेटेड बोरोन नाइट्राइड फलैक्स : अ थ्योरेटिकल एनालिसिस ऑफ़ एक्ससिटेड स्टेट्स, Molecular Physics, 115, 19, 2469-2477, (2017).

जी. सिंह, आर. वर्मा, एस. वागले, एस. आर. गद्रे , एक्सप्लिसिट हाइड्रेशन ऑफ़ अमोनियम आयन बाय कोरिलेटेड मेथड्स एम्प्लॉयिंग मॉलिक्यूलर टेलरिंग एप्रोच , मोलेक्यूलर फिजिक्स. 115, 2708 (2017), DOI: 10.1080/00268976.2017.1310326.

जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर ग्राफ़िक्स एंड मॉडेलिंग (1.754)

मनन देसाई, नीरज गौर एंड देबजानी दासगुप्ता, इफ़ेक्ट ऑफ़ टेम्परेचर ऑफ़ स्ट्रक्चरल स्टेबिलिटी ऑफ़ FtsZ फ्रॉम E.coli एंड P.abyssi: अ कम्पेरेटिव स्टडी , जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर ग्राफ़िक्स एंड मॉडेलिंग (रिव्यु)

इंटरनेशनल जर्नल ऑफ़ मास स्पेक्ट्रोमेट्री (1.702)

व्हाई. कृष्णन, पी राजबंग्शी एंड एम् परंज्योति, थ्योरेटिकल स्टडी ऑफ़ परबेनज़ोएट एनिओन डीकम्पोजीशन पाथवेज़ इन थी गैस फेज , इंटरनेशनल जर्नल ऑफ़ मास स्पेक्ट्रोमेट्री 2017 (इन प्रेस) .

जर्नल ऑफ़ मॉडर्न फैसिकस बी (1.669)

पी. एस थोकल एंड प्रदीप बी शेल्के , मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ पेटेरनड थीनइसिंग फिल्म्स , जर्नल ऑफ़ मॉडर्न फैसिकस बी. (सब्मिटेड)

जर्नल ऑफ़ केमिकल साइंसेज (1.2998)

व्हाई. कृष्णन, अ. विन्सेंट एंड एम्. परंज्योति, क्लासिकल डायनामिक्स सिम्युलेशन्स ऑफ़ इंटरस्टेलर ग्लाइसिन फार्मेशन वाया CH2=NH + CO + H2O रिएक्शन , जर्नल ऑफ़ केमिकल साइंसेज, 2017, 129, 1571 – 1577.

नैनोसाइंस एंड नैनोटेक्नोलॉजी (1.25)

सिद्धेश्वर चोपड़ा, एक्ससिटोन साइज एंड नेचुरल ट्रांजीशन ऑर्बिटल इन्वेस्टीगेशन इन वेरिएड ग्राफेन फॉर्म्स: हाई लेवल ऐब-इंश्यो कम्पूटेशन्स , नैनोसाइंस एंड नैनोटेक्नोलॉजी, 7, 2017, doi:10.2174/2210681207666170407165919

मीटरोलॉजी एंड एटमोस्फियरिक फिजिक्स (1.159)

सुमिता केडिआ, रमेश के. वेल्लोर, शाहिदुल इस्लाम एंड अक्षरा कागिनालकर, अ स्टडी ऑफ़ हिमालयन एक्सट्रीम राइफल इवेंट्स यूसींग WRF-Chem , मीटरोलॉजी एंड एटमोस्फियरिक फिजिक्स (सब्मिटेड)

थ्योरेटिकल एंड कम्प्युटशन फ्लूइड डायनामिक्स (1.097)

योगेश प्रसाद मद्रास सेतुरमन, जोहन लरसन एंड कृष्णेंदु सिन्हा, थर्मोडीनमिक फ्लक़चुएशन इन कैनोनिकल शॉक -टर्बुलेन्स इंटरेक्शन ", (अंडर रिव्यु) थ्योरेटिकल एंड कम्प्युटशन फ्लूइड डायनामिक्स (अंडर रिव्यु)

एस्ट्रोनॉमिस्चे नाचरिचटें (0.916)

ब्रैंडनबर्ग ऐ एंड चटर्जी पी , स्ट्रांग नॉनलोकैलिटी वैरिएशंस इन ऐ स्फेरिकल मीन-फील्ड डाइनेमो, 2018, एस्ट्रोनॉमिस्चे नाचरिचटें (एप्रींट arXiv:1802.04231)

कम्प्यूटर्स एंड जीओसाइंसेज (0.70)

रस्तोगी आर, लोंधे ऐ, श्रीवास्तव ऐ, सिरसला के, खोंडे के, 2017, 3D किरचॉफ डेप्थ माइग्रेशन अल्गोरिथम: ऐ न्यू स्केलेबल एप्रोच फॉर परलेलीजाशन ऑन मल्टीकोर CPU बेस्ड क्लस्टर, कम्प्यूटर्स एंड जीओसाइंसेज (स्प्रिंगर) , 100, 67-75.

प्रोसीडिंग्स ऑफ़ थी नेशनल अकादमी ऑफ़ सइंसेस, इंडिया-सेक्शन बी: बायोलॉजिकल साइंसेज (0.67)

कुमार, ए, कुमार, एस, कुमार ए एंड एम्एनविपी गाजुला, होमोलॉजी मॉडेलिंग, मॉलिक्यूलर डॉकिंग एंड मॉलिक्यूलर डायनामिक्स बेस्ड फंक्शनल इनसाइट्स इंटो राइस ऊरीस बाउंड टू यूरिया, प्रोसीडिंग्स ऑफ़ थी नेशनल अकादमी ऑफ़ सइंसेस, इंडिया-सेक्शन बी: बायोलॉजिकल साइंसेज PP1-10, 2017

परमाना - जर्नल ऑफ़ फिजिक्स (0.52)

डिंपल, नित्यासागर जेना, शौनक धनंजय बेहेरे एंड अबीर डे सरकार , थी इफेक्ट्स ऑफ़ डिफरेंट पॉसिबल मोड्स ऑफ़ यूनिएक्सियल स्ट्रेन ऑन थी ट्यूनएबिलिटी ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक एंड बैंड स्ट्रक्टर्स इन MoS2 मोनोलाएर नैनोशीट वाया फर्स्ट -प्रिंसिपल्स डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी, परमाना - जर्नल ऑफ़ फिजिक्स - स्प्रिंगर , 89(2017)1-7.

एडवांसेज इन कम्प्यूटेशन, मॉडेलिंग एंड कण्ट्रोल ऑफ़ ट्रांज़िशनल एंड टुर्बुलेंट फ्लोस (बुक)

राजेश रंजन, एस .एम् .देशपांडे एंड रोद्दम नरसिम्हा, ऐ हाई-रिज़ोलुशन कम्प्रेसिबल DNS स्टडी ऑफ़ फ्लो पास्ट ऐ लो-प्रेशर गैस टरबाइन ब्लेड, 2016

8

औद्योगिक यात्रा

16 मार्च 2017 से 28 फेब्रुअरी 2018 के दौरान आगंतुकों की कुल संख्या: 2750

गणमान्य व्यक्तिओ द्वारा किये गए दौरे

- लेफ्टिनेंट जनरल अनिल कपूर, वि एस एम्, महानिदेशक, सूचना प्रणाली, भारतीय सेना, भारत
- प्रो. इ. साईबाबा रेड्डी, पूर्व कुलपति, वीएसएसयूटी, बुर्ला ,ओडिशा
- एस. बी. महाजन, एओ आईसीआईएसए, नोएडा, यूपी
- एस. एम्. डोंगसवार, एएओ आईसीआईएसए, नोएडा, यूपी
- दिलीप कुमार नाइक, एसआर. एओ आईसीआईएसए, नोएडा, यूपी
- रेजी नायर, एसटीक्यूसी, त्रिरूवन्तपुरम
- श्री. वी. पी. शर्मा, पूर्व महानिदेशक, (टेक्निकल सर्विसेज), सिस्को सिस्टम्स, बैंगलोर एवं मुंबई
- आर. उमा, उप निदेशक, पी एंड टी ऑडिट ऑफिस, मुंबई
- डॉ. एस. एन. भास्कर, महानिदेशक ,एनटीआरओ, दिल्ली
- अमन कुमार, एनटीआरओ, दिल्ली
- प्रो. के. के शुक्ला, आईआईटी (बीएच् यू), वाराणसी, यूपी
- रमिरो वहरहाफ्टिग, ब्राज़ील
- प्रो. मिगुएल मातृकास, ब्राज़ील
- लुइज़ फेलिपे क्रेमर कार्बोनेल, ब्राज़ील
- डेनियल फ्रेइरा, सीटीआई , ब्राज़ील
- चंद्रकांत अम्बादास धाकरे, पुलिस हेड क्वार्टर, पुणे
- कोंस्तांतिन चेबास्तैव, अंतर्राष्ट्रीय संबंध प्रबंधक, "हेल्थ मॉडलिंग टेक्नोलॉजीज" चिकित्सा सूचना विज्ञान के राष्ट्रीय संघ के अंतर्राष्ट्रीय मामलों के उपाध्यक्ष (एन ए एम् आय), मास्को, रूस
- प्रो. मिखाइल नतेनज़ोन, राष्ट्रीय टेलीमेडिसिन एजेंसी मंडल के अध्यक्ष, मास्को, रूस
- इ. वैन, सलाहकार महानिदेशक, पोर्टल आर ए एम् एन एशिया-पसिफ़िक क्षेत्र, मास्को, रूस
- कुन्गुर्त्सेव सेर्गेय, अंतरराष्ट्रीय और अंतर्देशीय लिंक प्रभाग के नगर मामलों के विभाग के प्रमुख ओकरोग , रूस

