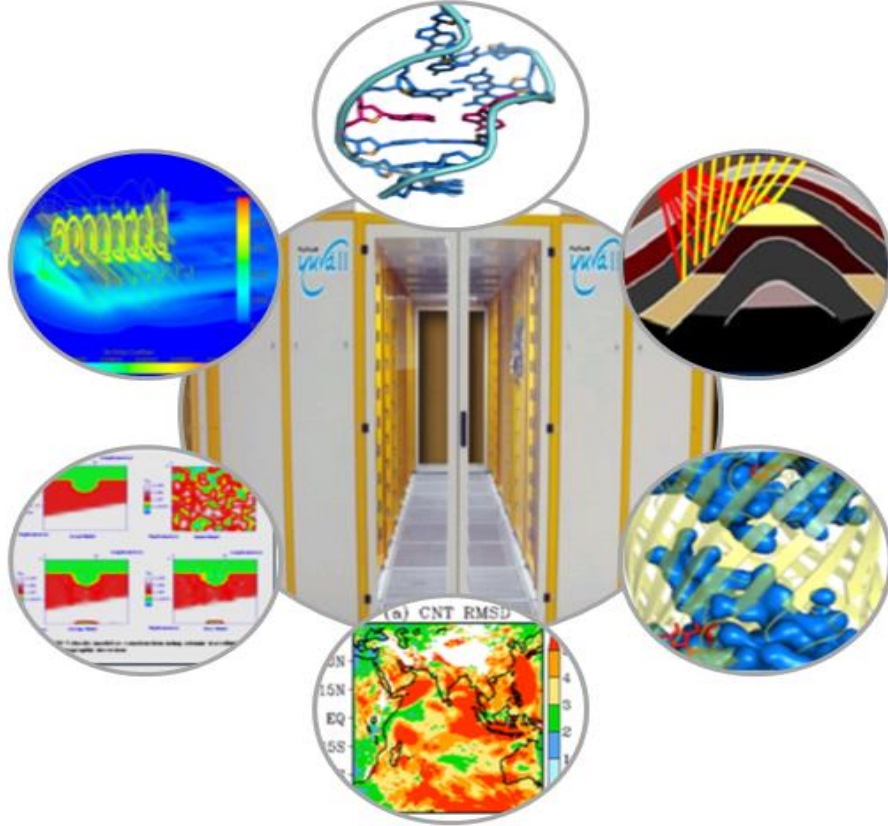


राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा

वित्तीय वर्ष २०१५-१६ की वार्षिक रिपोर्ट





## महानिदेशक का संदेश



वित्तीय वर्ष २०१५-१६ में राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा (एनपीएसएफ) पर की गयी गतिविधियों का ये विशेष प्रतिवेदन रखने में मुझे अत्याधिक प्रसन्नता और गर्व का अनुभव हो रहा है।

परम युवा द्वितीय प्रणाली, एनपीएसएफ, सी-डैक, पुणे, की परम श्रृंखला में पहली संकर महासंगणक है, जो निरंतर तीसरे वर्ष में भी वैज्ञानिकों और शैक्षिक समुदाय को अपनी सेवाएं प्रदान कर रही है। हमेशा से अधिक रहे

राष्ट्रीय / अंतरराष्ट्रीय पत्रिकाओं एवं उपयोगकर्ताओं द्वारा पीएचडी शोधप्रबंध, की संख्या के साथ एनपीएसएफ नई ऊचाइयों पर पहुंचा है।

मैं एनपीएसएफ टीम के सभी सदस्यों को बधाई देता हूं, जो अपने अथक प्रयासों से और अंतहीन सेवाओं के कारण ८०० से अधिक उपयोगकर्ता, ७२ अनुसंधान एवं विकास और शैक्षणिक संस्थानों को सहायता प्रदान कर रहे हैं। भारत सरकार द्वारा अनुमोदित राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग मिशन (एनएसएम) के आगमन से आगे आने वाले वर्षों में ये संख्या कई गुना बढ़ने की उम्मीद है।

एनपीएसएफ, जिसके पास पिछले २ दशको से ज्यादा की विशेषज्ञता हासिल है, उसके लिए एक बड़ी चुनौतीपूर्ण भूमिका आने वाली है। मैं पूर्ण रूप से अपनी शुभकामनाएं और समर्थन एनपीएसएफ और उनके सदस्यों के प्रयासों को देता हूँ।

मैं एनपीएसएफ के साथ जुड़े रहने वाले सभी हितधारकों और उपयोगकर्ताओं को अग्रिम वर्ष के लिए बहुत बहुत बधाई देता हूँ।

प्रो. रजत मूना

महानिदेशक, सी-डैक



## कार्यकारी निदेशक का संदेश



सबसे पहले मैं देशभर के सभी वैज्ञानिकों और शोधकर्ताओं को बधाई देता हूँ जो एनपीएसएफ संसाधनों का उपयोग अपने शोधकार्य के लिए कर रहे थे और कर रहे हैं। पिछले कुछ वर्षों में जिस तरीके से एचपीसी समुदाय की वृद्धि से उपयोगकर्ताओं के विशाल समुदाय का निर्माण हुआ है यह काफी प्रशंसनीय है। एचपीसी में हमारी समृद्ध अनुभव को देखते हुए जिस तरह से हम सुपरकंप्यूटिंग प्रणाली की अगली पीढ़ी, पेटास्केल और एक्सास्केल के लिए तैयार है उस से सी-डैक का भविष्य उज्वल लग रहा है। साथ में मुझे इस बात का भी गर्व है कि सी-डैक राष्ट्र का एकमात्र ऐसा संस्थान है जो शैक्षणिक एवं अनुसंधान संगठनों को एचपीसी संसाधन उपलब्ध कराता है। जो कीर्तिस्तम्भ हमने पार किये हैं, और जो प्रशंसा हमें निरंतर मिलती आ रही है उसमें हमारे तप और जनक इलेक्ट्रॉनिक्स एवं सूचना प्रौद्योगिकी विभाग (डीईआईटीवाई), भारत सरकार के समर्थन और विश्वास का अंशतः योगदान रहा है। यह हमारी क्षमताओं पर उनका अटूट आत्मविश्वास है, जो हमें भारत सरकार द्वारा अनुमोदित अत्याधिक प्रतिष्ठित राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग मिशन (एनएसएम) की दौड़ में सबसे आगे ले आया है।

मैं बेहद आशावान हूँ कि सी-डैक अपने अनुभव और सहयोग के माध्यम से नये और चुनौतीपूर्ण क्षेत्रों में काम करने के लिए निरंतर अपनी ताकत और क्षमता बढ़ाता रहेगा जिससे देश और नागरिकों को तरक्की की दिशा में मदद मिलेगी।

डॉ हेमंत दरबारी

कार्यकारी निदेशक, सी-डैक, पुणे



## विभाग प्रमुख का संदेश

यह प्रतिवेदन एनपीएसएफ को सुचारू रूप से चलाने की हमारी अपार प्रतिबद्धता और प्रयास का साक्षी है। पिछले वर्षों की तरह ही हमारी टीम ने यह सुनिश्चित किया है कि कंप्यूटिंग संसाधन संभावित रूप से सभी उपयोगकर्ताओं को पूर्ण एवं पारदर्शी रूप में मिले। पिछले साल के दौरान, एनपीएसएफ उपयोगकर्ता समुदाय ने ८०० उपयोगकर्ताओं की संख्या को पार किया और १,९२,७०८ जॉब्स पूरे किये हैं। हमारे उपयोगकर्ताओं द्वारा शोधप्रबंध और प्रकाशनों की संख्या, हमारे अधिकतम उपयोगिता और उपलब्धता का स्तर प्रदान करने के प्रयासों को स्पष्ट रूप से दर्शाता है।

जैसे, विशाल एनपीएसएफ सुविधा का संचालन, विश्वसनीयता और उपलब्धता के साथ करना एक बड़ी चुनौती थी, वैसे ही एचपीसी समुदाय के लिए नई सेवाएं प्रदान करने के लिए पृष्ठभूमि में किया गया प्रारंभिक कार्य एक अच्छा कदम था। मुझे विश्वास है कि हमारे उपयोगकर्ता इससे अत्याधिक लाभान्वित होंगे। इस साल अनुमोदित राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग मिशन (एनएसएम) के लिए एनपीएसएफ ने एक अच्छा प्रयास किया गया है, और आगे आने वाली चुनौतियों का सामना करने के लिए हमारी टीम उत्साहित है। हम अपने महानिदेशक, कार्यकारी निदेशक और सबसे महत्वपूर्ण हमारे मूल्यवान उपयोगकर्ताओं, को सबसे अच्छा एवं संभव सुपरकंप्यूटिंग मंच प्रदान करने के हमारे प्रयासों में समर्थन के लिए धन्यवाद करते हैं।

शुभ गणना!

श्री विनोद कुमार एम

सयुक्त निदेशक एवं विभाग प्रमुख, एचपीसी-आईएण्डई, सी-डैक, पुणे





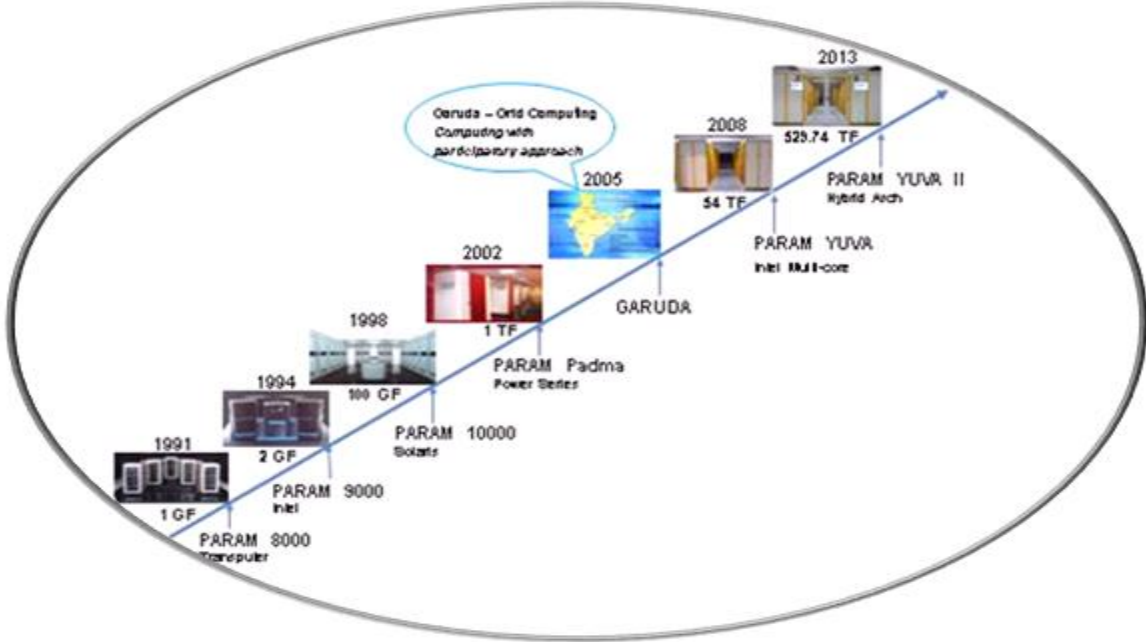
## विषय – सूची

१. प्रगतिशाली एचपीसी.....	1
२. परम युवा द्वितीय के आंकड़े.....	3
३. वर्ष २०१५-२०१६ की समीक्षा .....	5
४. कंप्यूटिंग संसाधन.....	9
५. एचपीसी उपयोगकर्ता समुदाय में वृद्धि.....	13
६. संसाधन आवंटन कार्यक्रम .....	27
७. प्रमुख अनुसन्धान परियोजनाएं .....	33
८. परम युवा द्वितीय उपयोगकर्ता द्वारा पीएचडी शोध प्रबंध.....	35
९. परम युवा द्वितीय का प्रयोग विज्ञान.....	39
१०. दौरे @ परम युवा द्वितीय .....	47
अनुबंध अ परियोजनाएं @ परम युवा द्वितीय.....	51
अनुबंध ब समर्पित स्लॉट बुकिंग की सुविधा के साथ उपयोगकर्ताओं के अनुभव .....	65
अनुबंध स चित्रशाला .....	71



## १. प्रगतिशाली एचपीसी

१९९० के दशक में, सी-डैक, अनुसंधान और विकास संगठन, एक गीगा या एक अरब फ्लॉप्स क्षमता वाले सुपर-कम्प्यूटर के निर्माण के प्राथमिक उद्देश्य से स्थापित किया गया था। परम ८००० नामित, इसने, समानांतर कंप्यूटरों की एक पूरी श्रृंखला के लिए मंच की स्थापना की, जिसे पिछले कुछ वर्षों से सुपर - कम्प्यूटर की परम श्रृंखला के रूप में जाना जाता है। १९९८ में, परम १०००० ने १०० गीगा फ्लॉप्स शीर्ष क्षमता के साथ भावी विकास के लिये पथ निर्धारित किया। २००२ में परम पद्मा के बनने से, परम सुपरकंप्यूटर ने गीगा फ्लॉप्स से १ टेरा फ्लॉप्स (हजार अरब फ्लॉप्स) परिसीमा को भी पार कर दिया। इस श्रृंखला में अगला, परम युवा (अब से परम युवा प्रथम उल्लेखित है), २००८ में निर्मित और प्रमोचित किया गया। यह नवंबर २००८ सुपरकंप्यूटिंग सम्मेलन, ऑस्टिन, टेक्सास, संयुक्त राज्य अमेरिका में जारी टॉप ५०० सूची में ६९ वें स्थान पर रहा।



चित्र १.१: एचपीसी क्रमागत उन्नति @ सी-डैक

परम युवा प्रथम, सी-डैक के द्वारा निर्मित, उच्च गति १० गीगाबिट्स (जीबीपीएस) सिस्टम एरिया नेटवर्क (स्वदेशीय परम नेट- ३) पर निर्भर था। यह एचपीसी क्लस्टर, अत्याधुनिक तकनीक , x86 क्वाड कोर प्रोसेसर नोड्स पर आधारित था। परम युवा प्रथम के संपूर्ण विन्यास में, २.९३ गीगाहर्ट्ज़ क्लॉक आवृत्ति (GHz) वाले

टाइगरटन इंटेल ज़िऑन ७३५० प्रोसेसर के ४,६०८ कोर थे। प्रणाली की प्रायौगिक क्षमता ३७.८ टेरा फ्लॉप्स और शीर्ष क्षमता ५४ टेरा फ्लॉप्स थी। त्वरक / सह प्रोसेसर प्रौद्योगिकी के साथ एचपीसी को समान रूप से अग्रसर या उन्नत बनाये रखने हेतु, परम युवा के उन्नयन की योजना बनाई गयी। फरवरी २०१३ में प्रमोचित, यह उन्नत प्रणाली परम युवा द्वितीय, भारत में निर्मित, सुपर-कम्प्यूटरों की प्रतिष्ठित परम श्रृंखला में संकलित हुआ। परम युवा द्वितीय, अपने कंप्यूटिंग शक्ति को प्राप्त करने के लिए इंटेल ज़िऑन के साथ इंटेल ज़िऑन फाई का उपयोग करने वाले देश के प्रथम एचपीसी प्रणालियों में से एक था। इस प्रक्षेपण के साथ ही सी-डैक भारत का ५०० टेरा फ्लॉप्स कीर्तिस्तंभ पार करने वाला एकमात्र अनुसंधान एवं विकास संस्थान भी बना।

सी-डैक ने १९९८ में, एचपीसी संसाधनों के उपयोग की सुविधा देश भर के शोधकर्ताओं के लिए, गहन गणना समस्याओं को हल करने की आवश्यकतापूर्ति हेतु, राष्ट्रीय परम सुपरकंप्यूटिंग सुविधा (एनपीएसएफ) सी-डैक, पुणे में स्थापित की गयी थी। विभिन्न विश्वविद्यालयों, आईआईटी और अन्य अनुसंधानों एवं विकास संस्थानों का नेशनल नॉलेज नेटवर्क से जुड़े होने से उपयोगकर्ताओं को एनपीएसएफ संगणन संसाधनों तक पहुँचने के लिए विश्वसनीयता और उपलब्धता का लाभ भी मिला है। वैज्ञानिक समुदाय इस एनपीएसएफ, सी-डैक अभिकलन सुविधा का उपयोग तकनीकी संबद्ध योजना के माध्यम से करते हैं। इसके तहत, मुख्य अन्वेषक (प्रो. वर्ग/ विश्वविद्यालय में वैज्ञानिक/ संस्थान/ अनुसंधान एवं विकास प्रयोगशाला) तकनीकी संबद्ध के रूप में नामांकित किया जाता है, और शोधकर्ता उसकी / उसके छात्र / सहयोगी के साथ एनपीएसएफ संसाधनों पर खाता प्राप्त कर सकते हैं और उनके शोध कार्य के लिए समय अभिकलन का लाभ ले सकते हैं। भावी उपयोगकर्ता अपने प्रश्न [npsfhelp@cdac.in](mailto:npsfhelp@cdac.in) को भेज सकते हैं।

यह रिपोर्ट वित्त वर्ष २०१५-१६ के दौरान की गयी गतिविधियों का विवरण है।

---

परम युवा: चालू वर्ष २००८ - २०१२, ५४ टेरा फ्लॉप्स शीर्ष क्षमता, टॉप ५०० में उच्चतम स्थान ६९

परम युवा द्वितीय: वर्ष २०१३ से परिचालन, ५२९.४ टेरा फ्लॉप्स शीर्ष क्षमता, टॉप ५०० में उच्चतम स्थान ६९

## २. परम युवा द्वितीय के आंकड़े

तथ्य और आंकड़े	८ फरवरी, २०१३ परम युवा द्वितीय राष्ट्र को समर्पित किया गया
	५२९.४ टेरा फ्लॉप्स शीर्ष
	३८६.७ टेरा फ्लॉप्स प्रायौगिक क्षमता
	१,७६०.२० मेगा फ्लॉप्स प्रति वाट ऊर्जा दक्षता
	३०,०५६ कम्प्यूटिंग कोर
	२२१ कम्प्यूटिंग नोड्स
मुख्य विशेषताएं	१,९२,७०८ जॉब्स प्रसंस्करण पूर्ण
	२५१ वां स्थान, टॉप५०० नवम्बर २०१५ की सूची में [ दुनिया भर के टॉप५०० सुपरकंप्यूटरो में उच्चतम स्थान : टॉप ५०० , जून २०१३ में ६९वां, <a href="http://www.top500.org">http://www.top500.org</a> ]
	९६वां स्थान, ग्रीन५०० नवम्बर २०१५ की सूची में [ दुनिया भर के ग्रीन५०० सुपरकंप्यूटरो में उच्चतम स्थान : ग्रीन५०० , नवम्बर २०१३ में ४४वां, <a href="http://www.green500.org">http://www.green500.org</a> ]
	८१२ उपयोगकर्ता
	७२ संस्थान
	२२१ परियोजनाएं
	२१ पीएचडीज पूर्ण
	११८ प्रकाशन

५४ टेरा फ्लॉप्स से ५२९.४ टेरा फ्लॉप्स अधिक गणना शक्ति में वृद्धि परम युवा वाले समान पावर इन्वेलोप में की गयी है।



### ३. वर्ष २०१५-२०१६ की समीक्षा

२०१५	
मई	<p>परम युवा द्वितीय के अनुरक्षण की गतिविधि ५ से ७ मई, २०१५(१ दिन २३ घंटे) के दौरान की गई। अनुरक्षण के दौरान सम्पन्न किये गये प्रमुख कार्यों की सूची : इंटेल मेनीकोर प्लेटफार्म सॉफ्टवेर स्टैक (इंटेल ऍमपीएसएस) का उन्नयन, इंटेल पैरेलल स्टूडियो XE २०१५ इंस्टॉलेशन, नेटवर्क कॉन्फिगरेशन और शेड्यूलर की नीतियों में बदलाव।</p>
जून	<p>एनपीएसएफ के द्वारा "परफॉर्मेंस ऑप्टिमाइजेशन एंड पैरेललाइजेशन टेक्निक्स" एचपीसी कार्यशाला का आयोजन १५ जून, २०१५ को किया गया। कार्यशाला में २० से ज्यादा सी-डैक सदस्यों ने भाग लिया और विभिन्न अनुकूलन तकनीकों का अनुभव प्राप्त किया।</p> <p>दिनांक ०३ जुलाई, २०१५ को एनपीएसएफ के द्वारा एचपीसी कार्यशाला "हैंड्स-ऑन सेशन ऑन परफॉर्मेंस ऑप्टिमाइजेशन टेक्निक्स, परफॉर्मेंस एनालायजिंग एंड प्रोफाइलिंग टूल्स" का आयोजन किया गया। २० से ज्यादा सी-डैक सदस्यों ने कार्यशाला में भाग लिया और उनको विभिन्न ऑप्टिमाइजेशन तकनीक एवं परफॉर्मेंस एनालायजिंग एवं प्रोफाइलिंग टूल्स का प्रायोगिक अनुभव मिला।</p>
जुलाई	<p>एनपीएसएफ एवं आईआईएसइआर, मोहाली द्वारा एचपीसी कार्यशाला "पैरेलल कंप्यूटिंग, परफॉर्मेंस ऑप्टिमाइजेशन टेक्निक्स, परफॉर्मेंस एनालायजिंग एंड प्रोफाइलिंग टूल्स" का आयोजन दिनांक १४-१५ जुलाई, २०१५ को किया गया। कार्यशाला में आईआईएसइआर, आईएनएसटी, एनएबीआई, डीआरडीओ जैसे अनुसंधान संस्थानों से ३५ से ज्यादा प्रतिभागियों ने हिस्सा लिया। उनको पैरेलल कंप्यूटिंग, परफॉर्मेंस ऑप्टिमाइजेशन टेक्निक्स एवं परफॉर्मेंस एनालायजिंग एंड प्रोफाइलिंग टूल्स का प्रायोगिक अनुभव मिला।</p>

