

Memoria del 2015 del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

Servicios Generales de Investigación (SGIker)

6 de abril de 2017

Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación
(Cálculo Científico)
IZO-SGI

Índice

1. Resumen y agradecimiento	4
2. El IZO-SGI en cifras	5
3. Introducción	6
3.1. Año 2015	8
4. Descripción del equipamiento	10
4.1. Equipamiento propio	10
4.2. Equipamiento de las TICs	10
5. Software	11
6. Acciones y proyectos	12
6.1. Arina	12
6.2. Péndulo	12
6.3. Recursos web	12
7. Uso de los recursos	13
7.1. Arina	13
7.1.1. Personal investigador	15
7.1.2. Trabajos	16
7.2. Péndulo	17
8. Participación en eventos y formación	20
8.1. Formación impartida	20
8.2. Presentaciones realizadas	20
8.3. Eventos Organizados	20
9. Tarifas del Servicio	21
10. Encuesta de satisfacción	22
11. Actividad web	23
11.1. Página web	23
11.1.1. Página de monitorización del Servicio	23
11.1.2. Formularios del Servicio	23
11.2. Blog del Servicio	23
11.3. Twitter	23
11.4. Facebook	23
11.5. Lista de distribución	23
12. Bibliometría	24
12.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio	24
13. Apéndices	27
A. Descripción detallada del equipamiento	28
A.1. Arina	28
A.2. Péndulo	28
A.3. Servicios e infraestructura de la VGTIC	28
A.4. Otros servicios	29
B. Datos de uso de Arina	30

C. Estadísticas de la web del Servicio	33
D. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI	37
E. Posts sobre HPC publicado en el blog	38
F. Publicaciones del Servicio	39
F.1. Datos históricos	39
F.2. Publicaciones recogidas	39

1. Resumen y agradecimiento

El Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico) de la UPV/EHU sigue intentando mejorar sus indicadores. Entre los aspectos positivos del 2015 (ver *El IZO-SGI en cifras*) cabe destacar el aumento significativo el número de publicaciones científicas que han contado con el apoyo del IZO-SGI, el mantenimiento de la alta ocupación de la máquina, a pesar de aumentar en un 45 % los recursos. El Servicio sigue manteniendo una excelente puntuación en la encuesta de satisfacción realizada al personal investigador usuario del Servicio.

Junto a los datos presentados en esta memoria, queremos aprovechar estas líneas para agradecer la confianza depositada en el Servicio por el personal investigador, dado que buena parte de los buenos números del Servicio son más mérito suyo que nuestro.

2. El IZO-SGI en cifras

	2.009	2.010	2.011	2.012	2.013	2.014	2.015
Cores de cálculo	440	872 [§]	1.520 [§]	1.520	1.400	1.300 [§]	1.852
Millones de horas de cálculo consumidas	2,11	2,26	5,76	11,27	10,4	10,1	13,99
Investigadores activos	101	98	90	89	99	107	104
Grupos activos	53	40	39	40	47	45	42
Cuentas nuevas	49	33	31	20	34	23	43
Satisfacción de los usuarios*	8,9	8,8	8,8	9,3	9,3	9,6	9,5
Artículos científicos**	48	64	63	74	87	75	85
Visitas web	4.925	5.957	8.022	9.899	5.924	2.340	2.902
Páginas vistas	58.731	40.987	30.042	30.738	20.323	12.057	10.799
Posts en el blog HPC	-	29	34	27	47	36	22
Visitas del blog HPC	-	1.431	3.818	4.741	24.613	23.677	20.670
Arina							
Cores de cálculo	320	752	1.360	1.360	1.320	1.300	1.892
Millones de horas consumidas	2,07	2,11	5,20	9,6	9,8	10,1	13,99
Promedio de ocupación	75 %	47 % [†]	74 %	79 %	83 %	87 %	86 %
Trabajos enviados	38.497	65.179	68.991	98.383	100.214	76.912	115.681
Trabajos de más de 2 minutos [‡]	28.377	50.624	51.735	78.846	75.406	64.335	100.131
Horas promedio por trabajo ^{††}	76	44	100	122	130	156	140
Horas promedio de espera ^{‡‡}	5,7	3,8	3,8	5,2	5,5	10,0	14
Péndulo							
Cores de cálculo	120	120	120	80	80	70	-
Millones de horas consumidas	0,02	0,15	0,09	0,07	0,04	0,006	-
Ikerbasque[#]							
Cores de cálculo	-	-	208	208	208	0	-
Millones de horas consumidas	-	-	0,47	1,6	0,55	0	-

Arina es el nombre del cluster de cálculo del IZO-SGI, Péndulo el GRID e Ikerbasque la máquina del Gobierno Vasco donde el Servicio tuvo derecho de uso.

§ Las ampliaciones del 2.011 y 2.014 se pusieron en producción el último mes por lo que no ha tenido mucho peso en las estadísticas.

† El uso en el 2.010 es aparentemente bajo debido a que se instaló una ampliación de Arina que pasó de 300 cores a 752 y se hizo disponible a finales de Julio. Esto provocó que en Agosto y Septiembre Arina estuviese muy vacío y, debido a la magnitud de la ampliación, estos meses han tenido mucho peso en la media anual. En el mes de Noviembre ya se alcanzó un 76 % de ocupación mensual. Tal vez sea más realista una media ponderada.

‡ La máquina se apagó en Abril del 2.013.

‡ Los trabajos de menos de 2 minutos se deben normalmente a trabajos fallidos que terminan inmediatamente en error. En cualquier caso, aun de no ser así, dada su corta duración no repercuten en el cluster.

†† No se han tenido en cuenta los trabajos de menos de dos minutos.

‡‡ Los trabajos se ejecutan a través de un sistema de colas que asigna a cada trabajo los recursos que se le han solicitado y ordena su ejecución para optimizar el uso del cluster. El tiempo en cola es el tiempo que están esperando los trabajos hasta que se liberan los recursos que necesitan y entran en ejecución.

* Encuesta de satisfacción de los usuarios realizada por la Unidad de Calidad e Innovación.

** En los que se agradece al IZO-SGI.

3. Introducción

La espectacular evolución de los ordenadores permite a la ciencia el estudio de sistemas más complejos y/o el empleo de modelos más avanzados. El análisis de datos y la simulación están alcanzando límites sin precedentes de precisión y capacidad para el análisis de sistemas reales a todas las escalas. Es tal la precisión que se está convirtiendo incluso en una herramienta generalizada en entornos industriales (química, bioquímica, mecánica, fluidos, electrónica, etc) dado que permite el filtrado y selección de posibles candidatos a un futuro producto mediante el empleo de computación de altas prestaciones. Esta no solo permite ahorrar costes en el diseño de prototipos y en experimentación, sino que además proporciona valiosa información adicional sobre el sistema en estudio.

En esta era, la digitalización de la información está alcanzando límites sin precedentes. Cada vez se tiene información de más sistemas, más precisa, de más variables, cada menor intervalo de tiempo, etc. lo que supone grandes cantidades de datos que son necesarios procesar y analizar para obtener información. Este es el reto del *Big Data* que requiere de potentes sistemas para su tratamiento.

Antes de la existencia del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico), perteneciente a los Servicios Generales de Investigación (SGIker), existían pequeños clusters y/o servidores pertenecientes a los grupos de investigación repartidos por la UPV/EHU. Esto obligaba a cada grupo tener que administrar sus propios recursos dedicando parte de su tiempo a ello, lo que reduce el tiempo disponible para la investigación. Por otra parte, cuando estos grupos no estaban utilizando sus computadoras (vacaciones o épocas sin calcular por diversos motivos), se puede considerar que perdían en la amortización de las mismas, ya que al estar paradas, su poder computacional estaba siendo desaprovechado mientras que las máquinas seguían envejeciendo.

El Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación libera a los grupos de investigación de tener que dedicar parte de su tiempo a la administración de un cluster y/o servidor y ofrece al personal investigador recursos que de forma individual no podrían tener. Los recursos están debidamente administrados y optimizados. Además, al ser un recurso compartido se garantiza que el uso de la máquina sea continuo al haber un altísimo número de investigadores usándola, por lo que su amortización es prácticamente óptima.

Los recursos del IZO-SGI se han convertido en la principal herramienta computacional para muchos grupos de la Universidad. Algunos, incluso han dejado de comprar equipamiento propio, y es por eso que tenemos la necesidad de mejorar esta infraestructura ampliando sus recursos, con el fin de que los usuarios dispongan de herramientas óptimas para poder seguir desarrollando sus labores de investigación.

Este es un Servicio General de Investigación (SGIker) a disposición del personal investigador de la UPV/EHU, empresas y OPIs que lo soliciten, por lo que los usuarios del Servicio General abarcan un amplio espectro de la Ciencia y la Ingeniería con investigaciones en las siguientes áreas o líneas:

- Secuenciación y genética.
- Nanomateriales semiconductores y magnéticos nanoporosos.
- Simulación de explosiones de Coulomb.
- Diseño de fármacos.
- Fotofísica, fotoquímica y dinámica vibracional de moléculas de interés biológico.
- Espectroscopía de nanotubos funcionalizados.
- Propiedades estructurales y dinámicas de sólidos y materiales funcionales.
- Cristalografía matemática y computacional.

- Inteligencia computacional.
- Procesamiento del lenguaje.
- In silico simulation of molecular biology experiments.
- Desarrollo y aplicaciones de cicloadiciones organocatalíticas asimétricas.
- Dinámica, estereodinámica y cinética de reacciones.
- Estudios de CFD de cápsulas de almacenamiento de combustible nuclear gastado.
- Cálculo contenedores en seco de combustible gastado.
- Estudios de CFD de ventilación y confort.
- Estudios CFD sobre generadores de vórtices para aerogeneradores, alas, etc.
- Diseño de miméticos multiópicos.
- Nanotecnología, estudio en nanoestructuras.
- Simulaciones Monte Carlo.
- Colorantes láser.
- Fosfafluoroquímica.
- Propiedades térmicas de materiales heterogéneos.
- Plegado de proteínas.
- Materiales magnéticos para discos duros.
- Nanomagnetismo.
- Análisis estadísticos multivariantes.
- Procesos ultrarápidos en química física.
- Dinámica y control de átomos fríos.
- Análisis de población electrónica y matrices de densidad.
- Reconstrucción tridimensional de partículas biológicas observadas mediante TEM.
- Álgebra y teoría de grupos.
- Algoritmos de descomposición de problemas de programación estocástica.
- Funciones de distribución numéricas para contrastes de raíces unitarias estacionales.
- Optimización para GPGPU.
- Materiales magnónicos artificiales controlados dinámicamente.
- Almacenamiento eficiente para depósitos RDF.
- Nanoclusters of semiconducting materials: properties, doping and selfassembling.
- Nanoclusters of semiconducting materials: (Bio)Functionalization.
- Aluminum interaction with bioligands.
- Protein damage Caused by ROS and RNS species and its prevention by antioxydants.

- Non-Covalent interactions.
- Water solvation of sodium on Cu(111) surfaces.
- Electronic and optical properties of MM compounds.
- Nanomecánica de proteínas de la matriz extracelular.
- Daño por radiación de materiales.
- Heteroestructuras de materiales óxidos.
- Polimerización y catálisis orgánica.
- Seguridad en redes de datos.
- Nuevas tecnologías y sistemas de transmisión.
- Sistemas de información.
- Análisis empírico de comportamiento de voto.
- Economía en conflictos bélicos.
- Determinación de isótopos radiactivos en muestras ambientales e industriales.
- etc.

No obstante, a pesar de esta multidisciplinariedad, todas estas áreas requieren de un gran poder computacional para realizar diferentes tipos de cálculo o se benefician de las herramientas que pueden encontrar en un Servicio profesional, ya sea para cálculos de la estructura electrónica (ab-initio y/o DFT), dinámica o mecánica, tanto clásica como cuántica, dinámica de fluidos, modelización de reactores, reconocimiento de secuencias de ADN, cálculos del estado sólido, dinámica de fluidos, biofísica,...

3.1. Año 2015

A finales del 2014 se puso en producción la ampliación de recursos del Servicio con los siguientes elementos:

- 31 Nodos de cálculo de 20 cores (2 x Xeon(R) CPU E5-2680 v2 @ 2.80GHz) y 128 GB de memoria RAM.
- Un nodo de memoria compartida de 32 cores (4 x Xeon(R) CPU E5-4620 v2 @ 2.60GHz) y 512 GB de RAM.
- Un nodo con 2 tarjetas GPGPU Nvidia Kepler K20.
- Un sistema de archivos paralelo de 40 TB netos y 7 GB/s de velocidad en lectura y 5 GB de velocidad en escritura.
- Interconexión infiniband FDR a 56 Gb/s.
- Un servidor de gestión.
- Demás elementos secundarios y servicios de instalación.

Tras una ampliación de este tipo, lo normal es que al principio cueste un poco a los investigadores ocuparla, pero está vez, el uso ha sido muy elevado desde el principio, llegando al 86 %, un valor muy alto teniendo en cuenta la reciente ampliación. Considerando además que el 4 % de las maquinas están obsoletas, esta ocupación se puede considerar como muy alta e indicadora por un lado de un gran aprovechamiento de la infraestructura y, por otro, que los usuarios siguen demandando todavía más recursos.

Durante 3 meses un estudiante de FP II del instituto IEFPS Elorrieta-Erreka Mari estuvo realizando las prácticas necesarias para la obtención del título. En este periodo realizó labores de apoyo dedicándose, fundamentalmente, a programación web y de scripts.

El Servicio ha seguido proporcionado recursos, consultoría y apoyo en cálculo científico a el personal investigador de la UPV/EHU siendo esta también su principal actividad. Pertenece a la Red Nacional de e-Ciencia donde participa en el área de supercomputación y a la red HPC-CAST Ibérica. Ha asistido a congresos y conferencias. Mantiene la página web del Servicio con información útil para el personal investigador sobre el mismo y redacta el blog HPC en la Ehusfera. El IZO-SGI, por otra parte, ha invertido entorno a 20.500 € en la compra y/o actualización de varios programas científicos con licencia corporativa y 13.000 € en renovación de soporte de la máquinas.