- कृष्णा मूर्ति, कार्यक्रम निदेशक, यशदा, पुणे
- मो. कामरुज़्ज़मान, उप सचिव, सूचना और संचार प्रौद्योगिकी विभाग, पोस्ट्स, दूरसंचार और आईटी मंत्रालय, बांग्लादेश
- डॉ. बी के. पाणिग्रही ,रजिस्ट्रार, आईआईआईटी-नया रायपुर
- डॉ. प्रदीप के. सिन्हा, कुलपति और निदेशक, आईआईआईटी-नया रायपुर
- उप समुद्री नायक एस.एन घोरमाडे, ए वी इस एम्, एन एम्, महानिदेशक , नौसेना संचालन, भारतीय नौसेना
- प्रो. डी. एन. रेड्डी, निदेशक, सीआर राव, एआयएम्एससीएस, एचसीयू, हैदराबाद
- डॉ. अजय के. नायक, संयुक्त सचिव, ओडिशा सरकार, भुबनेश्वर
- प्रो. आर. के. सिंह, डीन (छात्र कल्याण), एम्एनएनआयटी, अल्लाहाबाद
- एम्. कृष्णा, सहायक निदेशक (डीओसी), केंद्रीय फॉरेंसिक विज्ञान प्रयोगशाला (सीऍफ़ल),हैदराबाद
- विंग कमांडर ए. अहलुवालिआ, भारतीय वायु सेना
- डॉ. बहगत साम्मकीआ, अंतरिम राष्ट्रपति, एसयूएनवाय पॉलिटेक्निक इंस्टिट्यूट, न्यू यॉर्क
- .श्री जुअल ओराम, जनवादी मामलों के माननीय मंत्री, भारत सरकार
- विंग कमांडर एम्.एम्. इंगले, भारतीय वायुसेना

तालिका: छात्रों के औद्योगिक दौरे का सारांश

संस्था	आगंतुकों की कुल संख्या	दौरे की तारीख
2017		
गवर्नमेंट पॉलिटेक्निक मालवण	40	मार्च 20
यूनिवर्सल कॉलेज	70	मार्च 23
छोटुभाई गोपालभाई पटेल इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी	50	मार्च 30
आई टी ऍम यु आर-स्कूल ऑफ़ इंजीनियरिंग एंड रिसर्च, रायपुर	34	अप्रैल 03
पिंपरी-चिंचवड़ कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग	15	अप्रैल 07
नीआोटेक टेक्निकल कैंपस, वड़ोदरा	86	अप्रैल 10
नेशनल कॉलेज	45	अप्रैल 20
एस पी पी यु	25	मई 19
जे एस पी एम पॉलिटेक्निक	150	जुलाई 4,5,6
ट्रिनिटी कॉलेज	50	जुलाई 13
गवर्नमेंट पॉलिटेक्निक पुणे	60	जुलाई 14
एम जी एम पॉलिटेक्निक औरंगाबाद	64	जुलाई 14

वी पी एम पॉलिटेक्निक ठाणे	149	जुलाई 20
जे.एस.पी.एम जे.एस.सी.ओ.इ	50	जुलाई 21
मराठवाड़ा मित्र मंडल, पॉलिटेक्निक, पुणे	50	जुलाई 28
रीगल कॉलेज ऑफ़ टेक्नोलॉजी एंड मैनेजमेंट, कल्याण	50	अगस्त 10
टी एम इ एस आइ सी एस, मांडवी	70	अगस्त 11
नेस रत्नम कॉलेज, मुंबई	50	अगस्त 17
जयवंतराओ सावंत पॉलिटेक्निक, हडपसर	60	अगस्त 18
ऍन वी पी ऐ एस वल्लभ विद्यानगर, गुजरात	60	अगस्त 22
श्रीमती गीता डी तटकरे पॉलिटेक्निक, गोवे-कोलड	40	अगस्त 23
सिंहगड टेक्निकल एजुकेशन सोसाइटी, आर.एम.डी.एस.एस.ओ.इ	100	अगस्त 30-31
सी एम इ, पुणे	21	सप्टेंबर 06
अमृतवाहिनी कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, संगमनेर	56	सप्टेंबर 07
पिम्परी चिंचवड़ पॉलिटेक्निक, निगडी	120	सप्टेंबर 13-14
जी वी आचार्य पॉलिटेक्निक, शैलू-कर्जत	45	सप्टेंबर 22
गवर्नमेंट पॉलिटेक्निक पुणे	65	सप्टेंबर 28

ऐ.आइ.टी पुणे	20	अक्टूबर 04
गवर्नमेंट पॉलिटेक्निक पुणे	134	अक्टूबर 05-06
पिल्लई आर्ट्स कॉमर्स एंड साइंस कॉलेज	176	अक्टूबर 10, 12, 17
पिम्परी चिंचवड़ कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग	20	अक्टूबर 30
2018		
सैंट फ्रांसिस कॉलेज फॉर वीमेन, बेगमपेट	50	जनवरी 09
जी आर पाटिल कॉलेज, मुंबई	50	जनवरी 12
सार्वजनिक कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग एंड टेक्नोलॉजी	100	जनवरी 18-19
जील एजुकेशन सोसाइटी नरहे, पुणे	120	जनवरी 23-24
संदीप यूनिवर्सिटी, नाशिक	21	जनवरी 25
एम.आई.टी -डब्लयु.पी.यु कोथरुड, पुणे	120	जनवरी 30-31
श्री वटवृक्ष स्वामी महाराज, शोलापुर	40	फरवरी 02
डी.वाय पाटिल कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग एंड टेक्नोलॉजी, कोल्हापुर	38	फरवरी 07
लट्ठे एजुकेशन सोसाइटी, सांगली	41	फरवरी 14
रॉयल कॉलेज ऑफ़ साइंस, मीरा रोड, मुंबई	50	फरवरी 15
	40	फरवरी 16

साल कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग एंड टेक्नोलॉजी इंस्टिट्यूट, अहमदाबाद	30	फरवरी 16
जी एच रईसोनी कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग	25	फरवरी 21
डॉ. मनोज शेट्टी कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, कसारा		

परिशिष्ट

परिशिष्ट ए

संस्थानों में उपयोगकर्ता

तालिका A.1: शैक्षिक संस्थानों में उपयोगकर्ता

शैक्षिक संस्थान	उपयोगकर्ता संख्या
अहमदनगर कॉलेज	1
एमिटी विस्वविद्यालय	2
अलीगढ़ मुस्लिम विश्वविद्यालय	5
अन्ना यूनिवर्सीटी	2
आर्मी प्रौद्योगिकी संस्थानपुणे ,	5
भुसावल आर्ट्स, साइंस एंड पी.आो नाहटा कॉमर्स कॉलेज	1
बिट्स पिलानीहैदराबाद परिसर ,	2
सीआरएम अभिकॉलेज .एवं तक .	2
कारनेग मेलन यूनिवर्सिटी	1
कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग, पुणे	6
बिहार केंद्रीय विश्वविद्यालय	1
गुजरात केंद्रीय विश्वविद्यालय	3
हरयाना केंद्रीय विश्वविद्यालय	3
राजस्थान केंद्रीय विश्वविद्यालय	1
दिल्ली विश्वविद्यालय	2
डिब्रूगढ़ विश्वविद्यालय	3

डी वाई पाटिल विश्वविद्यालय, नवी मुंबई	3
गांधी इंस्टीट्यूट ऑफ टेक और प्रबंधन, हैदराबाद	1
जीएलए विश्वविद्यालय, मथुरा	1
गोवा विश्वविद्यालय, गोवा	2
सरकारी कॉलेज, टोंक	1
गुरु नानक देव विश्वविद्यालय	1
गुजरात प्रौद्योगिकी विश्वविद्यालय	1
एचपीटी आर्ट्स एंड आरवायके साइंस कॉलेज	1
हिमाचल प्रदेश विश्वविद्यालय	5
आईआईए, बैंगलोर	12
आईआईआईटी, हैदराबाद	3
आईआईआईटी, दिल्ली	4
आईआईआईटी, मध्यप्रदेश	4
आईआईएससी, बैंगलोर	7
आईआईएसईआर, पुणे	59
आईआईएसईआर, मोहाली	1
आईआईएसईआर, तिरुवनंतपुरम	3
आईआईटी बॉम्बे	226
आईआईटी भुवनेश्वर	2
आईआईटी दिल्ली	8
आईआईटी धनबाद (आईएसएम)	2
आईआईटी गुवाहाटी	24
आईआईटी गांधीनगर	10

आईआईटी हैदराबाद	30
आईआईटी जोधपुर	12
आईआईटी कानपुर	23
आईआईटी खड़गपुर	12
आईआईटी पटना	8
आईआईटी रूरकी	5
आईआईटी रोपार	8
आईएनएसटी, मोहाली	22
जेएमआई विश्वविद्यालय	3
जिवाजी विश्वविद्यालय	3
जेएसपीएम-टीएसएसएम स्पेस रिसर्च प्रोग्राम	1
जेएनयू	2
कुरुक्षेत्र विश्वविद्यालय	3
मणिपाल विश्वविद्यालय	2
एमआईटी पुणे	1
एनआईटी कालीकट	1
एनआईटी राउरकेला	1
एनआईटी सिल्चर	1
पंजाब विश्वविद्यालय	2
पीजेटीएसयू, हैदराबाद	1
पीडीयू शेखावाटी विश्वविद्यालय, सीकर	1
पीयू कॉलेज, मिजोरम	1
पीवीपीआइटी, पुणे	3

आरटीएम नागपुर विश्वविद्यालय	2
सत्स्त्र विश्वविद्यालय, तंजावुर	3
शेखावत विश्वविद्यालय	1
एसआरएम विश्वविद्यालय	3
एसआरटीएम विश्वविद्यालय	2
सेंट जेवियर्स कालेज, अहमदाबाद	1
एस पी पुणे विश्वविद्यालय	36
श्री गुरु ग्रंथ साहिब विश्व विश्वविद्यालय	9
एसवीऍनआईटी, सूरत	4
सिम्बायोसिस इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी, पुणे	1
टेट्राहैड्रिक्स इंजीनियरिंग प्राइवेट लिमिटेड	1
हैदराबाद विश्वविद्यालय	1
मद्रास विश्वविद्यालय	1
राजस्थान विश्वविद्यालय	1
वीएनआईटी नागपुर	10
व्हिस्टलिंग वुड्स इंटरनेशनल इंस्टिट्यूट	2
कुल	646

तालिका A.2: शोध संस्थानों में उपयोगकर्ता

शोध संस्थान	उपयोगकर्ता संख्या
बीएआरसी मुंबई	1
सीबीएस, मुम्बई	2
सीआईएफआरआई, कोलकाता	2
सीडैक-	137
सीईसीआरआई, दिल्ली	4
सीईसीआरआई, इंदौर	1
डीआरडीओबीयू सेंटर फॉर लाइफ साइंसेस-, कोयंबटूर	4
ईशिक्षक-	2
गरुड़ा	165
एचआरआइ , अल्लाहाबाद	2
आइऐसीएस, कोलकाता	1
आईएएसएसटी, गुवाहाटी	4
इंडो कोरिया विज्ञान और प्रौद्योगिकी केंद्र	1
भारतीय वायु सेना, बैंगलूर	1
इसरो	5
आईएससी मुंबई	2
आईयूसीएए, पुणे	7
जेएनसीएएसआर, बैंगलोर	11
एनएबीआई, मोहाली	1
एनसीएल, पुणे	8