अगस्त	दिनांक १३ अगस्त , २०१५ को श्री पंकज डोर्लीकर ने सावित्रीबाई फुले पुणे विश्वविद्यालय के छात्रों को "कंप्यूटर आर्किटेक्चर फॉर साइंटिफिक कंप्यूटिंग " के विषय पर व्याख्यान दिया। व्याख्याता डॉ. वैशाली शाह, सहायक प्रोफेसोर , सीएमस विभाग द्वारा आमंत्रित थे।
सितम्बर	दिनांक 11 सितम्बर , २०१५ को आयोजित कार्यशाला "ऐसीआर ट्रेण्डस २०१५" में श्री वाय एस स्वरुप ने "एचपीसी कूलिंग टेक्नोलॉजीस" के विषय पर व्याख्यान दिया।
दिसम्बर	संकाय विकास कार्यक्रम के अन्तर्गत श्री वाय एस स्वरुप ने " एचपीसी टेक्नोलॉजीस" के विषय पर दिनांक १६ दिसम्बर, २०१५ को गवर्नमेंट कॉलेज ऑफ इंजीनियरिंग, कराड में व्याख्यान दिया।
२०१६	
जनवरी	दिनांक २२ जनवरी, २०१६ को श्री वाय एस स्वरुप ने एस के बी आर कॉलेज , अमलापुरम (आंध्रप्रदेश ) के छात्रों को " एचपीसी टेक्नोलॉजीस एवं जॉब ओपोर्चुनीटीज " के विषय पर व्याख्यान दिया, जिससे छात्रों को एचपीसी टेक्नोलॉजीस का अनावरण मिला।  डॉ संदीप जोशी एवं डॉ वेंकटेश शेनोई ने परम युवा द्वितीय के प्रचार प्रसार के अन्तर्गत जनवरी- फरवरी , २०१६ के दौरान इंस्टिट्यूट ऑफ़ फिजिक्स (आई. ओ. पी.) , भुवनेश्वर का दौरा किया।
फरवरी	दिनांक १३ फरवरी , २०१६ को कु. निशा अग्रवाल ने महाराष्ट्र के विभिन्न अभियांत्रिकी संस्थानों से आये हुए संकायों को " इंट्रोडक्शन टू ओपनसीएल कंप्यूटिंग " के विषय पर पुणे इंस्टिट्यूट ऑफ़ कंप्यूटर टेक्नोलॉजी (पीआईसीटी ), पुणे में व्याख्यान दिया। पीआईसीटी, पुणे से आमंत्रण पर यह व्याख्यान संकाय विकास कार्यक्रम के अन्तर्गत दिया गया था।



	<p>एनपीएसएफ टीम ने दिनांक २८ फरवरी , २०१६ को सी-डैक में आयोजित “राष्ट्रीय विज्ञान दिवस” समारोह में भाग लिया और परम युवा द्वितीय से संबंधित गतिविधियों का ब्यौरा दिया। इसमें पुणे एवं नजदीकी जिले जैसे अहमदनगर , सातारा, सांगली एवं कोल्हापुर से लगभग १४९६ आगंतुकों ने (विभिन्न विद्यालय एवं महाविद्यालय के विद्यार्थी ) तकनीकी सत्रों एवं परम युवा द्वितीय के दौरे का लाभ उठाया।</p>
मार्च	<p>दिनांक ७-११ मार्च , २०१६ के दौरान आई आई टी कानपूर द्वारा आयोजित टेककृति-१६ कार्य के अन्तर्गत अंतरराष्ट्रीय हाई परफॉरमेंस कंप्यूटिंग (आईएचपीसी) प्रतियोगिता के लिए परम युवा द्वितीय कंप्यूटिंग संसाधनों का उपयोग किया गया।</p>

हमने राष्ट्रीय सुपरकंप्यूटिंग मिशन (एनएसएम) के कार्यान्वयन के प्रारंभिक चरण में कदम रखते हुए विभिन्न ज्ञानक्षेत्रों के उपयोगकर्ता समुदायों से कम्प्यूटेशनल संसाधनों की आवश्यकताओं, भंडारण क्षमता आदि के मामले में जानकारी के लिये आवेदन एकत्रित किये। उपयोगकर्ताओं से प्राप्त बहुमूल्य जानकारी, हमें भविष्य प्रणाली की योजना के साथ ही उपयोग की नीतियों को तैयार करने में मदद करेगी।



## ४. कंप्यूटिंग संसाधन

चार उपक्लस्टर	
उपक्लस्टर १	<p>इंटेल् सर्वर सिस्टम R2000GZ के साथ २२० नोड्स का क्लस्टर</p> <p>प्रति नोड ड्यूल सॉकेट इंटेल् ज़ीऑन E5 2670 (सैंडी ब्रिज) प्रोसेसर</p> <p>प्रति सॉकेट आठ सीपीयू कोर, २.६ गीगा हर्ट्ज़</p> <p>प्रति नोड दो इंटेल् ज़ीऑन फाई 5110P</p> <p>इनफिनीबैंड FDR इंटरकनेक्ट</p> <p>विभाजन: TESTp, FDRp, BIGJOBp, MICp, SDSp, DSBFp</p>
उपक्लस्टर २	<p>१०० से अधिक एचपी प्रोलिफंट DL580 G5 नोड्स का क्लस्टर</p> <p>प्रति नोड क्वैड सॉकेट इंटेल् ज़ीऑन X7350 प्रोसेसर</p> <p>प्रति सॉकेट चार सीपीयू कोर , २.९३ गीगा हर्ट्ज़</p> <p>प्रणाली इंटरकनेक्टस : परम नेट ३, इनफिनीबैंड DDR</p> <p>विभाजन: DDRp</p>
उपक्लस्टर ३	<p>सुपरमाइक्रो सुपरसर्वर 1027GR-TRF के चार नोड्स का क्लस्टर</p> <p>प्रति नोड ड्यूल सॉकेट इंटेल् ज़ीऑन E5 2650 (सैंडी ब्रिज) प्रोसेसर</p> <p>प्रति सॉकेट आठ सीपीयू कोर, २.६ गीगा हर्ट्ज़</p> <p>प्रति नोड दो एनवीडिया टेस्ला जीपीयू M2090</p> <p>इनफिनीबैंड FDR इंटरकनेक्ट</p> <p>विभाजन: FDRp</p>

उपक्लस्टर ४	एक ६४ कोर सुपरमाइक्रो 4U ऐ एम् डी SR5690 SMP सर्वर ब्रैड सॉकेट ऐ एम् डी आप्टेरान 6276 प्रोसेसर प्रति सॉकेट १६ सीपीयू कोर, २.३ गीगा हर्ट्ज़ ५१२ गीगा बाइट्स RAM विभाजन:GPU
संचयन	एचपीसी स्क्रेच क्षेत्र, १०जीबीपीएस लिखने की बैंडविड्थ, समानांतर फाइल प्रणाली उपयोगकर्ताओ के लिये विश्वसनीय होम क्षेत्र : 100TB बैकअप: 400TB (नेटिव क्षमता)
सॉफ्टवेयर	ऑपरेटिंग सिस्टम: CentOS v6.2, कर्नेल v2.6.32-220 इंटेल् क्लस्टर स्टूडियो XE 2013 पी जी आई क्लस्टर डेवलपमेंट किट
एँप्लीकेशन्स	फ़ाइल स्वरूपों, डेटाबेस और गणित के लिए लाइब्रेरी और सॉफ्टवेयर भौतिक विज्ञान / क्वांटम रसायन विज्ञान, आण्विक मॉडलिंग, तरल गतिकी, जलवायु मॉडलिंग, सर्किट सिमुलेशन और एयरोस्पेस इंजीनियरिंग के लिए कई वैज्ञानिक एँप्लीकेशन्स

क्लस्टर विभाजन, सेवा की गुणवत्ता में सुधार करने के लिए बनाया गया है।

#### विभाजन और कतार:

परम युवा द्वितीय संसाधनों को सजातीय समूह के समूहों में बांटा गया है जिसे विभाजन के रूप में जाना जाता है। तालिका -४.२ विभाजन और काम प्रस्तुत करने के लिए उनके कतार मानचित्रण का सारांश दर्शाता है।

तालिका ४.२: परम युवा द्वितीय पर कतारों और विभाजन का सारांश

विभाजन	कतार	वॉल समय सीमा	विभाजित नोड्स में त्वरक
FDRp	batch	७ दिन	ज़ीऑन फाई
BIGJOBp	batch	७ दिन	ज़ीऑन फाई
TESTp	TESTq	२ घंटे	ज़ीऑन फाई
GPUp	GPUq*	७ दिन	जीपीयू
MICp	MICq	७ दिन	ज़ीऑन फाई
DSBFp	DSBFq+	१५ दिन	ज़ीऑन फाई
SDSp‡	SDSq+	१४ घंटे ५५ मिनट‡	ज़ीऑन फाई

उपयोगकर्ताओं के संसाधन आवश्यकता के अनुसार विभिन्न कतारें अलग अभिकलन अभ्यास के लिए सेवा की गुणवत्ता की एक स्पेक्ट्रम सुनिश्चित करती हैं।

- TESTp विभाजन की उपलब्धता के साथ, उपयोगकर्ताओं को बिना लंबे समय तक इंतजार के वास्तविक जॉब्स से पहले परीक्षण जॉब्स चलाने के लिए संसाधन मिलते हैं। वर्तमान में TESTq कतार के लिए अधिकतम वॉल समय सीमा २ घंटे प्रति जॉब है।
- BIGJOBp विभाजन की उपलब्धता के साथ ६४ कोर से अधिक संसाधन अनुरोध वाले जॉब्स के लिए कतार प्रतीक्षा समय काफी कम हो गया है।
- SDSp विभाजन के संसाधन, मुख्य रूप से विभिन्न उपयोगकर्ताओं के लिए अपनी प्रतिबद्धता के अनुसार एक निश्चित अवधि के लिए दैनिक आधार पर वास्तविक जॉब्स चलाने के लिए हैं। उनके निष्क्रिय समय के दौरान इस विभाजन के संसाधनों को, समर्पित स्लॉट बुकिंग की सुविधा (डी एस बी एफ) के माध्यम से आरक्षण के लिए दूसरे उपयोगकर्ताओं के लिए उपलब्ध कराया जाता है।

---

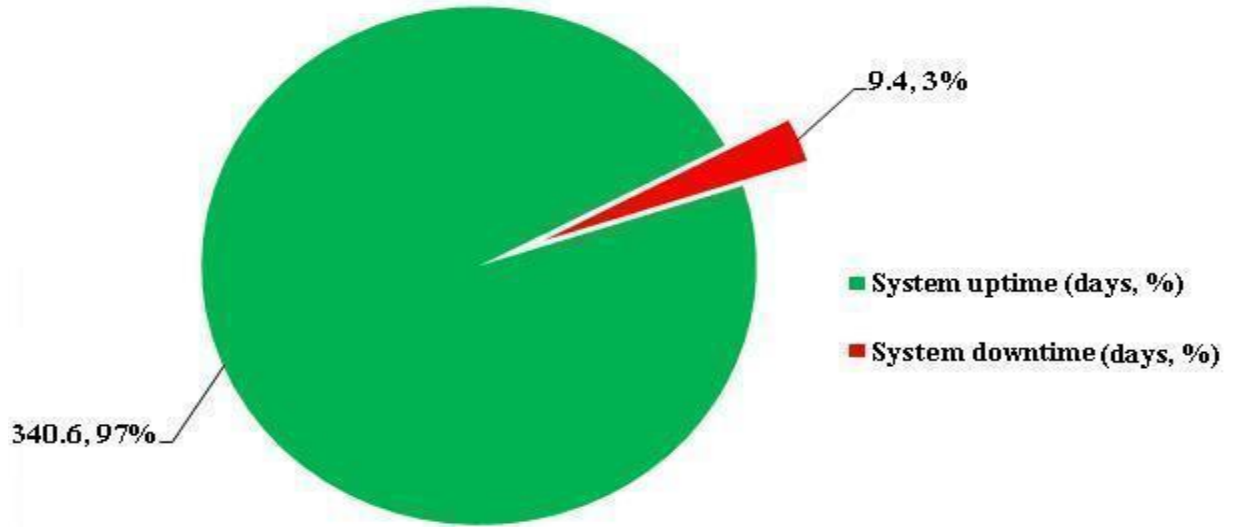
\* जीपीयू नोड्स / एसएमपी नोड पर जॉब्स के लिए कतार

+ उन्नत आरक्षण संसाधनों पर जॉब्स के लिए कतार

‡ प्रतिबद्ध संसाधनों के लिए निष्क्रिय अवधि (लगातार ७ दिनों के लिए दैनिक आधार पर)

‡ वास्तविक जॉब्स के लिए प्रतिबद्ध संसाधनों के साथ विभाजन

परम युवा द्वितीय उपलब्धता: (अवधि: १ अप्रैल, २०१५ - ३१ मार्च, २०१६) [३५० दिन]



1. अपटाइम: ३४१ दिन
2. अनुरक्षण अवधि: ९ दिन
  - मई ०५, २०१५, सुबह ११:३७ से मई ०७, २०१५, सुबह ११:०० [१ दिन, २३ घंटे]
  - जुलाई ०८, २०१५, सुबह ११:३० से १५ जुलाई, २०१५, रात ०९:०० [७ दिन, ९ घंटे]
3. प्रणाली अपटाइम: ९७%

---

कुल कंप्यूटर नोड्स २९० (परम युवा द्वितीय के २२१ नोड्स + कुछ संरक्षित पुराने नोड्स)

६० कोर के साथ इंटेल ज़ीऑन फाई 5110P

४९ से अधिक ओपन स्रोत वैज्ञानिक एप्लिकेशन्स / लाइब्रेरी / उपकरण उपलब्ध

कुल डाउनटाइम का ७७% क्लस्टर पारिस्थितिकी प्रणाली (विजली सब-सिस्टम) की विफलता की वजह से था

## ५. एचपीसी उपयोगकर्ता समुदाय में वृद्धि

परियोजनाएँ और उपयोगकर्ता (३१ मार्च २०१६ तक)

- परियोजनाओं की संख्या: २२१
- उपयोगकर्ताओं की संख्या: ८१२ (७२ संस्थानों में)
- पीएचडी छात्रों की संख्या: १४१

विभिन्न संस्थानों से उपयोगकर्ताओं की संख्या

तालिका ५.१: शैक्षिक संस्थानों के उपयोगकर्ताओं की संख्या

शैक्षिक संस्थान	उपयोगकर्ताओं की संख्या
अहमदनगर कॉलेज	१
एमिटी यूनिवर्सिटी	१
अलीगढ़ मुस्लिम यूनिवर्सिटी	५
अन्ना यूनिवर्सिटी	२
बिट्स पिलानी, हैदराबाद कैंपस	२
सीएमआर कॉलेज ऑफ़ ईएनजी. & टेक.	२
कारनेगीए मेलॉन यूनिवर्सिटी	१
कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, पुणे	२
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ़ बिहार	१
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ़ गुजरात	३
दिल्ली यूनिवर्सिटी	२
जीएलए यूनिवर्सिटी, मथुरा	१
गोवा यूनिवर्सिटी, गोवा	२
गवर्नमेंट कॉलेज, टोंक	१

गुरु नानक देव यूनिवर्सिटी	१
गुजरात टेक्नोलॉजी यूनिवर्सिटी	१
हिमाचल प्रदेश यूनिवर्सिटी	३
आईआईए, बेंगलोर	१२
आईआईआईटी, हैदराबाद	३
आईआईआईटी, दिल्ली	४
आईआईएससी, बेंगलोर	७
आईआईएसइआर, पुणे	५१
आईआईएसइआर, मोहाली	१
आईआईएसइआर, थिरुवनंतपुरम	३
आईआईटी, बॉम्बे	१७८
आईआईटी, भुवनेश्वर	२
आईआईटी, दिल्ली	८
आईआईटी, गुवाहाटी	२३
आईआईटी, गांधीनगर	१०
आईआईटी, हैदराबाद	१६
आईआईटी, जोधपुर	८
आईआईटी, कानपुर	२३
आईआईटी, खरगपुर	७
आईआईटी, पटना	५



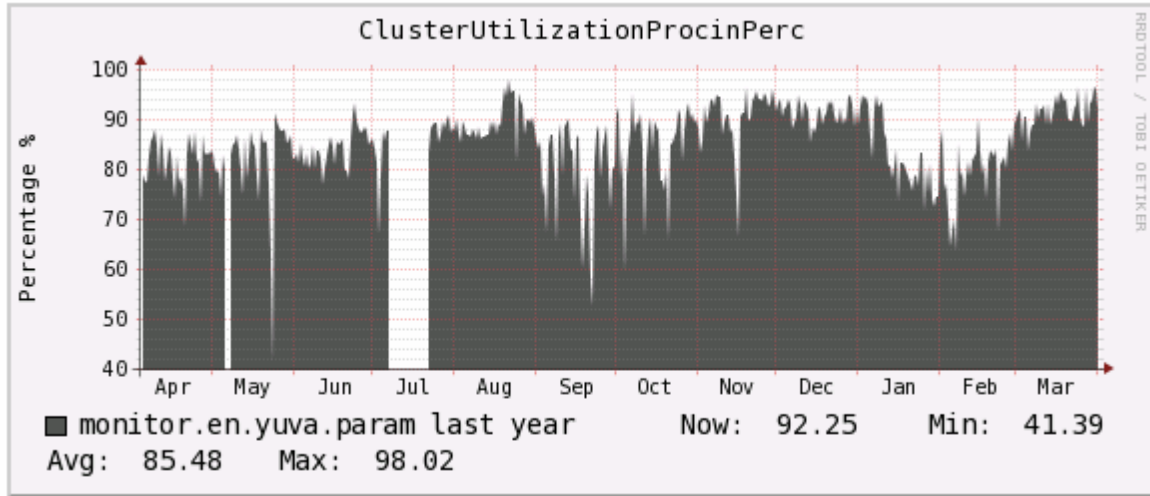
आईआईटी, रोपर	८
आईएनएसटी, मोहाली	८
जेएमआई यूनिवर्सिटी	१
जीवाजी यूनिवर्सिटी	३
जेएनयू	२
मनिपाल यूनिवर्सिटी	२
एमआईटी पुणे	१
एनआईटी कालीकट	१
एनआईटी राउरकेला	१
पंजाब यूनिवर्सिटी	२
पीजेटीएसएयू, हैदराबाद	१
यूनिवर्सिटी ऑफ़ राजस्थान	१
आरटीएम नागपुर यूनिवर्सिटी	२
सतारा यूनिवर्सिटी, थंजावुर	३
पीडीयू शेखावती यूनिवर्सिटी, सीकर	१
एसआरएम यूनिवर्सिटी	३
सेंट. जेवियर'स कॉलेज, अहमदाबाद	१
एस पी पुणे यूनिवर्सिटी	३२
विएनआईटी नागपुर	१
<b>कुल</b>	<b>४६६</b>