Ha impartido varias charlas sobre computación de altas prestaciones y del propio IZO-SGI. Ha generado informes y documentación sobre el rendimiento de diferentes aplicaciones del Servicio.

4. Descripción del equipamiento

4.1. Equipamiento propio

Dentro de los recursos propios del IZO-SGI, durante el 2015 se ha dispuesto de 1852 cores, varios nodos de computación con GPGPUs, 3 sistemas de ficheros de alto rendimiento basados en Lustre y servidores de servicio. En el apéndice A se pueden tener más detalles técnicos de los mismos.

Este cluster es la principal herramienta de cálculo de muchos grupos de investigación de la UPV/EHU. El crecimiento de los recursos ha sido acorde con el creciente número de personal investigador y su uso. Hoy en día es un servicio consolidado y en continua expansión.

4.2. Equipamiento de las TICs

El IZO-SGI usa para sus fines infraestructura, equipamiento y servicios gestionados por la Vicegerencia de las Tecnologías de la Información (VGTIC) de la UPV/EHU. El equipamiento está instalado en el Centro de Proceso de Datos (CPD) de la UPV/EHU con todos los elementos necesarios para garantizar su estabilidad y seguridad, se realizan copias de seguridad de datos y sistemas y se usa su sistema de almacenamiento masivo. En el apéndice A se pueden tener más detalles de los mismos.

5. Software

Además de mantener un correcto funcionamiento del hardware del Servicio es primordial mantener al día el software accesible al personal investigador. El trabajo realizado es la instalación, mantenimiento y benchmarking de las aplicaciones para mantenerlas en óptimo funcionamiento. También se pretende una racionalización del uso del software adquiriendo licencias corporativas para obtener mejores prestaciones y más baratas.

Este año se han comprado o renovado las licencias anuales de los programas:

ADF. 16 licencias Flotantes y ADF-Gui (3.100 €).

Schrodinger Program Suite. Comprada el 2015 para dos años (9.500 \$). Token Library for Impact, Liaison, Jaguar, Jaguar pKa, MacroModel, Epik, QikProp, SiteMap, Strike, Confgen, Minta, LigPrep, Glide, XP Visualizer, QSite, including 18 interchangeable tokens.

Star-CCM+. Licencia Power on Demand (5.500 €).

Matlab. 2 licencias (219 €) y Symbolic Math Toolbox (46 €).

Turbomole. Renovación 1.200 €.

Se puede encontrar un listado no completo del software de cálculo disponible en el Servicio en la página de software de cálculo y en la de software de desarrollo del Servicio.

6. Acciones y proyectos

El 2015 tuvo una particularidad respecto a los años anteriores, y es que una fuerte tormenta provocó un corte eléctrico en el CPD, pero debido a un fallo en el generador de electricidad, tras fallar el suministro eléctrico no se puso en marcha debido a aire acumulado en el circuito de gasoil, y las máquinas que estaban en el CPD no se pudieron mantener encendidas.

El anterior fallo eléctrico del CPD se produjo el 30 de diciembre de 2008, por lo que las máquinas han estado trabajando ininterrumpidamente durante 6 años y 20 días.

Nos gustaría agradecer a la Vicegerencia TIC por su esfuerzo continuo para mantener la sala de máquinas operativa ininterrumpidamente, y esperemos aumentar el récord anterior.

Este apagón provocó que varios nodos del cluster se estropearan, y el seguro nos permitió adquirir 2 nuevos para sustituirlos.

Se ha contado durante 3 meses con un estudiante de FP II en prácticas que ha realizado diversas tareas de mejora en la web de monitorización de Arina aparte de otras tareas menos visibles.

Este año los eventos en que los técnicos han participado no han sido muy numerosos. Estos se detallan en la sección 8.

Destacamos también la organización del workshop “CFD y supercomputación, I+D+i más competitiva” que se celebró el 23 de Marzo en Bilbao orientado a los usuarios de CFD, en la que participaron 60 personas de la universidad y diferentes empresas.

6.1. Arina

Se ha llevado a cabo buena parte del proceso necesario para la integración de la ampliación de Arina. La integración al final resultó más difícil de lo esperado, y se puso oficialmente en producción a finales de año, aunque estuvo funcionando en modo de pruebas con anterioridad.

6.2. Péndulo

El aula de Cursos, una de las dos salas que estaban integradas en Péndulo, actualizó los ordenadores el 25 de Septiembre del 2009 sin que nosotros hayamos configurado Péndulo en los nuevos PCs, por lo que en la actualidad sigue sólo habiendo una sala de PCs operativa. Está pendiente por parte de los técnicos incluir nuevamente la segunda sala, se pretende además aprovechar esta circunstancia para actualizar el sistema operativo de Péndulo y pasarlo de arquitectura x86 a x86_64. Este intervención viene reforzada por el hecho de que el servidor que gestiona Péndulo es antiguo. Recordar que este servidor fue cedido por el CIDIR. Por las limitaciones de tiempo de los técnicos, este proyecto de actualización se relanzó a finales de 2013 resolviendo ciertos problemas existentes en el nuevo servidor.

6.3. Recursos web

Se mantienen los perfiles en las redes sociales Facebook (<https://www.facebook.com/izosgi>) y Twitter (<https://twitter.com/izosgi>). El Servicio usa estas nuevas cuentas para informar sobre incidencias del propio Servicio así como temas interesantes relacionados con la supercomputación, la Ciencia en general y en el País Vasco, etc.

7. Uso de los recursos

Por motivos de facturación y para facilitar esta tanto al Servicio como a al personal investigador, muchos de cuyos proyectos han de cerrarse el 31 de Diciembre, el año se contabiliza desde el 1-12-2014 al 30-11-2015.

En el 2.015 en el IZO-SGI han calculado 42 grupos o proyectos de investigación en las áreas de Física, Química, Mineralogía, Biología, Genética, Informática, Ingeniería, Matemáticas, Antropología, etc. Se han abierto 43 nuevas cuentas de usuario y 104 investigadores realizaron cálculos.

7.1. Arina

Arina ha estado funcionando 24 horas 365 días al año y su uso durante el mismo ha sido de 421.517 días de cálculo (10,1 millones de horas) lo que supone un **87%** de ocupación.

El uso ha sido bastante homogéneo y podemos considerar que con un gran aprovechamiento de Arina y que el personal investigador ha podido trabajar con agilidad, aunque el tiempo de espera promedio ha sido el un 50% mas que el del año anterior, 14 horas; aunque esto se debe principalmente a que algunos usuarios envían listas muy largas de trabajos. Este año se han enviado a Arina 115.681 trabajos de los cuales 100.131 duraron más de 2 minutos. Realizamos la suposición de que la mayoría de los que duraron menos de dos minutos fueron scripts o inputs con

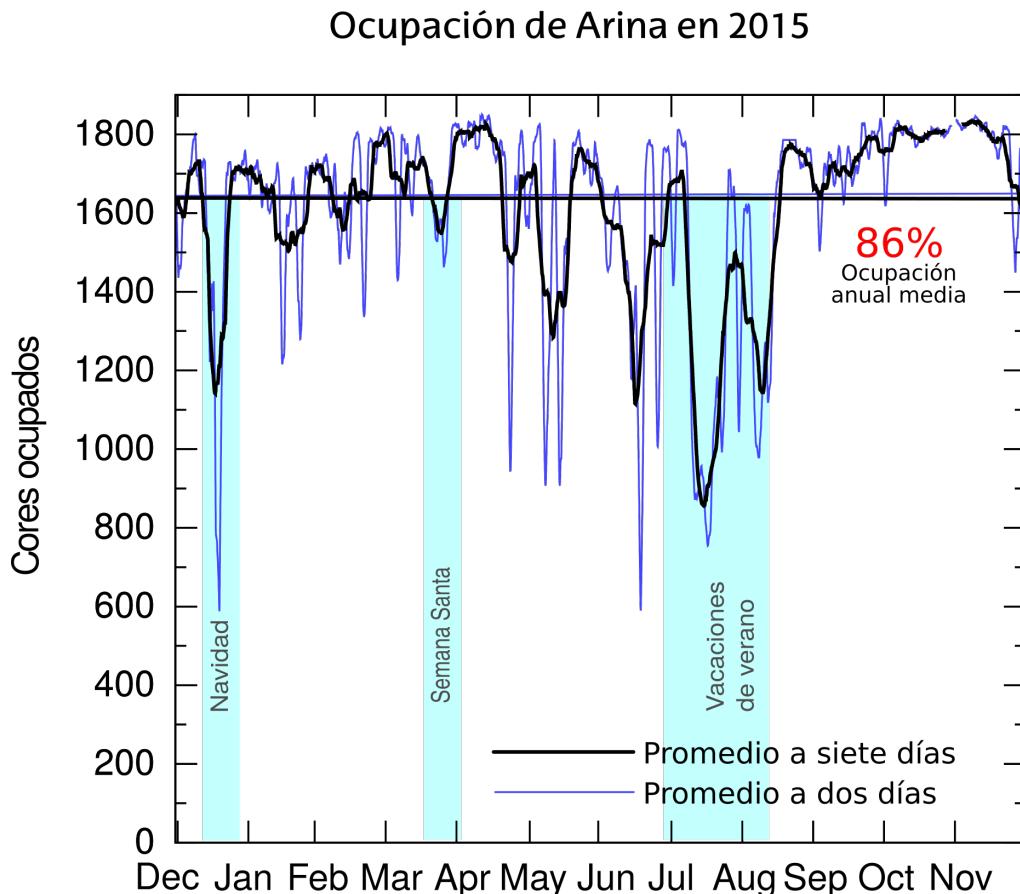


Figura 1: Uso de Arina en el año contable (periodo 12/2013-11/2014) donde se observa el gran uso de la infraestructura. Se toman medidas cada 15 minutos pero para eliminar ruido se ha promediado sobre dos días para eliminar la variación día/noche y cada 7 días para promediar igualmente el efecto del fin de semana.

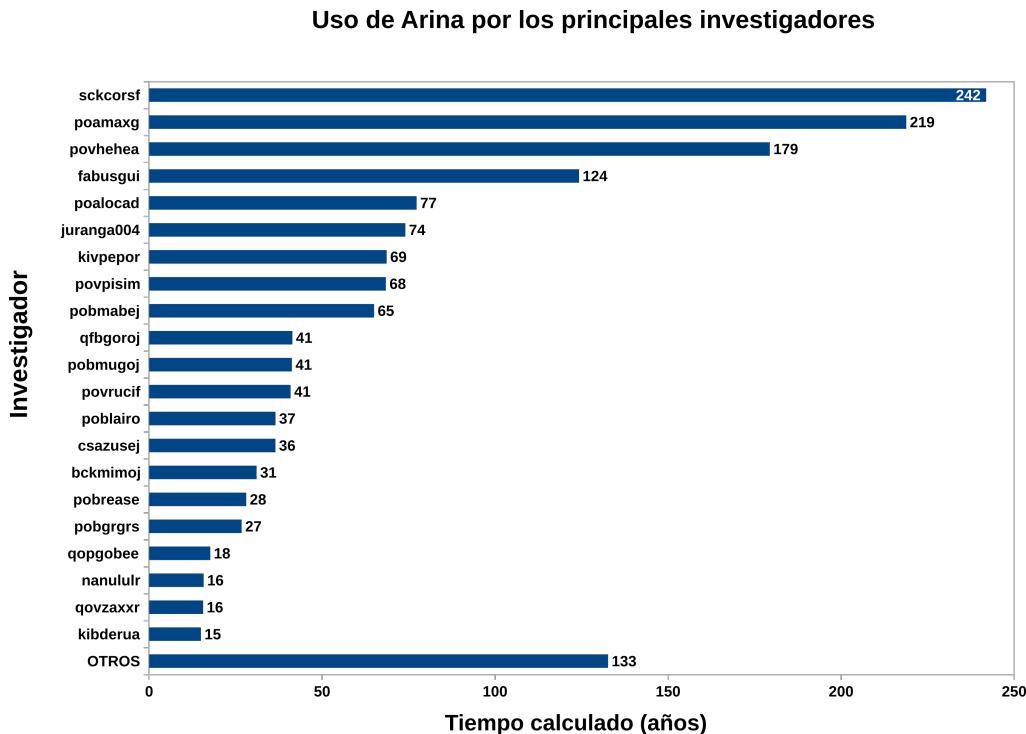


Figura 2: La distribución del tiempo de cálculo empleado en el cluster Arina por el personal investigador muestra su utilidad a un amplio espectro desde grandes usuarios hasta los más puntuales. En OTROS está agrupado el personal investigador con menos de 15 años calculados

algún tipo de error, aunque en número suponen muchos trabajos dada su corta duración son una parte mínima de tiempo de cálculo. El tiempo promedio por trabajo ha ascendido a 140 horas ligeramente inferior a las 156 del año 2.014. Se rompe la tendencia de los últimos años en la que se incrementaba el promedio, y es la primera vez que baja desde el 2.010.

En la figura 1 se muestra el uso durante el año contable de Arina. Se toman medidas cada 15 minutos pero se muestran el promedio sobre 48 horas, para eliminar el ruido debido a las diferencias día/noche, y cada 7 días, para eliminar el ruido proveniente del fin de semana. Se ha de notar que la máquina está en la práctica completamente ocupada, dado que por la modularidad del cluster sólo se consigue ocupaciones muy altas con largas colas de espera y, por lo tanto, con suficiente variedad de trabajos como para ocupar todos los pequeños huecos que se generan. En la gráfica promedio a dos días se observan como los picos llegan casi al 100 %, lo que significa que, entre semana, la máquina estaba próxima al 100 %.

Uno de los objetivos del Servicio es conseguir la mayor ocupación posible de Arina dado que supone una mayor amortización del equipamiento. No obstante, la ocupación óptima de Arina tiene su techo en torno al 80 %, límite a partir del cual las colas se empiezan a alargar. El aumento del tiempo de espera por trabajo, se puede relacionar con esta alta ocupación, y se espera que descienda con la ampliación llevada a cabo. Así la ocupación ha disminuido un puntos respecto al 2.014, del 87 al 86 %, una disminución muy pequeña pesar de haber doblado prácticamente la potencia de los recursos del servicio. El tiempo de espera ha seguido aumentando hasta 14 horas. No obstante, hay muchos usuarios muy intensivos que lanzan grandes cantidades de trabajo y llegan a alcanzar este tiempo de espera en cola, mientras que la mayoría de los usuarios más modestos apenas ven alterados sus tiempos de espera.