एनसीआरए, पुणे	6
एनआईसी	2
एनआईएसईआर	2
पीआरएल, अहमदाबाद	3
आरआरआई, बैंगलोर	3
एसआईएनपी, कोलकाता	2
टीएचएसआईटी	4
विजय कुमार फाउंडेशन, गुड़गांव	7
कुल	390

परिशिष्ट बी

वर्ष 2017-18 के दौरान नामांकित परियोजनाएं

परम युवा द्वितीय का कंप्यूट टाइम उपयोग करने वाले विभिन्न संस्थानों की परियोजनाओं की सूची, मुख्य अन्वेषक का विवरण और उपयोगकर्ताओं की संख्या इस परिशिष्ट में शामिल है।

संस्थान	परियोजना	मुख्य अन्वेषक	उपयोगकर्ताओं की संख्या
अहमदनगर कॉलेज	टु स्टडी द प्रॉपर्टीज ऑफ़ लेयरड स्ट्रकचरस एंड इफेक्ट्स ऑफ़ डोपिंग धऐर इन युसिंग डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी	डॉ. प्रदीप बी शेलके	1
एमिटी यूनिवर्सिटी	डी ऍफ़ टी बेस्ड केमिकल , स्ट्रक्चरल , ऑप्टिकल एंड मेग्नेटिक स्टडी ऑफ़ फंक्शनलाईज़ेड ग्राफेन नानोरीब्बनस	डॉ. सिद्धेश्वर चोपरा	1
भुसावल आर्ट्स, साइंस एंड पी.ओ नाहटा कॉमर्स कॉलेज	क्वांटम केमिकल इंवेस्टीगेशंस ओन Phenyl-Acetylene क्लस्टर्स	डॉ. सचिन डी. एओले	1
सी-डैक बैगलोर	सुमेघा इस ऐ साइंटिफिक क्लाउड व्हिच कैन प्रोविसन ऑन-डिमांड एक्सेस तू शेयर्ड पूल ऑफ़ वर्चुअल ऐचपीसी रिसोर्सेज ऐसीली ऐस एंड व्हेन नीडेड बाय थे ऐचपीसी ऍप्लिकेशन्स	बी अरुणाचलम	1

सी-डैक पुणे	IoE टेस्ट-बेड अस स्मार्ट सिटी सोलूशन्स फॉर डिजास्टर मैनेजमेंट एंड वीडियो सर्विलांस	डॉ. संजय कदम	1
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ़ हरियाणा	ऐब इनीशियो मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन ऑफ़ आयनिक लिक्विड डोप्ड पॉलीमर इलेक्ट्रोलाइट मेमब्रेन्स एंड प्लैटिनम इलेक्ट्रोड इंटरफ़ेस	डॉ. अनुराग सुंडा	3
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ़ राजस्थान	टेलरिंग थे इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ सरफेस/इंटरफ़ेस ऑफ़ सेमीकंडक्टर ऑक्साऐडज़	डॉ. दिव्या श्रीवास्तव	1
कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग पुणे	ब्लॉकचैन स्केलिंग एंड मेसरींग द वेरिएशन इन लेटेंसी एस द नेटवर्क सकेलबिलिटी चेनजीज़	प्रोफ. जिमि अब्राहम	4
कंसोर्टियम फॉर साइंटिफिक रिसर्च, इंदौर	फर्स्ट प्रिंसिपल्स मॉडलिंग ऑफ़ Dzyaloshinskii-Moriya इंटरेक्शन्स इन मैग्नेटिक मल्टीलेयर्स	डॉ. राजमणि रघुनाथन	1
डिब्रूगढ़ यूनिवर्सिटी	एयरोसोल रेडिएटिव फोर्सिंग ओवर इंडिया (ARFI) एंड एटमोस्फियरिक ट्रेस गैसेस, केमिस्ट्री, ट्रांसपोर्ट एंड मॉडलिंग(AT-CTM)	डॉ. बिनीता पाठक	3
हरीश-चंद्र रिसर्च इंस्टिट्यूट	मैग्नेटिक स्विचिंग युसिंग 3d-ओर्गनोमेटाल्लिक मॉलिक्यूल	प्रोफ. प्रसेनजित सेन	2
हिमाचल प्रदेश यूनिवर्सिटी	इन-प्लेन हीटरोस्ट्रकचर ऑफ़ ट्रांजीशन मेटल डायचालकोजेनाइडस	डॉ. रमन शर्मा	2
एचपीटी आर्ट्स एंड आरवायके एस. कॉल., नासिक	थ्योरेटिकल इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ स्ट्रक्चरल, इलेक्ट्रॉनिक, मैग्नेटिक एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ अनडोप्ड एंड डोप्ड आयरन ऑक्साइड नैनोस्ट्रकचर	डॉ. दत्तात्रय लक्समन लालसारे	1

इंडियन एसोसिएशन फॉर द कल्टीवेशन ऑफ़ साइंस, कोलकाता	कम्प्यूटेशनल इंवेस्टीगेशंस फॉर द लीनियर एंड नॉनलीनियर ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ मेटल एंड कवलेंट आर्गेनिक फ्रेमवर्क्स: ऍप्लिकेशन्स फॉर डिटेक्शन ऑफ़ मोलेक्युल्स	डॉ. अयन दत्ता	1
इंडियन इंस्टिट्यूट ऑफ़ इनफार्मेशन टेक्नोलॉजी एंड मैनेजमेंट, ग्वालियर	हाई एनर्जी डेंसिटी सुपरकेपसिटर्स एंड इफेक्टिव गैस/केमिकल/बायो-सेंसर्स युसिंग 2D/1D मटेरियल	डॉ. अनुराग श्रीवास्तव	4
इंटरनेशनल इंस्टिट्यूट ऑफ़ इनफार्मेशन टेक्नोलॉजी, हैदराबाद	सिमुलेशन ऑफ़ फाल्ट मोशन एनालिसिस, सिमुलेशन ऑफ़ कलपसे बिहेवियर ऑफ़ बिल्डिंग्स सब्जेक्टेड टु अर्थक्वेकस	डॉ. रमणचाराला प्रदीप कुमार	4
आई आई एस इ आर, पुणे	अनकन्वेंशनल फेज ट्रांसिशन्स इन क्लासिकल क्यूबिक डिमर मॉडल इमर्जेंट SO(5) सीमेत्रिस	डॉ. श्रीजीत गणेश जाया	1
	पॉइंट-डिफेक्ट्स इन टु-डायमेंशनल मैटेरियल्स	डॉ. मुकुल कबीर	3
	रोल ऑफ़ मैग्नेटिस्म इन Mn-Rich स्टील्स	डॉ. मुकुल कबीर	2
	कैटेलिस्ट डिज़ाइन फॉर मॉलिक्यूलर-H स्प्लिटिंग	डॉ. मुकुल कबीर	3
	वेकेंसी डिफयुसन इन ग्राफेन	डॉ. मुकुल कबीर	2
	माइक्रोस्कोपिक मैकेनिज्म फॉर मीथेन हाइड्रेट फार्मेशन	डॉ. मुकुल कबीर	3
	O2 मॉलिक्यूल स्प्लिटिंग एंड डिफयुसन औन LaMnO3 सरफेस	डॉ. मुकुल कबीर	3

	स्टडी ऑफ़ CdS एंड CdTeS क्वांटम डॉट्स डेकोरेटेड ऑन TiO2 नैनोवायर्स	डॉ. प्रसेनजित घोष	10
	सेलेक्टिव हाइड्रोज़िनेशन ऑफ़ एसिटिलीन ऑन Pd/Ga इंटरमेटॉलिक कंपाउंड्स	डॉ. प्रसेनजित घोष	9
आई आई एस इ आर, पुणे	मॉलिक्यूलर मॉडलिंग एंड डायनामिक्स ऑफ़ पॉलीमर्स ,गैस हाईड्रेट्स एंड आयनिक लिक्विड्स : एन अल्टरनेटिव एन-रजि इनिशिएटिव	प्रोफ. अरुण वेंकटनाथन	10
आई आई टी गुवाहाटी	अटॉमिस्टस सिमुलेशन ऑफ़ फ़ास्ट आयन ट्रांसपोर्ट इन सॉलिड्स	डॉ. पद्मा कुमार पद्मनाभन	5
	मॉलिक्यूलर डायनामिक्स स्टडी ऑफ़ अल्लोस्तरीक मॉडुलेशन एंड रेगुलेशन ऑफ़ द HIV-1 रेस्ट्रिक्शन फैक्टर, SAMHD1	डॉ. स्वाती भट्टाचार्य	2
आई आई टी हैदराबाद	इंवेस्टिगेटिंग सिस्मिक सोर्स फिजिक्स इन्क्लूसन ईंटो इंजीनियरिंग एनालिसिस ऑफ़ बिल्ट-एनवायरनमेंट	डॉ. सुरेंद्र नध सोमाला	6
	कैलोरीमीट्रिक डिटेक्शन ऑफ़ UCHLI	डॉ . अनिंद्य रॉय	3
	स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ RMA डुप्लेक्सेस कम्प्रिसिंग तृनुक्लेओटीडे ट्राई नुक्लीओटाइड रिपीट एक्सपेंशन	डॉ . थेनमलरचेल्वी रथिनावेलन	5

आई आई टी आईएसएम , धनबाद	थ्री डायमेंशनल मॉडलिंग ऑफ़ मैग्नेटोटेलउरिक डाटा ओवर दलमा एंड धनजोरी वोल्कानिक्स	प्रोफ . शालिवाहन	2
आई आई टी जोधपुर	डायरेक्ट न्यूमेरिकल सिमुलेशन ऑफ़ पारसीयली प्रेमिक्सेड टेबुलर फ्लेम्स	डॉ. सुदीप्तो मुखोपाध्याय	1
	कम्प्यूटेशनल इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ थे नेचर ऑफ़ एक्टिव साइट्स ऑफ़ Ni/CeO2 केटलीसेस	डॉ. श्रीराम गोवेरपेट श्रीनिवासन	1
आई आई टी जोधपुर	केमिकल डायनामिक्स सिम्युलेशन्स ऑफ़ काम्प्लेक्स आर्गेनिक रिएक्शन्स : मेकैनिस्टिक इनसाइट्स एंड माइक्रो -सॉल्वेशन इफेक्ट्स	डॉ . मणिकंदन परंजोतय	2
आई आई टी पटना	डेवलपमेंट ऑफ़ स्मार्ट मटेरियल यूसिंग मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन	डॉ . संदीप खान	3
आई आई टी रूरकी	इम्पैक्ट ऑफ़ LULC एंड क्लाइमेट चेंज इन ऐ हिमालयन बेसिन	डॉ. सी एस पी ओझा	2
	ऐ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स बेस्ड अटॉमिस्टिक सिमुलेशन टु स्टडी थे इफ़ेक्ट ऑफ़ नैनोफिलर्स इन थे मैकेनिकल एंड थर्मल प्रॉपर्टीज ऑफ़ पॉलीमर बेस्ड नैनोकपॉसाईट्स	प्रोफ. अविनाश पराशर	2
	लार्ज-स्केल अटॉमिस्टिक मॉलिक्यूलर डायनामिक्स स्टडी ऑफ़ ड्रग रिलीज़ फ्रॉम स्टिमुली-रेस्पॉन्सिव पोलीमेरिक कर्रिएर्स	डॉ. प्रतीक कुमार झा	1

