

Memoria del Servicio de Informática Aplicada a la
Investigación
2010

7 de octubre de 2011

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

Índice

1. Introducción	3
1.1. Año 2010	4
2. El IZO-SGI en cifras	5
3. Personal	6
4. Descripción del equipamiento	7
4.1. Arina	7
4.2. Péndulo	7
4.3. Recursos web	7
5. Software	8
6. Acciones y proyectos	9
6.1. Arina	9
6.2. Péndulo	10
6.3. Páginas web	10
6.4. Proyecto SCICOMP	10
6.5. Revisión de la tarifa	10
7. Uso de los recursos	12
7.1. Arina	12
7.1.1. Investigadores	13
7.1.2. Trabajos	15
7.2. Péndulo	17
8. Encuesta de satisfacción	19
9. Participación en eventos y formación	20
9.1. Conferencias impartidas por los Técnicos	20
9.2. Eventos a los que se ha asistido	20
9.3. Formación	20
10. Web	21
10.1. Página web	21
10.2. Blog del Servicio	21
10.3. Lista de distribución	21
11. Bibliometría	22
11.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio	22
12. Previsiones para el 2011	25
12.1. Proyectos futuros	25
A. Datos de uso de Arina	27
B. Estadísticas de la web del Servicio	29
C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI	33
D. Publicaciones del Servicio	35
D.1. Datos históricos	35
D.2. Publicaciones recogidas	35

1. Introducción

La rápida evolución de los ordenadores permite a los investigadores el estudio de sistemas más complejos y/o el empleo de modelos más avanzados. Por eso es imprescindible el conocimiento de los recientes avances tanto en el mundo del hardware como en el de las aplicaciones.

Antes de la existencia del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico), 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, supone por un lado liberar a los grupos de investigación de tener que dedicar parte de su tiempo a la administración de un cluster y/o servidor, y por otro, al ser un recurso compartido, garantizar 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.

Éste es un Servicio General de Investigación (SGIker) a disposición de todos los investigadores 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:

- Estudios de Genoma bacteriano.
- Secuenciación y genética.
- Inteligencia computacional.
- Espectroscopía de nanotubos funcionalizados.
- Biomarcadores fluorescentes para biología y farmacología.
- Nanotecnología, estudio en nanoestructuras.
- Diseño de fármacos.
- Estudio molecular de proteínas.
- Anestésicos.
- Colorantes láser.
- Ablación por láser.
- Materiales magnéticos para discos duros.
- Diseño de robots de elementos flexibles.
- Materiales y estructuras para nanotecnología.
- Simulación de explosiones de Coulomb.
- Desarrollos teóricos de Física, Química, Bioquímica, Matemáticas, Informática...
- Estudios de dinámica de fluidos.

- Etc.

No obstante, a pesar de esta multidisciplinaridad, todas estas áreas requieren de un gran poder computacional para realizar diferentes tipos de cálculo, ya sean 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, biofísica,...

1.1. Año 2010

El evento más importante del 2010 fue la ampliación realizada en Junio del 2010. Se amplió Arina con 432 nuevos cores (de la familia Xeon) y un nuevo sistema de archivos paralelo basado en Lustre (7.1 TB de capacidad neta) y un servidor con 8 cores dotado de dos tarjetas GPGPUs de última generación. Aunque la ampliación del IZO-SGI no supuso una interrupción significativa en su funcionamiento si supuso cierta inestabilidad en el servicio y un periodo de adaptación de los investigadores durante unos meses, que se recuperó para Noviembre donde el uso del cluster con la ampliación ya llegó hasta el 76 %. Posteriormente dentro del proyecto SCICOMP se instalaron 3 nuevos nodos con 8 cores 2 dos GPGPUs cada uno.

El Servicio ha seguido proporcionado recursos, consultoría y apoyo en cálculo científico a todos los investigadores de la UPV/EHU siendo esta su principal actividad. Ha organizado cursos sobre el uso de los recursos, optimización de programas y 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. Pertenecer a la Red Nacional de e-Ciencia donde participa en el área de supercomputación y a la red HP-CAST Ibérica. Ha asistido a congresos y conferencias. Mantiene la página web del Servicio con información útil para los investigadores sobre el mismo. El IZO-SGI, por otra parte, ha invertido entorno a 16000 € en la compra y/o actualización de varios programas científicos con licencia corporativa. Se lidera el proyecto SCICOMP para el estudio de tecnologías emergentes en cálculo intensivo.

2. El IZO-SGI en cifras

	2009	2010
Cores de cálculo	440	872
Cores de cálculo (Arina)	320	752
Horas de cálculo consumidas	2.15 millones	2.25 millones
Promedio de ocupación (Arina)	75 %	47 % [†]
Trabajos enviados (Arina)	38497	65179
Trabajos de más de 2 minutos [‡]	28377	50624
Tiempo promedio por trabajo ^{††}	75.8 horas	44.4 horas
Tiempo medio de espera (Arina) ^{‡‡}	5.7 horas	3.8 horas
Investigadores activos	101	98
Grupos de investigación activos	53	40
Cuentas nuevas	49	33
Satisfacción de los usuarios*	8.9	8.8
Artículos científicos**	44	54
Visitas web	4925	5957
Páginas vistas	58731	40987
Posts en el blog HPC	-	29
Visitas del blog HPC	-	1431

Arina Es el nombre del cluster de cálculo del IZO-SGI.