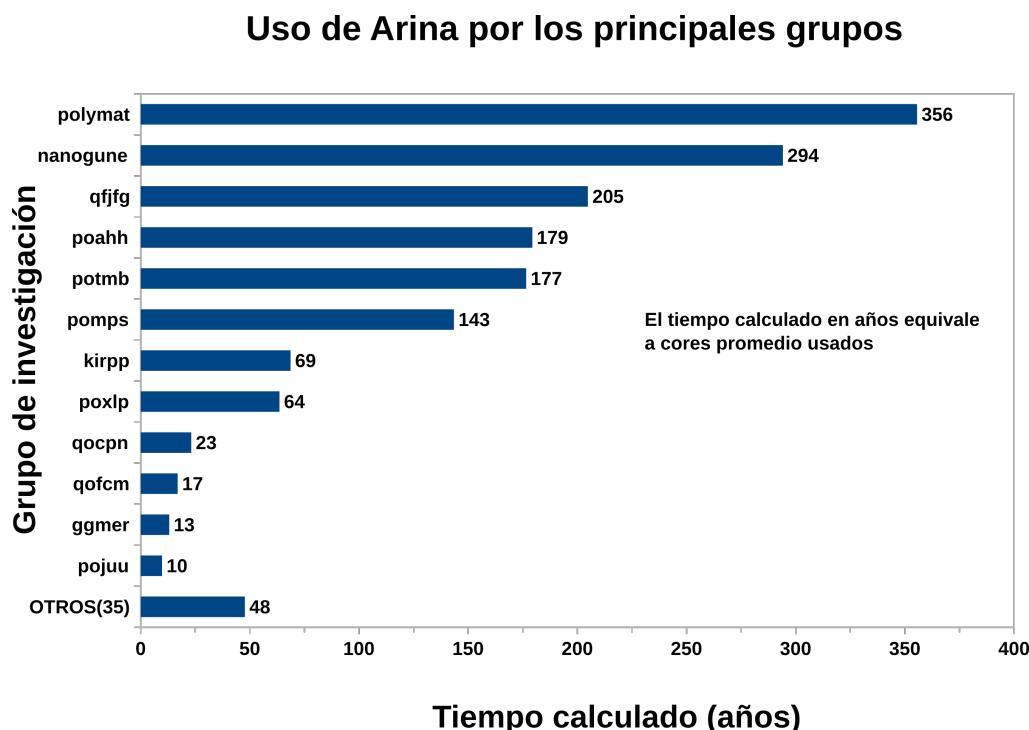


Figura 3: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por grupo. En OTROS están agrupados los grupos con menos de 10 años calculados.

7.1.1. Personal investigador

Este año el personal investigador que ha calculado en Arina asciende a un total de 104, figura 2. 51 han calculado más de 500 días. El mayor investigador empleó 88.286 días de cálculo, este investigador fue el tercero en uso el 2.014. Por debajo con menos de 500 pero más de 30 días de cálculo hay 33 investigadores/as (similar que el año pasado) y con menos de 30 días calculados hay 20. En la tabla 2 del apéndice B se pueden encontrar los datos completos.

47 grupos de investigación han calculado en Arina, figura 3. 19 grupos han calculado intensivamente (más de 1.000 días de cálculo), el año pasado fueron 15. El grupo que más ha usado Arina ha empleado 129.779 días. 10 han sido los grupos que han calculado más de entre 1.000 y 100 días y 18 grupos menos de 100 días. En la tabla 3 del apéndice B se pueden encontrar los datos completos.

Si agrupamos los grupos de investigación por departamentos, figura 4, el departamento de Ciencia y Tecnología de Polímeros es el que agrupa al mayor número de usuarios de Arina y que empleó 209.026 días de cálculo. De ésta figura, igualmente, obtenemos que la Química es la ciencia que más emplea Arina con un 73 % del tiempo de cálculo, seguido de la Física con un 24 % del tiempo, el 3 % restante representa usuarios de ingeniería, biología, matemáticas, informática, bioinformática etc.

En cuanto al uso por campus se ve que en el Campus de Gipuzkoa es donde se encuentran la mayor parte de los grupos usuarios de Arina, aunque su peso ha bajado del 50 % el 2.014, al 43 % el 2.016. El peso de Bizkaia a subido 8 puntos, hasta el 15 % y tenemos alrededor de un 40 % de usuarios externos, figura 5. Los grupos que usan computación en Gasteiz son 2 y han empleado menos de un 1 % del cálculo de Arina.

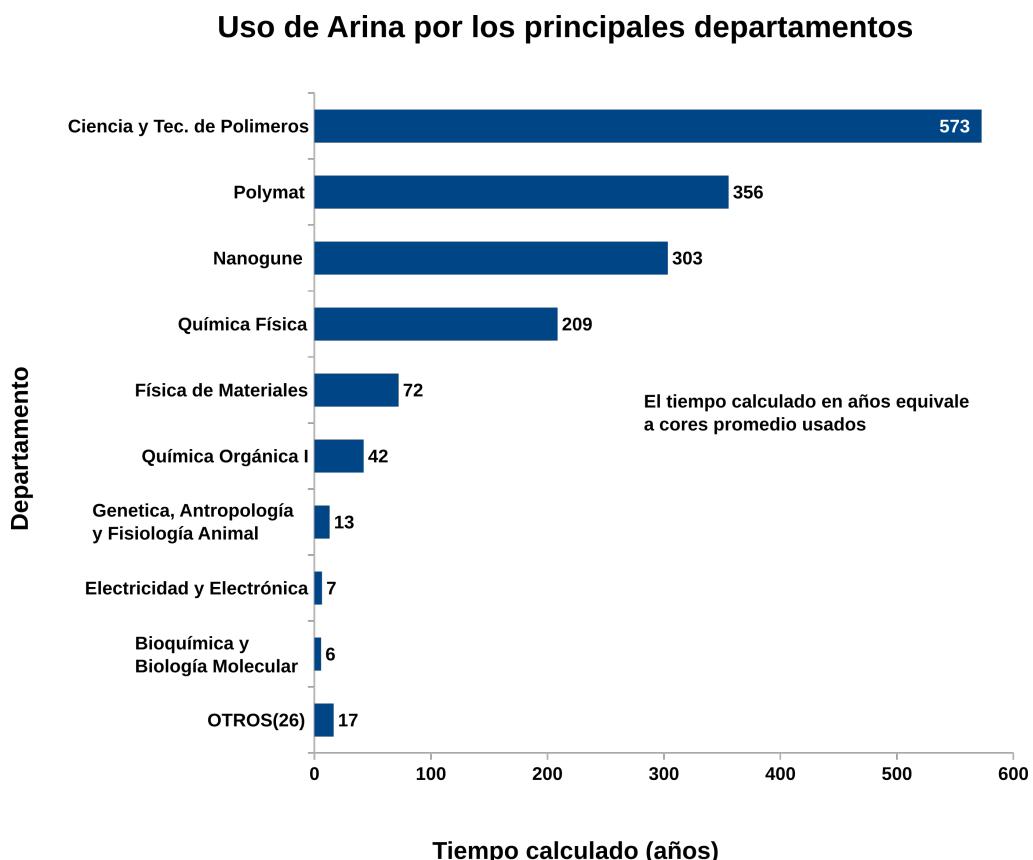


Figura 4: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por departamento donde se ve un fuerte concentración en la Química especialmente y física.

7.1.2. Trabajos

Hemos analizado también los trabajos enviados a Arina. De estos, en una gran medida, podemos controlar qué ejecutaban dado que o bien usaban alguna herramienta especial diseñada por el Servicio que permite identificar el trabajo, o alguna cola especial o porque ciertos programas que han sido usados por usuarios específicos y/o es el único programa que han usado. El resto que no podemos filtrar o aquellos cuyo uso ha sido menor a 1.000 días de cálculo han sido agrupados como *OTROS* en la figura 6. Los datos no son muy precisos pero son una foto lo suficientemente ilustrativa. Los programas Gaussian y Siesta han sido los más usados, con un porcentaje del 34 y 16 respectivamente. LAMPS que fué el segundo más usado a bajado del 25 % hasta el 2 %. En tercer lugar está GROMACS, y Plasma, que es un programa creado por un investigador de la UPV/EHU, sigue estando entre los programas más usados, por encima del 10 %. Destacamos también que CP2K, Amber y VASP aparecen entre los programs más usados, habiendo bajado el de ADF.

Analizando los trabajos, desde la perspectiva de su uso de tiempo de cálculo, evaluado como el tiempo que el trabajo ha estado calculando por el número de cores que emplea, un 98 % del tiempo de cálculo se emplea en trabajos de más de un día de uso por core, Figura 7. Evidentemente, con trabajos pequeños es más difícil acumular tiempo de cálculo. Los trabajos que usan entre 1 y 10 días de cálculo suponen un 22 % de los días de cálculo. En el otro extremo, los mayores trabajos que emplean más de 10 días de cálculo suponen un 75 % del tiempo consumido. Un porcentaje muy alto y que refuerza la necesidad de clusters como Arina con muchos nodos y estables que permiten la ejecución de estos trabajos de forma rutinaria y cómoda.

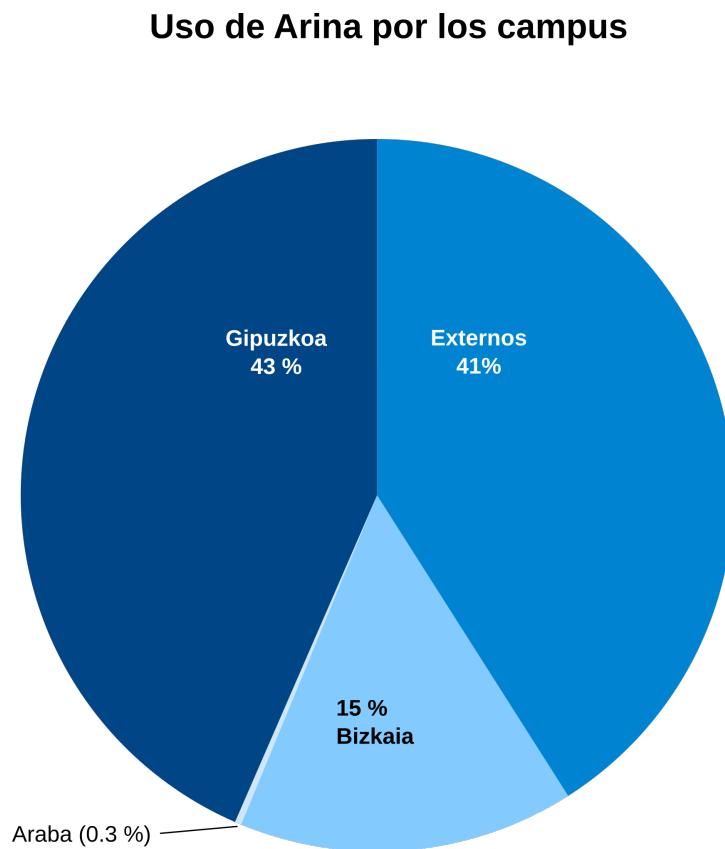


Figura 5: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por campus, el campus de Gipuzkoa es donde se concentran la mayoría del personal investigador usuario.

En la figura 8 clasificamos los trabajos en función del número de cores que emplean. Siempre recomendamos usar 1, 4, 8 cores o un múltiplo de 8. Ello explica los diferentes rangos mostrados en la figura 8. El 49 % de los trabajos corresponden a 4-8 cores. Esto es debido a que podemos considerar la unidad de cálculo el nodo que posee 8 cores y que una mayoría del personal investigador lanza sus cálculos a 8 cores. Los siguientes rangos más usados han sido 8-16 cores, superando a 4 cores por primera vez con un 21 y 13 % respectivamente. El 13 % del tiempo se ha empleado en trabajos que usan más de 16-32 cores, es decir, se han ejecutado en paralelo en más de 1 nodo. Nuevamente el que cerca del 86 % de los trabajos se ejecute en 8 cores o más, pone de manifiesto la necesidad ordenadores multiprocesador como Arina.

Los datos referentes a la memoria no se ha podido analizar pues el gestor de colas no captura correctamente la memoria empleada, especialmente en los trabajos que usan MPI.

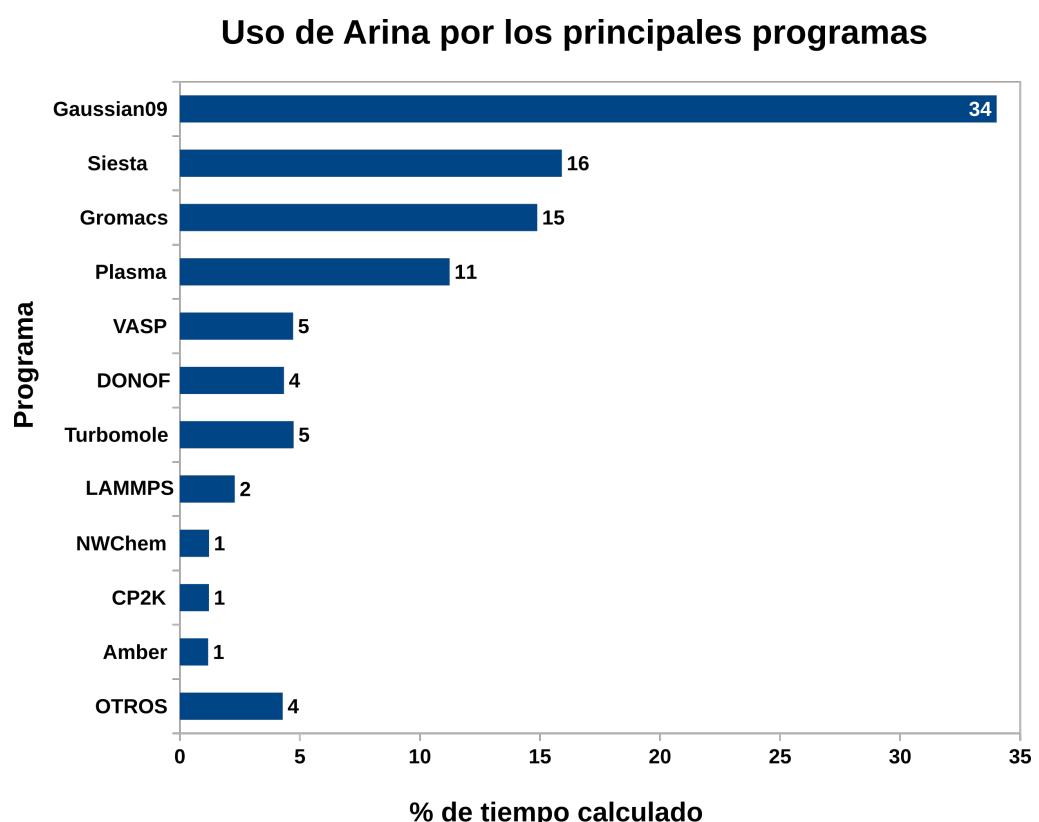


Figura 6: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por diferentes programas. Este año unos pocos consumen la mayor parte del tiempo.