आई एन एस टी, मोहाली	इलेक्ट्रॉनिक एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ ऑक्साइड इंटरफ़ेस एंड सुपर लेटीसेस	डॉ . चन्दन बेरा	3
	क्वांटम कैपसिटेंस कैलकुलेशन ऑफ़ कारबोनकेयस मैटेरियल्स	डॉ . रामेन्द्र सुन्दर दे	2
	एटॉमिक स्केल डिजाईन ऑफ़ नावेल नैनोमटेरिअल्स फॉर क्लीन एनर्जी एंड डीवाइसीज	प्रोफ . अबीर दे सर्कार	9
	अब इनिटीओ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स (AIMD) सिम्युलेशन्स	डॉ. मो. एहसान अली	8
	इलेक्ट्रॉनिक्स एंड थर्मल प्रॉपर्टीज ऑफ़ चालकोजेनाइड	डॉ . चन्दन बेरा	2
जामिआ मिलिआ इस्लामिआ यूनिवर्सिटी, नई दिल्ली	फर्स्ट प्रिंसिपल स्टडी ऑफ़ थे इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रकचर ऑफ़ हीटरोस्ट्रकचर डीवायसीज एंड धेर रिलेटेड ऍप्लिकेशन्स	डॉ. अनवर अज़ीज़	2
जवाहरलाल नेहरू सेंटर फॉर एडवांस्ड साइंटिफिक रिसर्च, बैगलोर	मॉडलिंग ऑफ़ सुपरमोलेक्युलर पॉलीमर्स	प्रोफ. बालासुब्रमण्यन सुंदरम	1
जेएसपीएम-टीएसएसऍम स्पेस रिसर्च प्रोग्राम, पुणे	स्पेस रिसर्च प्रोग्राम	प्रोफ. डॉ. श्रीनिवास नरसिम्हा किनी	1
कुरुक्षेत्र यूनिवर्सिटी , कुरुक्षेत्र , हरियाणा	सिम्युलेशन्स ऑफ़ रेयर अर्थ फ्री मैग्नेटिक इनऑर्गेनिक हैलाइद पेरोव्स्कीट्स फॉर फोटोवोल्टाइक ऍप्लिकेशन्स , अकादमिक	डॉ . मनीष कुमार कश्यप	3

एन आई एस ई आर	न्यूमेरिकल स्टडीज ऑफ़ कोरिलेटेड फेसेस एंड ट्रांसिशन्स इन फ्रसट्रेटेड मैग्नेट्स	श्री. वी. रवि चंद्रा	1
	बायोमोलेक्युलर सिमुलेशन: मॉलिक्यूलर मैकेनिज्म ऑफ़ सिग्नल ट्रांसडक्शन, प्रोटीन-प्रोटीन इंटरेक्शन एंड अललोस्तेरीक रेगुलेशन	डॉ. सुमन चक्रबर्ती	1
ऍन आई टी सिल्चर	स्पेक्ट्रल एलिमेंट मेथड्स फॉर इलिप्टिक एंड पैराबोलिक इंटरफ़ेस प्रोब्लेम्स	डॉ. पंकज बिस्वास	1
पद्मभूषण वसंतदादा पाटिल इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी, पुणे	डायरेक्ट न्यूमेरिकल सिमुलेशन ऑफ़ SDBD प्लाज्मा एक्टुएशन ओंन फ्लो सेपरेशन फॉर ऐ सर्कुलर सिलिंडर	डॉ. प्रमोदकुमार बागड़े	3
सस्त्रा यूनिवर्सिटी	हाइड्रोजन स्टोरेज औन अल्कली मेटल फंक्शनलिज़्ड पोरस डेस्करटे आर्गेनिक	डॉ. वेंकटरमनं ऍन एस	2
एस पी पुणे यूनिवर्सिटी	इफ़ेक्ट ऑफ़ सब्स्टिटूशनल डोपिंग औन इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर ऑफ़ II-VI सेमीकंडक्टर क्वांटम डॉट्स	प्रोफ. अंजलि क्षीरसागर	2
	कम्प्यूटेशनल स्टडी औन ग्राफेन बेस्ड नैनोशीट्स फॉर सेंसर ऍप्लिकेशन्स	डॉ. मृणालिनी देशपांडे	2
	इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ TM डोप्ड ZnO शीट: डेंसिटी फंक्शनल स्टडी	डॉ. मृणालिनी देशपांडे	4
	प्रोबिंग नॉनकॉवलेन्ट इंटरेक्शन्स इन आयनिक लिक्विड्स यूसिंग डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी	प्रोफ. श्रीधर पी जैज्जी	5
श्री गुरु ग्रन्थ साहिब वर्ल्ड यूनिवर्सिटी, पंजाब	डिज़ाइन, सिंथेसिस एंड इवैल्यूएशन ऑफ़ मॉडिफाइड शोर्ट पेप्टिड्स ऐस	डॉ. दीप्ति गोयल	5

	इन्हिबिटर्स ऑफ़ Amyloid-B(AB) पेप्टाइड एग्रीगेशन		
एस वी ऍन आई टी , सूरत	डेवलपमेंट ऑफ़ नावेल क्लस्टर असेंबल्ड मैटेरियल्स फ्रॉम पोटेंशियल क्लस्टर मोटिफ्स: ऐ न्यू इनसाइट अंडर डेंसिटी फंक्शनल इन्वेस्टीगेशन	डॉ. देबेश आर. रॉय	4
सिम्बायोसिस इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी, पुणे	वोटर क्वालिटी मॉडलिंग ऑफ़ लेक्स युसिंग इंटीग्रेटेड सॅटॅलाइट देटा फ्यूज़न	श्री ऋषिकेश कुलकर्णी	1
यूनिवर्सिटी ऑफ़ मद्रास	स्टडीज आोन हाइब्रिड आर्गेनिक–इनऑर्गेनिक हॉलाइड परोव्सकाइट युसिंग फर्स्ट-प्रिंसिपल्स डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी	डॉ. आर. राधाकृष्णन	1
विजय कुमार फाउंडेशन	रिसर्च वर्क औन नैनो-मैटेरियल्स	डॉ. विजय कुमार	7
वी एन आई टी नागपुर	फर्स्ट प्रिनिसिपल स्टडी ऑफ़ सम टोपोलोजिकल मैटेरियल्स	डॉ. पूर्वा सिंह	2
व्हिस्टलिंग वुड्स इंटरनेशनल इंस्टिट्यूट, मुंबई	रेंडरिंग सम ऑफ़ द शॉट्स फॉर 15 मिनट शार्ट फिल्म ओंन परमयुवा-II जीपियुस	श्री अनुराधा भाटीया	2