[†] El uso de 2010 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 vacía 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.

[‡] 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. Tal vez sea relevante tener en cuenta que con la ampliación se han adquirido procesadores más rápidos.

^{‡‡} 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.

* Encuesta de satisfacción de los usuarios.

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

3. Personal

El IZO-SGI cuenta con dos técnicos, Dr. Eduardo Ogando y Dr. Txema Mercero. Durante los meses de Abril, Mayo y Junio un estudiante de FP2 realizó sus prácticas para la obtención del título en el Servicio. El proyecto, realizado con el apoyo del Servicio, fue añadir varias funcionalidades a la página monitorweb del Servicio y que monitoriza el estado del cluster y las cuentas de usuario. También realizó pequeñas utilidades programando en *bash*.

El IZO-SGI pertenece a los Servicios Generales de Investigación (SGIker), con el apoyo que ello supone en tareas no técnicas y colabora estrechamente con el CIDIR.

4. Descripción del equipamiento

4.1. Arina

El IZO-SGI, adscrito a los Servicios Generales de Investigación (SGIker) de la UPV/EHU, dispone de un cluster que consta de 752 procesadores-cores para cálculo, nodos de computación con GPGPUs, 2 sistemas de ficheros de alto rendimiento basados en Lustre y servidores de servicio. En detalle:

248 cores Itanium2 Se puso en marcha a finales del 2004 con 56 procesadores Itanium2, varios de estos nodos han sido retirados ya. Se amplió a finales del 2006 con otros 32 procesadores Itanium2 y en 2008 con 192 nuevos cores Itanium2.

40 cores opteron Se pusieron en marcha en la ampliación de 2006.

464 cores xeon Se adquirieron en 2010. 4 de estos nodos tienen 2 tarjetas GPGPUs Nvidia (C2050/C2070) cada uno.

Sistemas de archivos Se tienen dos sistemas de archivos paralelos de alto rendimiento de 4.7 TB (instalado en 2006) y de 7.1 TB (instalado en 2010).

Almacenamiento El home con una capacidad de 1.8 TB.

Este cluster se ha convertido en la principal herramienta de cálculo de los grupos de investigación de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU) y su uso y acceso está regulado en base al mérito científico de los grupos. El crecimiento de los recursos ha sido acorde con el creciente número de investigadores y su uso. Hoy en día es un servicio consolidado y en continua expansión.

4.2. 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 estos momentos se compone de una sala, con 60 PC's core2duo de 1 GB de RAM. El Servicio tiene proyectado ampliar y migrar péndulo a una arquitectura de 64 bits durante el 2011 dependiendo de la disponibilidad de los técnicos.

4.3. Recursos web

<http://www.ehu.es/sgi> Página web del Servicio.

<http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/> HPC, blog del Servicio.

<http://www.ehu.es/sgi/monitorweb> Página de monitorización del Servicio.

<http://www.ehu.es/sgi/CUENTA/index.php> Página de formularios del Servicio.

<http://list.ehu.es/mailman/listinfo/arina-pruebas> Lista de distribución del Servicio.

5. Software

Tras mantener un correcto funcionamiento del hardware del servicio es primordial mantener al día el software accesible a los investigadores. El trabajo realizado es la instalación, mantenimiento y benchmarking de las aplicaciones para mantenerlas en óptimo funcionamiento.

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

- ADF, 8 licencias Flotantes y ADF-Gui (2100 €).
- Schrodinger Program Suite: Token Library for Impact, Liaison, Jaguar, Jaguar pKa, MacroModel, Epik, QikProp, SiteMap, Strike, Confgen, Minta, LigPrep, Glide, XP Visualizer, QSite, including 18 interchangeable tokens (8500 \$ para dos años).
- StarCCM+/Star-CD. 8 licencias de Investigación y 8 de HPC (3000 €).
- Gaussian09/Gaussview Upgrade to Rev B1 and Linda libraries (3430 \$).
- Matlab. (212 €).
- Terachem (450 \$).
- Compilador de PGI (2800 \$).

Se puede encontrar un listado 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

Aparte de intervenciones menores y rutinarias que no merece la pena señalar se realizaron las siguientes acciones de mayor envergadura.

6.1. Arina

La acción más destacable ha sido la ampliación de la capacidad de cálculo del Servicio. Como ya hemos mencionado se han comprado 54 nodos con 8 cores Xeon cada uno, un servidor para la gestión de estos nuevos nodos, y un sistema de archivos paralelo basado en Lustre con una capacidad de 7.1 TB netos. Por otra parte, también se compraron 4 nuevos nodos con tarjetas GPGPU dentro del proyecto SCICOMP. Las características de los nodos de la ampliación son:

■ Características comunes

- Procesador Xeon 2.3 GHz E5520.
- Conexión infiniband QDR con un ancho de banda de 40Gb/s.
- Sistema de archivos paralelo Lustre de 7.1 TB netos.