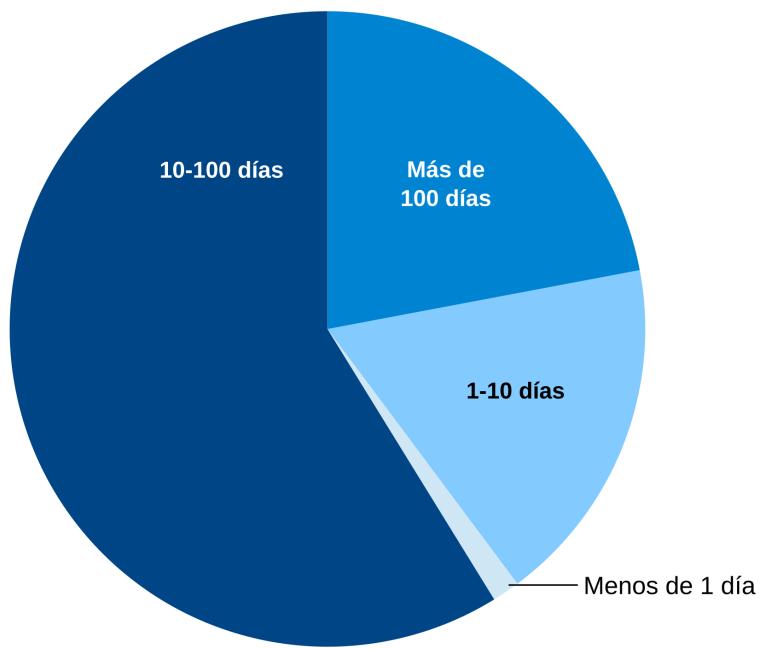


Figura 7: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por los trabajos en función del tiempo que ha usado cada uno. La mayoría de ellos no son trabajos adecuados para PCs por su duración.

Los trabajos de 8 cores son los más usados

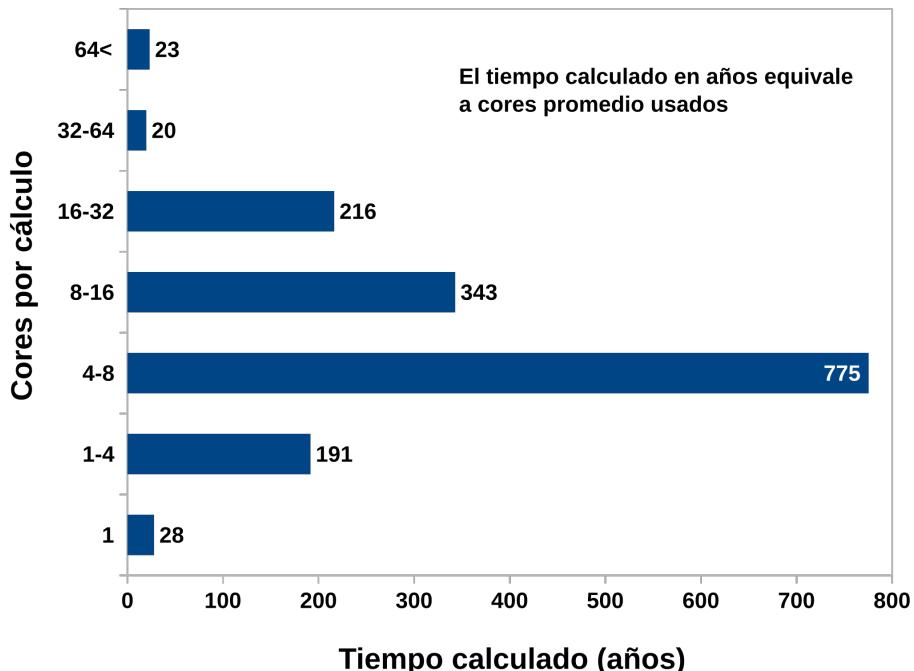


Figura 8: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por los trabajos en función del número de cores.

8. Participación en eventos y formación

8.1. Formación impartida

“Introducción a Linux y Linux de Gestión ” del Master interuniversitario de Química teórica y modelización computacional.

8.2. Presentaciones realizadas

Supercomputación en gigantescos ordenadores y teléfonos móviles. Zientzia-Astea, Durango.

8.3. Eventos Organizados

CFD y supercomputación, I+D+i más competitiva. Escuela Universitaria de Ingeniería Técnica Industrial de Bilbao

9. Tarifas del Servicio

En este año se han revisado las tarifas, por lo que la tarifa establecida fue la siguiente:

■ Tarifa de CPU

• Tarifa interna UPV/EHU

0,02 € por hora y core hasta que el grupo alcance un uso de 10.417 días de cálculo (lo que equivale a 10.000 €).

La tarifa a partir de este consumo, es decir, el resto del tiempo de cálculo se facturará a 0,004 € por hora y core, la quinta parte del primer tramo.

• Tarifa para otros organismos públicos

La tarifa por el uso de los recursos computacionales es de 0,034 € por hora y por core (CPU simple) (sin IVA). Incluye soporte técnico para tareas y problemas comunes. No está incluido el almacenamiento de datos, ni servicios especializados de los técnicos, que dependerá del tipo de asistencia que se requiera, por lo que se deberá describir el proyecto a realizar para establecer un presupuesto.

• Tarifa para organismos privados

La tarifa por el uso de los recursos computacionales es de 0,051 € por hora y por core (CPU simple) (sin IVA). Incluye soporte técnico para tareas y problemas comunes. No está incluido el almacenamiento de datos, ni servicios especializados de los técnicos, que dependerá del tipo de asistencia que se requiera, por lo que se deberá describir el proyecto a realizar para establecer un presupuesto.

■ Tarifa de almacenamiento.

Se facturará por tener datos en Arina siguiendo los siguientes criterios:

- Se facturará menos a los que realmente usen el Servicio, es decir, usan en el Servicio los datos almacenados en el mismo. Por lo tanto, se establece una factura dependiente del tiempo de cálculo consumido al final del año por el grupo.
- No se factura por debajo de 3 GB.
- Se facturará por meses sobre la media de disco usado en cada mes.
- Se emplearán los precios por GB, usando los precios establecidos en la siguiente tabla, que tienen en cuenta el tiempo consumido en el Servicio (IVA no incluido).

Tabla 1: Tarifa de almacenamiento

Rango de uso de CPU (en días al año)	Tarifa de disco (€/GB) al mes
2.500 <cpu<∞	0,1
100 <cpu<2500	0,5
1 <cpu<100	1,0
0 <cpu<1	1,5

10. Encuesta de satisfacción

La Unidad de Calidad e Innovación de los SGIker realiza una encuesta anual de satisfacción sobre el IZO-SGI, los resultados de la misma se muestran en el apéndice D. Los resultados del Servicio son excelentes.

Se recibieron 49 respuestas del personal investigador del Servicio con una valoración media de 4,77 sobre 5 (9,54 sobre 10). De la encuesta podemos destacar que todas las respuestas están entorno a la media de 4,8 excepto la correspondiente a la valoración de las tarifas con la puntuación más baja de 3,9 sobre 5. En realidad 3,9 puntos no representa una puntuación muy baja en valores absolutos pero si en términos relativos si se lo compara con la valoración del resto de elementos evaluados del Servicio. Esta tendencia se viene repitiendo año tras año.

11. Actividad web

11.1. Página web

La web del Servicio sigue cumpliendo su misión de información básica y manual del Servicio. Contiene información sobre el hardware y software del Servicio, su uso, informes, estadísticas, manuales, monitorización en línea de las máquinas, etc. Ésta ha sido visitada 2.902 veces por 1.017 usuarios únicos que han visitado 10.799 páginas. Se aprecia un descenso significativo en el número de visitas de la web respecto a años anteriores. En el apéndice C hay un resumen de las estadísticas de la web.

<http://www.ehu.es/sgi>

11.1.1. Página de monitorización del Servicio

Aunque la podemos englobar dentro de la página del Servicio tiene entidad propia al poder monitorizarse a través de ella numerosa información sobre el estado de las máquinas.

<http://www.ehu.es/sgi/monitorweb>

11.1.2. Formularios del Servicio

<https://www.ehu.eus/sgi/CUENTA/>

Página en la que se agrupan los formularios para solicitar una cuenta, subir publicaciones, etc.

11.2. Blog del Servicio

<http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/>

En el blog del Servicio (<http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/>), se divulga y difunde información relacionada con el Cálculo Científico, el Servicio, HPC, Linux, etc. Se publicaron 30 entradas y recibieron 21.401 visitas durante el 2.015, cifra similar a la del 2.014. En el Apéndice E hemos listado las entradas sobre HPC escritas el 2.015.

11.3. Twitter

<https://twitter.com/izosgi>

En la cuenta twitter del Servicio -IZO-SGI, HPC @UPVEHU (@izosgi)- se comparte información sobre HPC y el Servicio. Por ejemplo, se twittean las entradas en el blog. El número de seguidores del servicio en twitter (@izosgi) ha aumentado a 175.

11.4. Facebook

<https://www.facebook.com/izosgi>

En el perfil de Facebook se comparte en la red social lo publicado en el Blog del Servicio y la cuenta Twitter. El número de seguidores del servicio en Facebook **IZO-SGI, HPC at UPV/EHU** ha aumentado a 54 de los 43 del año pasado.

11.5. Lista de distribución

<http://list.ehu.es/mailman/listinfo/arina-pruebas>

Lista de distribución de correo del Servicio por el que se envían comunicaciones directas al personal investigador dado de alta en el Servicio. Se han enviado 60 anuncios y notificaciones a la lista de distribución del Servicio que tiene 318 subscriptores.

12. Bibliometría

A pesar de ser un requisito mencionar en los agradecimientos al IZO-SGI si se ha empleado el mismo para la realización de cualquier tipo de publicación, en ocasiones, esta mención no se realiza o no se nos hace llegar la cita o referencia de la publicación por lo que las listas inferiores y datos nunca serán completos.

12.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio

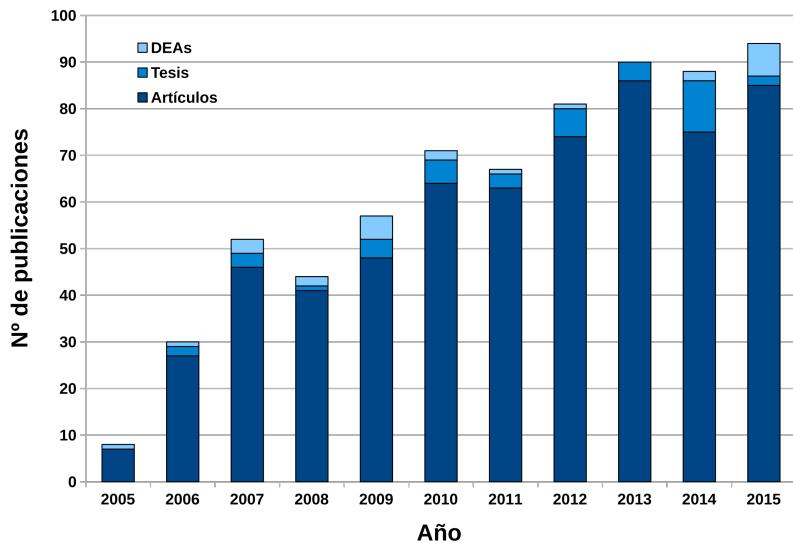


Figura 9: . Evolución del número de publicaciones.

Este año han agradecido al Servicio en sus publicaciones 85 artículos científicos y 2 tesis. En la gráfica 9 podemos ver la evolución del número de publicaciones desde la creación del IZO-SGI. Los datos concretos se encuentran en el apéndice F donde también se recogen las referencias de los artículos publicados en 2015. Se puede obtener más información en la página de publicaciones del Servicio y en el ResearchID del IZO-SGI (F-3072-2010).

En la figura 10 se muestran el número de citas realizadas a artículos, junto a ciertos datos estadísticos como el índice h del IZO-SGI. En la Figura 11 se muestran a los autores que más citan el IZO-SGI.

Muestra de la multidisciplinariedad del IZO-SGI es la Figura 12, donde se reflejan las diversas áreas de investigación en las que el personal investigador que usa el Servicio han publicado de acuerdo al ResearchID F-3072-2010 del IZO-SGI.

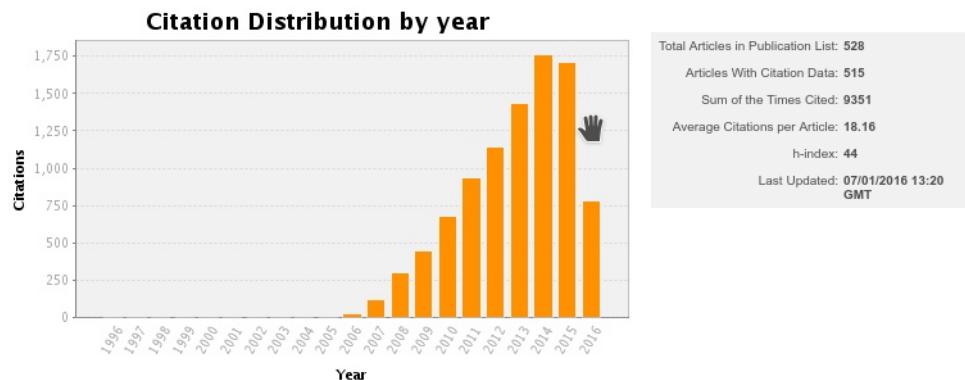


Figura 10: . Número de citas realizadas a artículos que citan al Servicio según la WOK (considerando los últimos 500 artículos).