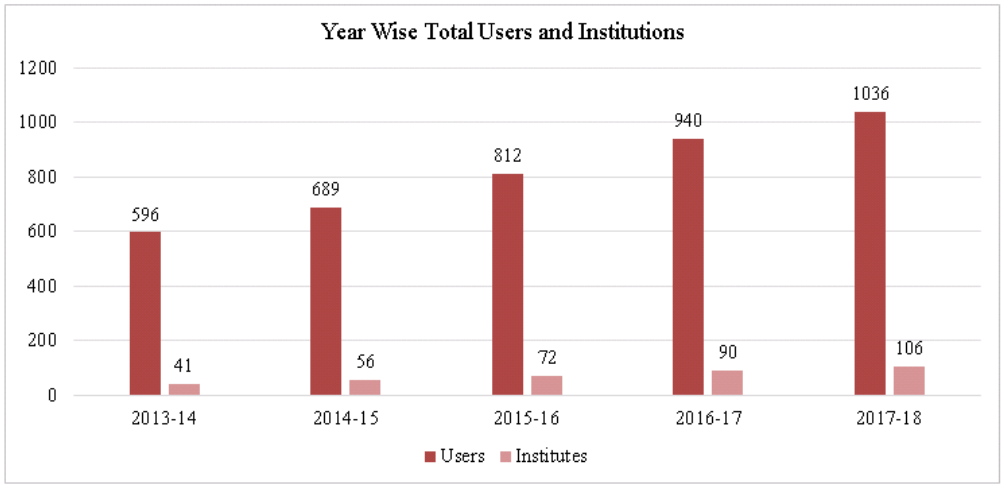
परिशिष्ट सी

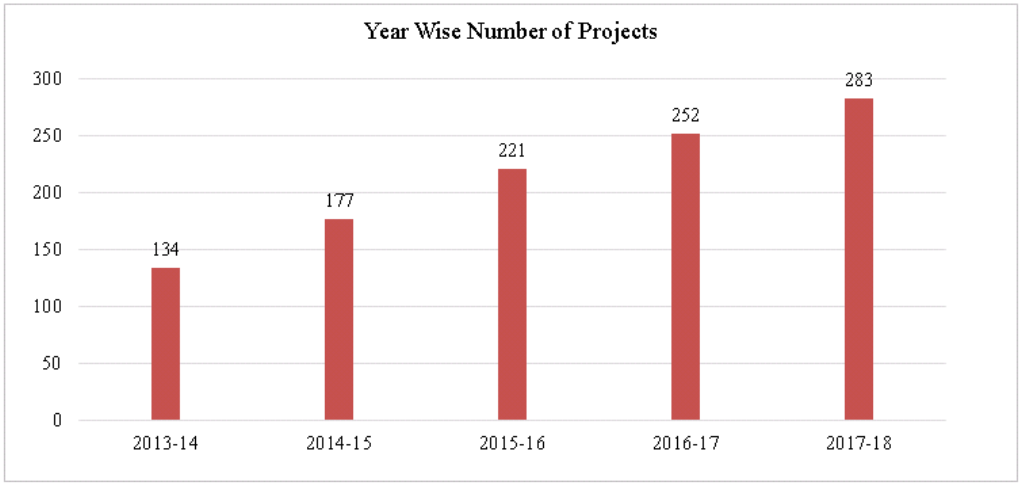
पिछले पांच वर्षों की झलक

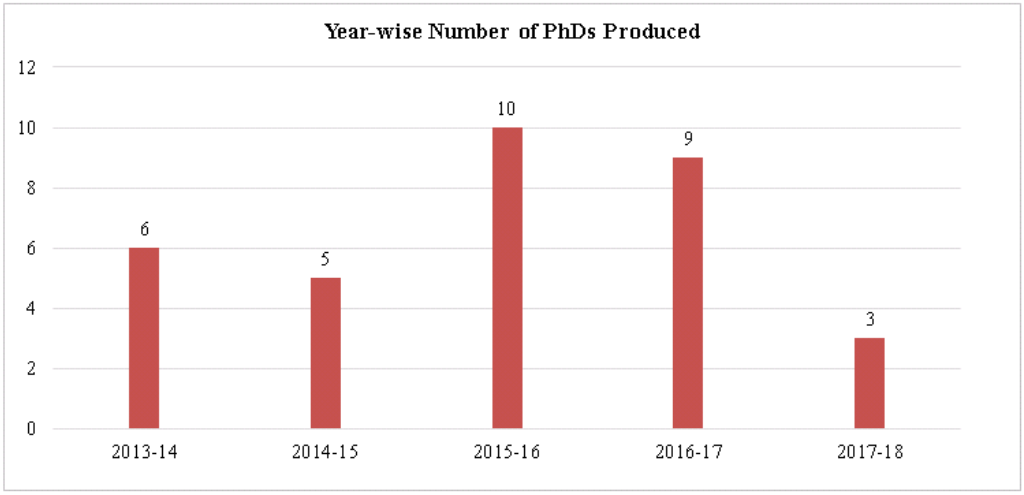
नीचे पिछले पांच वर्षों (वर्ष 2013-18) की एनपीएसएफ़ की अंशतः सांस्ख्यकी दी गयी है |

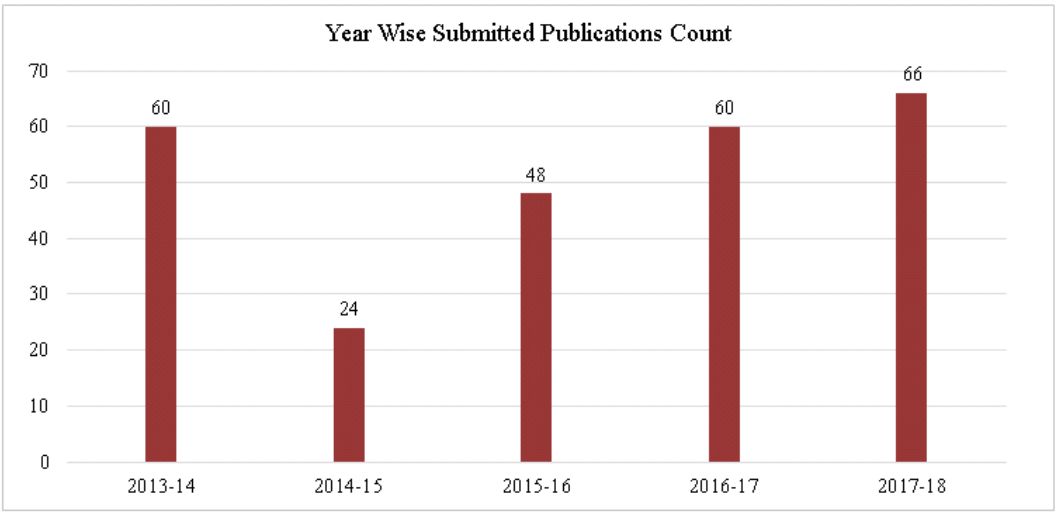
सांस्ख्यकी में क्लस्टर उपयोगिता में बदलाव, वर्षीय परियोजनाओं की कुल संख्या, और एनपीएसएफ़ प्रस्तुत पीएचडी और प्रकाशन की संख्या शामिल है |

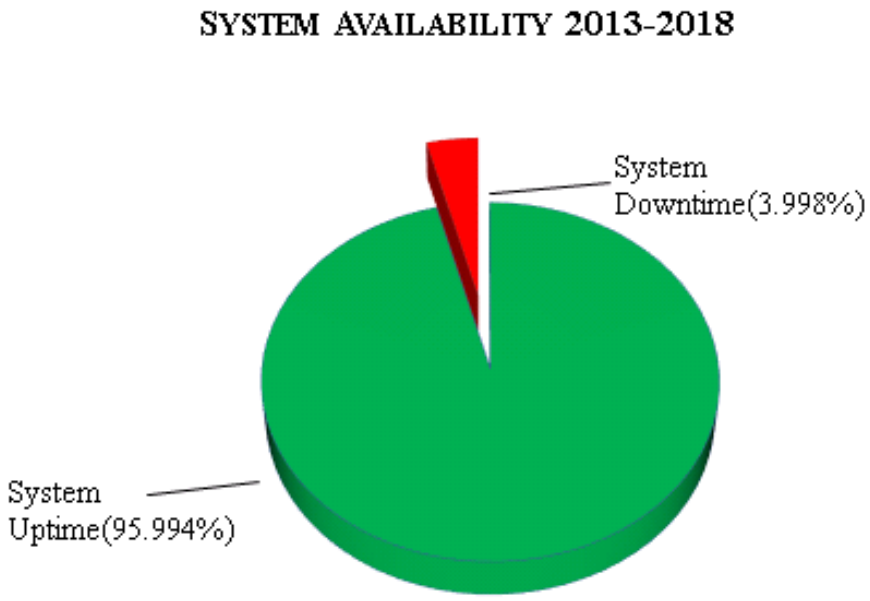
1. **2,67,617** प्रसंस्करण पूर्ण हुए जॉब्स
2. **1036** उपयोगकर्ता
3. **106** संस्थान
4. **283** परियोजना
5. **33** पीएच.डी. पूर्ण
6. **245** प्रकाशन
7. **225** कुल पीएचडी छात्र

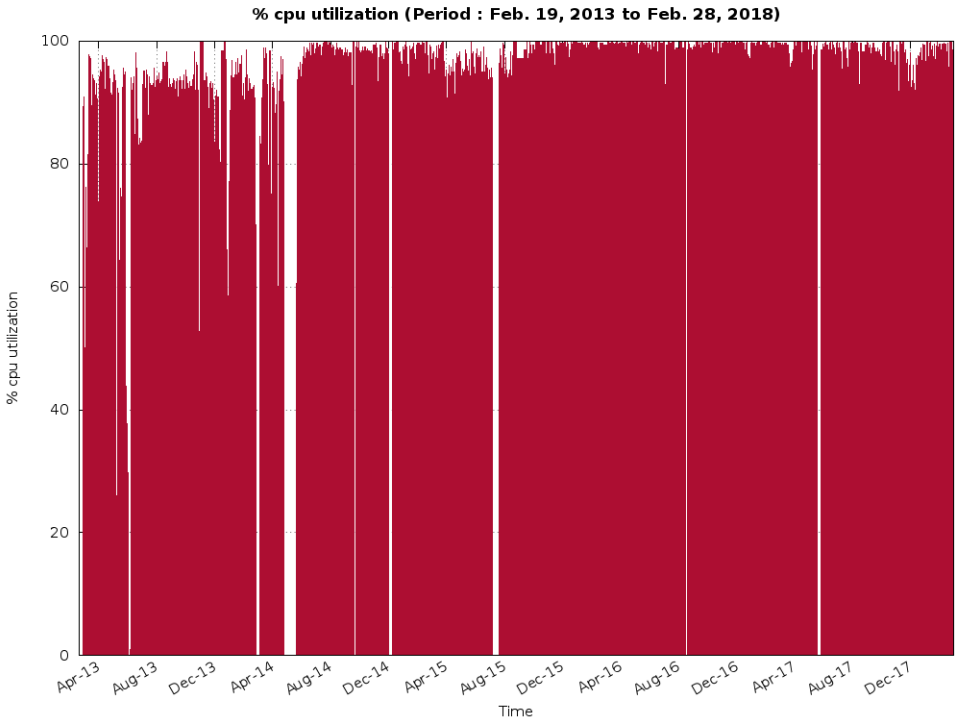

Year Wise Total Users and Institutions
1200
1000
800
600
400
200
0
596
41
689
56
812
72
940
90
1036
106
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17
2017-18
Users
Institutes

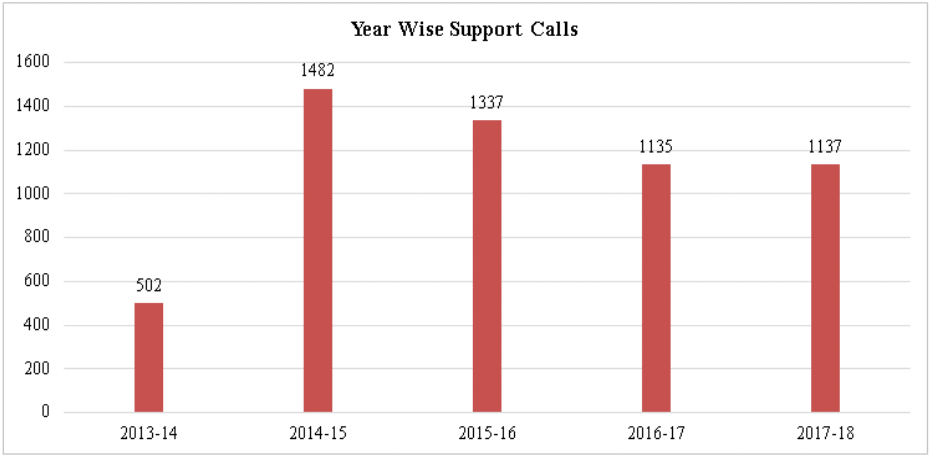

Year Wise Number of Projects
300
250
200
150
100
50
0
134
177
221
252
283
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17
2017-18


Year-wise Number of PhDs Produced
12
10
8
6
4
2
0
6
5
10
9
3
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17
2017-18


Year Wise Submitted Publications Count
70
60
50
40
30
20
10
0
60
24
48
60
66
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17
2017-18


SYSTEM AVAILABILITY 2013-2018
System Downtime(3.998%)
System Uptime(95.994%)