■ Características específicas

- 17 Nodos con 24 GB de RAM y 170 GB de `/scratch`.
- 36 Nodos con 48 GB de RAM y 170 GB de `/scratch`.
- 1 Nodo con 96 GB de RAM y 170 GB de `/scratch`.
- 2 Nodos con 24 GB de RAM, 2 GPGPUs NVIDIA Fermi C2050 y 230 GB `/scratch`.
- 2 Nodos con 24 GB de RAM, 2 GPGPUs NVIDIA Fermi C2070 y 230 GB `/scratch`.

La ampliación ha supuesto pasar de 304 cores a 752 cores de además rendimiento superior, al coincidir con el inicio del verano ha provocado un escaso llenado de Arina en los meses de Agosto y Septiembre que ya se recuperó en Octubre.

Señalar, que todavía el sistema de alta disponibilidad no está configurado como quisiéramos, principalmente por falta de tiempo. Así, todavía falta integrar el sistema de colas en la alta disponibilidad por lo que en caso de caída del servidor principal los trabajos continúan normalmente y los usuarios siguen pudiéndose conectar pero no pueden lanzar trabajos. Es un punto importante que hay que abordar.

Los nodos más antiguos del Servicio, que se pusieron en funcionamiento el 2004, están empezando a fallar. Ya han caído 6 nodos que están parados, por lo que consideramos estos 14 servidores como obsoletos y no se espera mucho de ellos este año. De los nodos comprados el 2006 también se ha retirado uno.

A lo largo del 2009 se detectaron una serie de problemas de rendimiento con el servidor de disco de Arina, donde se guardan todos los datos de los usuarios, y estaba previsto analizarlo durante el 2010. Los problemas surgen del crecimiento del número de nodos y usuarios que carga el servidor de disco. Modificando varias herramientas del sistema se han conseguido mitigar estos problemas, aunque no solucionarlo completamente.

Se sigue probando conjuntamente con el CIDIR la posibilidad de utilizar el sistema de almacenamiento masivo del CIDIR. De momento, no esta claro como funcionaría esta opción y hay que analizar su viabilidad. Por ello, y por motivos de eficiencia se ha decidió comprar un nuevo sistema de almacenamiento que esperamos poder incorporarlo a lo largo del 2011.

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. Esta 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 está paralizado.

6.3. Páginas web

Durante el 2010 se ha rediseñado la página del Servicio <http://www.ehu.es/sgi> para dotarla de un aspecto más atractivo y con más funcionalidades. Se modificará para organizar mejor los contenidos durante el 2011.

Se ha creado el blog HPC del Servicio <http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/> como un nuevo medio de comunicación del SGI-IZO.

6.4. Proyecto SCICOMP

El servicio lidera el proyecto SCICOMP en la cual participan 8 investigadores de 5 departamentos diferentes de la UPV/EHU, además de los dos técnicos del Servicio. El proyecto está enfocado a la adaptación al entorno de cálculo de la UPV/EHU a la tecnología GPGPU y GRID. Dentro de este proyecto se instalaron los nodos con GPGPUs y realiza un estudio sobre los mismos.

6.5. Revisión de la tarifa

■ Establecimiento de nueva tarifa de CPU

● Tarifa interna UPV/EHU:

0.044 € por hora y core hasta que el grupo alcance un uso del 3.7% sobre tiempo total disponible en el servicio (10.100 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 0.0044 € por hora y core, la décima parte del primer tramo.

● Tarifa para otros organismos públicos:

La tarifa por el uso de los recursos computacionales es de 0.07 € por hora y por core (cpu simple). 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 0.09 € 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.

■ Establecimiento de tarifa por almacenamiento de datos

Se facturará por tener datos en Arina. Para establecer la tarifa se han seguido los siguientes criterios:

Se facturará menos a los que realmente usen el servicio, es decir, usen 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 por usuario.

Se facturará cada mes sobre la media de disco usado ese mes.

Se emplearán los precios por GB de la siguiente tabla, que tienen en cuenta el tiempo consumido en el servicio.

Tabla 1: Tarifas por GB extra almacenado cada mes que se aplicarán en función del uso del servicio.

Rango de uso de CPU (en días al año)	Tarifa de Almacenamiento (€/Gb) al mes
$2500 < cpu$	0.1
$100 < cpu < 2500$	0.5
$1 < cpu < 100$	1.0
$0 < cpu < 1$	1.5

7. Uso de los recursos

Por motivos de facturación el año se contabiliza desde el 1-12-2009 al 30-11-2010.

En el 2010 en el IZO-SGI han calculado 40 grupos o proyectos de investigación en las áreas de Física, Química, Minearología, Biología, Genética, Informática, Ingeniería, Matemáticas y Antropología pertenecientes a 44 grupos de investigación. Se han abierto 33 nuevas cuentas de usuario y 98 investigadores realizaron cálculos. Alumnos del master de Química Teórica realizaron prácticas en Arina. En total se han consumido 93750 días de cálculo.