तालिका ५.१: विभिन्न शोध संस्थानों से उपयोगकर्ता

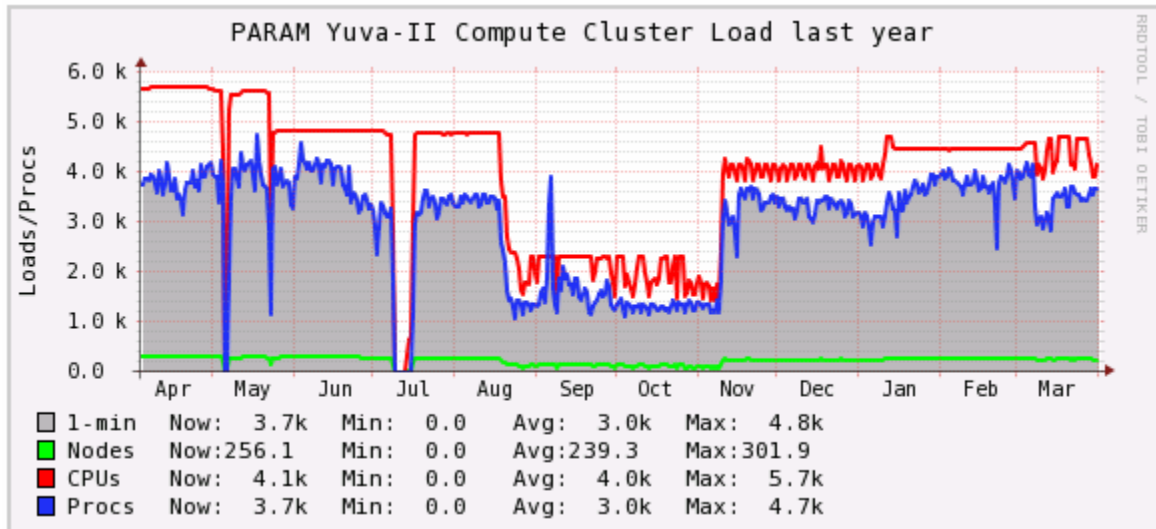
अनुसन्धान संस्थान	उपयोगकर्ताओं की संख्या
बीएआरसी, मुम्बई	१
सीबीएस, मुम्बई	२
सीआईएँफ़आरआई, कोलकाता	२
सी-डैक	१२३
सीइसीआरआई, कराईकुडी	४
इ-टीचर	२
गरूडा	१५७
आईएसएसटी, गुवाहाटी	४
इसरो, अहमदाबाद	५
आयूका, पुणे	७
जेएनसीएसआर, बैंगलोर	१०
नाबी, मोहाली	१
एनसीएल, पुणे	६
एनसीआरए, पुणे	६
एनआईसी	२
पीआरएल, अहमदाबाद	३
आरआरआई, बैंगलोर	३
एसआईएनपी, कोलकाता	२
विजय कुमार फाउंडेशन, गुडगाँव	६
कुल	३४६

## परम युवा द्वितीय प्रणाली का उपयोगीकरण

क्लस्टर उपयोगीकरण : (अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६)



क्लस्टर लोड : (अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६)

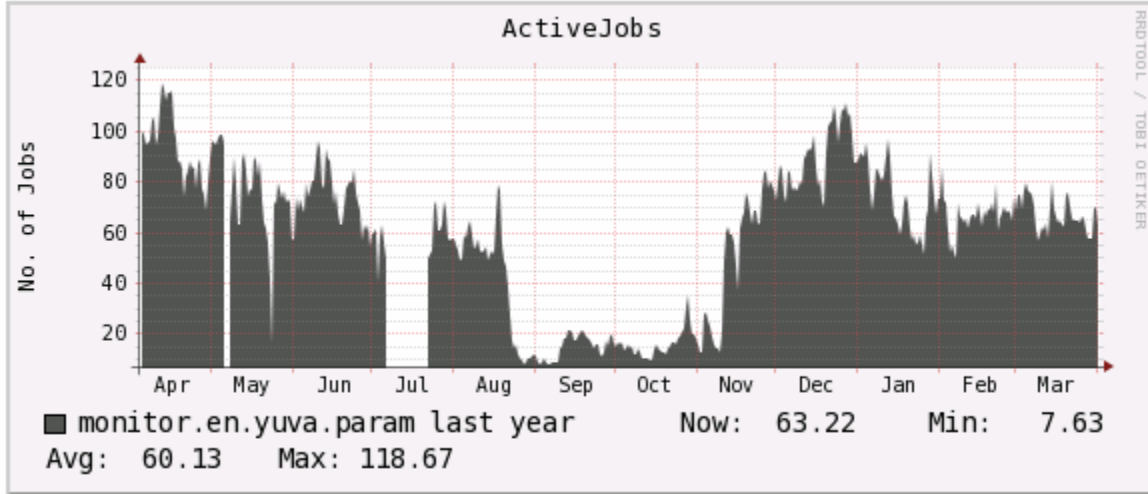


मई माह में “१ दिन २३ घंटे” और जुलाई माह में “७ दिन ९ घंटे” परम युवा द्वितीय क्लस्टर में अनुरक्षण गतिविधियाँ की गयी थी, जिसे ग्राफ में दर्शाया गया है। अगस्त से नवम्बर माह के बीच में पावर और शीतलन प्रणाली में अव्यवस्था के चलते परम युवा द्वितीय क्लस्टर आंशिक रूप से बंद किया गया था। गैंगलिया ग्राफ में परम युवा द्वितीय क्लस्टर आंशिक रूप से बंद स्थिति को सीपीयू में रिक्तता के रूप में दर्शाया गया है।

## जॉब कतारों में:

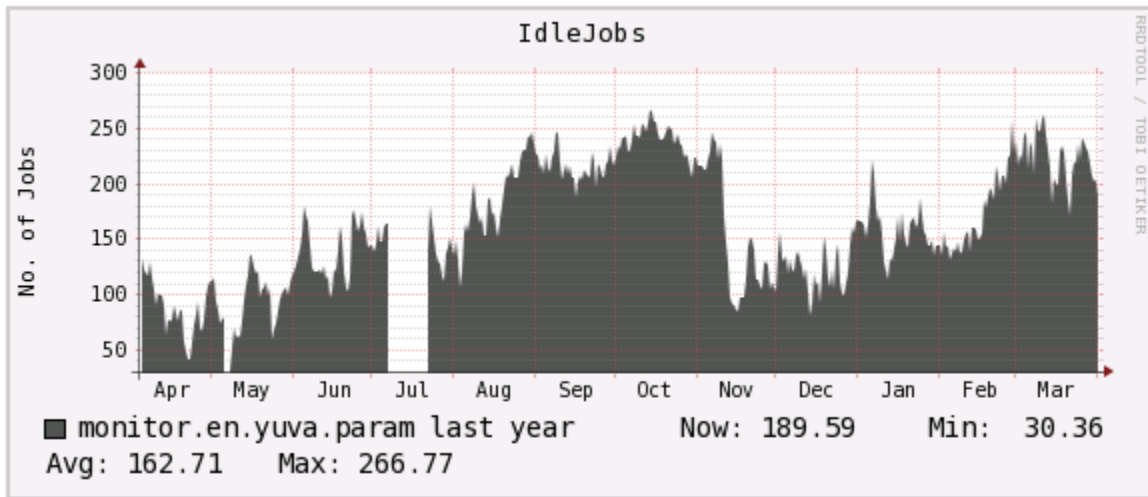
### रनिंग जॉब्स (क्रियाशील जॉब्स)

परम युवा द्वितीय - रनिंग जॉब्स, अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६



### कतार में प्रतीक्षा करते जॉब्स

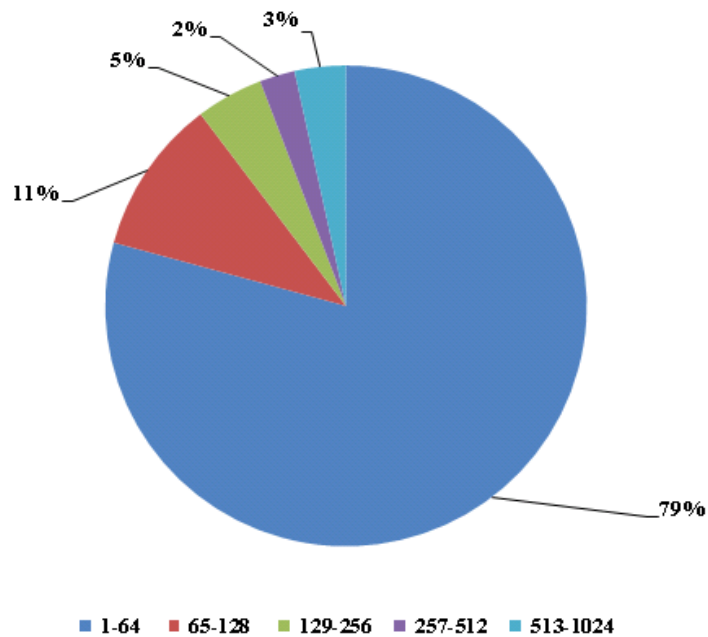
परम युवा द्वितीय - निष्क्रिय जॉब्स, अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६



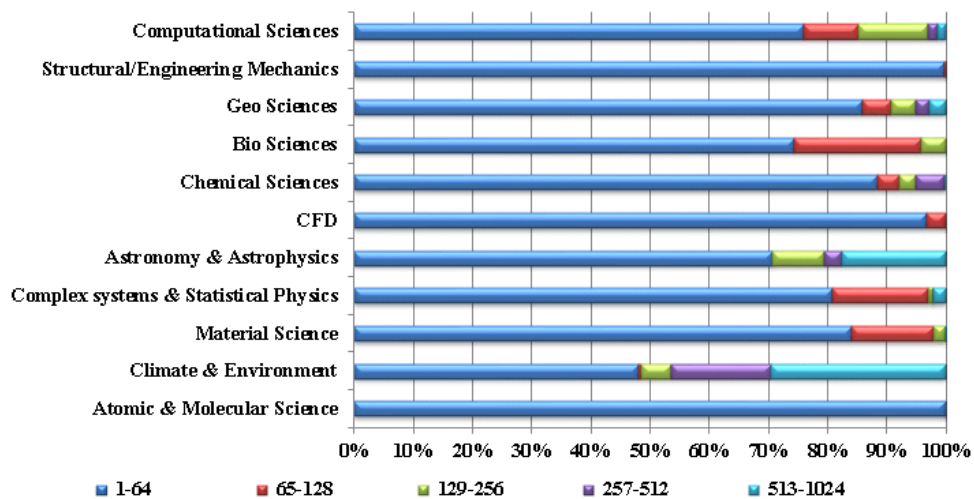
ऊपर दिए गए ग्राफ में हम ये देख सकते हैं कि १०० जॉब्स क्रियाशील हैं और करीब इतने ही जॉब्स हमेशा निष्क्रिय अवस्था में रहते हैं, यह ओर अधिक संसाधनों की आवश्यकता को दर्शाता है। अगस्त से नवम्बर माह के बीच में पावर और शीतलन प्रणाली में अव्यवस्था के चलते परम युवा द्वितीय क्लस्टर आंशिक रूप से बंद किया गया था। गैंगलिया ग्राफ में परम युवा द्वितीय क्लस्टर आंशिक रूप से बंद स्थिति को निष्क्रिय जॉब्स की संख्या में वृद्धि के रूप में दर्शाया गया है।

## सीपीयू उपयोगीकरण (अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६)

सीपीयू टाइम उपयोगीकरण की तुलना में सीपीयू कोर्स



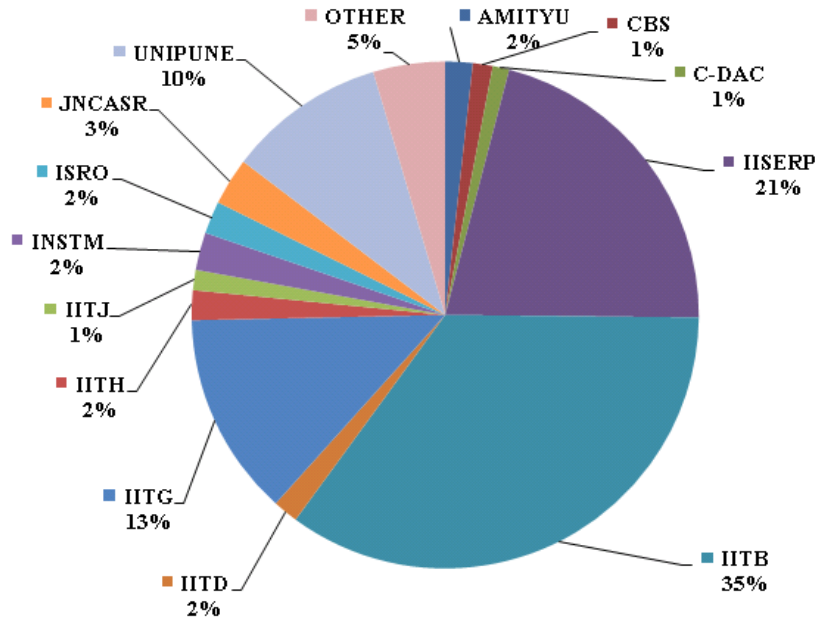
जॉब साइज (सीपीयू कोर्स) एप्लीकेशन डोमेन्स



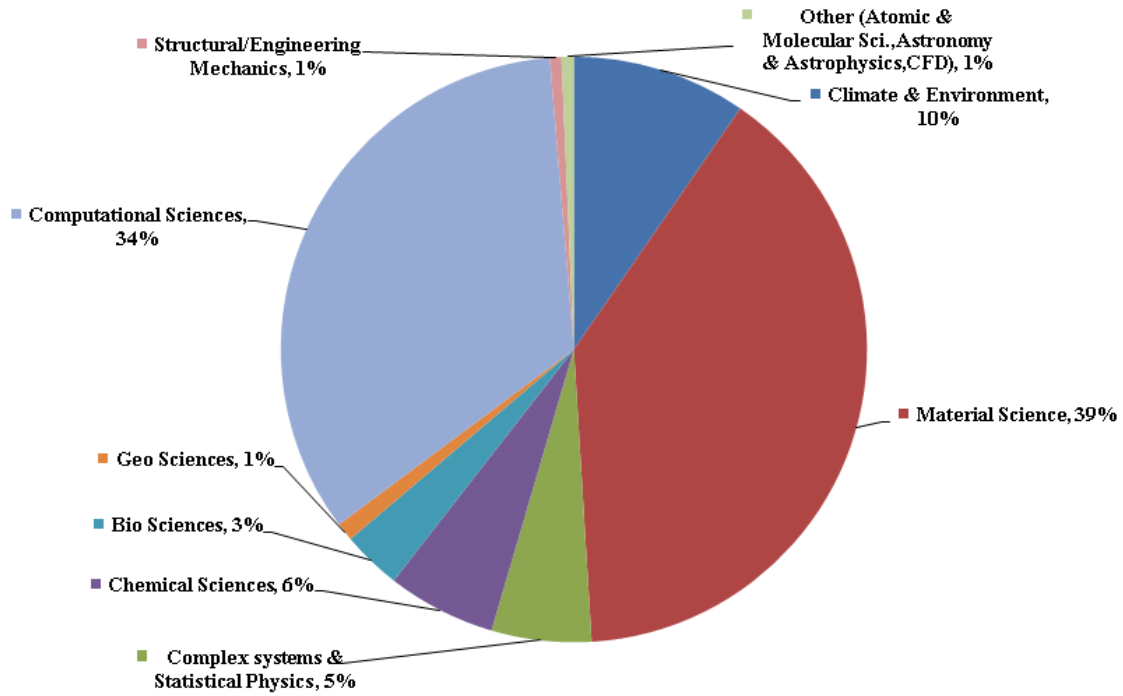
९ जॉब्स ने १०२४ से अधिक कोर का इस्तेमाल किया।

सी-डैक पुणे सिस्मिक ग्रुप में निर्मित होम ग्रोन कोड को २४९६ कोर तक चलाया जा चुका है।

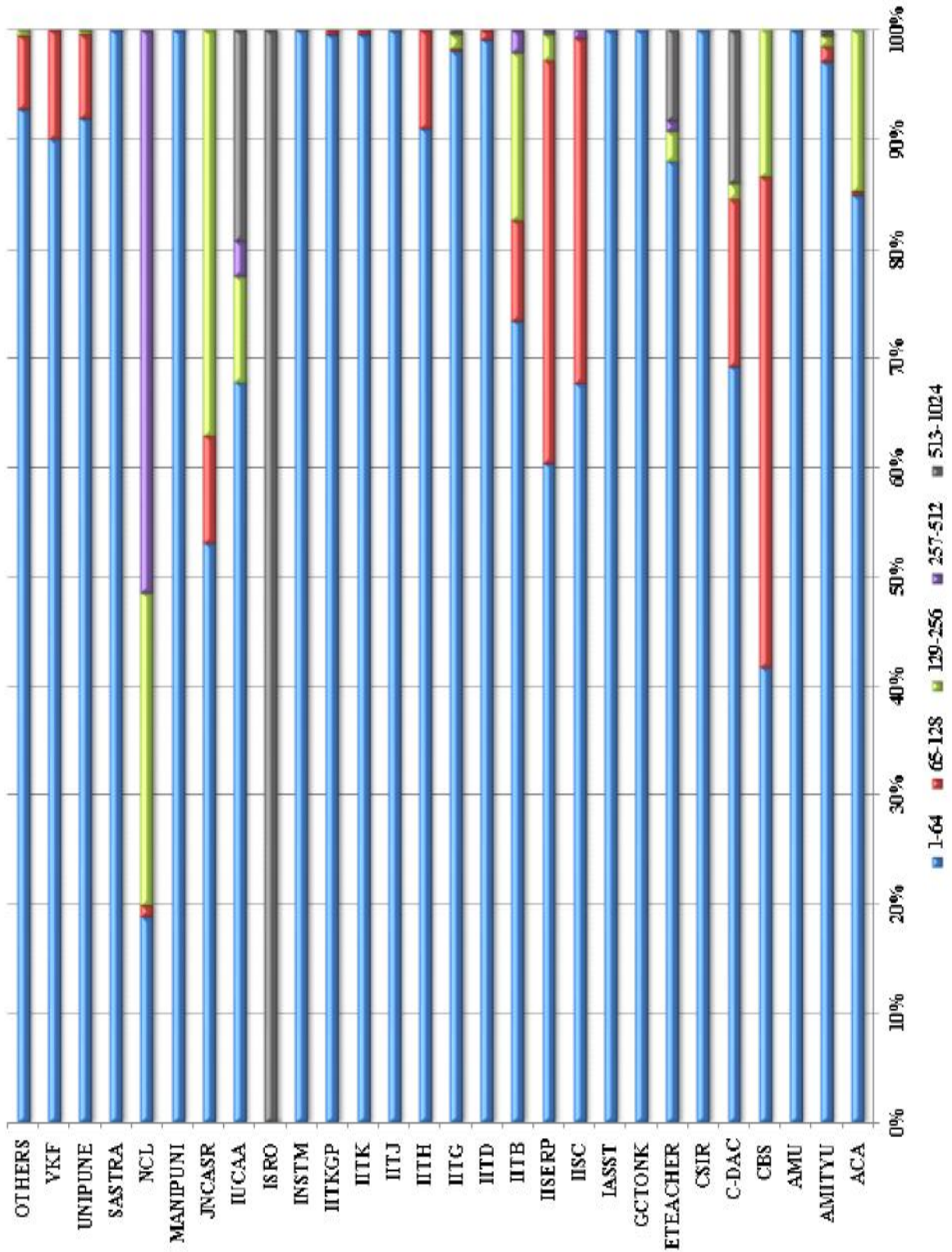
सीपीयू टाइम उपयोगीकरण संस्थानों द्वारा



सीपीयू टाइम उपयोगीकरण एप्लीकेशन द्वारा



जॉब्स के आंकड़े (अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६)



## उपयोगकर्ताओं :

जॉब्स की संख्या = ४८,०९४ (अप्रैल १, २०१५ - मार्च ३१, २०१६)

पूर्ण जॉब्स की संख्या = १,९२,७०८ (फेब्रुअरी १९, २०१३ - मार्च ३१, २०१६)

## जॉब्स ज्ञानक्षेत्रों में

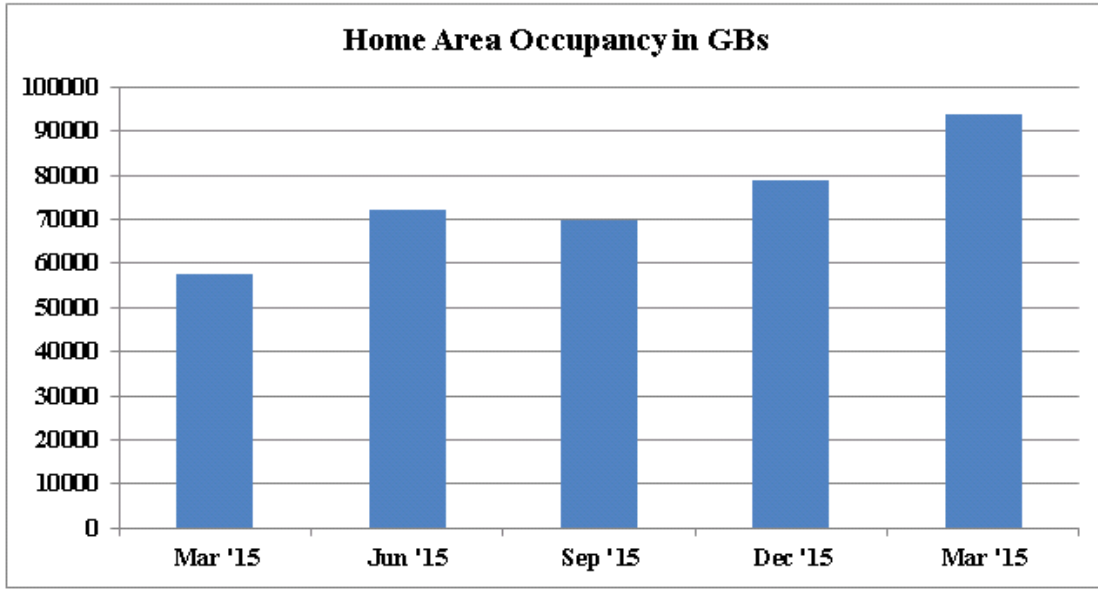
तालिका ५.३ जॉब्स विभिन्न क्षेत्रों में :