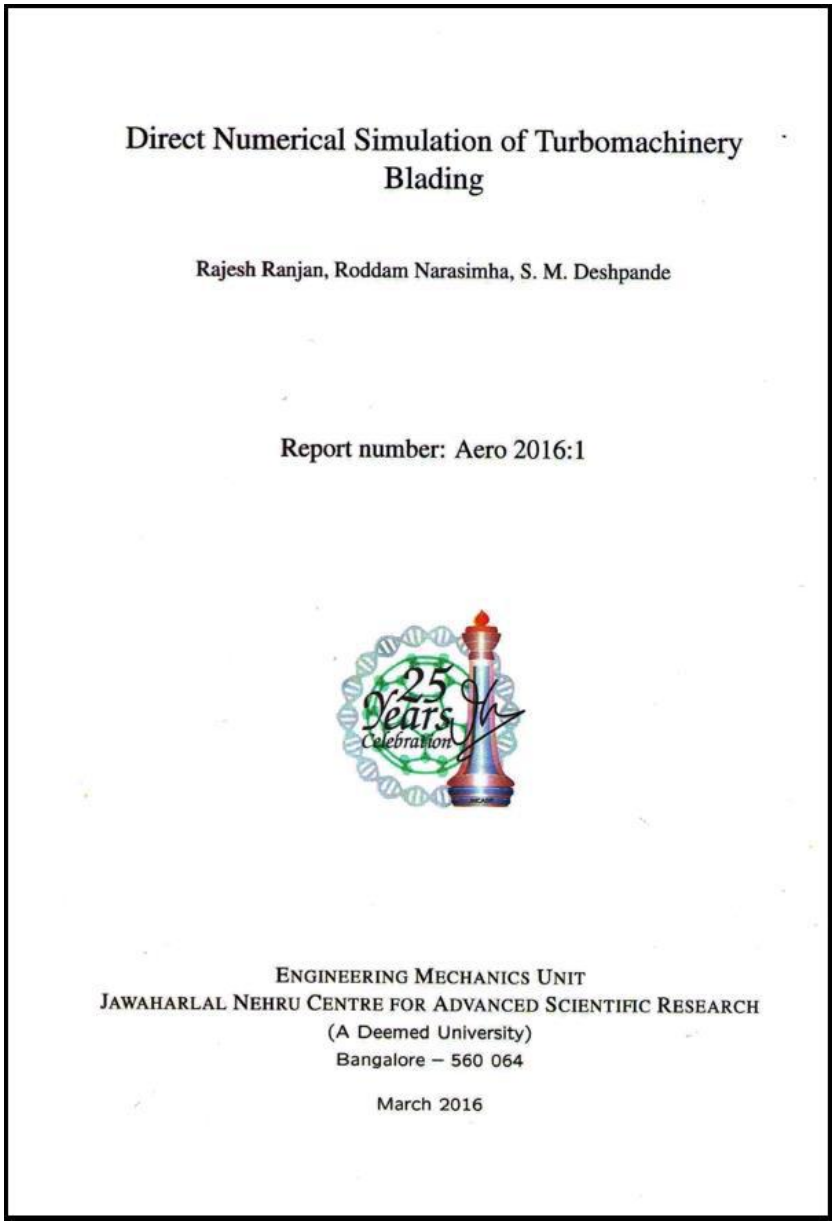

% cpu utilization (Period : Feb. 19, 2013 to Feb. 28, 2018)
% cpu utilization
100
80
60
40
20
0
Apr-13
Aug-13
Dec-13
Apr-14
Aug-14
Dec-14
Apr-15
Aug-15
Dec-15
Apr-16
Aug-16
Dec-16
Apr-17
Aug-17
Dec-17
Time


Year Wise Support Calls
1600
1400
1200
1000
800
600
400
200
0
502
1482
1337
1135
1137
2013-14
2014-15
2015-16
2016-17
2017-18

परिशिष्ट डी

उपयोगकर्ताओं से प्रशंसनीय सन्देश

नीचे कुछ उपयोगकर्ता के प्रशंसा उद्धरण हैं



Direct Numerical Simulation of Turbomachinery Blading

Rajesh Ranjan, Roddam Narasimha, S. M. Deshpande

Report number: Aero 2016:1

ENGINEERING MECHANICS UNIT
JAWAHARLAL NEHRU CENTRE FOR ADVANCED SCIENTIFIC RESEARCH
(A Deemed University)
Bangalore – 560 064

March 2016

Acknowledgements

The work described in this report has been carried out as part of a project on *Direct Numerical Simulation of Turbo-Machinery blading*, sponsored through a grant from the GATET at Gas Turbine Research Establishment (GTRE) under the project "GTRE/GATET/CS15/1214/58" (JNCASR Project No. "RN/GTRE/4310"). The Principal Investigator Prof. Roddam Narasimha, and the Co-Principal Investigator Prof. S. M. Deshpande, are grateful for this support. The authors thank **Dr. C P Ramanarayanan**, Director, GTRE and **Dr. S. Kishore Kumar**, Associate Director, GTRE at the time of the award of this project. The authors would also like to express their gratitude to **Dr. M.Z. Siddique**, Present Director, GTRE for his continued support, and **Dr. K. V. L. Rao**, Technical Advisor, GTRE for his guidance throughout the project. The authors thank **Dr. Sivaramakrishna G.**, Programme Director, GATET, GTRE for his keen interest in the progress of the project, and his colleagues at GTRE for their support.

The authors would like to thank **Prof. Wolfgang Rodi, Dr. Jan Wissink, and Mr. Stephan Stotz** for providing important data on the blade and wake, and **Prof. O. N. Ramesh** for data pertaining to the simulation of free-stream turbulence. The authors sincerely acknowledge **Dr. Sukumar Chakravarthy** and his team at Metacomp Technologies, USA for providing the CFD++® license for scientific study.

This work would not have been possible without the generous co-operation and support received from C-DAC, Pune and CSIR-4PI, Bangalore. At C-DAC, the authors are grateful to **Dr. Rajat Moona**, Director General C-DAC and **Mr. Sanjay Wandhekar**, Associate Director and HoD, National PARAM Supercomputing Facility (NPSF) for their enthusiastic support. The authors thank the C-DAC support team specially Mr. Pankaj, Ms. Nisha, Mr. Gaurav, and Ms. Chaitali. At CSIR-4PI, the authors thank **Mr. Shyam Chetty**, Director NAL & Head CSIR-4PI for making their facilities available, and **Mr. R P Thangavelu**, in-charge of the supercomputing facility at CSIR-4PI for help regarding operational questions at the centre.

"The reason we were not using CDAC account is because I recently moved out of JNCASR, and also because we shifted to doing simulations using GPUs. However, Param YUVA II was extremely useful initially in getting some important data for our research. I am sure for the CPU codes, it is one of the fastest supercomputer available in the country, and our colleague shall be using these accounts for cloud simulations."

श्री. राजेश रंजन

प्रो. रॉडदम नरसिम्हा (मुख्य अन्वेषक)

जेएनसीएएसआर, बेंगलोर

"We have completed all the testing and designed simulations using the HPC facility Param Yuva-II. The facilities and whole hearted support rendered by NPSF has indeed played a significant role in completion of job. We sincerely wish to appreciate and grateful for the efforts put-in by the entire admin and help team. "

श्री राम सिंह
डॉ. कृष्णा अछूताराव (मुख्य अन्वेषक)
आईआईटी दिल्ली, नई दिल्ली

"I would like to convey my deep appreciation for your continuous support and assures you that your support has gone well in making some good scientific contributions and training of some people. We aspire to continue this journey and look forward to your continuous support."

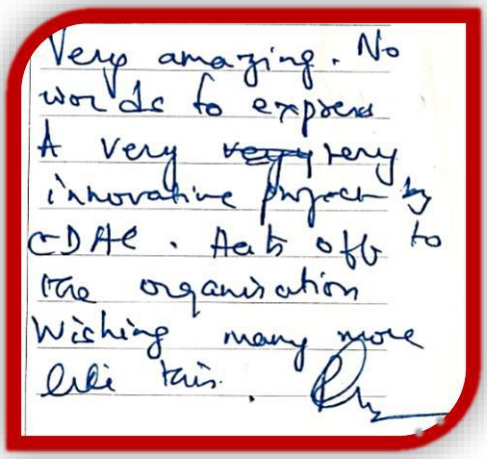
डॉ विजय कुमार (मुख्य अन्वेषक)
संस्थापक अध्यक्ष
डॉ विजय कुमार फाउंडेशन, गुड़गांव

"We are grateful for the assistance offered by C-DAC towards the project "CFD Analysis of 120 mm. FSAPDS Tank Ammunition" carried out by Centre for Modeling and Simulation, SPPU with DRDO. This project was successfully completed in 2016. The results have been reported to DRDO but cannot be shared in any academic journal. This note can serve as an acknowledgement of the computing support provided by C-DAC to test supersonic compressible ow simulations. "

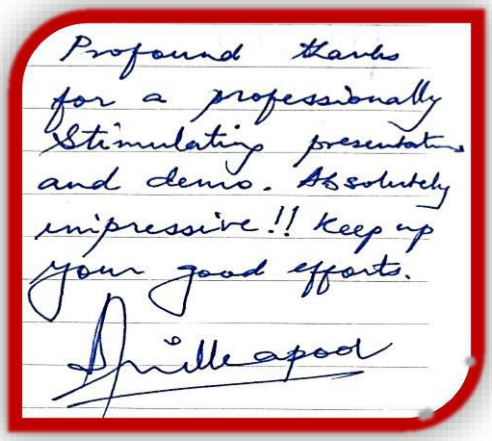
श्री. सुकरातु बरवे,
डॉ अंजली क्षीरसागर (मुख्य अन्वेषक)
एस पी पुणे विश्वविद्यालय, पुणे