7.1. Arina

Arina ha estado funcionando prácticamente 24 horas 365 días al año y su uso durante el mismo ha sido de 87742 días de cálculo (2.1 millones de horas) lo que supone un **47 %** de uso. El uso es aparentemente bajo debido a que en Julio se instaló una ampliación de Arina que pasó de 300 cores a 752 y se hizo disponible a finales de Julio. Esto ha provocado que en Agosto y Septiembre Arina estuviese muy vacía 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. En la figura 1 se muestra el uso durante el año contable de Arina, cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

El uso ha sido bastante homogéneo a lo largo del año salvo por el efecto de la ampliación. Nuevamente salvo el periodo de adaptación tras la ampliación podemos considerar que ha sido un buen aprovechamiento de Arina y que el investigador a podido trabajar con agilidad dado que el tiempo promedio de espera de un trabajo en la cola de ejecución ha sido de 3.8 horas. Este año se han enviado a Arina 65179 trabajos de los cuales 50624 duraron más de 2 minutos, es decir, podemos suponer que la mayoría de los 14555 que duraron menos de dos minutos fueron scripts o inputs con algún tipo de error. Una estimación del tiempo promedio por trabajo nos da 44.4 horas.

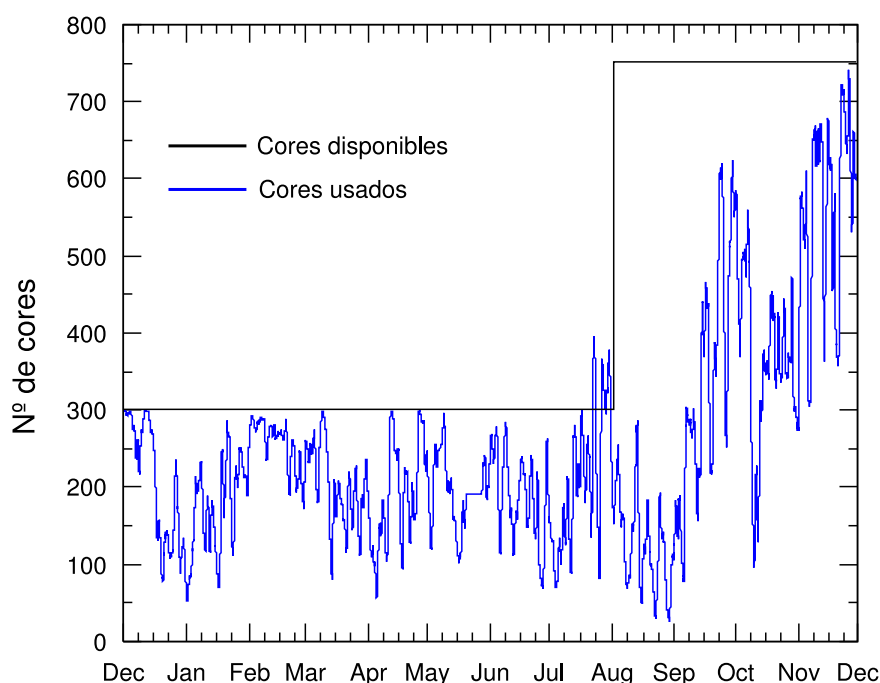


Figura 1: Uso de Arina en el año contable. Cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

7.1.1. Investigadores

Este año un total de 96 investigadores han calculado en el Arina. 30 han calculado más de 500 días. El mayor usuario empleó 8848 días de cálculo. Por debajo, pero con más de 30 días de cómputo, hay 25 investigadores y con menos de 10 días calculados 22 investigadores. En la figura 2 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por investigador y en la tabla 3 del apéndice A se pueden encontrar los datos completos.

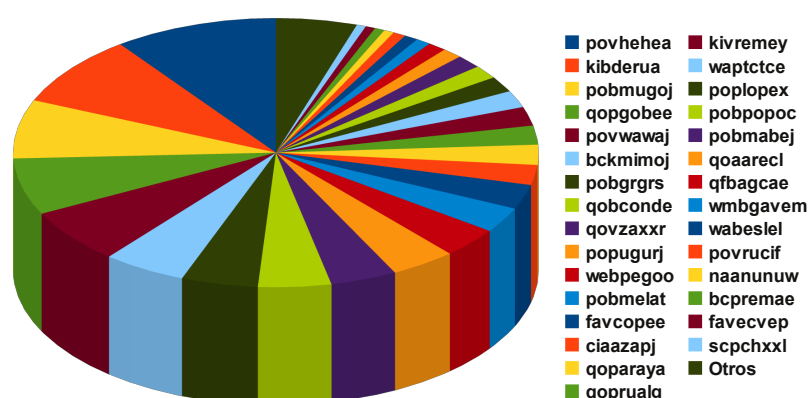


Figura 2: Uso de Arina por investigador. En *otros* están agrupados los investigadores con menos de 500 días calculados.