क्षेत्र	जॉब्स
एटॉमिक एंड मॉलिक्यूलर साइंस	२२८
क्लाइमेट एंड एनवायरनमेंट	४७३४
मटेरियल साइंस	२४२३१
काम्प्लेक्स सिस्टम्स एंड स्टैटिस्टिकल फिजिक्स	१४३२
एस्ट्रोनाॅमी एंड एस्ट्रोफिजिक्स	३४
सीएफडी	७९१
केमिकल साइंसेज	२०६६
बायो साइंसेज	१०३३
जीयो साइंसेज	१३५९
स्ट्रक्चरल/इंजीनियरिंग मैकेनिक्स	१३४०
कम्प्यूटेशनल साइंसेज	१०८४६
कुल	४८०९४

## संचयन उपयोग के आंकड़े :

परम युवा द्वितीय संचयन के आंकड़े नीचे तालिका में संक्षेप में दिये गये हैं। परम युवा द्वितीय होम एरिया अधिभोग के आंकड़े, संगृहीत डाटा परिमाण में बदलाव और फाइल्स की संख्या में बदलाव(योग/संशोधित) को नीचे दिए गए ग्राफ में दर्शाया गया है।



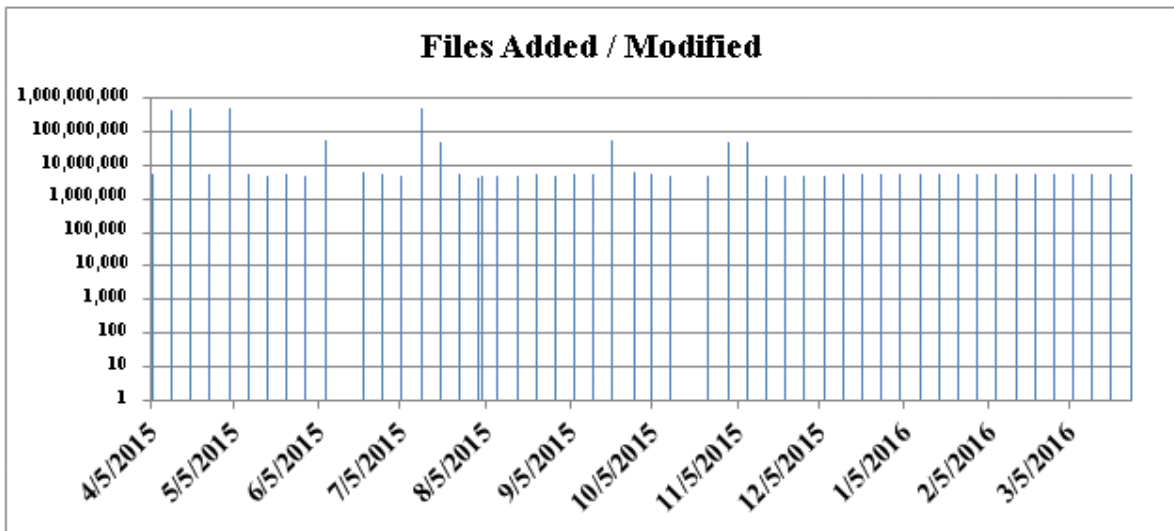
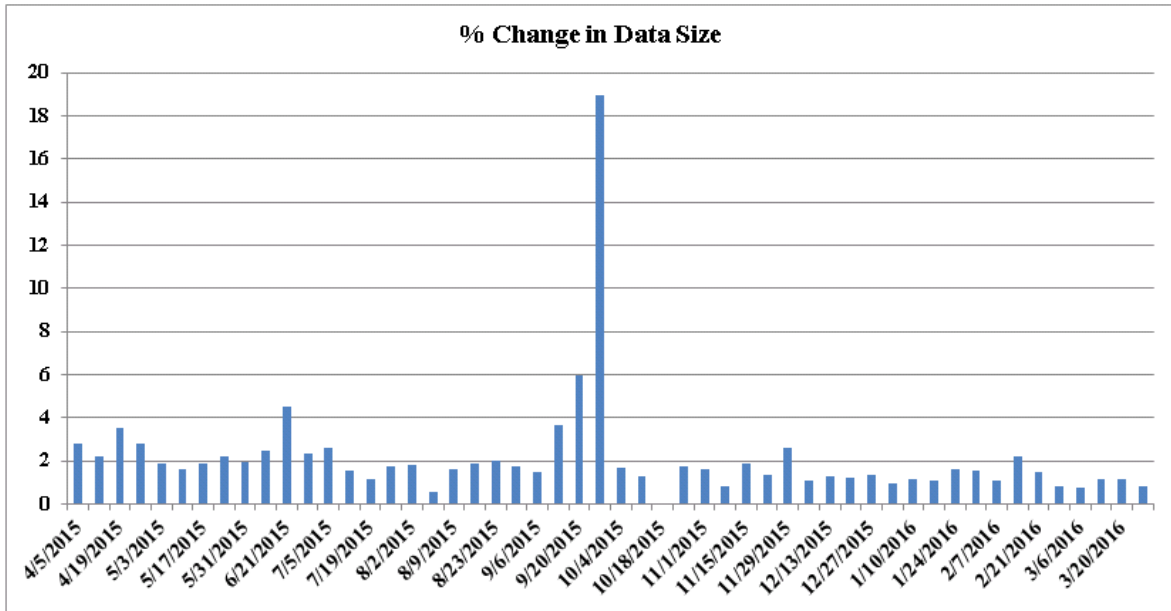


हर एक उपयोगकर्ता को संचयन में कोटा आवंटित किया गया है। इन सभी आवंटित कोटा का योग कुल संचयन का ९६% पहुँच गया है। आवंटित संचयन को घटाने के लिए निष्क्रिय उपयोगकर्ताओं के कोटा को कम करके न्यूनतम अंक पर निर्धारित किया गया है, और अभी कुल संचयन कोटा १७६.७८ TB, ८९.५१% तक पहुँच गया है। आने वाले वर्षों में इसके विस्तार की योजना बनाई गयी है।

इसके अलावा उपयोगकर्ताओं को निश्चित समय के लिए अतिरिक्त कोटा भी दिया जाता है। परम युवा द्वितीय होम एरिया में उपयोगकर्ताओं की ज्यादातर छोटी फाइल्स होती है पर संचयन का ज्यादा हिस्सा बड़ी फाइल्स ही उपभोग करती है। संचयन को होम और स्कैच एरिया में विभाजित किया गया है। यह देखा गया है कि करीब ८००० (१६.६%) जॉब्स स्कैच एरिया डाटा स्टेजिंग के लिए उपयोग किया गया है।

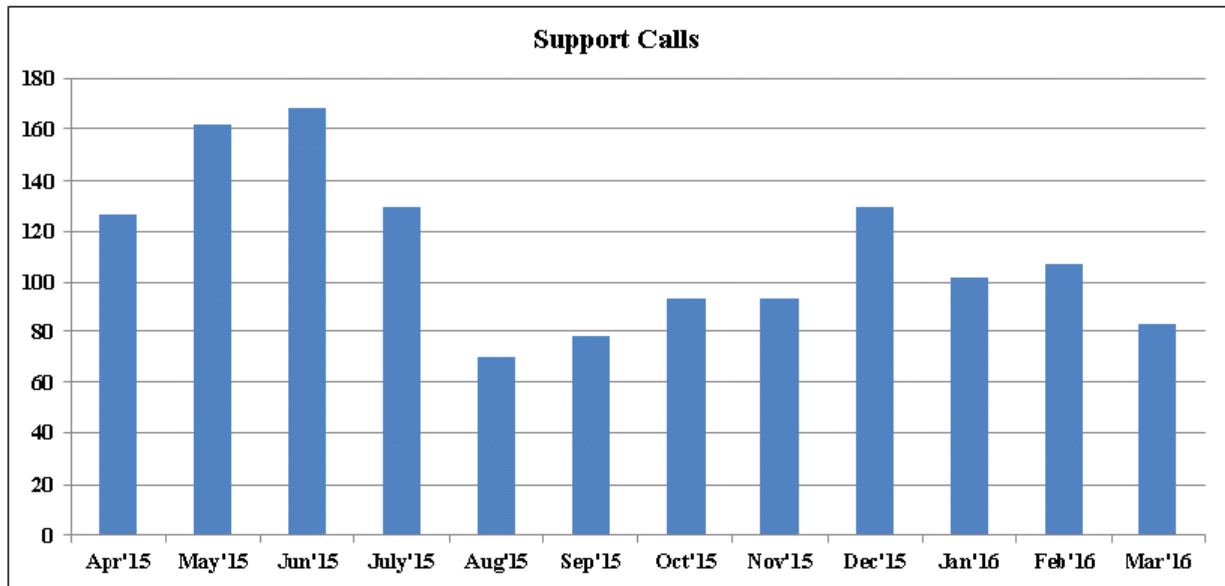
तालिका ५.४: परम युवा द्वितीय के संचयन में परिवर्तन

दिनांक	आकार(टेरा बाइट)	फ़ाइलों की संख्या
१३ अक्टूबर २०१५	८३.३७	६१,१४,१७३६
३१ मार्च २०१६	९४	१३,०२,६६,९२८



### उपयोगकर्ता सहायता अनुरोध:

परम युवा हेल्प टीम को करीबन ११२ उपयोगकर्ता अनुरोध हर महीने आते है। उपयोगकर्ता सहायता अनुरोध टेलीफोन, ईमेल, स्क्रीन सत्र और उपयोगकर्ताओ की उपस्थिति माध्यम द्वारा की जाती है। दर्शाया गया डेटा सिर्फ ईमेल से लिया गया है।



वित्तीय वर्ष २०१५-१६: संकलित उपयोगकर्ता: १२३; संकलित इंस्टीट्यूशनस : १६ ; जॉब्स प्रसंस्कृत: ४८०९४  
 अधिकतम कोर % (५१३ -१०२४ कोर) जलवायु और पर्यावरण एप्लीकेशन डोमेन के द्वारा इस्तेमाल किया गया है ।



## ६. संसाधन आवंटन कार्यक्रम

उपयोगकर्ताओं को उच्चतम सर्विस के लिए एक आवंटन कार्यक्रम "डेडिकेटेड स्लॉट बुकिंग फैसिलिटी" (डीएसबीएफ) की सुविधा दी गयी है, यह सुविधा उपयोगकर्ताओं को सामान्यतः उपयोग होने वाली बैच प्रसंस्करण प्रणाली सेवा से बेहतर गुणवत्ता प्रदान करती है। यह सुविधा उपयोगकर्ताओं को इन स्लॉट्स के दौरान उनकी जॉब्स के लिए प्रतिबद्ध किये हुए कंप्यूटर संसाधन के द्वारा इन विस्तारित अवधि में उनकी कंप्यूटिंग अभ्यास की योजना में मदद करती है। इस सुविधा का लाभ यह है कि जब तक जॉब्स के लिए प्रतिबद्धित संसाधन पूर्ण न हो जाए तब तक उनको दीर्घ समय तक बैच कतार में प्रारम्भ होने के लिए नहीं रहना पड़ता। इस योजना का प्राथमिक उद्देश्य यह है की उपयोगकर्ताओं को कैपेबिलिटी कॉन्सुटिंग और उनके एप्लीकेशन स्केलिंग अभ्यास के प्रति प्रोत्साहित किया जाए, जो कि पेटास्केल अभिकलन युग की तैयारियों के लिए आवश्यक है। हालांकि, वर्तमान में उपयोगकर्ताओं को अपने स्लॉट में बड़ी संख्या में छोटे जॉब्स को चलाने के लिए अनुमति है जो कि उनके स्लॉट का कुशल उपयोग है।

इस योजना के तहत उपयोगकर्ता ६४ नोड्स<sup>I</sup>, १५ दिनों की अधिकतम अवधि के स्लॉट<sup>II</sup> को आरक्षित करने का अनुरोध कर सकते हैं। डेडिकेटेड स्लॉट की घोषणा समय समय पर की जाती है और ये सुविधा एनपीएसएफ वेबसाइट <https://npsf.cdac.in> के माध्यम से दी जाती है। उपयोगकर्ता ये स्लॉट पहले आओ पहले पाओ के आधार पर आरक्षित कर सकते हैं। डीएसबीएफ के तहत स्लॉट बुकिंग के लिए स्लॉट का लाभ उठाने में उपयोगकर्ता समुदाय को निष्पक्षता सुनिश्चित करने के लिए, पात्रता मापदंड पहले से ही स्लॉट बुकिंग की घोषणा में निर्दिष्ट किया जाता है। उपयोगकर्ताओं से स्लॉट का उपयोग और किए गए कार्यों को दिए गए प्रारूप में एक विस्तृत रिपोर्ट के रूप में प्रस्तुत करने की अपेक्षा की जाती है।

६४ नोड्स के संसाधनों के ये स्लॉट्स एक विशेष तिथि और समय से प्रारम्भ हो कर एक निर्दिष्ट अवधि के लिए (२४ घंटे की अवधि के मात्रा में) उपलब्ध होते हैं। ये स्लॉट्स चेकपॉइंट सक्षम अनुप्रयोगों का उपयोग करनेवाले अन्तरायित जॉब्स को कुछ समय के पर्याप्त पुनःआरंभ करने की सुविधा के लिए इस्तेमाल किया जा सकते हैं। इन स्लॉट्स में उपयोगकर्ताओं से तत्काल संसाधनों की आवश्यकता के अनुरोधों को परिस्थिति के अनुसार समाविष्ट किया जाता है। समय सीमा के साथ, अनेक उपयोगकर्ताओं ने ये स्लॉट्स उनके जॉब्स के लिए प्रभावपूर्ण तरीके से उपयोगी हो सकते हैं ऐसा सूचीत किया है। इस दृष्टिकोण से, इन स्लॉट्स को डीएसबीएफ परिधि के अंतर्गत लाया गया है।

---

II स्लॉट की अवधि को dd:hh:mm:ss के प्रारूप में दर्शाया गया है।

Γ१ नोड = १६ सीपीयू कोर्स

\*\* उपयोगकर्ताओं को परियोजनाओं में संकलित किया गया है और हर परियोजना के एक मुख्य अन्वेषक है और उनसे संबंधित परियोजना खाते में सीपीयू टाइम डेबिट/क्रेडिट किया जाता है।

सीपीयू उपयोगिता की यही प्रक्रिया बैच प्रसंस्करण के साथ-साथ डीएसबीएफ के जॉब्स के लिए भी लागू होती हैं।

तालिका \*\* ६.१ डीएसबीएफ के तहत स्लॉट का सारांश

उपयोगकर्ता	मुख्य अन्वेषक	संस्था	क्षेत्र	प्रारंभ समय	अवधि	नंबर ऑफ़ नोड्स
२०१६						
श्री अंकित महतो	श्री अंकित महतो	आईआईटी, कानपुर	कंप्यूटर साइंस	२०१६-०३-११ १२:००:००: ०	२:१२:०:०	२
श्री अंकित महतो	श्री अंकित महतो	आईआईटी, कानपुर	कंप्यूटर साइंस	२०१६-०३-०७ १०:००:००: ०	४:७:१२:०	१
श्री सागर खावणेकर	डॉ अविनाश काले	सीबीएस, मुम्बई	बायो साइंस	२०१६-०२-२९ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री सागर खावणेकर	डॉ अविनाश काले	सीबीएस, मुम्बई	बायो साइंस	२०१६-०२-२२ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्रीमती रिचा रस्तोगी	श्रीमती रिचा रस्तोगी	सी-डैक, पुणे	जियो साइंस	२०१६-०२-२२ १२:००:००: ०	०:४:०:०	१५६
श्रीमती रिचा रस्तोगी	श्रीमती रिचा रस्तोगी	सी-डैक, पुणे	जियो साइंस	२०१६-०२-२२ १६:००:००: ०	०:५:०:०	१२८
श्री सुब्रह्मण्यम एस	डॉ प्रसेनजित घोष	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१६-०२-१५	७:०:०:०	६४

				१८:००:००: ०		
श्रीमती तन्मया करमारकर	श्रीमती तन्मया करमारकर	इ-टीचर	कंप्यूटर साइंस	२०१६-०२- १५ ००:००:०:०	७:१२:०:०	१
श्री रोहित बाबर	डॉ मुकुल कबीर	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१६-०२- ०८ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री देवाशीष दास	डॉ सुभ्रदीप घोष	आईआईटी, गुवाहाटी	मटेरियल साइंस	२०१६-०२- ०१ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्रीमती तन्मया करमारकर	श्रीमती तन्मया करमारकर	इ-टीचर	कंप्यूटर साइंस	२०१६-०१- २५ ०:८:५५:०	३८:९:५०: ०	४
श्री आशीस कुंडू	डॉ सुभ्रदीप घोष	आईआईटी, गुवाहाटी	मटेरियल साइंस	२०१६-०१- २५ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री चन्दन केआर सिंह	डॉ मुकुल कबीर	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१६-०१- १८ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री योगीश्वर अजजुगल	डॉ आर थेनमलारसे ल्वि	आईआईटी, हैदराबाद	बायो साइंस	२०१६-०१- ११ १८:००:००: ०	७:०:०:०	६४
२०१५						
श्रीमती तन्मया करमारकर	श्रीमती तन्मया करमारकर	इ-टीचर	कंप्यूटर साइंस	२०१५-१२- ३१ २०:३०:००: ०	०:३:३०:०	४



श्री अभिषेक श्रीवास्तव	श्रीमती रिचा रस्तोगी	सी-डैक, पुणे	जियो साइंस	२०१५-१२- १७ १८:००:००: ०	०:१२:०:०	६४
डॉ संदीप के जोशी	डॉ संदीप के जोशी	सी-डैक, पुणे	कंप्यूटर साइंस	२०१५-०९- ०२ १८:००:००: ०	०:१५:५०: ०	६४
डॉ संदीप के जोशी	डॉ संदीप के जोशी	सी-डैक, पुणे	कंप्यूटर साइंस	२०१५-०९- ०१ १८:००:००: ०	०:१५:५०: ०	६४
श्री वैभव कावरे	डॉ कविता जोशी	ऍनसीएल, पुणे	केमिकल साइंस	२०१५-०६- १५ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री सुब्रह्मण्यम एस	डॉ प्रसेनजित घोष	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१५-०६- ०८ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री सुब्रह्मण्यम एस	डॉ प्रसेनजित घोष	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१५-०६- ०१ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री संगखा बोरा	डॉ पी पद्म कुमार	आईआईटी, गुवाहाटी	केमिकल साइंस	२०१५-०५- १८ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री अर्णव मुखर्जी	श्री अर्णव मुखर्जी	आईआईएसईआर पुणे	वायो साइंस	२०१५-०५- ११ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४

डॉ अंजलि क्षीरसागर	डॉ अंजलि क्षीरसागर	एस पी पुणे यूनिवर्सिटी	मटेरियल साइंस	२०१५-०५- ०४ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
डॉ आर थेनमलारसेल्वि	डॉ आर थेनमलारसे ल्वि	आईआईटी, हैदराबाद	बायो साइंस	२०१५-०४- २७ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री आशीस कुंडू	डॉ सुभ्रदीप घोष	आईआईटी, गुवाहाटी	मटेरियल साइंस	२०१५-०४- २० १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री आशीस कुंडू	डॉ सुभ्रदीप घोष	आईआईटी, गुवाहाटी	मटेरियल साइंस	२०१५-०४- १३ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री नंदाकुमार	डॉ प्रसेनजित घोष	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१५-०४- ०६ १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४
श्री नंदाकुमार	डॉ प्रसेनजित घोष	आईआईएसईआर पुणे	मटेरियल साइंस	२०१५-०३- ३० १७:००:००: ०	७:०:०:०	६४

## ७. प्रमुख अनुसन्धान परियोजनाएं

परम युवा द्वितीय पर किए गए से उच्च प्रभाव पत्रिकाओं में शोध प्रकाशन पर आधारित प्रमुख अनुसंधान परियोजनाओं की सूची