परिशिष्ट ई

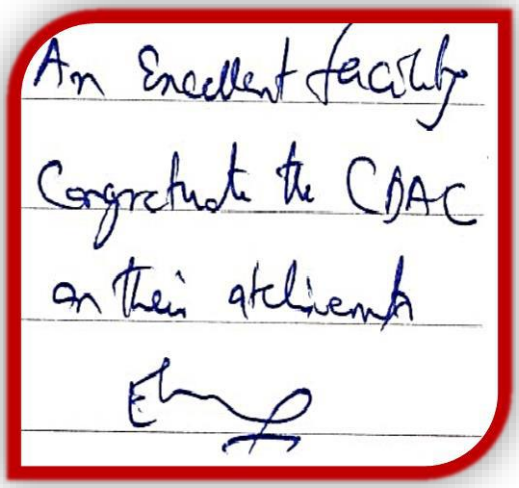
आगंतुकों के विचार



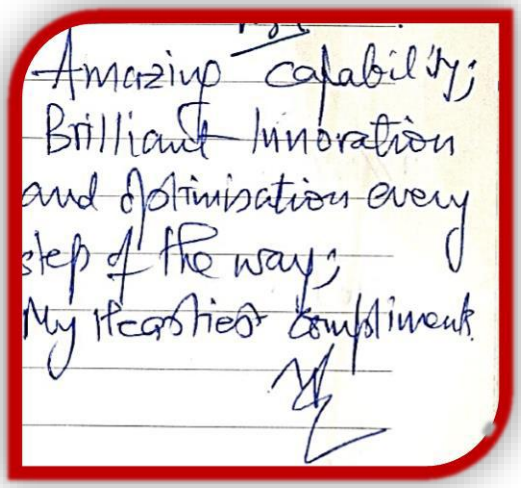
सुश्री. आर. उमा, उप निदेशक, पी एंड टी ऑडिट ऑफिस, मुंबई



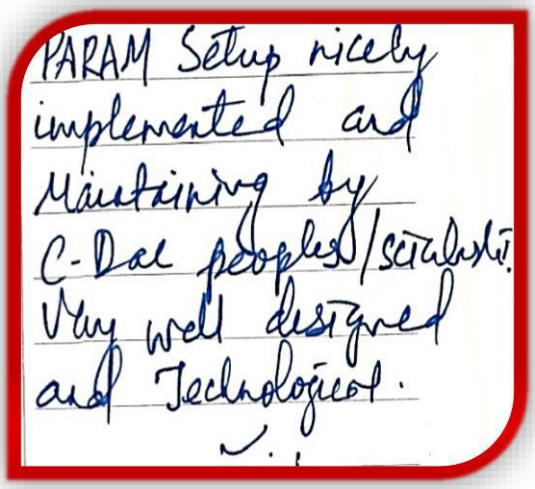
लेफ्टिनेंट जनरल अनिल कपूर, वि एस एम्, महानिदेशक, सूचना प्रणाली, भारतीय सेना, भार



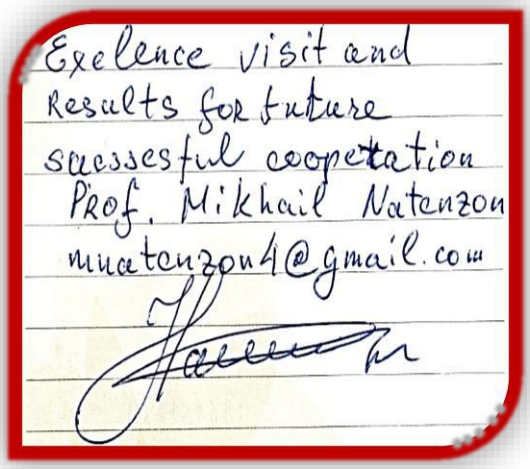
प्रो. इ. साईबाबा रेड्डी, पूर्व कुलपति, वीएसएसयूटी, बुर्ला ,ओडिशा



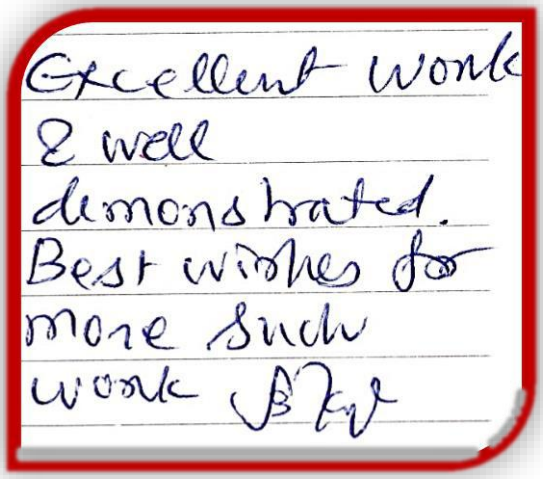
श्री. वी. पी. शर्मा, पूर्व महानिदेशक, (टेक्निकल सर्विसेज), सिस्को सिस्टम्स, मुंबई



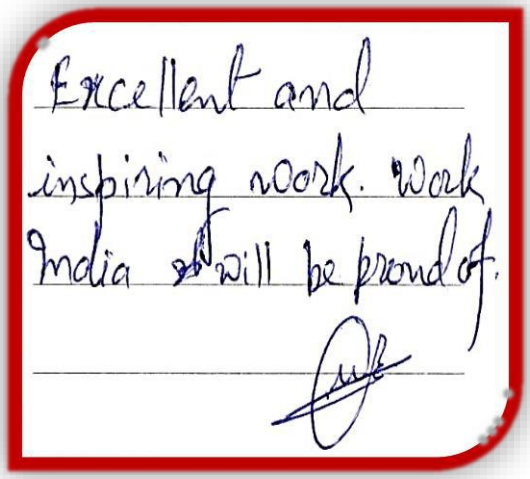
श्री. चंद्रकांत अम्बादास धाकरे, पुलिस हेड क्वार्टर, पुणे



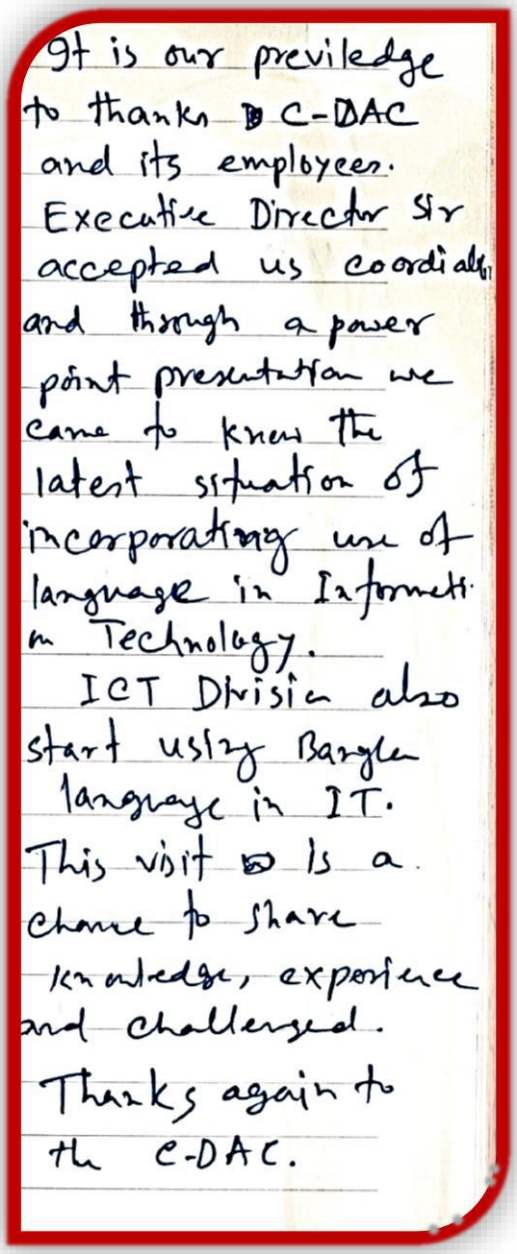
प्रो. मिखाइल नतेनज़ोन, राष्ट्रीय टेलीमेडिसिन एजेंसी मंडल के अध्यक्ष, मास्को, रूस



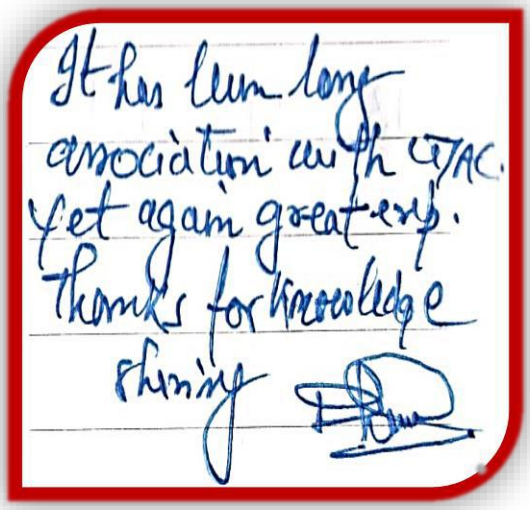
श्री. बी. कृष्ण मूर्ति, कार्यक्रम निदेशक, यशदा, पुणे



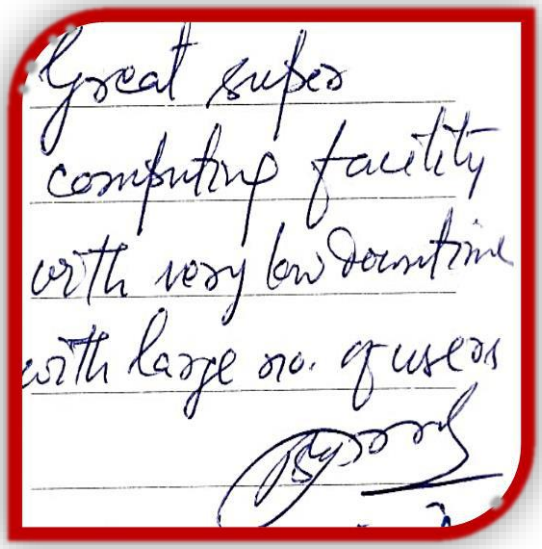
विंग कमांडर एम्.एम्. इंगले, भारतीय वायुसेना


It is our previledge to thanks to C-DAC and its employees. Executive Director Sir accepted us cordially and through a power point presentation we came to know the latest situation of incorporating use of language in Information Technology.
ICT Division also start using Bangla language in IT. This visit is a chance to share knowledge, experience and challenged.
Thanks again to the C-DAC.