38 grupos de investigación han calculado en Arina. 16 grupos han calculado intensivamente (más de 1000 días de cálculo). El grupo que más ha usado Arina ha empleado 21282 días. 16 han sido los grupos que han calculado más de 1000 días y 12 grupos menos de 1000 días pero más de 30 días. Finalmente tenemos 10 grupos que han calculado menos de 30 días. En la figura 3 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por grupo y en la tabla 4 del apéndice A se pueden encontrar los datos completos.

Si agrupamos los grupos de investigación por departamentos observamos en la figura 4 que el departamento de Ciencia y Tecnología de Polímeros es el que agrupa al mayor número de usuarios de Arina y que empleó 36789 días de cálculo. De esta figura igualmente obtenemos que la Química es la ciencia que más emplea Arina con un 88 % del tiempo de cálculo seguido de la Física con un 10 % del tiempo, el 2 % restante representa usuarios de ingeniería, biología, matemáticas, informática 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 que han empleado el 78 % del tiempo de cálculo usado (84788 días), seguido de Bizkaia con un 16 % (14157 días). Los grupos que usan computación en Gasteiz son 3 y han empleado un 1 % del cálculo de Arina (2336 días). En la figura 5 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por campus.

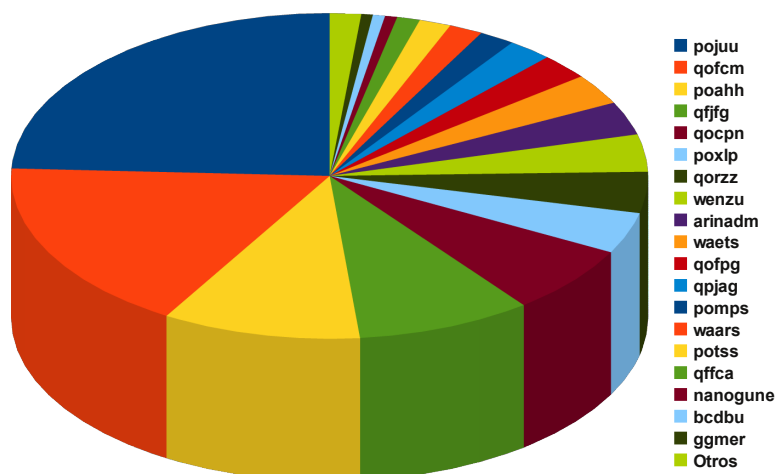


Figura 3: Uso de Arina por grupo. En *otros* están agrupados los grupos con menos de 500 días calculados.

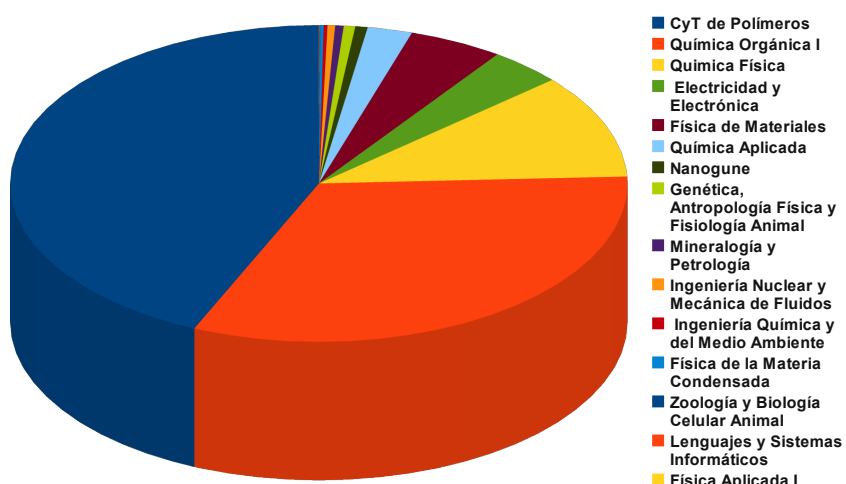


Figura 4: Uso de Arina por departamento.

7.1.2. Trabajos

Hemos analizado también los trabajos enviados a Arina. De estos en una gran medida podemos controlar que 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 han sido usados por ciertos usuarios y es el único programa que han usado. El resto que no podemos filtrar o aquellos cuyo uso ha sido menor han sido agrupados como *Otros* en la figura 6. Los datos no son muy precisos pero son una foto lo suficientemente ilustrativa. El 60% del tiempo usado

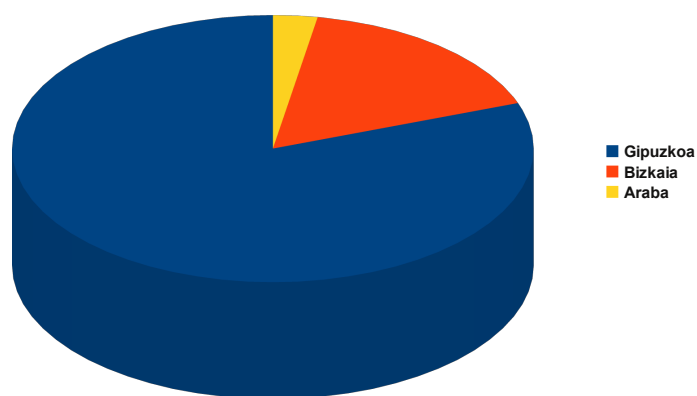


Figura 5: Uso de Arina por campus.