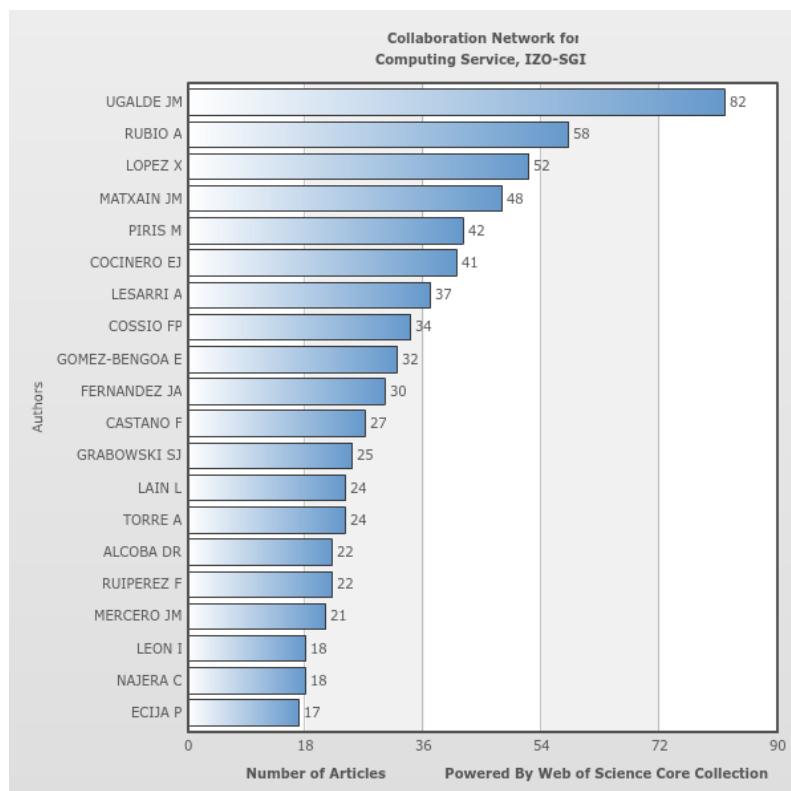


Figura 11: . Autores que más citan el Servicio según la WOK (considerando los últimos 500 artículos).

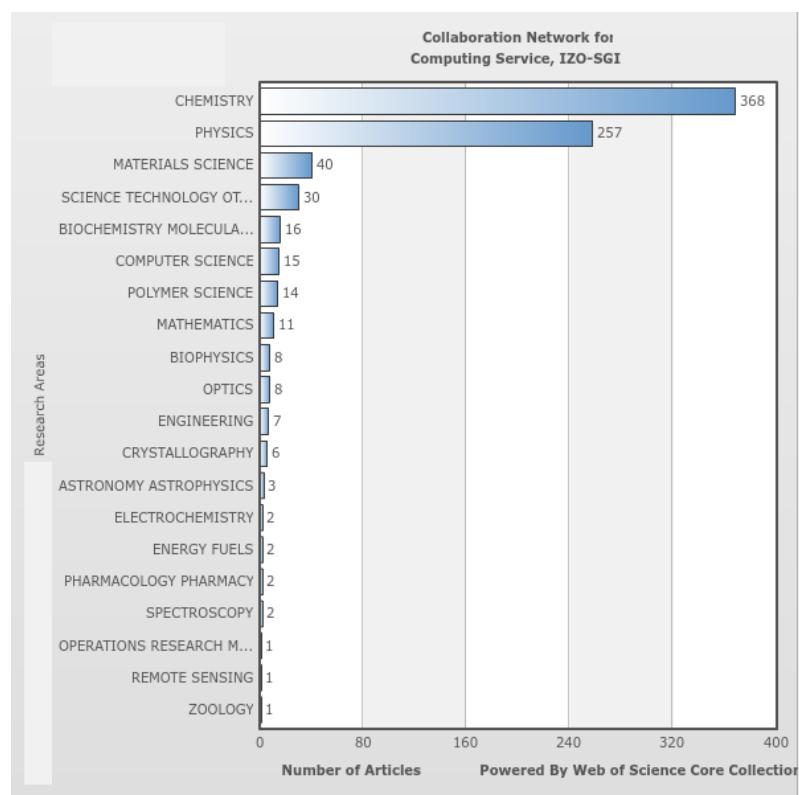


Figura 12: Áreas de investigación en las que los usuarios han publicado artículos citando al Servicio (considerando los últimos 500 artículos).

13. Apéndices

A. Descripción detallada del equipamiento

A.1. Arina

Los recursos propios de IZO-SGI disponen de un cluster con 1852 cores para cálculo, nodos de computación con GPGPUs, 2 sistemas de ficheros de alto rendimiento basados en Lustre y servidores de gestión. En concreto:

80 cores Itanium2 Se puso en marcha a finales del 2004 con 56 procesadores Itanium2. Se amplió a finales del 2006 con otros 32 procesadores Itanium2 y, en 2008, con 192 nuevos cores Itanium2. Quedan 80 cores, que están obsoletos, y el resto ya se ha estropeado.

0 cores opteron Se pusieron en marcha 40 cores en la ampliación de 2006. Ya no funciona ninguno, este año se han apagado los dos últimos.

456 cores xeon E5520 Se adquirieron 464 en 2010, uno ya ha dejado de funcionar, y 4 de estos nodos tienen 2 tarjetas GPGPUs Nvidia (C2050/C2070) cada uno.

648 cores xeon E5645 Se adquirieron en Noviembre de 2011 gracias al convenio firmado con el nanoGUNE.

652 cores xeon E5-2680 v2 Se han comprado durante el 2014, e integrado a finales del 2014.

40 cores xeon E5-2680 v2 Se han comprado dos nodos durante el 2015.

Sistemas de archivos de Alto Rendimiento Se tienen tres sistemas de archivos paralelos de alto rendimiento de 4.7 TB (instalado en 2006), de 22 TB (instalado en 2010 y ampliado el 2011) y de 40 TB instalado a finales del 2014.

Almacenamiento El home con una capacidad de 5.6 TB (Instalado el 2011).

Red La red de comunicaciones para cálculo es Infiniband SDR, DDR, QDR y FDR según el tipo de nodos.

A.2. Péndulo

El grid Péndulo, de diseño completamente propio, hace uso de las salas de ordenadores docentes dispersadas en la UPV/EHU configurándolo como una grid de cálculo científico fuera del horario docente. En la actualidad se compone de una sala, con 60 PC's de 4 cores y de 4 GB de RAM.

A.3. Servicios e infraestructura de la VGTIC

El IZO-SGI usa para sus fines infraestructura, equipamiento y servicios gestionados por la Vicegerencia de las Tecnologías de la Información (VGTIC) de la UPV/EHU.

El equipamiento está instalado en el Centro de Proceso de Datos (CPD) de la UPV/EHU. El CPD de 450 m² y de nueva construcción, en 2006, es un lugar habilitado para la ubicación de computadores y está capacitado con todos los sistemas necesarios para garantizar el correcto funcionamiento de ellos. Dispone de:

- Sistemas de climatización de precisión por expansión directa exclusivo y sistema de descalcificación del agua. Los 7 aparatos de aire acondicionado disponen de una potencia agregada de 208KW, lo que asegura una redundancia N+1 ante posibles fallos.
- Sistema contra incendios. Sistema de detección de incendios mediante detectores ópticos y térmicos. Sistema de extinción por agua nebulizada HI-FOG, que preserva la integridad del equipamiento informático en caso de activación.
- Acometida desde dos transformadores independientes.

- Doble rama eléctrica para los equipos IT, cada una con SAIs (sistemas de alimentación ininterrumpida) independiente y cuadros de baja tensión independientes. Permite redundancia y mantenimiento en caliente de la instalación eléctrica.
- Grupo electrógeno de 750 KVA con dos días de autonomía sin necesidad de repostar.
- Control de acceso, alarmas y vigilancia mediante circuito cerrado de TV.
- Copias de seguridad de datos y sistemas de las máquinas.
- Monitorización por parte de operadores in-situ y sistema de gestión y control de las instalaciones.
- Metodología 5S para la mejora de la calidad.

El equipamiento está monitorizado in-situ e informáticamente y tiene el mantenimiento en regla con revisiones periódicas incluidas.

La Vicegerencia de las TICs dispone en otro edificio incluso de un CPD secundario de respaldo del primer CPD donde mantiene duplicados los servicios básicos para en caso de grave desastre poder mantener la operativa. Por ejemplo, las copias de seguridad se realizan en este CPD secundario para mantener separados los datos y sus copias de seguridad.

Esta moderna infraestructura permite un funcionamiento ininterrumpido 24h*7 días de las máquinas tremadamente estable.

A.4. Otros servicios

La Vicegerencia de las TICs mantiene la red de datos de la UPV/EHU que está formada por tecnologías de primera línea y de última generación. Esto permite que se puedan establecer conexiones con gran ancho de banda (hasta 10Gbps) y un alto grado de seguridad, algo fundamental para trabajar con eficacia en una infraestructura a la que hay que conectarse remotamente. La red dispone de elementos hardware redundantes y líneas de comunicación duplicadas con caminos diversificados, así como firewall perimetral, zonas de red desmilitarizadas, balanceadoras, sistemas hardware de detección de orígenes inseguros o potencialmente peligrosos, etc. La conexión con Internet, hacia el exterior, se realiza a través de i2Basque, la red de datos autonómica, que a su vez conecta con RedIRIS, la red académica y de investigación española.

Dentro de los servicios de investigación que ofrece la Vicegerencia de las TICs cabe destacar, por su relevancia para la computación de altas prestaciones, la de un sistema de almacenamiento masivo para el personal investigador integrable en el Servicio. Este es altamente seguro al existir, entre otras medidas, una copia de respaldo en el CPD secundario y es escalable en capacidad y ancho de banda para satisfacer las necesidades actuales y futuras.

B. Datos de uso de Arina

Tabla 2: Días de cálculo empleados en Arina por el personal investigador.

Investigador	Días	Investigador	Días
sckcorsf	88.286,82	mapmemam	302,35
poamaxg	79.861,91	popugurj	291,39
povhehea	65.467,48	pobrease	283,21
fabusgui	45.350,87	mtpmafel	267,64
poalocad	28.212,08	bcpmeale	240,02
juranga004	27.023,98	qopcomof	232,80
kivpepor	25.045,61	kixsasal	215,93
povpisim	24.972,39	kiaurbao	211,97
pobmabej	23.725,47	faaatnaa	175,34
qfbgoroj	15.107,00	wubcavaa	153,09
pobmugoj	15.058,17	qoparaya	151,36
povrucif	14.917,20	gaazareg	127,99
poblairo	13.327,52	povracoe	85,93
csazusej	13.317,54	poaorloi	84,66
bckmimoj	11.333,89	qfbleoni	73,57
pobrease	10.240,28	quxlegoa	71,77
pobgrgrs	9.753,40	qfparsaf	68,96
qopgobee	6.450,10	kiadugat	67,85
nanululr	5.744,32	weaaromam	62,10
qovzaxxr	5.696,13	pmarkaide001	47,1
kibderua	5.460,77	wepgaara	46,83
pobfoese	4.853,85	faacalea	45,01
kixgrazr	3.450,06	kivpepor	43,67
pmarkaide001	3.378,11	qobmimuj	42,96
naaalcaa	2.989,82	qfxaldad	42,83
pobromam	2.490,59	gbbsaeur	42,56
upetralanda001	2.384,51	acplaing	40,13
ciaazapj	2.060,91	qobffib	26,71
bixbrdem	2.042,61	qfbloala	19,62
pobinini	1.753,05	favecvep	16,59
favcopee	1.666,81	wmpabuf	16,55
kiaolfeb	1.155,76	meamejaj	15,91
poanacuj	1.091,80	weacoexl	8,99
vcposamj	1.075,21	wabpepaa	8,05

Continua en la siguiente página.

Continua de la página anterior.