- स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ आरएमए डुप्लेक्सेस कॉम्प्रेसिंग ट्राईन्यूकिलियोटाइड रिपीट एक्सपांशन  
डॉ. थैनमलारसेल्वी रथिनावेलनआईआईटी, हैदराबाद
- ऐब इनिशियो मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन ऑफ़ आयनिक लिक्विड डोपड पॉलीमर इलेक्ट्रोलाइट मैमब्रेन्स एंड प्लैटिनम इलेक्ट्रोड इंटरफ़ेस  
डॉ. अनुराग प्रकाश सुंदा, पंडित दीनदयाल उपाध्याय शेखावती युनिवर्सिटी, सीकर, राजस्थान
- इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर कैल्क्युलेशन्स ऑफ़ सेमीकंडक्टर  
प्रो. एस. वी. घैसास, एस. पी. पुणे यूनिवर्सिटी, पुणे
- मल्टीस्केल सिमुलेशन ऑफ़ शियर ऑफ़ मिसेलर सिस्टम्स  
डॉ. अप्रतिम चटर्जी, आईआईएसइआर, पुणे
- चाल्कोजेनइडस नैनोस्ट्रक्चर फॉर कैटालिटिक एंड एलेक्ट्रोकेमिकल एप्लीकेशन्स  
डॉ. पी मुरुगन, सीएसआईआर -सेंट्रल एलेक्ट्रोकेमिकल रिसर्च इंस्टिट्यूट, कराईकुडी, तमिलनाडु
- रिसर्च वर्क ऑन नैनोमटेरिअल्स  
डॉ. विजय कुमार, डॉ. विजय कुमार फाउंडेशन, गुडगाँव
- क्वांटम केमिकल स्टडीज ऑन अंडरस्टैंडिंग दी इंटरैक्शन्स ऑफ़ मोलेक्युल्स एंड मॉलिक्यूलरक्लस्टर्स विथ ग्राफीन एंड ग्राफडियाने  
डॉ. आर. एस. स्वाति, आईआईएसइआर, थिरुवनंतपुरम

- इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड स्केटरिंग डायनामिक्स  
डॉ. आदित्य पांडा, आईआईटी गुवाहाटी
- मटेरिअल्स मॉडलिंग एट डिफरेंट लेंथ एंड टाइम स्केल्स  
डॉ. मुकुल कबीर, आईआईएसइआर, पुणे
- स्टडी ऑफ़ स्ट्रक्चरल, इलेक्ट्रॉनिक एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ नैनोमटेरिअल्स  
डॉ. मृणालिनी देशपांडे, एचपीटी आर्ट्स एंड आरवायके साइंस कॉलेज, नासिक

---

++ परियोजनाओं की पूरी सूची के लिए परिशिष्ट अ देखें।

## ८. परम युवा द्वितीय उपयोगकर्ता द्वारा पीएचडी शोध प्रबंध

१. ट्रांसवर्सल पैटर्न फार्मेशन इन शेलो नॉन-अडीअबटीक पैकड बेड रिएक्टर्स (अप्रैल, २०१५)  
स्टूडेंट: श्री. के. नरेन्द्रन, डिपार्टमेंट ऑफ़ केमिकल इंजीनियरिंग, आईआईटी बॉम्बे  
सुपरवाइजर: प्रो. गणेश ए. विश्वनाथन
२. ऐब इनिशियो स्टडी ऑफ़ अनडोपड सिलिकॉन नेनोक्लसटर्स एंड ग्राफेन फॉर मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज - रोल ऑफ़ वैकेंसीज़ (जून, २०१५)  
स्टूडेंट: कु. प्रिया फ्रांसिस, डिपार्टमेंट ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक साइंस, एस. पी. पुणे यूनिवर्सिटी  
सुपरवाइजर: प्रो. एस. वी. घैसास
३. इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ पाई-कंजुगेटेड सिस्टम्स: ओलिगोआसन्स एंड ट्रिगोनाल ज़िगज़ैग ग्राफेन नैनोडिस्कस (जुलाई, २०१५)  
स्टूडेंट: श्री. हिमांशु चक्रवर्ती, डिपार्टमेंट ऑफ़ फिजिक्स, आईआईटी बॉम्बे  
सुपरवाइजर: प्रो. अलोक शुक्ला
४. थ्योरेटिकल स्टडीज ऑफ़ एटॉमिक एंड इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर ऑफ़ मेटल डोपड सेमीकंडक्टर क्लस्टर्स एंड देयर वाइब्रेशनल प्रॉपर्टीज (अगस्त २०१५)  
स्टूडेंट: कु. स्तुति जैस्वाल, वीकेएफ़, गुडगाँव एंड सनराइज यूनिवर्सिटी, अलवर राजस्थान  
सुपरवाइजर: प्रो. विजय कुमार (वीकेएफ़, गुडगाँव)
५. ऐब इनिशियो कैल्क्युलेशन्स फॉर डेटरमिनिंग दी डिफ्यूज़न बैरियर्स फॉर Cd,Te एंड Sulfur ऑन CdTe <111>सरफेस (सितम्बर, २०१५)  
स्टूडेंट: श्री. ऐबदोल्लाह नादेरी, डिपार्टमेंट. ऑफ़ फिजिक्स, एस. पी. पुणे यूनिवर्सिटी  
सुपरवाइजर: प्रो. एस. वी. घैसास, डिपार्टमेंट. ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक साइंस

६. इलेक्ट्रॉनिक, स्ट्रक्चरल एंड फाईनरिट टेम्परेचर स्टडीज ऑफ़ नैनोस्ट्रक्चर्ड मैटेरियल्स यूसिंग ऐब इनिशियो मेथड्स (०३ सितम्बर, २०१५)  
स्टूडेंट: श्री. वैभव कावरे, एस. पी. पुणे यूनिवर्सिटी  
सुपरवाइजर: प्रो. डी.जी. कान्हेरे एंड प्रो. अंजलि क्षीरसागर
७. प्रोटीन थर्मल स्टेबिलिटी, कांफोर्मेशनल डायनामिक्स एंड साल्वेंट प्रॉपर्टीज: इनसाइट्स विथ अटॉमिस्टिक मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिम्युलेशन्स (अक्टूबर, २०१५)  
स्टूडेंट: श्री. प्रथित चटर्जी, नेशनल केमिकल लेबोरेटरी, पुणे  
सुपरवाइजर : डॉ. नीलांजना सेनगुप्ता
८. इवैल्यूएशन ऑफ़ TanDEM-X इंटरफेरोमेट्रिक डिजिटल एलिवेशन मॉडल्स ओबटैनड ओवर वेरियस ट्रैन्स (अक्टूबर/नवम्बर, २०१५)  
स्टूडेंट: कु. रिंकी देव, सेंटर फॉर स्टडीज इन रिसोर्स इंजीनियरिंग, आईआईटी, बॉम्बे  
सुपरवाइजर: प्रो. व्हाई. एस. राव
९. डीएनएस स्टडीज ऑफ़ दी बाउंड्री लेयर ऑन अ लौ प्रेशर टरबाइन ब्लेड एट हाई इन्सिडेन्स (२७ नवम्बर, २०१५)  
स्टूडेंट: श्री. राजेश रंजन, इंजीनियरिंग मैकेनिक्स यूनिट, जेएनसीएसआर, बेंगलोर  
सुपरवाइजर: प्रो. रोहम नरसिम्हा
१०. डेवलपमेंट्स ऑफ़ एल्गोरिथ्मस फॉर एक्यूरेट एनर्जिटिक्स एंड स्पेक्ट्रा ऑफ़ मॉलिक्यूलर अग्रेगेट्स विदइन फ्रेगमेंटेशन एप्रोच (११ जनवरी, २०१६)  
स्टूडेंट: श्री. नित्यानंद साहू, एस. पी. पुणे यूनिवर्सिटी  
सुपरवाइजर : प्रोफेसर श्रीधर आर. गद्रे
११. अटोमिस्टिक इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ पॉलीमर इलेक्ट्रोलाइट मेम्ब्रेन नैनोस्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ मॉलिक्यूलर ट्रांसपोर्ट इन फ्यूल सेल्स (जनवरी, २०१४)  
स्टूडेंट: श्री. अनुराग पी. सुंदा, डिपार्टमेंट. ऑफ़ केमिस्ट्री, आईआईएसआर, पुणे  
सुपरवाइजर: प्रो. अरुण वेंकटनाथन

१२. ऐब इनिशिओ कैल्क्युलेशन्स ऑफ़ ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ क्लस्टर्स (जून, २०१४)  
स्टूडेंट: श्री. रविन्द्र एल. शिंदे, डिपार्टमेंट ऑफ़ फिजिक्स, आईआईटी, बॉम्बे  
सुपरवाइजर: प्रो. अलोक शुक्ला

---

वित्तीय वर्ष २०१५-१६ में पीएचडी छात्रों की कुल संख्या: १२ ( २०१४ में २ पीएचडी छात्र वित्त वर्ष २०१४-१५ में शामिल नहीं हुए थे)





## ९. परम युवा द्वितीय का प्रयोग विज्ञान

### एनपीएसएफ उपयोगकर्ताओं द्वारा प्रकाशित प्रकाशन

समकक्ष समीक्षित राष्ट्रीय और अंतर्राष्ट्रीय पत्रिकाओं में प्रकाशन (उनके प्रभाव तत्व के अनुसार)

निम्नलिखित प्रकाशन परम युवा द्वितीय उपयोगकर्ताओं द्वारा उपयोग के परिणामस्वरूप प्रकाशित हुए हैं। प्रकाशन उनके प्रकाशित पत्रिकाओं के प्रभाव कारकों द्वारा सूचीबद्ध हैं। शैक्षिक पत्रिका के प्रभाव तत्व पत्रिका में प्रकाशित हुए हाल के लेखों की प्रशंसात्मक उल्लेख की औसत संख्या के माप को दर्शाता है।

*न्यूक्लिक एसिड्स रिसर्च (९.११२)*

भारती रेड्डी कुन्दुरु, संजना अनिलकुमार नायर एंड थेनमलारसेल्वि रथिनावेलन, EK3D : एन इ. कोली के एंटीजन ३ डायमेंशनल स्ट्रक्चर डेटाबेस, एनउसीएल. एसिड्स आरइएस. ४४ (डी १), डी ६७५, (२०१६)

*जर्नल ऑफ़ मटेरियल केमिस्ट्री (७.४४३)*

अनुराग पी. सुंडा, अमोनियम-बेस्ड प्रोटिक आयनिक लिक्विड डोपड नाफ़िन मेम्ब्रेन एस अनहयड्रोस फ्यूल सेल इलेक्ट्रोलाइट, जे. मटेरियल चेम. ए ३, १२९०५ (२०१५)

*कार्बन (६.१९६)*

प्रिया फ्रांसिस, चिरंजीव मजूमदार एंड एस. वी. घैसास, दी नोंचालेन्त मैग्नेटिक मोमेंट इन ग्राफ़ेन, कार्बन ९१, ३५८ (२०१५)

*मैक्रोमोलेक्यूल्स (५.८)*

अमृता कुलकर्णी, आशीष लेले, स्वामीनाथन शिवाराम, पी.आर.राजामोहनं, सचिन वेलंकर एंड अप्रतिम चटर्जी, स्टार तेलेचेलिक पॉली(एल -लैकेटाइड) आईओनोमेर्स, मैक्रोमोलेक्यूल्स ४८(१८), ६५८०(२०१५)

*जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री सी (४.७७२)*

जे. कार्तिकेयन, वी. कुमार एंड पी. मुरुगन, दी रोल ऑफ़ वैलेंस इलेक्ट्रान कंसंट्रेशन इन ट्यूनिंग दी स्ट्रक्चर, स्टेबिलिटी, एंड इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ Mo6S 9-xix नैनोवायर, जे. फि. चेम. सी ११९, १३९७९(२०१५)

भीमा लिंगम चित्तारी एंड विजय कुमार, ऐब इनिशीओ स्टडीज ऑफ़ सेग्रीगेशन, ऑर्डरिंग, एंड मैग्नेटिक बिहेवियर इन (Fe-Pt)<sub>n</sub>, एन = ५५ एंड १४७ : डिजाईन ऑफ़ Fe<sub>75</sub>Pt<sub>72</sub> नानोपार्टिकल. जे. फि. चेम. सी ११९, ११०६२ (२०१५)

एस. चंद्र शेकर एंड आर. एस. स्वाती, काशन इंटरैक्शन्स एंड रॉटलिंग मोशन थ्रू ट्व-डायमेंशनल कार्बन नेटवर्क्स : ग्राफीन वस ग्राफीन्स, जे. फि. चेम. सी ११९, ८९१२ (२०१५)

हरिकृष्णा साहू एंड आदित्य एन. पांडा, हेलिकल एंड नॉन-हेलिकल स्ट्रक्चर ऑफ़ विनयलेन-एंड अज़ोमेथिन - लिंकड हेटेरोसायक्लिक ओलिगोमेरस : ए कम्प्यूटेशनल स्टडी ऑफ़ कांफोर्मेशन डिपेंडेंट ऑप्टोइलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज, जे. फि. चेम. सी ११९ (४०), २२८५५ (२०१५)

मुकुल कबीर, एंड क्रीस्टीन जे वैन वलैट, काइनेटिक्स ऑफ़ टोपोलोजिकल स्टोन-वेल्स डिफेक्ट फार्मेशन इन सिंगल वौल्ड कार्बन नैनोट्यूब्स, जे.फि.चेम.सी, (२०१५)(एक्सेप्टेड)

*फिजिकल केमिस्ट्री केमिकल फिजिक्स (४.४९३)*

मानसी एस. महाबल, मृणालिनी डी. देशपांडे, तनवीर हुसैन एंड राजीव आहूजा, सेंसिंग कैरक्टरिस्टिक्स ऑफ़ ए ग्राफीन-लाइक बोरोन कार्बाइड मोनोलेयर टुवडर्स सलेक्टेड टॉक्सिक गैसेस, फि. चेम. चेम. फि. १६, ३५५१ (२०१५)

*जर्नल ऑफ़ नैनोस्ट्रक्चर इन केमिस्ट्री (३.८४)*

एस. चोपड़ा एंड राय. बी., डीएफ़टी/टीडीडीएफ़टी स्टडी ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ सरफेस पैसिवेटेड सिलिकॉन नैनोक्रीस्टल्स, सिन (n= २०, २४, २६ एंड २८), जे. नैनोस्ट्रक्ट. चेम., ५, १९५ (२०१५)

*फिजिकल रिव्यू बी (३.७३६)*

भीमा लिंगम चित्तारी एंड वी. कुमार, एटॉमिक स्ट्रक्चर, अलोरिंग बेहेवियर, एंड मैग्नेटिज़्म इन स्माल Fe-Pt क्लस्टर्स, फि. रेव. बी (२०१५) (एक्सेप्टेड)

दीपिका, टी. जे. दिलीप कुमार, आलोक शुक्ला एंड राकेश कुमार, एज कॉन्फिगुरेशनल इफेक्ट ऑन बैंड गैप्स इन ग्राफेन नानोरीबनस, फि. रेव. बी ९१, ११५४२८ (२०१५)

टी. बासक, एच. चक्रवर्ती, एंड ए. शुक्ला, थ्योरी ऑफ़ लीनियर ऑप्टिकल अब्सॉर्प्शन इन डायमंड शेप्ड ग्राफेन क्वांटम डॉट्स, फि. रेव. बी ९२, २०५४०४ (२०१५)

*केमिकल फिजिक्स एंड फिजिकल केमिस्ट्री (३.४१९)*

एस. चोपड़ा, स्टडी ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक, ऑप्टिकल अब्सॉर्प्शन एंड एमिशन इन प्योर एंड मेटल डेकोरेटेड ग्राफीन नैनोरीबनस (C29H14-X): फर्स्ट प्रिंसिपल्स कैल्क्युलेशन्स, चेमफिचेम. १६(९), १९४८ (२०१५)

कुलकर्णी, एम. एंड मुखर्जी ए., कम्प्यूटेशनल एप्रोच टू एक्स्प्लोर दी बी/ए जंक्शन फ्री एनर्जी इन डीएनए, चेमफिचेम १७(१), १४७ (२०१६)

*जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री बी (३.३०२)*

सुब्रता पॉल एंड संदीप पॉल, एक्सप्लोरिंग दी कौन्ट्राक्टिंग मैकेनिज्म ऑफ़ ट्रेहलोस ऑन यूरिया कॉन्फेरेड प्रोटीन देनातुरेशन : ए मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी, जे. फि. चेम. बी ११९, ९८२० (२०१५)

भनिता शर्मा एंड संदीप पॉल, अंडरस्टैंडिंग दी रोल ऑफ़ टेम्परेचर चेंज एंड दी प्रजेस ऑफ़ NaCl साल्ट्स ऑन कैफीन एग्रीगेशन इन एक्वस सलूशन: फ्रॉम स्ट्रक्चरल एंड थेर्मोडायनामिक्स पॉइंट ऑफ़ व्यू, जे. फि. चेम. बी ११९, ६४२१ (२०१५)

सुब्रता पॉल एंड संदीप पॉल, मैकेनिज्म ऑफ़ हैडरोट्रोपिक एक्शन ऑफ़ हैडरोट्रोपि सोडियम क्यूमेने सुल्फोनेट ऑन दी सोलुबिलिटी ऑफ़ Di-t-Butyl-Methane: ए मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी, जे. फि. चेम. बी १२० (१), १७३ (२०१६)

के. आर. रम्या, प्रवीण कुमार एंड ए. वेंकटनाथन, मॉलिक्यूलर सिमुलेशनस ऑफ़ अनियन एंड टेम्परेचर डिपेंडेंस ऑन स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ 1-hexyl-3-methylimidazolium आयनिक लिक्विड्स, जे. फि. चेम. बी ११९, १४८०० (२०१५)

न्यू जर्नल ऑफ़ केमिस्ट्री (३.०८६)

एम. एम. देशमुख, एस. आर. गदरे एंड इ. जे. कोसिनेरो, स्टेबिलिटी ऑफ़ कांफोर्मेशनलली लॉकड फ्री फ्रुक्टोज़ : थ्योरेटिकल एंड कम्प्यूटेशनल इनसाइट्स, न्यू जे. चेम. (२०१५) (एक्सेप्टेड)

जर्नल ऑफ़ केमिकल फिजिक्स (२.९५२)

नलिनी गुरव, अनंत कुलकर्णी, श्रीधर गोज्जी, एंड राजीव पाठक, CH<sub>3</sub>OH... (H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> [n=1-4] क्लस्टर इन एक्सटर्नल इलेक्ट्रिक फ़ील्ड्स, जे. चेम. फि. १४२, २१४३०९ (२०१५)

जर्नल ऑफ़ फिजिक्स डी (२.७२१)

देवाशीष दास एंड सुभ्रदीप घोष, डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी बेस्ड कम्पेरेटिव स्टडी ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ ACr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (A=Mn,Fe,Co,Ni) कंपाउंड्स. जे. फी. डी: एप्लाइड फिजिक्स ४८, ४२५००१ (२०१५)

जर्नल ऑफ़ फिजिकल केमिस्ट्री ए (२.६९३)

एस. एस. राव, एन. बी. बीजॉय एंड एस. पी. गोज्जी. हाइड्रोजन बॉन्डिंग, 1H NMR एंड मॉलिक्यूलर इलेक्ट्रान डेंसिटी टोपोग्राफिकल करैक्टरइस्टिक्स ऑफ़ आयनिक लिक्विड्स बेस्ड ऑन एमिनो एसिड केशन्स एंड देयर एस्टर डेरिवेटिव्स. जे. फि. चेम. ए ११९, ८७५२ (२०१५)

गुरमीत सिंह, राहुल वर्मा एंड श्रीधर आर गदरे, अंडरस्टैंडिंग पैकिंग पैटर्न्स इन क्रिस्टल्स बाय एनालिसिस ऑफ़ स्माल अग्रिगेट्स: ए केस स्टडी ऑफ़ CS<sub>2</sub>, जे. फि. चेम. ए ११९, १३०५५ (२०१५)

जर्नल ऑफ़ दी अमेरिकन सिरेमिक सोसाइटी (२.६१०)

के. गंगा प्रसाद, मनीष के. निरंजन, साकेत अस्थाना, एंड आर. कार्तिकेयन, इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ रमन मोड्स एंड बोर्न-इफेक्टिव चार्जेज इन AgNb<sub>1/2</sub>Ta<sub>1/2</sub>O<sub>3</sub>: ए डेंसिटी-फंक्शनल एंड रमन स्कैटरिंग स्टडी, J. एम. सरम. सोच. ९९ (१), १ (२०१५)

अमोल बी. रहाणे, विजय कुमार, एंड जेनिफर एस. दुन्न, कार्बन डोपिंग इन बोरोन सबऑक्साइड : स्ट्रक्चर, एनेरजेटिक्स, एंड इलास्टिक प्रॉपर्टीज. जे. एम. सरम. सोच. ९८, २२२३ (२०१५)

*इंडस्ट्रियल एंड इंजीनियरिंग केमिस्ट्री रिसर्च (२.५८७)*

के. नरेन्द्रन, एंड जी. ए. विश्वनाथन, इम्पैक्ट ऑफ़ वाल हीट ट्रांसपोर्ट ऑन फार्मेशन ऑफ़ ट्रांसवर्सल हॉट ज़ोन्स इन शॉलओ, नॉन-अडीअबटीक पैकड-बेड रिएक्टर्स, एंड. इंग. चेम. रेस. ५४, ७३५२ (२०१५)