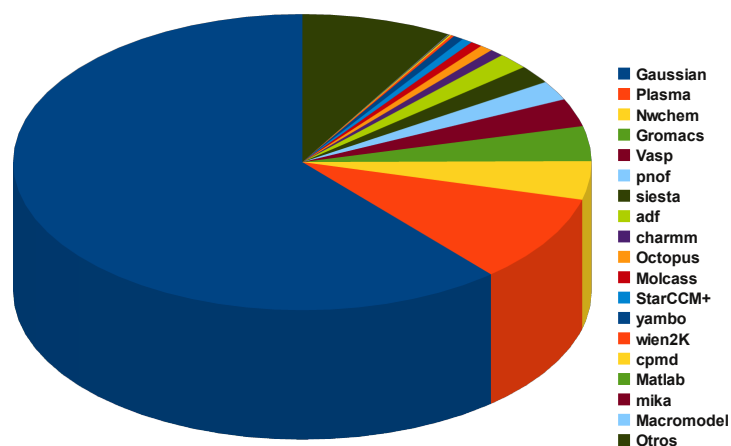


Figura 6: Tiempo consumido por los programas.

ha sido con Gaussian, el programa más usado y con más usuarios de Arina. En segundo lugar está plasma, que ha consumido el 10 % del tiempo de cpu Arina, y es un programa creado por un investigador.

Analizando los trabajos, independientemente de su naturaleza, vemos que un 93 % del tiempo de cálculo se emplea en trabajos de más de un día de uso de cpu como se observa en la Figura 7. Este tiempo está calculado como el tiempo que el trabajo ha estado calculando por el número de cores que emplea. Evidentemente, con trabajos pequeños es más difícil acumular tiempo de cálculo

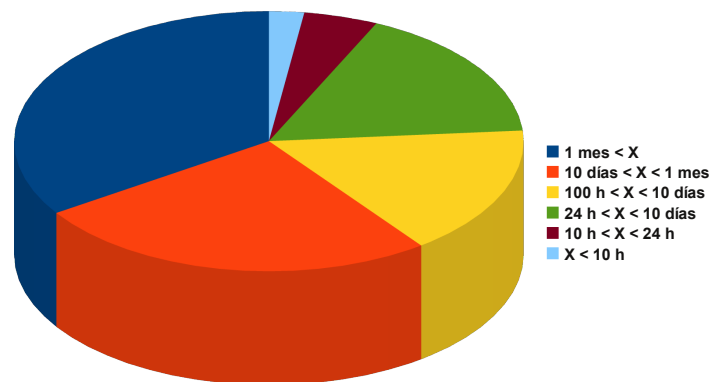


Figura 7: Tiempo consumido por los trabajos en función del tiempo que emplea cada uno.

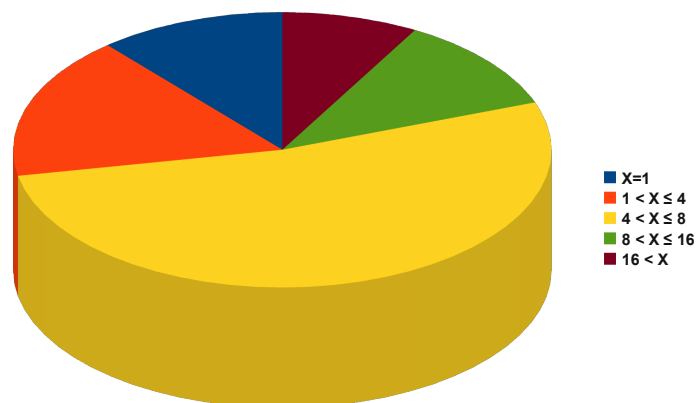


Figura 8: Tiempo consumido por los trabajos en función del número de cores.

y los trabajos que usan menos de un día de cálculo suponen alrededor de 6000 días de cálculo. En el otro extremo los mayores trabajos que consumen más de un mes de cómputo supone un 34 % 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.

Si separamos los trabajos en función del número de cores que emplean obtenemos la figura 8. Siempre se recomienda usar 1, 4, 8 cores o un múltiplo de éste último al ser los nodos de 8 cores y de este modo evitar la fragmentación. Es por ello que en los diferentes rangos mostrados en la figura 8 - entre 2 y 4, 5 y 8, etc. El 50 % de los trabajos corresponden a 8 cores. Esto es debido a que podemos considerar la unidad de cálculo el nodo que posee 8 cores. Además, Gaussian, el programa más empleado según la figura 6 es de memoria compartida y el año pasado no podía emplear más de un nodo, i.e., 8 cores. Buena parte de los trabajos que emplean más de 8 cores corresponde a CPMD y VASP aunque no exclusivamente.

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.