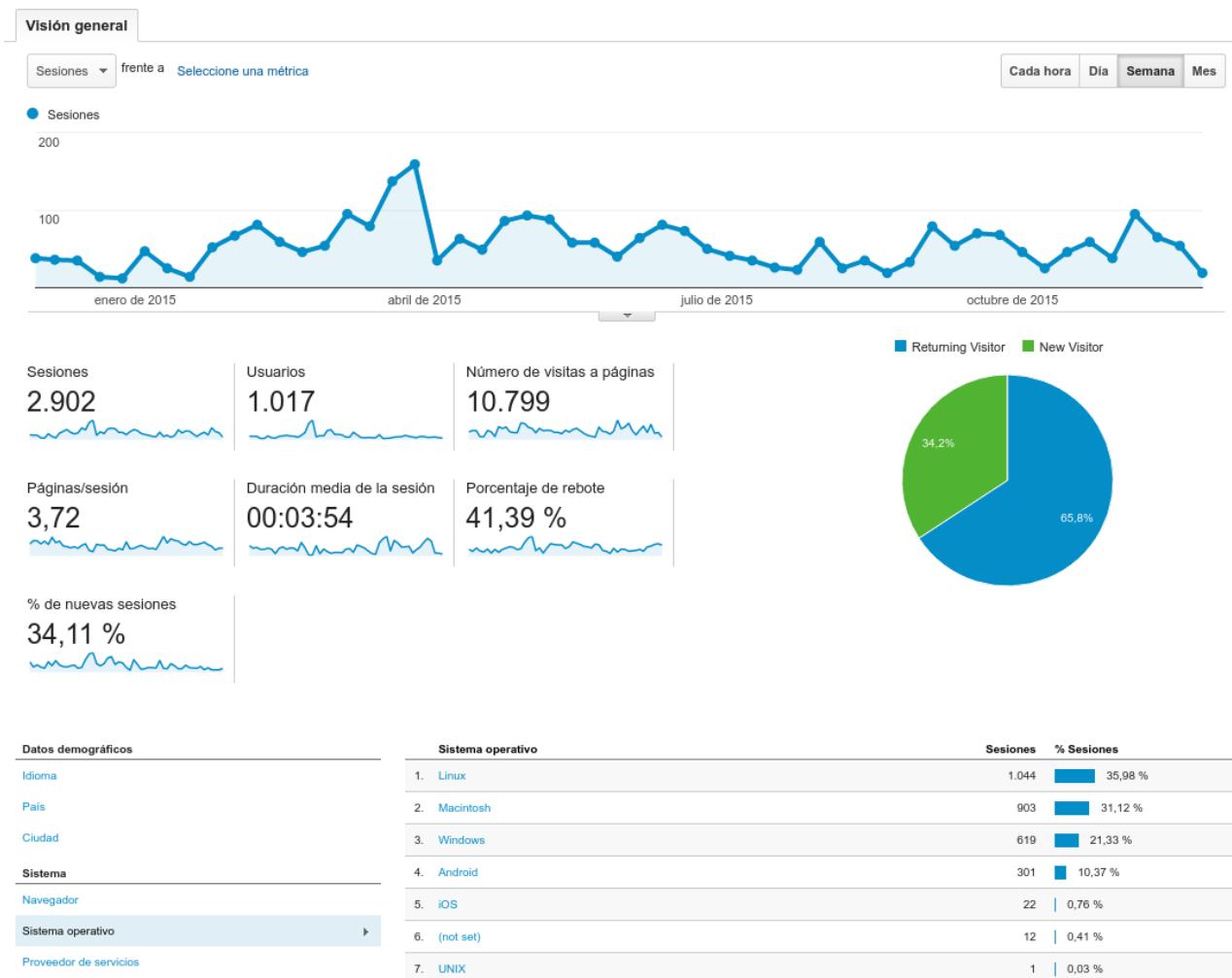
Investigador	Días	Investigador	Días
ggplaarj	995,58	wavalocm	7,69
kixbebej	910,76	wuppobam	6,37
poplopex	841,24	poairurm	5,90
qoprualg	821,76	poagiae	5,34
kiasomal	816,09	bavfepem	4,19
quaurehei	758,24	qopalpec	3,70
anpgaetk	748,15	paslobej	3,65
pobmelat	739,39	gbpaljod	3,33
kiadadag	736,85	povmieci	2,95
sckwankm	719,14	kixmagre	1,46
bcpfimaa	652,35	qfpesmai	1,44
qfpbaprj	634,79	inbchcap	0,80
dixsasam	597,75	quamearx	0,30
waxpooxy	583,62	inppebaa	0,29
mapalmau	574,68	poagumaj	0,18
pobcacad	501,56	inpribeg	0,11
webogare	501,53	quapuoli	0,09
ggpagrom	398,63	sipmuli	0,00
navdesad	397,94	poasobas	0,00
qfpmamoh	392,45	mipdebln	0,00
qfbmagap	358,42	gepalgoi	0,00
qoaarecl	332,92	fabsazob	0,00
qobsalae	324,76		

Tabla 3: Días de cálculo empleados en Arina por los grupos de investigación.

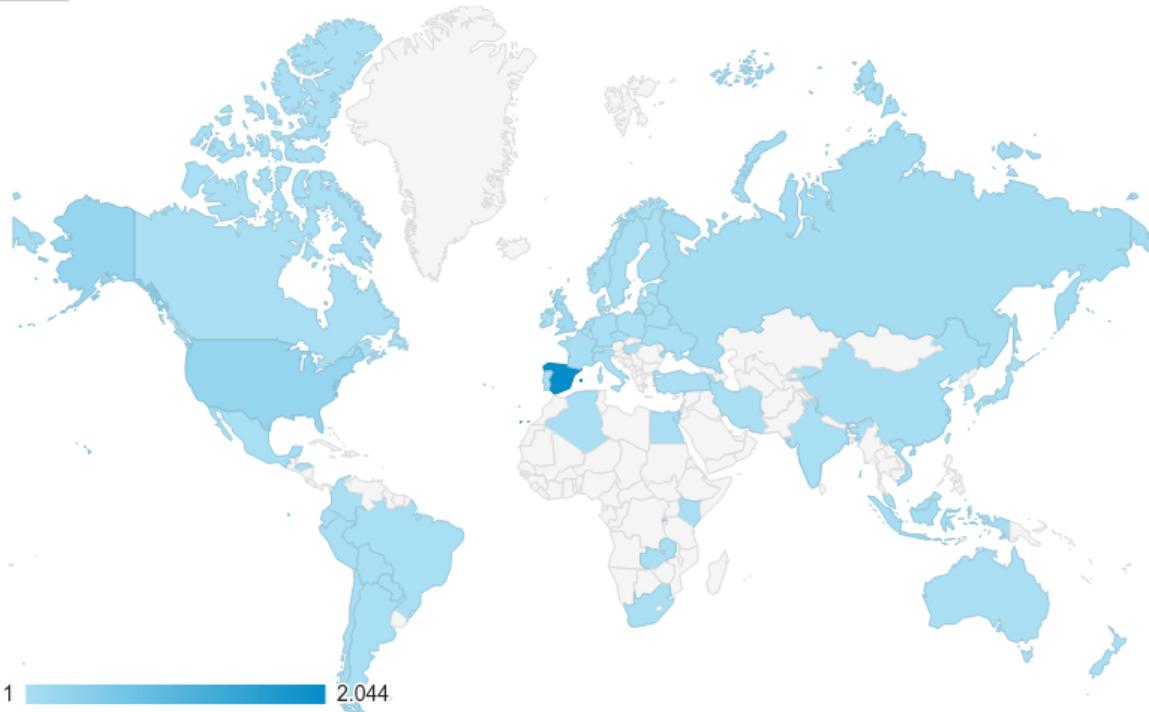
Grupo	Días	Grupo	Días
polymat	129.779,13	mimam	652,35
nanogune	107.348,68	qambm	324,76
qfjfg	74.752,36	mtgfa	267,64
poahh	65.467,48	faraz	175,34
potmb	64.439,79	wuash	153,09
pomps	52.360,49	injss	128,78
kirpp	25.045,61	weaga	117,92
poxlp	23.187,38	waaap	43,67
qocpn	8.448,75	lgsgi	42,96
qofcm	6.177,86	qflp	42,83
ggmer	4.772,32	jiads	40,13
pojuu	3.571,16	wmjcd	16,55
nanopeji	3.387,76	mejsl	15,91
wdaga	2.384,51	waijo	7,69
gbdga	2.085,18	wuebp	6,37
qfila	1.387,39	pajlb	3,65
waars	1.310,80	gbmgg	3,33
arinadm	1.288,02	qpjag	0,29
vcnor	1.075,21	inagr	0,11
qtftp	877,03	sipeo	0,00
qofpg	825,46	geaaa	0,00
anjbc	748,15	fajbr	0,00

C. Estadísticas de la web del Servicio

En la primera página de las estadísticas “*visión general de público*”, la primera gráfica muestra las visitas por semana, la segunda el origen de las vistas, y la tercera el origen desde dentro de España.



Sesiones ▾



1 2.044

Dimensión primaria: País Ciudad Continente Subcontinente

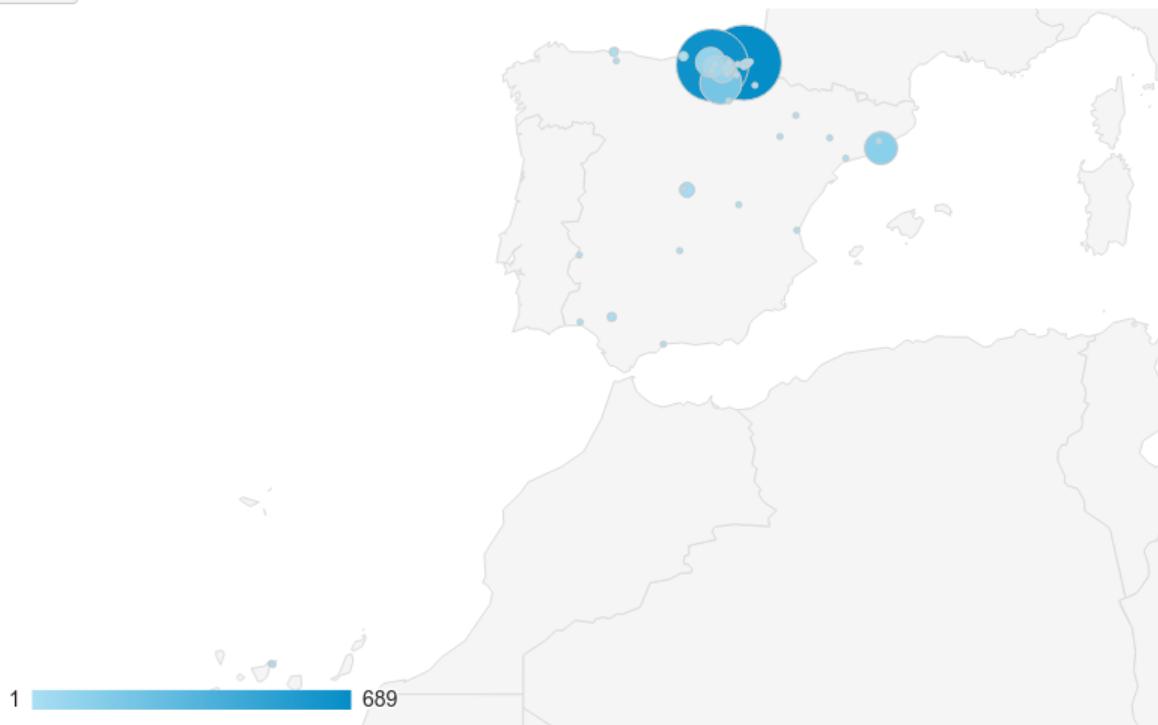
Dimensión secundaria ▾

avanzado



País	Adquisición			Comportamiento		
	Sesiones	% de nuevas sesiones	Nuevos usuarios	Porcentaje de rebote	Páginas/sesión	Duración media de la sesión
	2.902 % del total: 100,00 % (2.902)	34,22 % Media de la vista: 34,11 % (0,30 %)	993 % del total: 100,30 % (990)	41,39 % Media de la vista: 41,39 % (0,00 %)	3,72 Media de la vista: 3,72 (0,00 %)	00:03:54 Media de la vista: 00:03:54 (0,00 %)
1. Spain	2.044 (70,43 %)	19,37 %	396 (39,88 %)	28,18 %	4,50	00:05:00
2. United States	249 (8,58 %)	95,18 %	237 (23,87 %)	75,90 %	1,25	00:00:27
3. (not set)	115 (3,96 %)	95,65 %	110 (11,08 %)	89,57 %	1,17	00:00:14
4. United Kingdom	101 (3,48 %)	18,81 %	19 (1,91 %)	32,67 %	4,81	00:07:14
5. Russia	76 (2,62 %)	6,58 %	5 (0,50 %)	89,47 %	1,14	00:00:38
6. Indonesia	45 (1,55 %)	11,11 %	5 (0,50 %)	26,67 %	2,51	00:00:48
7. Netherlands	36 (1,24 %)	80,56 %	29 (2,92 %)	86,11 %	1,31	00:00:03
8. China	24 (0,83 %)	100,00 %	24 (2,42 %)	95,83 %	1,04	00:00:01
9. France	24 (0,83 %)	37,50 %	9 (0,91 %)	75,00 %	2,92	00:03:13
10. Germany	14 (0,48 %)	71,43 %	10 (1,01 %)	85,71 %	1,14	00:00:09

Sesiones ▾



Dimensión primaria: Ciudad Otros ▾

Dimensión secundaria ▾

Ciudad ?	Adquisición			Comportamiento		
	Sesiones ?	% de nuevas sesiones ?	Nuevos usuarios ?	Porcentaje de rebote ?	Páginas/sesión ?	Duración media de la sesión ?
	2.044 % del total: 70,43 % (2.902)	19,37 % Media de la vista: 34,11 % (-43,21 %)	396 % del total: 40,00 % (990)	28,18 % Media de la vista: 41,39 % (-31,91 %)	4,50 Media de la vista: 3,72 (20,95 %)	00:05:00 Media de la vista: 00:03:54 (27,89 %)
1. San Sebastian	689 (33,71 %)	20,32 %	140 (35,35 %)	28,45 %	5,06	00:04:03
2. Bilbao	649 (31,75 %)	22,19 %	144 (36,36 %)	26,35 %	4,93	00:05:43
3. Vitoria-Gasteiz	217 (10,62 %)	12,90 %	28 (7,07 %)	20,28 %	4,77	00:07:29
4. Barcelona	131 (6,41 %)	8,40 %	11 (2,78 %)	38,17 %	2,19	00:03:25
5. Leioa	99 (4,84 %)	19,19 %	19 (4,80 %)	22,22 %	3,84	00:02:59
6. Durango	95 (4,65 %)	8,42 %	8 (2,02 %)	22,11 %	3,59	00:02:55
7. Basauri	50 (2,45 %)	10,00 %	5 (1,26 %)	58,00 %	2,52	00:08:47
8. Madrid	26 (1,27 %)	34,62 %	9 (2,27 %)	46,15 %	2,65	00:03:00
9. Eibar	16 (0,78 %)	25,00 %	4 (1,01 %)	25,00 %	3,12	00:04:20
10. Seville	9 (0,44 %)	0,00 %	0 (0,00 %)	44,44 %	2,22	00:07:36

D. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI

La puntuación está en una escala de 0 a 5.