*जर्नल ऑफ़ मॉलिक्यूलर लिक्विड्स (२.५१५)*

सुब्रता पॉल एंड संदीप पॉल, इन्फ्लुएंस ऑफ़ टेम्परेचर ऑन दी सोल्वेशन ऑफ़ N-मेथिलसटमीडे इन एक्स ट्रेहलोसे सलूशन : ए मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन स्टडी, जे. मोल. लीक. २११, ९८६ (२०१५)

पी. एल. वर्मा, एस. एस. राव एंड स. पी. गेज्जी, प्रोबिंग मॉलिक्यूलर इंटरैक्शन्स अंडरलाइंग इमडाजोलिम एंड प्यरिदिनीम बेस्ड आयनिक लिक्विड्स, जे. मोल. लीक. २१२, ८८५ (२०१५)

एस. एस. राव, डी. एन. लांडे एंड एस. पी. गेज्जी, डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी इन्वेस्टिगेशन्स ऑन बाइंडिंग एंड स्पेक्ट्रल फीचर्स ऑफ़ कॉम्प्लेक्सेस ऑफ़ फरोसनयल डेरिवेटिव्स विथ क्यूकरबिट [७]उरिल, जे. मोल.लीक. २१६, ३०९ (२०१६)

एम. एन. शेवाले, डी. एन. लांडे एंड एस. पी. गेज्जी, एनकैप्सूलेशन ऑफ़ बेंज़िंदज़यले डेरिवेटिव्स वीथिन क्यूकरबिट [७]उरिल :डेंसिटी फंक्शनल इन्वेस्टिगेशन्स, जे. मोल. लीक. २१६, २९८ (२०१६)

*बाउंड्री-लेयर मीटरोलॉजी (२.४७)*

प्रशांत कुमार, बिमल के. भट्टाचार्य, एंड पी. के. पाल, इवैल्यूएशन ऑफ़ वेअदर रिसर्च एंड फोरकास्टिंग मॉडल प्रेडिक्शन्स उसिंग मिक्रोमेटोरोलोजिकल टावर ओब्सेर्वेशन्स, बाउंड्री-लेयर मीटरोलॉजी (२०१५) (एक्सेप्टेड)

*जर्नल ऑफ़ फिजिक्स: कंडेंसड मैटर (२.३४६)*

विकास काशिद, वैशाली शाह, एच. जी. सालुंके, वाय. मोक्रासोव एंड, एस. बलुइगेल, मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ 2D निकल नैनोस्ट्रिप्स : स्ट्रक्चर डिपेंडेंट मैग्नेटिज़्म एंड स्टोनर क्रिटेरिन, जे. फि.: कांड. मैटर २७, ३१६००२ (२०१५)

*जर्नल ऑफ एप्लाइड फिजिक्स (२.१८३)*

प्रभशरण कौर, एस. एस. सेखोन, जे. एम. जावद, एंड विजय कुमार. एनहांसड स्टेबिलिटी ऑफ Eu इन GaN नैनोपार्टिकल्स : इफेक्ट्स ऑफ Si को-डोपिंग, जे. एप्प. फि. ११७, २२४३०१ (२०१५)

भार्गव देका, आशीष कुंडू, सुभ्रदीप घोष एंड ए. श्रीनिवासन, एक्सपेरिमेंटल एंड ऐब इनिशओ स्टडीज ऑफ सब-लैटिस ऑर्डरिंग एंड मैग्नेटिज़्म इन Co<sub>2</sub>Fe (Ge 1-x Si X) अलॉयज. जे. एप्लाइड फि. ११८, १३३९०६ (२०१५)

*यूरो फिजिक्स लेटर्स (२.०९५)*

कौस्तुभ एस. अग्रवाल, राजीव के. पाठक एंड योगेश एन. जोगलेकर, एक्सएक्टली सॉल्वेल पीटी-सिमेट्रिक मॉडल्स इन ट्व डाइमेंशन्स, ईपीएल ११२ (३), ३१००३ (२०१५)

*कंप्यूटर्स एंड जियोसाइंस (२.०५४)*

आर. रस्तोगी, ए. श्रीवास्तव, के. खोंडे, के. सिरसला, ए. लोंडे एंड एच. चव्हाण, एन एफिसिएंट पैरेलल अल्गोरिथम : पोस्टक एंड प्रेस्तक किर्चहोफ 3D डेपथ माइग्रेसन उसिंग एक्सई-डेपथ इतरेशन्स, कंप्यूटर्स एंड जीओसाइंसेज ८०, १(२०१५)

*थ्योरेटिकल एंड एप्लाइड क्लिमातोलोजि (२.०१५)*

एस. नायक, एम. मंडल एंड एस. मैटी, कस्टोमाइजेशन ऑफ रीजनल क्लाइमेट मॉडल (RegCM4) ओवर इंडियन रीजन, थेओ. एंड एप्प. क्लिमा., (२०१५) (एक्सेप्टेड)

*सरफेस साइंस (१.९२५)*

नंदा कुमार एंड प्रसेनजित घोष, स्ट्रक्चर एंड स्टेबिलिटी ऑफ क्लीन एंड एडसोर्बते कवर्ड इंटरमेटॉलिक PdGa सरफेस : ए फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडी, सरफेस साइंस ६४४, ६९ (२०१६)

प्रदीप बी. शेलके एंड ए.वी. लिमये, डायनामिक्स ऑफ रैंडम सेकुएन्टिअल अडसोरप्शन (RSA) ऑफ लीनियर चेन्स कंसिस्टिंग ऑफ n सर्कुलर डिस्क-रोल ऑफ आस्पेक्ट रेश्यो एंड डिपार्चर फ्रॉम कॉन्वेक्सिटी. सरफेस साइंस ६३७, १ (२०१५)

*मॉलिक्यूलर फिजिक्स (१.७२०)*

एन. साहू, एस. एस. खीरे एंड एस. आर. गदरे, स्ट्रक्चर, एनेरगेटिक्स एंड विब्रेशनल स्पेक्ट्रा ऑफ़ (H<sub>2</sub>O)<sub>32</sub> क्लस्टर्स : ए जर्नी फ्रॉम मॉडल पोटेनटिल्स टू कॉर्रलेटेड थ्योरी, मोल. फि. (२०१५) (एक्सेप्टेड)

*मैटेरियल्स रिसर्च एक्सप्रेस (१.६४७)*

मनीष के. निरंजन, अनिसोट्रोपी इन इलास्टिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ TiSi<sub>2</sub> (C<sub>49</sub>, C<sub>40</sub> and C<sub>54</sub>), TiSi एंड Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>: एन ऐब इनिशिओओ डेंसिटी फंक्शनल स्टडी, मेटर. रेस. एक्सप्रेस २, ०९६३०२ (२०१५)

*कम्प्यूटेशनल एंड थ्योरेटिकल केमिस्ट्री (१.५४५)*

एस. राव एंड एस. पी. गेज्जी, मॉलिक्यूलर इनसाइट्स अककंपनयिंग एग्रीगेशन इन एमिनो एसिड आयनिक लिक्विड्स. कॉम्प. थेऔर. चेम. १०५७, २४ (२०१५)

*मॉलिक्यूलर सिमुलेशन (१.१३३)*

गोपाल कांधकुमार, मैलसमय जोति एंड पूमणि कुमारदास, प्रोबिंग दी इफेक्ट ऑफ़ निट्रो ग्रुप्स इन निटरमीने बेस्ड एनरजेटिक मोलेक्युल्स : ए DFT एंड चार्ज डेंसिटी स्टडी, मॉल. सिमुलेशन ४२ (३), १७३ (२०१५)

*कैनेडियन जर्नल ऑफ़ केमिस्ट्री (१.०६१)*

जी. कांधकुमार, सी. क्लिअरसी एंड पी. कुमारदास, स्ट्रक्चर एंड चार्ज डेंसिटी डिस्ट्रीब्यूशन ऑफ़ अमीने-अज़ीडे बेस्ड हैपरगोलिक प्रोपेलेंट मोलेक्युल्स : ए थ्योरेटिकल स्टडी, कैनेडियन जे. ऑफ़ चेम. (२०१६) (एक्सेप्टेड)

*पार्टिकुलेट साइंस एंड टेक्नोलॉजी (०.५२३)*

के. नवल, के. गोपी, बी. मनस्विता, ट्रांजीशन क्राइटेरिया फॉर फ्लूइडिज़्यु बेड्स रीविसिटेड, पार्टिकुलेट स्की. एंड टेक. ३३(४), ३९३ (२०१५)

*इंटरनेशनल जर्नल ऑफ़ एप्लाइड इंजीनियरिंग एंड टेक्नोलॉजी (०.३०२)*

बी. शिवाकुमार एंड ए. गोयल, जीओस्पैटियल इनफार्मेशन एक्सट्रैक्शन फ्रॉम मल्टीस्पेक्ट्रल सेंटलाइट इमेजरी थ्रू जीपीउ'स बेस्ड पैरेलल कम्प्यूटेशन एप्रोच, इन्ट. जे. ऑफ़ एप्प. इंगग. एंड टेक. ४, ६१ (२०१४)

### कांफ्रेंस प्रोसीडिंग्स

आदित्य ए. गुप्ते, ए. एम. प्रदीप, एंड पी. एम. मुजुमदार, न्यूमेरिकल एनालिसिस ऑफ़ सिंथेटिक जेट इन क्रोसफ़्लो, २२ आईएए कम्प्यूटेशनल फ्लूइड डायनामिक्स कांफ्रेंस, जून २०१५.

नीलेश मलतारे, एक्सपेरिमेंट टू एक्सप्लॉइट परललिस्म बय पैरेलल डिजाईन पैटर्न्स ऑन MPI क्लस्टर, एसीएम कांफ्रेंस पीडीपीटीए'१५, नेवडा यूएसए : दी २०१५ इंटरनेशनल कांफ्रेंस ऑन पैरेलल एंड डिस्ट्रिब्यूटेड प्रोसेसिंग टेक्निक्स एंड एप्लिकेशन्स.(एक्सेप्टेड)

के. नवल एंड बी. मनस्विता, CFD-DEM सिमुलेशन्स फॉर गैस सॉलिड फ्लो इन ए फ्लूइडिज़्युड बेड, APCChE २०१५: कांग्रेस इंकॉर्पोरेटिंग Chemeca 2015, मेलबोर्न, विक्टोरिया. पेपर नो. 3135330, सितम्बर -अक्टूबर २०१५.

नवल वी. कोरलकर, गोपी के. कृष्णा, मनस्विता बोस, स्टेबिलिटी क्राइटेरिया फॉर ट्रांजीशन फ्रॉम होमोजेनियस टू बुबब्लिंग फ्लूइडिजिजिऑ, PGBSIA-२०१३.

मोहन लबादे, विकास कुमार, एंड श्रीसाई मैहर, फ्लो सिमुलेशन स्टडीज ऑन एचपीसी प्लेटफार्म विथ जीपीयू एक्सेलरेटर, ४२ नेशनल कांफ्रेंस ऑन फ्लूइड मैकेनिक्स एंड फ्लूइड पावर, नेशनल इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी कर्नाटक, सूरतकल, दिसम्बर, २०१५.

नीलेश मलतारे, जनरेटिंग लार्ज प्राइम ऑन MPI क्लस्टर बय अप्पलईंग पैरेलल डिजाईन पैटर्न्स, ICICT २०१५ एंड स्पिंगर AISC सीरीज २०१५.(एक्सेप्टेड)

विकास काशिद, शांतनु कदम, एच. जी. सालुंके, अंजलि क्षीरसागर, दी स्ट्रक्चर एंड इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ़ MoS २ एंड WS २ मोनोलाएर कंपोजिट्स, डीएइ, सॉलिड स्टेट फिजिक्स सिम्पोजियम २०१५. (एक्सेप्टेड)

मनस्विता बोस, २०१६, वेलोसिटी डिस्ट्रीब्यूशन ऑफ़ पार्टिकल्स इन लौ वेलोसिटी प्रयूमेटिक कॉन्वेयिंग सिस्टम्स, इंटरनेशनल काम्प्लेक्स फ्लूइड्स कांफ्रेंस (कंपफ्लू - २०१६), आईआईसेर, पुणे, इंडिया, जनवरी, २०१६.



## १०. दौरे @ परम युवा द्वितीय

### अधिकारियों, शिक्षा और उद्योग के सदस्यों का दौरा

१. डॉ एस चौधरी, निदेशक (एस एंड टी) और निदेशक (प्रशासन), उत्तर पूर्वी परिषद, उत्तर पूर्वी क्षेत्र विकास मंत्रालय, भारत सरकार (अगस्त २०१५)
२. डॉ मनीष जिंटीम, पंजीयक, पीईसी प्रौद्योगिकी विश्वविद्यालय, चंडीगढ़ (अक्टूबर ९ '२०१५)
३. श्री जे एलन बर्ड, वैश्विक व्यवसाय विकास नेता, मैसाचुसेट्स इंस्टीट्यूट ऑफ टेक्नोलॉजी (एमआईटी), मैसाचुसेट्स (फ़रवरी ०४ ' २०१६)
४. प्रोफेसर बर्नार्ड सोंगवार, निदेशक, इंडिया सेशल्स सेंटर ऑफ एक्सिलेंस इन आइ सी टी, २९ फ़रवरी से २ मार्च, २०१६।
५. श्री एस ए कुमार, प्रमुख एचपीसी डिवीजन, इलेक्ट्रॉनिकी और सूचना प्रौद्योगिकी मंत्रालय (मार्च १०' २०१६)



श्री एस ए कुमार (बाएं से तीसरे), वैज्ञानिक 'एफ', प्रमुख, डिवीजन, इलेक्ट्रॉनिकी और सूचना प्रौद्योगिकी मंत्रालय

तालिका १०. १: छात्रों के औद्योगिक दौरो का सारांश

संस्था	आगंतु कों की संख्या	दौरे की तारीख
२०१५		
राजर्षि स्कूल ऑफ़ मैनेजमेंट एंड टेक्नोलॉजी, वाराणसी	४३	अप्रैल ०१
इंडियन नेवी	५०	अप्रैल २३
जीटीयू, गुजरात	१५	मई २१
एनआईटी, सिलचर	१०	जून ५
सिम्बायोसिस इंटरनेशनल यूनिवर्सिटी	३२	जुलाई २२
एक्ट्स, सी-डैक, पुणे	४३	जुलाई २४
जेइसीआरसी यूनिवर्सिटी, जयपुर	२६	अगस्त १३
के. जे. सोमैया कॉलेज ऑफ़ साइंस एंड कॉमर्स, मुम्बई	५५	अगस्त १३
डी. वाय पाटिल कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, तलेगांव	१००	अगस्त १७
डी. वाय पाटिल इंस्टिट्यूट मैनेजमेंट एंड रिसर्च, आकुर्डी	६२	अगस्त १७
एआईएसएसएएमएस, पुणे	७५	अगस्त २१
श्रीमती एस. एच. मनसुखानी इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी, उल्हासनगर	१०५	अगस्त २१
श्री चिथराथिरुन्नल कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, त्रिवेंद्रम	५२	अगस्त २५
मारवाड़ी एजुकेशन फाउंडेशन, राजकोट	३१	सितम्बर २
एम् एच साबू सिद्दीक कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, भायखला, मुम्बई	३०	सितम्बर ४
एम्जीएम् पॉलिटैक्रिक, औरंगाबाद	४६	सितम्बर ४
के. जे. इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी एंड मैनेजमेंट, बडोदरा	५३	सितम्बर १४
आर. जे. कॉलेज ऑफ़ आर्ट्स, साइंस एंड कॉमर्स, मुम्बई	५८	सितम्बर १८
इ-प्रोक्योरमेंट ट्रेनिंग	३५	सितम्बर ३०
एस एच जोधले पॉलिटैक्रिक, ठाणे	६०	अक्टूबर १२
भारती विद्यापीठ इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी	५४	अक्टूबर १५
एएसएम'स इंस्टिट्यूट ऑफ़ बिज़नस मैनेजमेंट एंड रिसर्च, पुणे	१००	अक्टूबर १६
बनस्थली विद्यापीठ, राजस्थान	१५	नवम्बर ४
कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, पुणे	१८	नवम्बर ६

२०१६		
भारत कॉलेज ऑफ़ आर्ट्स एंड कॉमर्स , ठाणे	४४	जनवरी १२
एक्सीलेरेटिंग बायोलॉजी , सी-डैक	२५०	जनवरी १९
कलसेकर कॉलेज , ठाणे	५०	जनवरी २१
एआईएसएसएएमएस, पुणे	६	जनवरी २७
डी-आईटीएसएस , एक्ट्स	४०	जनवरी २८
लत्थे पॉलिटिकल , सांगली	३३	फरवरी २
सार्वजनिक कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग एंड टेक्नोलॉजी, सूरत	३७	फरवरी ५
पीआईसीटी , पुणे	४४	फरवरी ११
विवेकानंद साइंस कॉलेज , बुल्धाना	१०३	फरवरी १२
वामनीकॉम , पुणे	३०	फरवरी १८
डॉ डी वाय पाटिल पॉलिटिकल, कोल्हापुर	४०	फरवरी २८
बाबरिया इंस्टिट्यूट ऑफ़ टेक्नोलॉजी , बडोदरा	९०	फरवरी २८
सीओइपी , पुणे	२०	मार्च ९
पीजी -डीबीडीए , एक्ट्स	२०	मार्च १०
डी वाय पाटिल पॉलिटिकल, तलसंदे , कोल्हापुर	४१	मार्च १८
पीइएस कॉलेज ऑफ़ इंजीनियरिंग, औरंगाबाद	३५	मार्च २८

वित्तीय वर्ष २०१५ -१६ में परम युवा द्वितीय आगंतुकों की कुल संख्या: २०५१



## अनुबंध अ परियोजनाएं @ परम युवा द्वितीय

परम युवा द्वितीय गणना समय का उपयोग कर विभिन्न संस्थानों से परियोजनाओं की सूची और मुख्य जांचकर्ता और उपयोगकर्ताओं की संख्या का ब्यौरा इस परिशिष्ट में शामिल किया गया है

तालिका अ.१ : परम युवा द्वितीय गणना समय का उपयोग कर रही परियोजनाओं की सूची

संस्था	परियोजना	मुख्य अन्वेषक	उपयोगकर्ताओं की संख्या
अहमदनगर कॉलेज	इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ सेमीकंडक्टिंग नैनो क्लस्टर्स यूसिंग फर्स्ट प्रिंसिपल कैल्क्युलेशन्स	डॉ. प्रदीप शेलके	१
अलीगढ मुस्लिम यूनिवर्सिटी	हायर आर्डर कैल्क्युलेशन्स इन फील्ड थ्योरी	डॉ. अब्बास अली	५
एमिटी यूनिवर्सिटी	डीएफ़टी बेस्ड केमिकल, स्ट्रक्चरल, ऑप्टिकल एंड मैग्नेटिक स्टडी ऑफ़ फंक्शनलाइज़ड ग्राफेन नेनॉरिबबोन्स	डॉ. सिद्धेश्वर चोपड़ा	१
अन्ना यूनिवर्सिटी	इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड रिलेटेड प्रॉपर्टीज ऑफ़ कंपाउंड सेमीकंडक्टर्स	डॉ. संकर सम्बाशिवं	२
बीएआरसी	स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ डिपोसिटेड मेटल क्लस्टर्स	डॉ. चिरंजीव मजूमदार	१
बिट्स-पिलानी हैदराबाद	कम्प्यूटेशनल फ्लूइड डायनामिक्स बेस्ड प्रोसेस मॉडलिंग, ऑप्टिमाइजेशन एंड स्केल-अप ऑफ़ फ्लोटेशन सेल	डॉ. जीवन जैदी	२
सीबीएस, मुम्बई	कांफोर्मेशनल डायनामिक्स ऑफ़ एक्टिन एंड इट्स रेगुलेटर्स	डॉ. अविनाश काले	२
सीआईएफ़आरआई, कोलकाता	बायो-प्रोस्पेक्टिंग ऑफ़ गेन्स एंड एलील माइनिंग फॉर आबिओटिक स्ट्रेस टॉलरेंस	डॉ. बिजय कुमार बेहेरा	२
सीएमआरसीइटी, हैदराबाद	डिटेक्टिंग नियर डुप्लिकेट्स फॉर वेब क्रावलिंग	श्री वराहबतला नारायणा	२