7.2. Péndulo

El uso de Péndulo ha sido mucho más reducido que el de Arina debido a sus características y presentamos unas estadísticas más sencillas. En total se ha calculado en Péndulo 6008 días repartidos en 5 grupos de investigación y los administradores (pruebas y benchmarks), otros 2 grupos han hecho unos tests. En la figura 9 se muestra el uso durante el año contable de Arina, cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

En la tabla 2 se muestra el tiempo empleado por cada grupo. Este uso representa aproximadamente un 21 % de todo el tiempo de cálculo disponible en Péndulo, que es más difícil de estimar y de llegar a valores de ocupación altos debido a que entre semana se interrumpe su uso durante

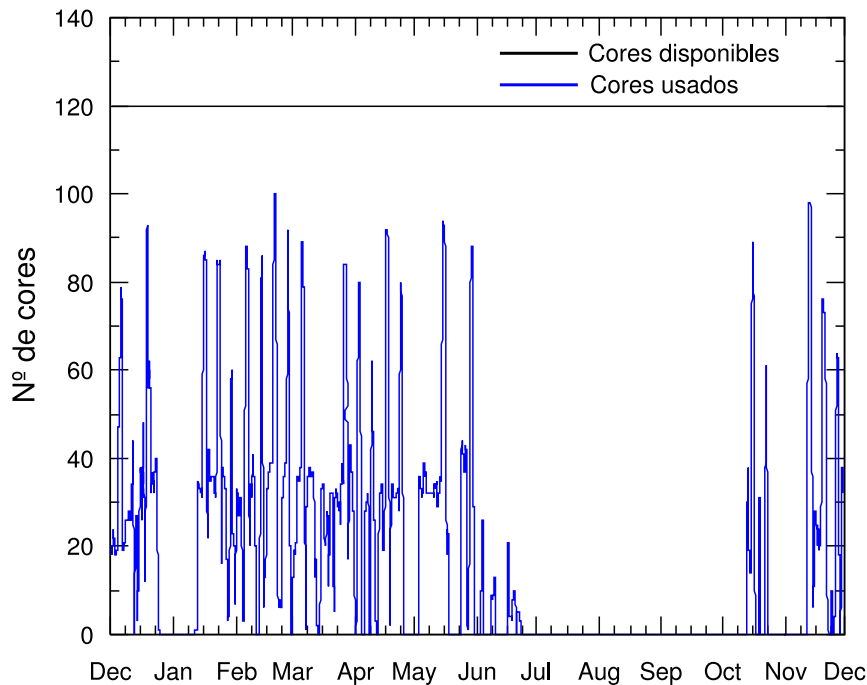


Figura 9: Uso de Pendulo en el año contable. Cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

el día y hay que acomodar los trabajos en la ventana nocturna.

Tabla 2: Uso de los grupos de investigación de Péndulo

Grupo	Días
qorzz	5344
zoicu	295
mtgfa	249
qpjag	83
arinadm	21
bcafx	16

Es de destacar que en Péndulo se ha desarrollado la alineación y anotación 40000 secuencias únicas del transcriptoma del muble *Chelon labrosus* con MPIBLAST de forma masivamente paralela.

8. Encuesta de satisfacción

La Unidad de Calidad e Innovación de los SGIker realiza una encuesta anual de satisfacción con el IZO-SGI, los resultados de la misma se muestran en el apéndice C. Se recibieron 23 respuestas con una valoración media de 4.38 sobre 5 (8.76 sobre 10). De la encuesta podemos destacar la baja puntuación (2.89 sobre 5) de las tarifas y un comentario realizado sobre el alto precio. El sistema de tarificación fue revisado tras la ampliación de los recursos del IZO-SGI para adaptarla a la nueva situación. En la próxima encuesta de satisfacción veremos la evolución.

También se realizó un comentario sobre la falta de notificaciones del espacio de disco empleado. Ahora cada vez que un usuario se conecta a Arina recibe en pantalla un mensaje donde se indica el uso de disco personal y el del grupo. Además se ha añadido a la monitorización web la posibilidad de monitorizar el disco empleado por el grupo y sus integrantes.

9. Participación en eventos y formación

9.1. Conferencias impartidas por los Técnicos

- Clases impartidas en la Asignatura de Simulación y Modelización del máster de Nuevos Materiales.
- El 13 de Abril dentro del máster de Nuevos Materiales se impartió el seminario *Cálculo Científico y Supercomputación*.
- **Evento CD-Adapco** El 14 de Diciembre se presentó el servicio en una jornada organizada por CD-Adapco en Gasteiz.
- **UPV/EHU** El 15 de Diciembre, dentro de la asignatura de “Arquitecturas Paralelas” se dio una charla sobre el IZO-SGI.

9.2. Eventos a los que se ha asistido

- Reuniones regulares del grupo de administradores Café-IT-o.
- Asistencia al Congreso ESPA celebrado en Oviedo.

9.3. Formación

- Enmarcados en el proyecto sobre la implantación de la tecnología de GPGPU dentro de la UPV/EHU, se organizó un curso de programación en GPGPUs en Julio del 2010.

10. Web

10.1. Página web

La web del Servicio <http://www.ehu.es/sgi> ha sido rediseñada para darle un aspecto más atractivo y nuevas funcionalidades. Ésta ha sido visitada 5957 veces por 1663 usuarios absolutos que han visitado 40987 páginas, en el apéndice B hay un resumen de las estadísticas de la web.