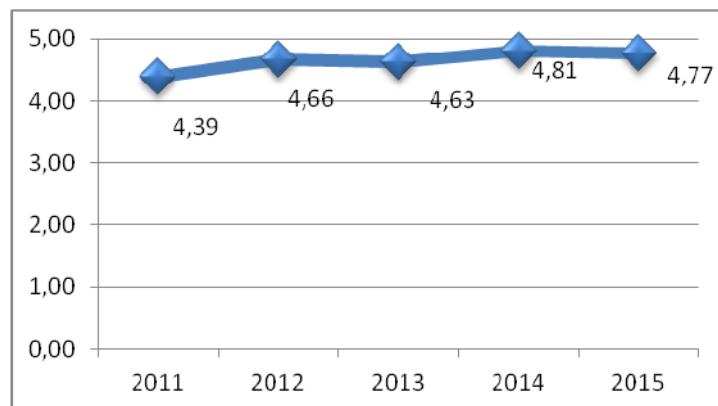


Figura 13: Evolución de la Valoración durante los últimos años.

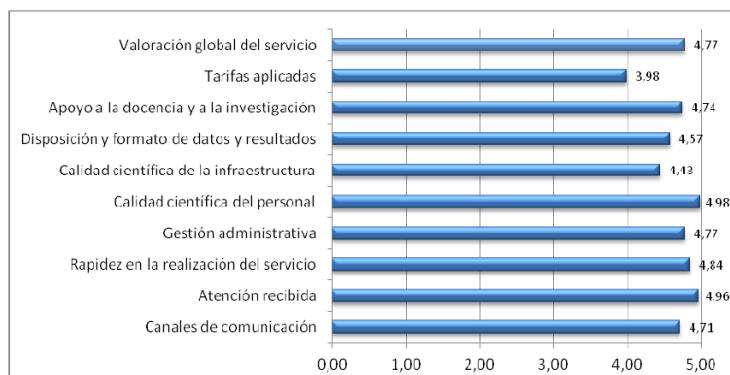


Figura 14: Valoración del 2015.

E. Posts sobre HPC publicado en el blog

En este listado se muestran las entradas publicadas en el Servicio y relacionadas con HPC.

Titulo	Disponibilidad		
Tianhe2 continues as the most powerfull supercomputer of the world	Eng	Esp	Eus
¿Podemos apoyar tus solicitudes para a lograr financiación para tu investigación?		Esp	
El techo de cristal en computación, ¿realmente hago la ciencia que quiero?		Esp	
Computing Aided Design o el HPC en la empresa		Esp	
Memoria sobre el uso de STAR-CCM+ en 2014		Esp	
2014 a positive year for the IZO-SGI Computing Service	Eng	Esp	Eus

F. Publicaciones del Servicio

F.1. Datos históricos

En las siguientes tablas se muestran un resumen de las publicaciones recogidas por el Servicio en las que se agradece su participación. En DEAs están agrupados trabajos fin de carrera y de master.

Tabla 4: Artículos científicos en los que se agradece el uso del IZO-SGI.

Año	Publicaciones	Año	Publicaciones
2015	85		
2014	75	2009	48
2013	88	2008	41
2012	74	2007	46
2011	63	2006	27
2010	65	2005	7

Tabla 5: Tesis en las que se menciona el uso del IZO-SGI.

Año	Tesis	Año	Tesis
2015	2	2014	11
2013	4	2009	3
2012	6	2008	1
2011	3	2007	3
2010	5	2006	2

Tabla 6: Proyectos de Fin de Grado o Master científicos en los que se ha usado el IZO-SGI.

Año	PFM/PFG	Año	PFM/PFG
2015	7	2014	2
2013	0	2009	5
2012	1	2008	1
2011	1	2007	3
2010	2	2006	1

F.2. Publicaciones recogidas

-
- [1] D. Albesa-Jove, F. Mendoza, A. Rodrigo-Unzueta, F. Gomollon-Bel, J. O. Cifuentes, S. Urresti, N. Comino, H. Gomez, J. Romero-Garcia, J. M. Lluch, E. Sancho-Vaello, X. Biarnes, A. Planas, P. Merino, L. Masgrau, and M. E. Guerin. A native ternary complex trapped in a crystal reveals the catalytic mechanism of a retaining glycosyltransferase. *Angewandte Chemie-International Edition*, 54(34):9898–9902, 2015.
 - [2] U. Aldasoro, L. F. Escudero, M. Merino, J. F. Monge, and G. Perez. On parallelization of a stochastic dynamic programming algorithm for solving large-scale mixed 0-1 problems under uncertainty. *Top*, 23(3):703–742, 2015.
 - [3] I. Alkorta, J. Elguero, and S. J. Grabowski. Pnicogen and hydrogen bonds: complexes between ph₃x+ and ph₂x systems. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(5):3261–3272, 2015.
 - [4] I. Asenjo-Sanz, A. Veloso, J. I. Miranda, A. Alegria, J. A. Pomposo, and F. Barroso-Bujans. Zwitterionic ring-opening copolymerization of tetrahydrofuran and glycidyl phenyl ether with b(c6f5)(3). *Macromolecules*, 48(6):1664–1672, 2015.
 - [5] E. Axpe, A. B. Garcia-Arribas, J. I. Mujika, D. Merida, A. Alonso, X. Lopez, J. A. Garcia, J. M. Ugalde, F. M. Goni, and F. Plazaola. Ceramide increases free volume voids in dppc membranes. *Rsc Advances*, 5(55):44282–44290, 2015.
 - [6] J. M. Azpiroz, I. Infante, and F. De Angelis. First-principles modeling of core/shell quantum dot sensitized solar cells. *Journal of Physical Chemistry C*, 119(22):12739–12748, 2015.
 - [7] J. M. Azpiroz, J. M. Ugalde, L. Etgar, I. Infante, and F. De Angelis. The effect of tio₂ surface on the electron injection efficiency in pbs quantum dot solar cells: a first-principles study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(8):6076–6086, 2015.
 - [8] L. Betancourt-Mendiola, I. Valois-Escamilla, T. Arbeloa, J. Banuelos, I. L. Arbeloa, J. O. Flores-Rizo, R. R. Hu, E. Lager, C. F. A. Gomez-Duran, J. L. Belmonte-Vazquez, M. R. Martinez-Gonzalez, I. J. Arroyo, C. A. Osorio-Martinez, E. Alvarado-Martinez, A. Urias-Benavides, B. D. Gutierrez-Ramos, B. Z. Tang, and E. Pena-Cabrera. Scope and limitations of the liebeskind-srogl cross-coupling reactions involving the biemann bodipy. *Journal of Organic Chemistry*, 80(11):5771–5782, 2015.
 - [9] S. Betanzos-Lara, N. P. Chmel, M. T. Zimmerman, L. R. Barron-Sosa, C. Garino, L. Salassa, A. Rodger, J. L. Brumaghim, I. Gracia-Mora, and N. Barba-Behrens. Redox-active and dna-binding coordination complexes of clotrimazole. *Dalton Transactions*, 44(8):3673–3685, 2015.
 - [10] C. Bianchi and R. Zangi. Molecular dynamics study of the recognition of dimethylated cpg sites by mbd1 protein. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 55(3):636–644, 2015.
 - [11] C. Bosch, B. Fiser, E. Gomez-Bengoa, B. Bradshaw, and J. Bonjoch. Approach to cis-phlegmarine alkaloids via stereodivergent reduction: Total synthesis of (+)-serratezomine e and putative structure of (-)-huperzine n. *Organic Letters*, 17(20):5084–5087, 2015.
 - [12] A. J. Calahorro, E. S. San Sebastian, A. Salinas-Castillo, J. M. Seco, C. Mendicute-Fierro, B. Fernandez, and A. Rodriguez-Dieguex. Effect of pi-pi stacking interactions on the emission properties of cadmium metal-organic frameworks based on 1,4-bis(4-pyridyl)-2,3-diaza-1,3-butadiene. *Crystengcomm*, 17(19):3659–3666, 2015.
 - [13] D. Casanova. Bright fission: Singlet fission into a pair of emitting states. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 11(6):2642–2650, 2015.

- [14] L. M. Castello, C. Najera, J. M. Sansano, O. Larranaga, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Enantioselective synthesis of exo-4-nitroprolinates from nitroalkenes and azomethine ylides catalyzed by chiral phosphoramidite center dot silver(i) or copper(ii) complexes. *Synthesis-Stuttgart*, 47(7):934–943, 2015.
- [15] J. Cioslowski, M. Piris, and E. Matito. Robust validation of approximate 1-matrix functionals with few-electron harmonium atoms. *Journal of Chemical Physics*, 143(21):10, 2015.
- [16] J. Comas-Barcelo, R. S. Foster, B. Fiser, E. Gomez-Bengoa, and J. P. A. Harrity. Cu-promoted sydnone cycloadditions of alkynes: Scope and mechanism studies. *Chemistry-a European Journal*, 21(8):3257–3263, 2015.
- [17] E. Conde, I. Rivilla, A. Larumbe, and F. P. Cossio. Enantiodivergent synthesis of bis-spiropyrrolidines via sequential interrupted and completed (3+2) cycloadditions. *Journal of Organic Chemistry*, 80(23):11755–11767, 2015.
- [18] A. Correa, B. Fiser, and E. Gomez-Bengoa. Iron-catalyzed direct alpha-arylation of ethers with azoles. *Chemical Communications*, 51(69):13365–13368, 2015.
- [19] P. R. R. Costa, J. M. Sansano, U. Cossio, J. C. F. Barcellos, A. G. Dias, C. Najera, A. Arrieta, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Synthesis of chromen 4,3-b pyrrolidines by intramolecular 1,3-dipolar cycloadditions of azomethine ylides: An experimental and computational assessment of the origin of stereocontrol. *European Journal of Organic Chemistry*, (21):4689–4698, 2015.
- [20] A. Delgado-Camon, C. Jarne, V. L. Cebolla, O. Larranaga, A. de Cozar, F. P. Cossio, Y. Vara, A. Dominguez, L. Membrado, J. Galban, and R. Garriga. Resonance driven regioselective demethylation of berberine. microwave assisted synthesis of berberrubine and its assessment as fluorescent chemosensor for alkanes. *Tetrahedron*, 71(36):6148–6154, 2015.
- [21] J. Demaison, N. C. Craig, P. Groner, P. Ecija, E. J. Cocinero, A. Lesarri, and H. D. Rudolph. Accurate equilibrium structures for piperidine and cyclohexane. *Journal of Physical Chemistry A*, 119(9):1486–1493, 2015.
- [22] Jean Demaison, Norman C. Craig, Peter Groner, Patricia Ecija, Emilio J. Cocinero, Alberto to Lesarri, and Heinz Dieter Rudolph. Accurate equilibrium structures for piperidine and cyclohexane. *The journal of physical chemistry. A*, 119(9):1486–93, 2015.
- [23] M. M. Deshmukh, S. R. Gadre, and E. J. Cocinero. Stability of conformationally locked free fructose: theoretical and computational insights. *New Journal of Chemistry*, 39(11):9006–9018, 2015.
- [24] P. Ecija, I. Uriarte, F. J. Basterretxea, J. Millan, A. Lesarri, J. A. Fernandez, and E. J. Cocinero. Structural distortion of the epoxy groups in norbornanes: A rotational study of exo-2,3-epoxynorbornane. *Chemphyschem*, 16(12):2609–2614, 2015.
- [25] B. Escribano, E. Akhmatkaya, S. Reich, and J. M. Azpiroz. Multiple-time-stepping generalized hybrid monte carlo methods. *Journal of Computational Physics*, 280:1–20, 2015.
- [26] F. M. Fernandez, D. R. Alcoba, O. B. Ona, A. Torre, and L. Lain. Electronic densities in systems with fractionally charged nuclei: a symmetry breaking study. *Journal of Mathematical Chemistry*, 53(1):236–249, 2015.
- [27] B. Fiser, Z. Mucsi, E. Gomez-Bengoa, B. Viskolcz, S. J. K. Jensen, and I. G. Csizmadia. Radicalicity: A scale to compare reactivities of radicals. *Chemical Physics Letters*, 618:99–101, 2015.
- [28] J. Flores-Ferrandiz, B. Fiser, E. Gomez-Bengoa, and R. Chinchilla. Solvent-induced reversal of enantioselectivity in the synthesis of succinimides by the addition of aldehydes to maleimides catalysed by carbamate-monoprotected 1,2-diamines. *European Journal of Organic Chemistry*, (6):1218–1225, 2015.

-
- [29] J. Flores-Ferrandiz, A. Stiven, L. Sotorrios, E. Gomez-Bengoa, and R. Chinchilla. Enantioselective addition of aryl ketones and acetone to nitroalkenes organocatalyzed by carbamate-monoprotected cyclohexa-1,2-diamines. *Tetrahedron-Asymmetry*, 26(17):970–979, 2015.
 - [30] E. Formoso, J. I. Mujika, S. J. Grabowski, and X. Lopez. Aluminum and its effect in the equilibrium between folded/unfolded conformation of nadh. *Journal of Inorganic Biochemistry*, 152:139–146, 2015.
 - [31] C. Giansante, I. Infante, E. Fabiano, R. Grisorio, G. P. Suranna, and G. Gigli. "darker-than-black" pbs quantum dots: Enhancing optical absorption of colloidal semiconductor nanocrystals via short conjugated ligands. *Journal of the American Chemical Society*, 137(5):1875–1886, 2015.
 - [32] D. Giganti, D. Albesa-Jove, S. Urresti, A. Rodrigo-Unzueta, M. A. Martinez, N. Comino, N. Barilone, M. Bellinzoni, A. Chenal, M. E. Guerin, and P. M. Alzari. Secondary structure reshuffling modulates glycosyltransferase function at the membrane. *Nature Chemical Biology*, 11(1):16–+, 2015.
 - [33] Q. Gou, G. Feng, L. Evangelisti, M. Vallejo-Lopez, L. Spada, A. Lesarri, E. J. Cenicero, and W. Caminati. Internal dynamics in halogen-bonded adducts: A rotational study of chlorotrifluoromethane-formaldehyde. *Chemistry-a European Journal*, 21(10):4148–4152, 2015.
 - [34] S. J. Grabowski. Cleavage of hydrogen by activation at a single non-metal centre - towards new hydrogen storage materials. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(20):13539–13546, 2015.
 - [35] S. J. Grabowski. Lewis acid-lewis base interactions: From nf₃+center dot center dot center dot nch and nf₄+center dot center dot center dot nch complexes to nf₃+center dot center dot center dot center dot(nch)(n) and nf₄+center dot center dot center dot(nch)(n) clusters. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1053:289–297, 2015.
 - [36] S. J. Grabowski. pi-hole bonds: Boron and aluminum lewis acid centers. *Chemphyschem*, 16(7):1470–1479, 2015.
 - [37] S. J. Grabowski. Triel bonds, pi-hole-pi-electrons interactions in complexes of boron and aluminium trihalides and trihydrides with acetylene and ethylene. *Molecules*, 20(6):11297–11316, 2015.
 - [38] R. Grande-Aztatzi, J. L. Cabellos, R. Islas, I. Infante, J. M. Mercero, A. Restrepo, and G. Merino. Planar pentacoordinate carbons in cbe₅– derivatives. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(6):4620–4624, 2015.
 - [39] A. Habtemariam, C. Garino, E. Ruggiero, S. Alonso-de Castro, J. C. Mareque-Rivas, and L. Salassa. Photorelease of pyridyl esters in organometallic ru(ii) arene complexes. *Molecules*, 20(4):7276–7291, 2015.
 - [40] J. Houmoller, M. Wanko, A. Rubio, and S. B. Nielsen. Effect of a single water molecule on the electronic absorption by o- and p-nitrophenolate: A shift to the red or to the blue? *Journal of Physical Chemistry A*, 119(47):11498–11503, 2015.
 - [41] I. Husu, M. Magyar, T. Szabo, B. Fiser, E. Gomez-Bengoa, and L. Nagy. Structure and binding efficiency relations of q(b) site inhibitors of photosynthetic reaction centres. *General Physiology and Biophysics*, 34(2):119–133, 2015.
 - [42] M. K. Jahn, E. Mendez, K. P. R. Nair, P. D. Godfrey, D. McNaughton, P. Ecija, F. J. Basterretxea, E. J. Cenicero, and J. U. Grabow. Conformational steering in dicarboxy acids: the native structure of succinic acid. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(30):19726–19734, 2015.