करनेगीए मेलॉन यूनिवर्सिटी	अडसरप्शन ऑफ आयनिक लिक्विड्स ऑन ग्राफेन सरफेस	डॉ. नीलेश आर. धूमाल	१
सीइसीआरआई, कराईकुडी	मेटल चॉकोजनीदेस नैनोस्ट्रक्चर फॉर कैटेलिटिक एंड एलेक्ट्रोकेमिकल एप्लिकेशन्स  फाईनार्ड टेम्परेचर बेहेवियर ऑफ एटॉमिक क्लस्टर्स एंड नैनो-कार्बन मैटेरियल्स	डॉ. पी. मुरुगन  डॉ. शैलजा कृष्णमूर्ती	१  ३
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ बिहार	मॉलिक्यूलर डायनामिक्स स्टडी ऑफ थर्मो- स्टेबिलिटी ऑफ एचएल प्रोटीन	डॉ. कृष्णा कुमार ओझा	१
सेंट्रल यूनिवर्सिटी ऑफ गुजरात	कम्प्यूटेशनल एप्रोच टू द डेवलपमेंट ऑफ नैनोस्ट्रक्चर कैटेलिस्ट ऑफ हाइड्रोजन प्रोडक्शन  कंप्यूटर मॉडलिंग ऑफ स्किन सेंसिटाइजेशन पोटेंटियालस एंड रेअक्टिविटी ऑफ केमिकल्स	डॉ. प्रकाश सी. झा  डॉ. प्रकाश सी. झा	२  २
सीओइपी, पुणे	फ्लो अराउंड ए बंडल ऑफ स्क्वायर सिलिंडर	डॉ. सी. एम. सेवतकर	२
दिल्ली यूनिवर्सिटी	एमड सिम्युलेशन्स प्रोजेक्ट ऑफ दिल्ली यूनिवर्सिटी	प्रो. पारवती बिस्वास	२
इ-टीचर	एचपीसी प्रोग्राम एनालिसिस ए रिप्रजेंटेशन टूल्स टू प्रोवाइड बैकेंड फॉर एन ऑन-लाइन इंजीनियरिंग इ-टीचर	डॉ. नरेंद्र करमारकर	४
जीएलए यूनिवर्सिटी, मथुरा	थ्योरेटिकल इन्वेस्टीगेशन ऑफ नावेल मैटेरियल्स एप्लिकेशन्स इन द फील्ड ऑफ इलेक्ट्रॉनिक्स एंड ऑप्टोइलेक्ट्रॉनिक डिवाइसेस	डॉ. ब्रम्हा प्रसाद पांडेय	१
गवर्नमेंट कॉलेज, टोंक	स्टडी ऑफ पी-एंड पी, टी-ओड इफेक्ट्स इन हैवी पोलर डीएटोमिक्स	डॉ. मनु सिकरवार	१
गुरुनानक देव यूनिवर्सिटी	टू स्टडी द एटॉमिक एंड इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर ऑफ III-V सेमीकंडक्टर नैनोस्ट्रक्चर	प्रो. एस. एस. सेखोन	१
गुजरात टेक. यूनिवर्सिटी अहमदाबाद	अडाप्टिव पैरेलल डिजाईन पैटर्न फॉर मल्टीकोर	श्री नीलेश मलतारे	१
हिमाचल प्रदेश यूनिवर्सिटी	फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टेटिक, डायनामिक एंड इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ लिक्विड मेटल अलॉयज	प्रो. प्रदीप के अहलूवालिया	३

एचपीटी आर्ट्स एंड आरवायके साइंस कॉलेज, नासिक	थ्योरेटिकल स्टडी ऑफ स्ट्रक्चरल, इलेक्ट्रॉनिक एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ नैनोमटेरिअल्स	डॉ. मृणालिनी देशपांडे	२
	इलेक्ट्रॉनिक प्रॉपर्टीज ऑफ TM डोपड ZnO शीट: डेंसिटी फंक्शनल स्टडी	डॉ. मृणालिनी देशपांडे	३
आईएसएसटी, गुवाहाटी	ऐब इनिशिओ कैल्क्युलेशन्स ऑफ शेप मेमोरी हैउसलेर अलॉयज	डॉ. मुनिमा बी. सहरियाह	३
	न्यू n-type आर्गेनिक सेमीकंडक्टर्स फॉर ऑप्टोइलेक्ट्रॉनिक्स सिंथेसिस कैरेक्टराइजेशन : एंड डिवाइस फेब्रिकेशन	डॉ सागर शर्मा	१
आईआईए, बेंगलोर	कम्प्यूटेशनल मेनी बाँडी थ्योरी ऑफ एटम्स एंड मोलेक्युल्स	प्रो. भानु प्रताप दास	१०
	न्यूमेरिकल सिमुलेशन्स ऑफ हैडरोमेग्नेटिक टर्बुलेन्स फ्रॉम गैलेक्सीज टू सन	डॉ शरण्य सुर	२
आईआईआईटी, दिल्ली	एक्स्प्लोर दी बेनिफिट ऑफ डीप न्यूरल नेटवर्क फॉर वेरियस टास्कस रिलेटेड टू इगोसॅट्रिक वीडियोस	डॉ चेतन अरोरा	४
आईआईआईटी, हैदराबाद	सिमुलेशन ऑफ फॉल्ट मोशन एनालिसिस कोलेप्स बिहेवियर ऑफ बिलिंडिंग्स सब्जेक्टेड टू अर्थकुएक्स	डॉ रामनचरल प्रदीप कुमार	३
आईआईइससी बेंगलोर	दी प्रोसेस ऑफ प्रोटीन फोल्डिंग /एग्रीगेशन विहच आर रेस्पॉसिबल फॉर स्पीशीज सच अस अल्लेइमेर्स	डॉ गोवर्धन पी रेड्डी	१
	डिफेक्ट्स इन ऑक्सीडेस	डॉ मनीष जैन	४
	ए रोबस्ट मिडिलवेयर फॉर जॉब मैनेजमेंट इन सुपरकंप्यूटर सिस्टम्स	प्रोफ सतीश वाडियार	१
	कम्प्यूटेशनल एलेक्ट्रोमैग्नेटिक्स ऑन इंटेल् मिक्	श्री योगिंदर कुमार नेगी	१



आईआईएसइआर , पुणे	मेकैनिस्टिक इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ फोटो टोटोमेरीजेशन एंड फ्लुओरेसेंस कुइंचिंग	डॉ अनिबान हाज़रा	४
	मल्टीस्केल सिम्युलेशन ऑफ़ शेअर ऑफ़ मिसेलर सिस्टम्स	डॉ अप्रतिम चैटर्जी	३
	कोरस ग्रेन्ड मॉडल्स फॉर एक्टिव मेटर सिम्युलेशन्स	डॉ अप्रतिम चैटर्जी	२
	मॉडलिंग सेमीफलेक्सिबल पॉलीमेरिक सेल्फ एसेम्बली यूसिंग अ नॉवेल २-बॉडी पोटेंशियल	डॉ अप्रतिम चैटर्जी	२
	सॉफ्ट मेटर इन एक्सटेंशनल फ्लो यूसिंग कोर्से ग्रेन्ड सिम्युलेशन्स	डॉ अप्रतिम चैटर्जी	२
	स्ट्रक्चरल डिफॉर्मेशन्स ऑफ़ डीएनए एंड रिलेशन टू इंटरकैलाशन मेकैनिज़म	श्री अर्णव मुखर्जी	७
	मॉलिक्यूलर मॉडलिंग एंड डायनामिक्स ऑफ़ पॉलीमर्स, गैस हैड्रॉट्स एंड आयनिक लिक्विड्स : एन अल्टरनेटिव एनर्जी इनिशिएटिव	प्रो. अरुण वेंकटनाथन	८
	मैटेरियल्स मॉडलिंग एट डिफरेंट लेंथ एंड टाइम स्केल्स	डॉ मुकुल कबीर	५
	स्टडी ऑफ़ CdS एंड CdTeS क्वांटम डॉट्स डेकोरेटेड ओन TiO <sub>2</sub> नैनोवायर्स	डॉ प्रसेनजित घोष	७
	सेलेक्टिव हैड्रोजनेशन ऑफ़ एसिटिलीन ओन Pd/Ga इंटरमेटॉलिक कंपाउंड्स	डॉ प्रसेनजित घोष	३
कंप्यूटिंग ट्रांसलोकेशन टाइम ऑफ़ पॉलीपेप्टिडेस यूसिंग माइलस्टॉर्मिंग रिसर्च	डॉ श्रावती चौधरी	२	
कैटेलिस्ट डिजाइन फॉर मॉलिक्यूलर -H स्प्लिटिंग	डॉ मुकुल कबीर	३	

	वेकैसी डिफ्यूजन इन ग्राफेन	डॉ मुकुल कबीर	२
	माइक्रोस्कोपिक मैकेनिज्म फॉर मीथेन हाइड्रेट फार्मेशन	डॉ मुकुल कबीर	३
	O2 मॉलिक्यूल स्प्लिटिंग एंड डिफ्यूजन ओन LaMnO3 सरफेस	डॉ मुकुल कबीर	३
	क्वांटम केमिकल कैल्क्युलेशन्स ऑफ़ दी एनेर्जेटिक्स एंड वाइब्रेशनल फ्रीक्वेंसीस ऑफ़ नॉन-कोवलेटली बॉन्डेड एरोमेटिक कॉम्प्लेक्सस रिलेवेंट टू बायोलॉजी	डॉ आलोके दास	४
	कवरिंग अरेज़ एंड सॉफ्टवेर टेस्टिंग	डॉ सौमेन मैती	३
आईआईएसइआर , मोहाली	सिम्युलेशन एवोल्यूशन ऑफ़ न्यूट्रल हाइड्रोजन इन गैलेक्सीज इन दी अर्ली यूनिवर्स	प्रो. जसजीत बागला	१
आईआईएसइआर , थिरुवनंतपुरम	क्वांटम केमिकल स्टडीज ओन अंडरस्टैंडिंग दी इंटरैक्शन्स ऑफ़ मोलेक्युल्स एंड मॉलिक्यूलर क्लस्टर्स विथ ग्राफीन एंड ग्राफडाईन	डॉ आर एस स्वाति	३
आईआईटी, भुवनेस्वर	एयरोडायनामिक कैरेक्टराइजेशन ऑफ़ नेचुरल लैमिनार फ्लो	डॉ योगेश जी भूमकर	२
आईआईटी, मुंबई	हार्ड परफॉर्मन्स कंप्यूटिंग इनिशिएटिव	प्रो. अमिताभ भट्टाचार्य	१५०
	डेवेलोपमेंट ऑफ़ गॉर्किन मेथड्स	डॉ एस गोपालकृष्णन	१
आईआईटी, दिल्ली	टेस्टिंग ऑफ़ CISM मॉडल	प्रो. कृष्णा एम अच्युताराव	३
	मॉलिक्यूलर डायनामिक्स एंड ट्रेजेक्टरी एनालिसिस	डॉ मनीष अग्रवाल	१
	सिस्टम फॅमिलीअराइजेशन	प्रो. सुबोध कुमार	१
	अनसर्टेनिटी क्वांटिफिकेशन टुवर्ड्स इम्प्रोविंग दी पैरामेटराइजेशन फॉर प्रेसिपिटेशन स्कावेंजिंग ऑफ़ ऐरोसॉल्स इन अ जनरल साईक्यूलैशन मॉडल	डॉ दिलीप गांगुली	३

आईआईटी, गांधीनगर	हाई फिडेलिटी कम्प्यूटेशनल इंजीनियरिंग	प्रो. मुरली दामोदरन	६
	यूसिंग कम्प्यूटेशनल अप्रोचेस MD एंड QM गेन इनसाइट इनटू hOGT मैकेनिज्म	डॉ साईराम एस मल्लाजोस्यूला	२
आईआईटी, गुवाहाटी	इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स	प्रो. आदित्य एन पांडा	३
	इलेक्ट्रान मॉलिक्यूल स्कैटरिंग	डॉ मानबेंद्र सरमा	३
	अटोमिस्टिक सिम्युलेशन ऑफ फ्रास्ट आयन ट्रांसपोर्ट इन सॉलिड्स	डॉ पद्मकुमार पद्मनाभन	३
	फर्स्ट प्रिंसिपल्स बेस्ड इन्वेस्टिगेशन्स ऑफ शेप मेमोरी अलॉयज एंड ऑक्साइड मल्टीफेरोइक्स	प्रो. सुभ्रदीप घोष	२
	इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर एंड मैग्नेटिक प्रॉपर्टीज ऑफ स्पिनेल मल्टीफेरोइक्स	प्रो. सुभ्रदीप घोष	२
	सर्च फॉर न्यू मल्टीफन्क्शनल मैग्नेटिक मैटेरियल्स इन हैउसलेर स्ट्रक्चर	प्रो. सुभ्रदीप घोष	२
	ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ पेरोव्स्काइट बेस्ड सोलर सेल्स	प्रो. सुभ्रदीप घोष	१
	हाइड्रोफोबिक इंटरैक्शन्स इन डिफरेंट केमिकल एनवायरनमेंट	डॉ संदीप पॉल	५
	एप्लीकेशन ऑफ स्मूथ एक्सटीरियर स्केलिंग मेथड	प्रो. आशीष कुमार गुप्ता	२
	कम्प्यूटेशनल स्टडीज ऑफ अलोस्टेरिक मैकेनिज्म ऑफ SAMHD1	डॉ स्वाति भट्टाचार्य	२
आईआईटी, हैदराबाद	फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडीज ओन ऑप्टिकल सुपरकंडक्टिंग मैटेरियल्स	डॉ वी कंचना	५
	स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ RMA डुप्लेक्सेस कॉम्प्रेसिंग ऑफ ट्राईनुक्लेओटीड रिपीट एक्सपांशन	डॉ थेमलारसेल्वी राथीनवेलन	१

	<p>स्ट्रक्चर एंड डायनामिक्स ऑफ़ इ-कोली आउटर मेम्ब्रेन लेक्टिन</p> <p>फर्स्ट प्रिंसिपल स्टडी ऑफ़ सरफसेस एंड इंटरफसेस</p> <p>इंवेस्टिगेटिंग सिस्मिक सोर्स फिजिक्स इंकलूजन इनटू इंजीनियरिंग एनालिसिस ऑफ़ बिल्ट-एनवायरनमेंट</p>	<p>डॉ थेमलारसेल्वी राथीनवेलन</p> <p>डॉ मनीष कुमार निरंजन</p> <p>डॉ सुरेंद्र नाथ सोमला</p>	<p>२</p> <p>३</p> <p>२</p>
आईआईटी, जोधपुर	<p>मैग्नेटिक फंक्शनलाईजेशन एंड मैग्नेटोट्रांसपोर्ट प्रॉपर्टीज ऑफ़ ग्राफेन</p> <p>थ्योरेटिकल स्टडी ओन लिथियम आयन बैटरीज</p> <p>केमिकल डायनामिक्स सिम्युलेशन्स ऑफ़ काम्प्लेक्स आर्गेनिक रिएक्शन्स : मेकैनिस्टिक इनसाइट्स एंड माइक्रो- सॉल्वेशन इफेक्ट्स</p> <p>ड्यूल स्केल सिम्युलेशन्स ऑफ़ सर्फेक्टेंट, को-सर्फेक्टेंट वाटर सिस्टम्स</p>	<p>डॉ अम्बेश दिक्षित</p> <p>डॉ अम्बेश दिक्षित</p> <p>डॉ मणिकंदन परंजोथी</p> <p>डॉ अनन्या देबनाथ</p>	<p>१</p> <p>२</p> <p>२</p> <p>३</p>
आईआईटी, कानपुर	<p>शेप एंड साइज इफेक्ट्स ऑफ़ नैनोपार्टिकल्स ओन दी प्रॉपर्टीज ऑफ़ पॉलीमर नैनोकंपोजिट्स</p> <p>मैग्नेटोहाइड्रोडायनामिक्स टर्बुलेन्स स्टडीज ऑफ़ लिक्विड मेटल्स एंड डाइनेमो</p> <p>स्टडी ऑफ़ काम्प्लेक्स फ्लूइड फ्लोव्स पास्ट ब्लफ बॉडीज</p> <p>थंडर स्टॉर्म सिम्युलेशन</p> <p>डेवलपमेंट ऑफ़ अ फ्रैक्चर एंड क्रैक एनालिसिस पैरेलल कोड फॉर कम्पोजिट मैटेरियल्स ओन हाइब्रिड एच पी सी</p>	<p>प्रो. जयंत के सिंह</p> <p>प्रो. महेंद्र के वर्मा</p> <p>प्रो. संजय मित्तल</p> <p>प्रो. सच्चिदानंद त्रिपाठी</p> <p>डॉ राकेश कुमार एम</p>	<p>५</p> <p>७</p> <p>१</p> <p>१</p> <p>५</p>

आईआईटी, खरगपुर	<p>टू फाइंड दी इंटरफेसियल स्ट्रेंथ इन CNT ऐमाइन इपोक्सी कम्पोजिट</p> <p>टू स्टडी द इम्पैक्ट ऑफ़ लैंड यूज़ चेंजेस ऑन चेंजिंग क्लाइमेट ओवर इंडियन रीजन</p> <p>इंट्रा-सीजनल एंड इंटर-एनुअल वरिएबिलिटी स्टडीज अलॉग द इंडियन कास्ट्स</p> <p>एयरोसोल मॉडलिंग</p>	<p>प्रो. वैदूर्य भट्टाचार्य</p> <p>डॉ. मनबोत्तम मंडल</p> <p>डॉ. सी. शाजी</p> <p>प्रोफ शुभा वर्मा</p>	<p>४</p> <p>१</p> <p>१</p> <p>१</p>
आईआईटी पटना	<p>इमरजड बाउंड्री मेथड बेस्ड यूआईडी स्ट्रक्चर इंटरैक्शन</p>	डॉ. सोमनाथ राय	४
आईआईटी रोपर	<p>H2 स्टोरेज एंड फ्यूल सेल मैटेरियल्स फॉर रिन्यूएबल एनर्जी</p> <p>हाइपर वेलोसिटी प्रोजेक्टाइल इम्पैक्ट</p> <p>इलेक्ट्रॉनिक बैंड स्ट्रक्चर कैल्क्युलेशन्स ऑफ़ जीएनआरएस</p>	<p>डॉ. टी.जे. दिलीप कुमार</p> <p>डॉ. नविन कुमार</p> <p>डॉ. राकेश कुमार</p>	<p>३</p> <p>३</p> <p>२</p>
आईएनएसटी, मोहाली	<p>एटॉमिक स्केल डिजाईन ऑफ़ नावेल नैनोमटेरिअल्स फॉर क्लीन एनर्जी एंड डिवाइसेस</p> <p>ऐब इनिशिओ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स (एआईएमडी) सिम्युलेशन्स</p> <p>इलेक्ट्रॉनिक्स एंड थर्मल प्रॉपर्टीज ऑफ़ चालकोजेनाइड</p>	<p>प्रो. अबीर डे सरकार</p> <p>डॉ. मो. हसन अली</p> <p>डॉ. चन्दन बेरा</p>	<p>५</p> <p>१</p> <p>२</p>
इसरो	<p>नेशनल रिमोट सेंसिंग सेंटर</p> <p>नेशनल कार्बन प्रोजेक्ट</p> <p>वेदर रिसर्च एंड फोरकास्टिंग मॉडल रन्स</p>	<p>डॉ. एम. एम. अली</p> <p>डॉ. एम. राजशेखर</p>	<p>२</p> <p>१</p>

स्पेस एप्लिकेशन्स सेंटर	रियल टाइम शार्ट रेंज वेदर फोरकास्टिंग	डॉ. पी. के. पाल	१
विक्रम साराभाई स्पेस सेंटर	एयरोसोल रेडिएटिव फोरसिंग ओवर इंडिया	डॉ. एस. सुरेश बाबु	१
आयुका, पुणे	मैग्नेटिक फ्रील्ड्स ऑफ़ असीक्रेटिंग न्यूट्रॉन स्टार्स प्रोटोटाइपिंग एलआईजीओ डाटा एनालिसिस सॉफ्टवेर ऑन एचपीसी क्लस्टर स्टडीइंग DDSCAT MPI कोड फॉर स्टूडियिंग दी इफेक्ट्स ऑफ़ लाइट स्कैटरिंग विथ डस्ट इन एस्ट्रोफिजिकल एनवायरनमेंट	प्रो. सुकांता बोस प्रो. सुकांता बोस प्रो. रंजन गुप्ता	२ ३ २
जीवाजी यूनिवर्सिटी	एनालिसिस ऑफ़ इलेक्ट्रॉनिक एंड मैकेनिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ सम हैउसलेर अलॉयज एंड टर्नरी अलॉयज	डॉ. दिनेश सी. गुप्ता	३
जेएमआई, दिल्ली	वरिएशनल मोटे कार्लो स्टडी ऑफ़ लाइट नुक्लेइ	प्रो. कोमर नासिर उस्मानी	१
जेएनसीएसआर, बेंगलोर	फ्लूइड डायनामिक्स ऑफ़ क्लाउड्स डेवलपमेंट ऑफ़ ए सिंपल एंड एक्यूरेट फ़ास्ट ३डी न्यूमेरिकल मेथड कैपेबल ऑफ़ हैंडलिंग मूविंग बॉउंड्रीज़ डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी स्टडीज ऑफ़ नैनोसिस्टम्स स्टडीज ऑफ़ माइक्रो एंड नैनोस्केल फ्लोइज़	प्रो. रोहम नरसिम्हा डॉ. संतोष अंसुमाली प्रो. शोभना नरसिम्हन डॉ. नंदू गोपन	४ २ २ १
जेएनयू	एंद्रोफी एंड फ्री एनर्जी कैलकुलेशन	प्रो. इंदिरा घोष	२
एमआईटी, पुणे	सिमुलेशन एंड एनालिसिस ऑफ़ फ्लो इनसाइड ए स्क्रैमजेट	श्री गिरीश बारपांडे	१
मनिपाल यूनिवर्सिटी	पोर्टिंग एंड ट्यूनिंग CFSv2.1.8 ऑन परम युवा द्वितीय	कु. जिमसीमोल जेम्स	२