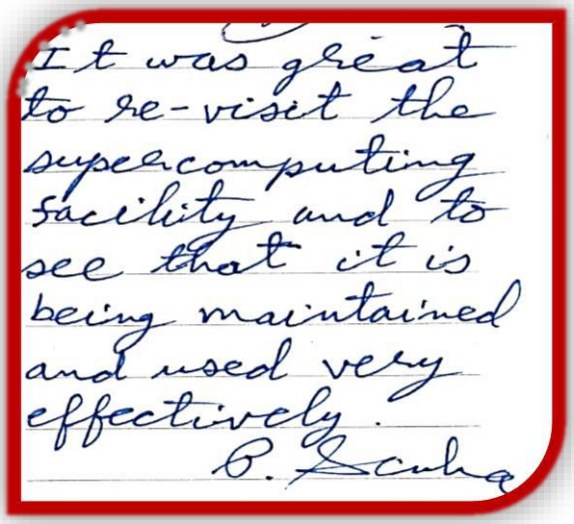
मो. कामरुज़्ज़मान, उप सचिव, सूचना और संचार प्रौद्योगिकी विभाग, पोस्ट्स, दूरसंचार और आईटी मंत्रालय, बांग्लादेश


It has been long association with C-DAC. Yet again great exp. Thanks for knowledge sharing

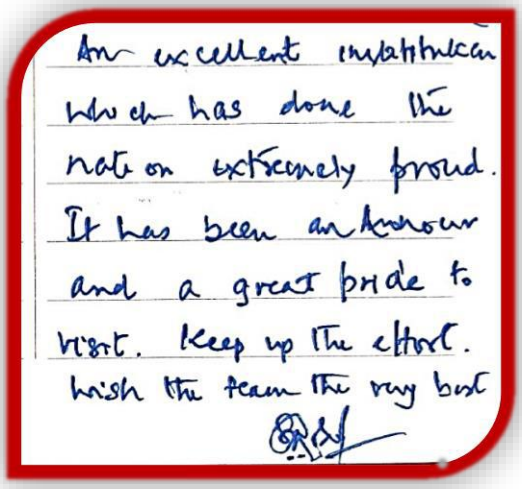
डॉ. धनञ्जय श्रीवास्तव एनटीआरओ, दिल्ली


Great supercomputing facility with very low downtime with large no. of users

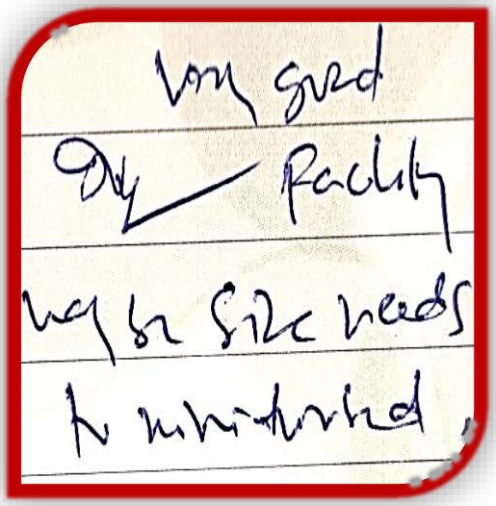
डॉ. बी के. पाणिग्रही ,रजिस्ट्रार, आईआईआईटी नया-रायपुर



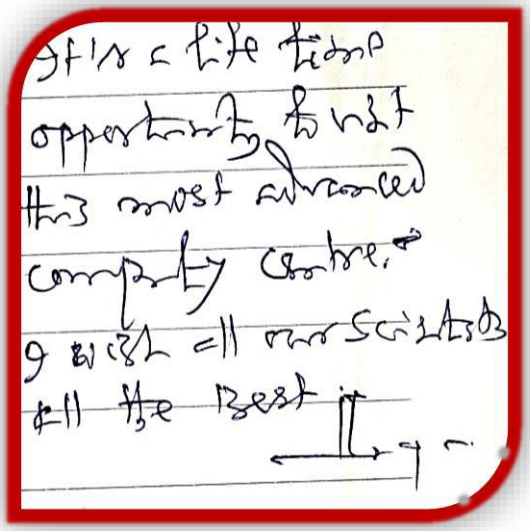
डॉ. प्रदीप के. सिन्हा, कुलपति और निदेशक , आईआईआईटी-नया रायपुर



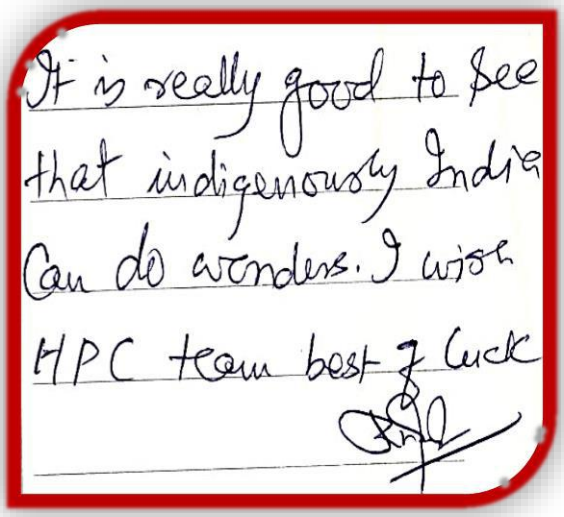
उप समुद्री नायक, एस.एन घोरमाडे, ए वी इस एम्, एन एम्, **महानिदेशक** , नौसेना संचालन, भारतीय नौसेना



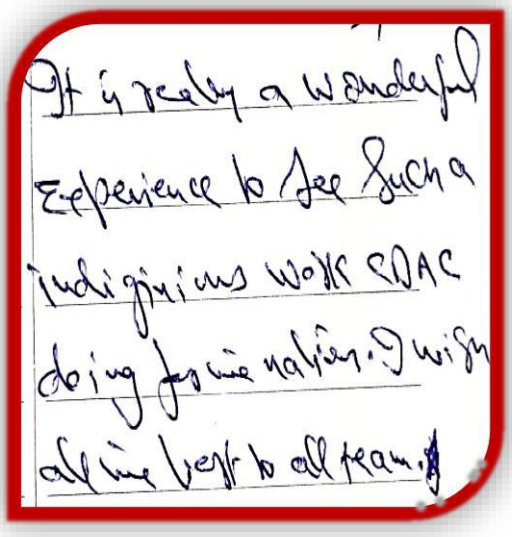
प्रो. डी. एन. रेड्डी, निदेशक, सीआर राव, एआयएम्एससीएस, एचसीयू, हैदराबाद



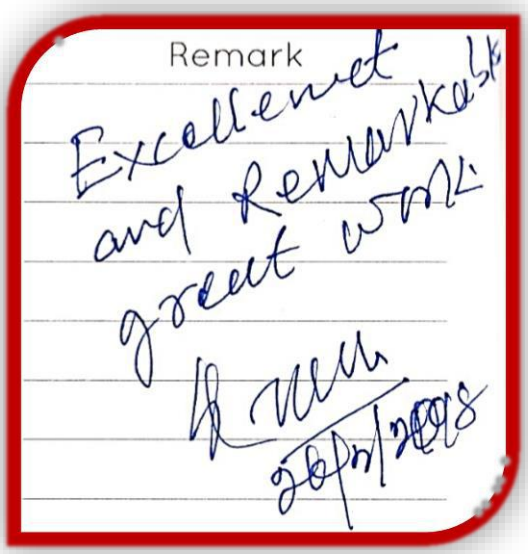
डॉ. अजय के. नायक, संयुक्त सचिव, ओडिशा सरकार, भुबनेश्वर



प्रो. आर. के. सिंह, डीन (छात्र कल्याण), एम्एनएनआयटी, अल्लाहाबाद



श्री. एम्. कृष्णा, सहायक निदेशक (डीओसी),सेंट्रल फॉरेंसिक साइंस लेबोरेटरी (सीऍफ़एल),हैदराबाद



श्री जुअल ओराम, जनजातीय मामलों के माननीय मंत्री, भारत सरकार

परिशिष्ट ऍफ़

चित्रशाला

श्री जुअल ओराम (दाएं से तीसरे) , जनजातीय कार्य मंत्रालय भारत सरकार, एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए।

ब्राज़ीलियाई प्रतिनिधिमंडल को श्री। विनोद कुमार एम, केंद्र प्रमुख, सी-डैक, मोहाली एवं
वरिष्ठ निर्देशक एचओडी , एचपीसी- आई एंड आई, सी-डैक, पुणे, एनपीएसएफ के बारे में समझते हुए

ब्राज़ीलियाई प्रतिनिधिमंडल एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए

वाइस एडमिरल एस एन घोरमाड़े (दाएं से दूसरे), एवीएसएम, एनएम, महानिदेशक नौसेना संचालन, भारतीय नौसेना, एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए

डॉ. प्रदीप के. सिन्हा, वाइस चांसलर एवं निदेशक, आईआईआईटी- नई रायपुर, एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए |(डॉ प्रदीप के. सिन्हा पूर्व वरिष्ठ निदेशक, कॉर्पोरेट आर एंड डी, सी-डैक, एनपीएसए की स्थापना उनके संरक्षण में हुई थी और और एचपीसी सेवाएं राष्ट्र को प्रदान करना प्राम्भ किया

रूसी प्रतिनिधिमंडल, एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए

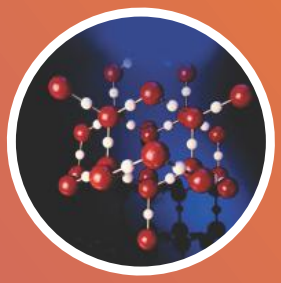
लेफ्टिनेंट जनरल अनिल कपूर (दाएं), महानिदेशक, सूचना प्रणाली, भारतीय सेना को कर्नल ए. के. नाथ(सेवानिवृत्त), कार्यकारी निदेशक, कॉर्पोरेट सी-डैक, एनपीएसएफ के बारे में समझते हुए

प्रो ई साईबाबा रेड्डी, पूर्व उप-कुलपति, वीएसएसयूटी, ओडिशा, एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए

डॉ. अजय के नायक, संयुक्त सचिव, ओडिशा सरकार, भुवनेश्वर, एनपीएसएफ़ का दौरा करते हुए

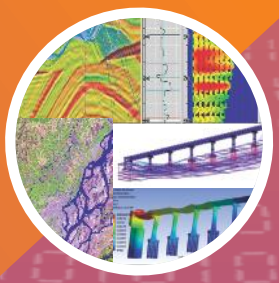
निशा अग्रवाल ने राष्ट्रीय विज्ञान दिवस, सी-डीएसी, पुणे पर मीडिया से एनपीएसएफ के बारे में समझते हुए

Space Applications



Basic Sciences

Data Sciences



Engineering Applications

Defence & Atomic Energy Applications

Earth Sciences

सी डैक
CDAC
www.cdac.in

प्रगत संगणन विकास केंद्र
CENTRE FOR DEVELOPMENT OF ADVANCED COMPUTING
पुणे विश्वविद्यालय परिसर, गणेशखिंड, पुणे - 411 007, भारत
Pune University Campus, Ganeshkhind, Pune 411 007, India.
फ़ोन / Tel: +91-20- 2570 4100, फैक्स / email: npsfhelp@cdac.in