- [43] S. M. Joshi, A. de Cozar, V. Gomez-Vallejo, J. Koziorowski, J. Llop, and F. P. Cossii. Synthesis of radiolabelled aryl azides from diazonium salts: experimental and computational results permit the identification of the preferred mechanism. *Chemical Communications*, 51(43):8954–8957, 2015.
- [44] L. Lain, A. Torre, D. R. Alcoba, O. B. Ona, and G. E. Massaccesi. A study of the compactness of wave functions based on shannon entropy indices: a seniority number approach. *Theoretical Chemistry Accounts*, 134(7):7, 2015.
- [45] U. A. Laskay, C. Garino, Y. O. Tsybin, L. Salassa, and A. Casini. Gold finger formation studied by high-resolution mass spectrometry and in silico methods. *Chemical Communications*, 51(9):1612–1615, 2015.
- [46] I. Leon, R. Montero, A. Longarte, and J. A. Fernandez. Influence of dispersive forces on the final shape of a reverse micelle. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(3):2241–2245, 2015.
- [47] F. Llano-Tome, B. Bazan, M. K. Urtiaga, G. Barandika, A. Fidalgo-Marijuan, R. F. de Luis, and M. I. Arriortua. Water-induced phase transformation of a cu-ii coordination framework with pyridine-2,5-dicarboxylate and di-2-pyridyl ketone: synchrotron radiation analysis. *Crystengcomm*, 17(33):6346–6354, 2015.
- [48] X. Lopez and M. Piris. Pnof5 calculations based on the "thermodynamic fragment energy method": $C_{nh}2n+2$ ($n = 1, 10$) and $(fh)(n)$ ($n = 1, 8$) as test cases. *Theoretical Chemistry Accounts*, 134(12):6, 2015.
- [49] Xabier Lopez, Mario Piris, Fernando Ruiperez, and Jesus M. Ugalde. Performance of pnof6 for hydrogen abstraction reactions. *Journal of Physical Chemistry A*, 119(27):6981–6988, 2015.
- [50] Noelia Luque, Jon I. Mujika, Elena Formoso, and Xabier Lopez. Aluminum interaction with 2,3-diphosphoglyceric acid. a computational study. *Rsc Advances*, 5(78):63874–63881, 2015.
- [51] F. Mahmoudinobar, C. L. Dias, and R. Zangi. Role of side-chain interactions on the formation of α -helices in model peptides. *Physical Review E*, 91(3):8, 2015.
- [52] J. Mancebo-Aracil, C. Najera, L. M. Castello, J. M. Sansano, O. Larranaga, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Regio and diastereoselective multicomponent 1,3-dipolar cycloadditions between proline hydrochlorides, aldehydes and dipolarophiles for the direct synthesis of pyrrolizidines. *Tetrahedron*, 71(52):9645–9661, 2015.
- [53] H. Manzano, E. Durgun, I. Lopez-Arbeloa, and J. C. Grossman. Insight on tricalcium silicate hydration and dissolution mechanism from molecular simulations. *Acs Applied Materials & Interfaces*, 7(27):14726–14733, 2015.
- [54] L. Martinez. Strongly regular m-cayley circulant graphs and digraphs. *Ars Mathematica Contemporanea*, 8(1):195–213, 2015.
- [55] L. Martinez, M. Milanic, L. Legarreta, P. Medvedev, I. Malaina, and I. M. de la Fuente. A combinatorial approach to the design of vaccines. *Journal of Mathematical Biology*, 70(6):1327–1358, 2015.
- [56] J. M. Mercero, A. I. Boldyrev, G. Merino, and J. M. Ugalde. Recent developments and future prospects of all-metal aromatic compounds. *Chemical Society Reviews*, 44(18):6519–6534, 2015.
- [57] Jose M. Mercero, Eduard Matito, Fernando Ruiperez, Ivan Infante, Xabier Lopez, and Jesus M. Ugalde. The electronic structure of the al-3(-) anion: Is it aromatic? *Chemistry-a European Journal*, 21(27):9610–9614, 2015.

- [58] F. J. N. Moles, G. Guillena, C. Najera, and E. Gomez-Bengoa. Glyoxylic acid versus ethyl glyoxylate for the aqueous enantioselective synthesis of alpha- hydroxy-gamma-keto acids and esters by the n-tosyl-(s-a)-binam-l-prolinamide-organocatalyzed aldol reaction. *Synthesis-Stuttgart*, 47(4):549–561, 2015.
- [59] J. M. Oliva, D. R. Alcoba, O. B. Ona, A. Torre, L. Lain, and J. Michl. Toward (car)borane-based molecular magnets. *Theoretical Chemistry Accounts*, 134(2):8, 2015.
- [60] O. B. Ona, J. J. Torres-Vega, A. Torre, L. Lain, D. R. Alcoba, A. Vasquez-Espinal, and W. Tiznado. Chemical bonding analysis in boron clusters by means of localized orbitals according to the electron localization function topology. *Theoretical Chemistry Accounts*, 134(3):9, 2015.
- [61] A. Pascual, H. Sardon, F. Ruiperez, R. Gracia, P. Sudam, A. Veloso, and D. Mecerreyres. Experimental and computational studies of ring-opening polymerization of ethylene brassylicate macrolactone and copolymerization with epsilon-caprolactone and tbd-guanidine organic catalyst. *Journal of Polymer Science Part a-Polymer Chemistry*, 53(4):552–561, 2015.
- [62] J. Perez-Miqueo, A. Telleria, M. Munoz-Olasagasti, A. Altube, E. Garcia-Lecina, A. de Cozar, and Z. Freixa. Azobenzene-functionalized iridium(iii) triscyclometalated complexes. *Dalton Transactions*, 44(5):2075–2091, 2015.
- [63] U. Petralanda and I. Etxebarria. Structural instabilities and sequence of phase transitions in srbi2nb2o9 and srbi2ta2o9 from first principles and monte carlo simulations. *Physical Review B*, 91(18):8, 2015.
- [64] M. Petrovic, D. Scarpi, B. Fiser, E. Gomez-Bengoa, and E. G. Occhiato. Annulated n-heterocycles by tandem gold(i)-catalyzed 3,3 -rearrangement/nazarov reaction of propargylic ester derivatives: an experimental and computational study. *European Journal of Organic Chemistry*, (18):3943–3956, 2015.
- [65] M. Piris and N. H. March. Is the hartree-fock prediction that the chemical potential μ of non-relativistic neutral atoms is equal to minus the ionisation potential i sensitive to electron correlation? *Physics and Chemistry of Liquids*, 53(6):696–705, 2015.
- [66] M. Piris and N. H. March. Low-lying isomers of free-space halogen clusters with tetrahedral and octahedral symmetry in relation to stable molecules such as sf6. *The journal of physical chemistry. A*, 119(40):10190–4, 2015.
- [67] E. Ramos-Cordoba, X. Lopez, M. Piris, and E. Matito. H-4: A challenging system for natural orbital functional approximations. *Journal of Chemical Physics*, 143(16):7, 2015.
- [68] M. D. Retamosa, A. de Cozar, M. Sanchez, J. I. Miranda, J. M. Sansano, L. M. Castello, C. Najera, A. I. Jimenez, F. J. Sayago, C. Cativiela, and F. P. Cossio. Remote substituent effects on the stereoselectivity and organocatalytic activity of densely substituted unnatural proline esters in aldol reactions. *European Journal of Organic Chemistry*, (11):2503–2516, 2015.
- [69] E. Rezabal, J. M. Asua, and J. M. Ugalde. Homopolymerization of ethylene by palladium phosphine sulfonate catalysts: The role of structural and environmental factors. *Organometallics*, 34(1):373–380, 2015.
- [70] E. Rezabal and T. Schafer. Ionic liquids as solvents of polar and non-polar solutes: affinity and coordination. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(22):14588–14597, 2015.
- [71] A. Ruiz-Olalla, M. D. Retamosa, and F. P. Cossio. Densely substituted l-proline esters as catalysts for asymmetric michael additions of ketones to nitroalkenes. *Journal of Organic Chemistry*, 80(11):5588–5599, 2015.

- [72] V. San Nacianceno, S. Azpeitia, L. Ibarlucea, C. Mendicute-Fierro, A. Rodriguez-Dieguez, J. M. Seco, E. San Sebastian, and M. A. Garralda. Stereoselective formation and catalytic activity of hydrido(acylphosphane)(chlorido)(pyrazole)-rhodium(iii) complexes. experimental and dft studies. *Dalton Transactions*, 44(29):13141–13155, 2015.
- [73] D. Scarpi, S. Begliomini, C. Prandi, A. Oppedisano, A. Deagostino, E. Gomez-Bengoa, B. Fiser, and E. G. Occhiato. Gold-catalysed synthesis of exocyclic vinylogous amides and -amino ketones: A detailed study on the 5-exo/6-endo-dig selectivity, methodology and scope. *European Journal of Organic Chemistry*, (15):3251–3265, 2015.
- [74] J. M. Seco, A. J. Calahorro, E. San Sebastian, A. Salinas-Castillo, E. Colacio, and A. Rodriguez-Dieguez. Experimental and theoretical study of photoluminescence and magnetic properties of metal-organic polymers based on squarate and tetrazolate moieties containing linkers. *New Journal of Chemistry*, 39(12):9926–9930, 2015.
- [75] Nathan A. Seifert, Cristobal Perez, Justin L. Neill, Brooks H. Pate, Montserrat Vallejo-Lopez, Alberto Lesarri, Emilio J. Cocinero, and Fernando Castano. Chiral recognition and atropisomerism in the sevoflurane dimer. *Physical chemistry chemical physics : PCCP*, 17(28):18282–7, 2015.
- [76] D. Sokolovski, E. Akhmatkaya, C. Echeverria-Arrondo, and D. De Fazio. Complex angular momentum theory of state-to-state integral cross sections: resonance effects in the f plus hd -;hf(v '=3) + d reaction. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(28):18577–18589, 2015.
- [77] D. Sokolovski and M. Pons. Adiabaticity in a time-dependent trap: The passage near a continuum threshold. *Physical Review A*, 92(4):11, 2015.
- [78] D. Tejedor, L. Cotos, D. Marquez-Arce, M. Odriozola-Gimeno, M. Torrent-Sucarrat, F. P. Cossio, and F. Garcia-Tellado. Microwave-assisted organocatalyzed rearrangement of propargyl vinyl ethers to salicylaldehyde derivatives: An experimental and theoretical study. *Chemistry-a European Journal*, 21(50):18280–18289, 2015.
- [79] A. Telleria, J. Perez-Miqueo, A. Altube, E. Garcia-Lecina, A. de Cozar, and Z. Freixa. Azobenzene-appended bis-cyclometalated iridium(iii) bipyridyl complexes. *Organometallics*, 34(23):5513–5529, 2015.
- [80] R. Ullah, F. Corsetti, D. Sanchez-Portal, and E. Artacho. Electronic stopping power in a narrow band gap semiconductor from first principles. *Physical Review B*, 91(12):8, 2015.
- [81] J. Uranga, J. I. Mujika, and J. M. Matxain. center dot oh oxidation toward s- and oh-containing amino acids. *Journal of Physical Chemistry B*, 119(50):15430–15442, 2015.
- [82] A. Veloso, W. Garcia, A. Agirre, N. Ballard, F. Ruiperez, J. C. de la Cal, and J. M. Asua. Determining the effect of side reactions on product distributions in raft polymerization by maldi-tof ms. *Polymer Chemistry*, 6(30):5437–5450, 2015.
- [83] P. Vizcaino-Milla, J. M. Sansano, C. Najera, B. Fiser, and E. Gomez-Bengoa. Primary amine-2-aminopyrimidine chiral organocatalysts for the enantioselective conjugate addition of branched aldehydes to maleimides. *Synthesis-Stuttgart*, 47(15):2199–2206, 2015.
- [84] P. Vizcaino-Milla, J. M. Sansano, C. Najera, B. Fiser, and E. Gomez-Bengoa. Pyrimidine-derived prolinamides as recoverable bifunctional organocatalysts for enantioselective inter- and intramolecular aldol reactions under solvent-free conditions. *European Journal of Organic Chemistry*, (12):2614–2621, 2015.
- [85] Gorka Zamorano, Bingen Garro, Unai Fernandez-Gamiz, and Ekaitz Zulueta. Estudio computacional de la variacion del angulo de incidencia en un generador de vortices. *DYNA NEW TECHNOLOGIES*, 2:1, 2015.