नाबी, मोहाली	स्टडी असेंबली एंड अननोटेशन ऑफ जीनोम एंड ट्रास्क्रिप्टोम्स टू आइडेंटिफाय एसएनपी मार्कर्स फ्रॉम पब्लिक डोमेन्स एंड थ्रू इंटरनेशनल एंड नेशनल कॉलेबोरेशन्स	श्री श्रीकांत मंत्री	१
एनसीएल, पुणे	इन्वेस्टीगेशन ऑफ फाइनाइट टेम्परेचर बेहेवियर ऑफ फाइनाइट साइज सिस्टम्स  स्टडी ऑफ इफेक्ट्स ऑफ पॉइंट म्यूटेशन्स ऑन द कांफोर्मेशनल डायनामिक्स  कम्प्यूटेशनल स्ट्रक्चर-फंक्शन कोरिलेशन इन बियोमोलेक्युलर सिस्टम्स	डॉ. कविता जोशी  डॉ. नीलांजना सेनगुप्ता  डॉ. सुमन चक्रवर्ती	४  १  १
एनसीआरए, पुणे	सर्च फॉर पलसर्स एंड ट्रांसिएंट्स  सॉफ्टवेर बैकेंड फॉर द ऊटी रेडियो टेलिस्कोप  पल्सर डाटा एनालिसिस	डॉ. जयंत राय  डॉ. जयराम एन चेंगलुर  श्री वेंकटा सुब्रमणि	१  १  ३
एनआयटी कालीकट	स्टडी ऑफ अडसोरप्शन ऑफ ओर्गेनिक मोलेक्युल्स ऑन ओरिएंटेड मैटेलिक सरफसेस एंड इट्स एप्लिकेशन्स टू डेवलपमेंट ऑफ मोर इफेक्टिव कैटालिस्ट्स	प्रो. रघु चटानथोडी	१
एनआयटी राउरकेला	इफेक्ट्स ऑफ स्वर्ल एंड रोटेशन ऑन टर्बुलेंट पाइप फ्लो	डॉ. बिकाश साहू	१
पंडित दीनदयाल उपाध्याय शेखावटी यूनिवर्सिटी, सीकर	एब इनिशिओ मॉलिक्यूलर डायनामिक्स सिमुलेशन ऑफ आयनिक लिक्विड डोप्ड पॉलीमर इलेक्ट्रोलाइट मैम्ब्रेन्स एंड प्लैटिनम इलेक्ट्रोड इंटरफेस	डॉ. अनुराग प्रकाश सुंदा	१
पंजाब यूनिवर्सिटी	फर्स्ट प्रिंसिपल्स स्टडी ऑफ हेटेरो स्ट्रक्चर्स ऑफ फोस्फोरेन	डॉ. तनकेश्वर कुमार	२
फिजिक्स डिपार्टमेंट, गोवा यूनिवर्सिटी	स्टडी ऑफ इलेक्ट्रॉनिक, ऑप्टिकल एंड थर्मोडायनामिक प्रॉपर्टीस ऑफ ABO <sub>2</sub> टाइप सेमीकंडक्टर्स	डॉ. के आर एस प्रिओलकर	२
पीजेटीएसएयू, हैदराबाद	मल्टी ओमिक प्लेटफार्म	डॉ. एम एन वी प्रसाद गजूला	१

पीआरएल, अहमदाबाद	एटॉमिक स्टडी	डॉ. बिजया साहू	३
आरआरआई, बेंगलोर	सिम्युलेटिंग इवोलूशन ऑफ न्यूट्रल हाइड्रोजन इन गैलेक्सीज इन दी अर्ली यूनिवर्स  टेस्टिंग ज़िऑन फाई कोप्रोसेसर	प्रो. सी आर सुब्रह्मण्या  प्रो. सुमति सूर्या	१  २
आरटीएम नागपुर यूनिवर्सिटी	स्टैटिस्टिकल फिजिक्स ऑफ़ टाइम डिलेड प्रणाली	प्रो. प्रशांत गाडे	२
सख्वा यूनिवर्सिटी	हाइड्रोजन संचयन ऑन अल्कली मेटल फंक्शनलाईज्ड पोरस डिस्क्रीट ऑर्गेनिक  इंक्ल्यूजन कॉम्प्लेक्सेस ऑफ़ सिस्प्लैटिन एंड इट्स अनालोगस	डॉ. वेंकटारामनन एन एस  डॉ. ए. सुविथा	२  १
एसआयएनपी कोलकाता	स्ट्रक्चर, डायनामिक्स एंड इंटरैक्शन ऑफ़ नुक्लेअर एसिड्स	प्रो. धनंजय भट्टाचार्य	२
एसपी पुणे यूनिवर्सिटी	कम्प्यूटेशनल स्टडीज ऑफ़ दी एग्रीगेशन ऑफ़ पेची पार्टिकल्स अंडर नॉन एक्विलिब्रियम कंडीशन्स  फर्स्ट-प्रिंसिपल्स इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ सेमीकंडक्टर नैनोस्ट्रक्चर्स  इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर कैल्क्युलेशन्स  इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ फिजिक्स ऑफ़ कनफाईण्ड सिस्टम्स  दी स्टडी ऑफ़ डीफ्यूज़न कोर्डिफिशियंटऑफ़ Te ऑन Cd-Te सरफेस (१११)  वाटर क्लस्टर एंड मॉलिक्यूल इंटरैक्शन्स इन इलेक्ट्रिक फील्ड	डॉ. अहमद सईद  प्रो. अंजलि क्षीरसागर  डॉ. भालचंद्र एस. पुजारी  प्रो. दिलीप जी. कान्हेरे  श्री.ऐबादुल्लाह नादेरी  प्रो. राजीव पाठक	३  २  १  १  १  २



	मॉलिक्यूलर टेलरिंग एप्रोच: ऐब इनिशओ ट्रीटमेंट ऑफ़ लार्ज मोलेक्युल्स एंड मॉलिक्यूलर क्लस्टर्स	प्रो. श्रीधर आर. गद्रे	२
	प्रोबिंग नॉनकोवलेट इंटरैक्शन्स यूसिंग डेंसिटी फंक्शनल थ्योरी	प्रो. श्रीधर पी गेज्जी	३
	इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर कैल्क्युलेशन्स ऑफ़ सेमीकंडक्टर्स	प्रो. एस. वी. घैसास	२
	इन्वेस्टीगेशन ऑफ़ स्ट्रक्चरल एंड ऑप्टिकल प्रॉपर्टीज ऑफ़ सेमीकंडकटिंग मैटेरियल्स इन वेरियस फॉर्म्स	प्रो. एस. वी. घैसास	१
	ऐब इनिशओ इन्वेस्टीगेशन्स ऑन नैनो - बिओमटेरिअल्स एंड टर्नरी अल्लोयस	डॉ. वैशाली शाह	५
	इफेक्ट ऑफ़ सब्स्ट्रूशनल डोपिंग ऑन इलेक्ट्रॉनिक स्ट्रक्चर ऑफ़ II-VI सेमीकंडक्टर क्वांटम डॉट्स	प्रो. अंजलि क्षीरसागर	२
	ऐब इनिशओ स्टडीज ऑफ़ डोपड GaNbO <sub>4</sub> एंड TiO <sub>2</sub> मैटेरियल्स	डॉ. वैशाली शाह	२
एसआरएम यूनिवर्सिटी	थ्योरेटिकल मॉडलिंग ऑफ़ नावेल ननोएलेक्ट्रॉनिक डिवाइसेस	डॉ. अरिजीत सेन	३
सेंट जेवियरस कॉलेज, अहमदाबाद	क्वांटम ट्रांसपोर्ट इन एलिमेंटल डोपड बोरोन नाइट्राइड मोनोलेयर	डॉ. संजीव कुमार गुप्ता	१
यूनिवर्सिटी ऑफ़ राजस्थान, जयपुर	ओब्सेर्वेशन्स ऑफ़ गोल्ड बेस्ड नैनोकैटेलेसिस एट नैनोस्केल	डॉ. देवेन्द्र कुमार महावर	१
वीकेएफ़, गुडगाँव	ऐब इनिशओ स्टडीज ऑफ़ मैटेरियल्स: नैनोस्ट्रक्चरस, डिफेक्ट्स, सरफेसस एंड बल्क मैटेलिक ग्लासेज	प्रो. विजय कुमार	६
वीएनआईटी नागपुर	प्रोजेक्ट ऑन जनरेशन ऑफ़ लार्जस्ट प्राइम नो.स.	श्री एस. उकेश कुमार	१

वित्तीय वर्ष २०१५-१६ में कुल संकलित परियोजनाएं: ५०



## अनुबंध ब समर्पित स्लॉट बुकिंग की सुविधा के साथ उपयोगकर्ताओं के अनुभव

" We have received comments from referees of Nucleic Acid Research (NAR) Journal asking us to re-perform the MD simulations using the latest force field parameters set and were given 60 days' time to complete it. Without this dedicated slot it would have taken us a long time to complete the simulations we have performed during these two slots. We still need bit more computational time to finish some more simulations to prove our hypothesis. Considering the amount of computational time needed and time we have at our hand to submit the revised version, it would have been impossible to carry out these simulations on a regular queue. These two dedicated slots proved to be of tremendous important for revision of our manuscript submitted to NAR."

श्री. सागर खावणेकर,  
डॉ. अविनाश काले (मुख्य अन्वेषक)  
यूम-डीएई सेंटर फॉर एक्सीलेस इन बेसिक साइंसेस

"Nudge Elastic Band (NEB) calculations are expensive calculations and need to be run without any interruption in order to find the correct transition path. Other jobs which were expensive in terms of computational time were completed during this slot."

श्री. सुब्रह्मण्यम एस.  
डॉ. प्रसेनजित घोष (मुख्य अन्वेषक)  
आई आई एस इ आर, पुणे

"Both band structures and nudged elastic band calculations are expensive and require a relatively larger number of cores and memory. Although the converged path was not obtained for nudged elastic band calculations, there has been progress in the same direction."

श्री. रोहित बाबर  
डॉ. मुकुल कबीर (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईएस इआर, पुणे

"This slot booking facility help me a lot. During this period as everyday a fix amount of nodes are fixed to me, so I can run all possible calculation in a systematic manner and get a comparative study. In normal queue this work takes nearly a month."

श्री. देवाशीष दास  
प्रा. सुभ्रदीप घोष (मुख्य अन्वेषक)  
आयआयटी गुवाहाटी

"In the off-stoichiometric compound of  $Mn_2NiSn/In$ , there are many functional properties around martensitic transformation. For better functionality of this material, it is very important to understand atomic ordering in different sub lattices and the electronic structure of these materials. During this slot, we have tried to explore the martensitic transformation with different sub lattice occupancy. The job runs faster than the job in regular queue."

श्री. आशिस कुंडू  
प्रा. सुभ्रदीप घोष (मुख्य अन्वेषक)  
आयआयटी गुवाहाटी

"Both band structures and nudged elastic band calculations are expensive and require a relatively larger number of cores and memory. Although the converged path was not obtained for nudged elastic band calculations, there has been progress in the same direction."

श्री. चन्दन सिंह  
डॉ. मुकुल कबीर (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईएस इआर, पुणे

"Yes it is very useful, mainly for saving time and one can submit unlimited jobs (according to allocated cores)"

श्री. योगीश्वर अज्जुगल  
डॉ. थेनमलारसेल्वी रथीनावेलन (मुख्य अन्वेषक)  
आयआयटी, हैदराबाद

"Dedicated slot allowed me to keep a track of various computational experimentation needed, continuously. Long waiting times in the regular queue make it difficult to do so otherwise. We would like to request you to reduce the maximum walltime allowed for the regular queue. In the present scenario, the waiting period in the queue is huge enough to loose track of the submitted jobs. I would suggest that we should change the max wall time to 2/3 days and max running jobs 3 (and waiting 3) to keep the queue moving. Dedicated slots can be booked by those who can not continue a job after a break. Most of the VASP/QE/GROMACS/GAMESS users should be able to restart their jobs with little effort."

श्री. वैभव कावरे,  
डॉ. कविता जोशी (मुख्य अन्वेषक),  
सीएसआइआर-एनसीएल, पुणे

"Current simulations are quite expensive with respect to computational cost. It is good to have some commands about how we are utilizing resources while running our jobs. The bbcp command is very useful in this dedicated slot (since we have to transfer data to and fro effectively while using slot) I would like to thank personally for the continuous and constant help from npsfhelp@cdac.in. I would like to express my gratitude for extending disk space quota."

श्री. सुब्रह्मण्यम एस.  
डॉ. प्रसेनजित घोष (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईएसइआर, पुणे

" The molecular clusters we are contemplating are having countless possibilities. All potential possibilities need to be probed to make conclusive remarks. Thus, incessant availability of computational power to attempt each possibility imposes constraints on this path. However, with dedicated computer time for C-DAC state-of-art hardware, we have completed many sub-parts of computations."

श्री नित्यानंद साहू  
प्रो. श्रीधर आर गद्रे (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईटी कानपुर

"Normally, The above mentioned task could have taken 1.5 months to complete."

श्री मंदार कुलकर्णी  
डॉ. अर्णव मुखर्जी (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईएसइआर पुणे

"It helped me run few tests in quick time."

श्री संगखा बोराह  
डॉ. पद्म कुमार पद्मनाभन (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईटी गुवाहाटी

" We could use larger number of cores without being in a queue."

कु. दीपाश्री सराफ  
प्रो. अंजलि क्षीरसागर (मुख्य अन्वेषक)  
सेंटर फॉर मॉडलिंग एंड सिमुलेशन, एस. पी. पुणे यूनिवर्सिटी, पुणे

" With the dedicated slot, we were able to simultaneously carry out more number of jobs without any waiting period."

कुमारी संजना नायर, श्री वेंकटा सुब्बियाह एसपी  
डॉ. थेमलारसेल्वी राथीनवेलन (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईटी हैदराबाद

"The job in dedicated slot queue run a bit faster than regular job queue. The results that we have got using dedicated slot queues, would have taken 6-7 month in regular job queues."

श्री आशीस कुंडू, श्री श्रीकृष्ण घोष  
प्रो. सुभ्रदीप घोष (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईटी गुवाहाटी

" Nudge Elastic Band (NEB) calculations are expensive calculations and need to be run without any interruption and difficult to converge in order to find the correct transition path."

श्री नंदा कुमार  
डॉ. प्रसेनजित घोष (मुख्य अन्वेषक)  
आईआईएसआर पुणे

उपयोगकर्ताओं से प्रशंसनीय सन्देश.....

*"As my students who are accessing PARAM Yuva gave me a positive feed back on the computing resources, I have requested my new PhD students as well to get an account."*

डॉ. गोपालन राजारामन  
एसोसिएट प्रोफेसर  
आईआईटी बॉम्बे

*"I remain highly thankful to C-DAC, Pune for the National PARAM Supercomputing Facility (NPSF) provided to my research group on PARAM-Yuva II."*

डॉ. अबीर दे सरकार  
एसोसिएट प्रोफेसर  
आईएनएसटी मोहाली

*"I heartily wish your entire team, a very happy, prosperous and successful new year. I thank you from the bottom of my heart for all your help, guidance and patience. It is all your team's effort that researchers like me are able to do quality research."*

डॉ. सिद्धेश्वर चोपड़ा  
असिस्टेंट प्रोफेसर  
एमिटी यूनिवर्सिटी

*"Our poster won the best poster award at Indian Biophysical Society conference which included work from PARAM YUVA II- dedicated slot."*

*"Thank you for providing such a wonderful support and a world class facility!"*

श्री सागर खावणेकर (परियोजना छात्र)  
डॉ. अविनाश काले (मुख्य अन्वेषक)  
सीबीएस, मुम्बई



## अनुबंध स चित्रशाला



डॉ संदीप जोशी आईआईएसईआर, मोहाली कार्यशाला में *समांतर कम्प्यूटिंग* पर व्याख्यान देते हुए



डॉ. वेंकटेश शेनॉय आईआईएसईआर, मोहाली कार्यशाला में *ऑप्टिमाइजेशन ऑफ पीडीई सॉल्वर्स* पर व्याख्यान देते हुए



श्री. पंकज डोर्लीकर आईआईएसईआर, मोहाली कार्यशाला में *लेवेरेजिंग मल्टीकोर विथ ओपनएमपी* पर व्याख्यान देते हुए



श्रीमती चैताली चंद्रात्रे आईआईएसईआर, मोहाली कार्यशाला में *गोइंग बियाॅन्ड मल्टीकोर : एचपीसी यूजिंग मैसेज पासिंग* पर व्याख्यान देते हुए



कु. निशा अग्रवाल आईआईएसईआर, मोहाली कार्यशाला में परफॉरमेंस कॉन्सीडरेशन्स एंड यूनीप्रोसेस्सर ऑप्टिमाइजेशन टेक्निक्स पर व्याख्यान देते हुए



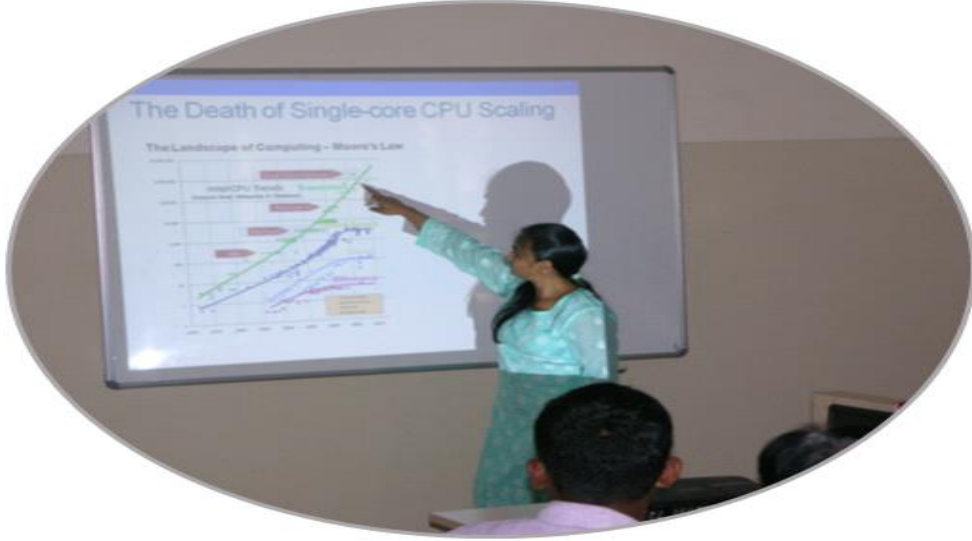
एनपीएसएफ टीम के सदस्य आईआईएसईआर, मोहाली कार्यशाला के दौरान



श्री. पंकज डोर्लीकर सावित्रीबाई फुले पुणे विद्यापीठ में कंप्यूटर आर्किटेक्चर फॉर साइंटिफिक कंप्यूटिंग पर आमंत्रित व्याख्यान देते हुए



श्री. वाय. एस. स्वरुप एसकेबीआर कॉलेज, अमलापुरम में एचपीसी टेक्नोलॉजीज एवं जॉब अपोरच्युनिटीज़ पर आमंत्रित व्याख्यान देते हुए



कु. निशा अग्रवाल पीआईसीटी, पुणे में इंट्रोडक्शन टू ओपेनसीएल कंप्यूटिंग पर आमंत्रित व्याख्यान देते हुए



श्री. वाय. एस. स्वरुप राष्ट्रीय विज्ञान दिवस, सी-डैक, पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए



श्री. पंकज डोर्लीकर *राष्ट्रीय विज्ञान दिवस*, सी-डैक, पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए



श्री. गौरव कुमार मर्सकोले *राष्ट्रीय विज्ञान दिवस*, सी-डैक, पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए



श्री. मनीष कुमार *राष्ट्रीय विज्ञान दिवस*, सी-डैक पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए



श्री. अरुण गुप्ता *राष्ट्रीय विज्ञान दिवस*, सी-डैक पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए



कु. निशा अग्रवाल राष्ट्रीय विज्ञान दिवस, सी-डैक, पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के बारे में समझाते हुए



राष्ट्रीय विज्ञान दिवस, सी-डैक, पुणे के अवसर पर एनपीएसएफ के स्वयंसेवक