10.2. Blog del Servicio

Se ha creado el blog del Servicio <http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/> para dar difusión a información relacionada con el Cálculo Científico y el Servicio. Se han publicado 29 posts y ha recibido 1431 visitas.

10.3. Lista de distribución

Se han enviado 79 anuncios y notificaciones a la lista de distribución del Servicio.

11. 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.

11.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio

Este año han agradecido al Servicio en sus publicaciones 54 artículos científicos, 5 tesis y 4 DEAs. Esto supone un incremento notable en el número de artículos. En la gráfica 10 podemos ver la evolución del número de publicaciones desde la creación del IZO-SGI. Los datos concretos se encuentran en el apéndice D donde también se recogen las referencias de los artículos publicados. Se puede obtener más información en la página de publicaciones del Servicio y en el ResearchID del IZO-SGI.

En la figura 11 se muestran el número de citas realizadas a artículos recopilados hasta el 2010, junto a ciertos datos estadísticos como el índice h del IZO-SGI a día 6 de Octubre. En la Figura 12 se muestran a los autores que más citan el IZO-SGI.

Muestra de la multidisciplinaridad del IZO-SGI es la Figura 13, donde se reflejan las diversas áreas de investigación en las que los investigadores que usan el Servicio han publicado de acuerdo al ResearchID F-3072-2010 del IZO-SGI.

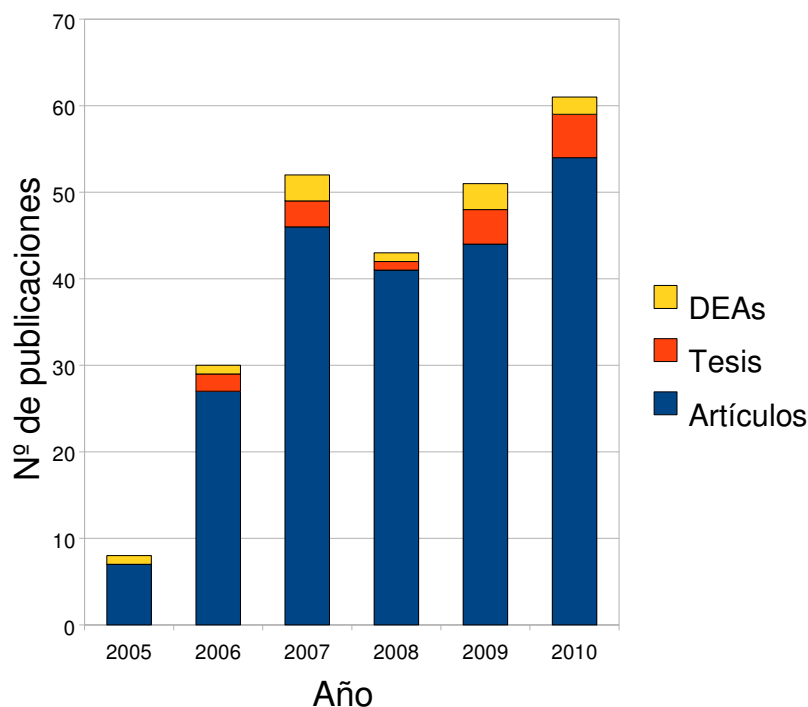


Figura 10: . Evolución del número de publicaciones.

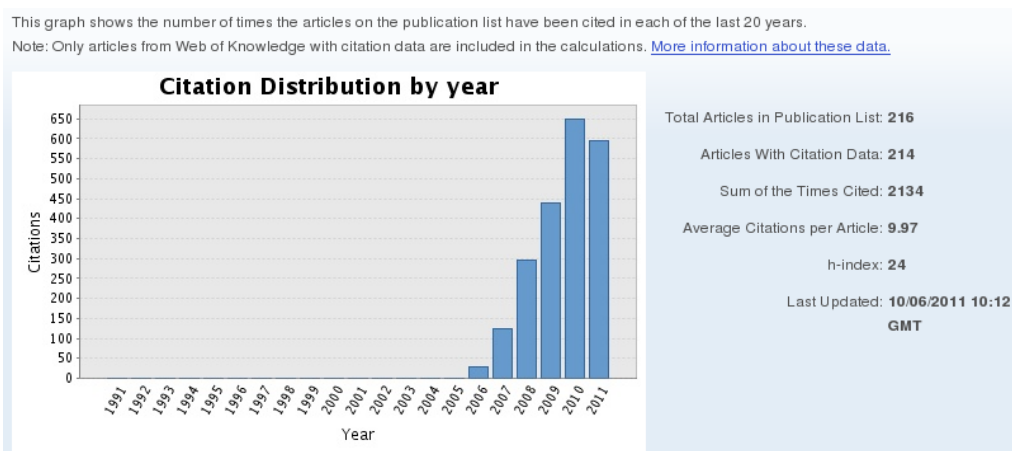


Figura 11: . Número de citas realizadas a artículos que citan al Servicio según la WOK.

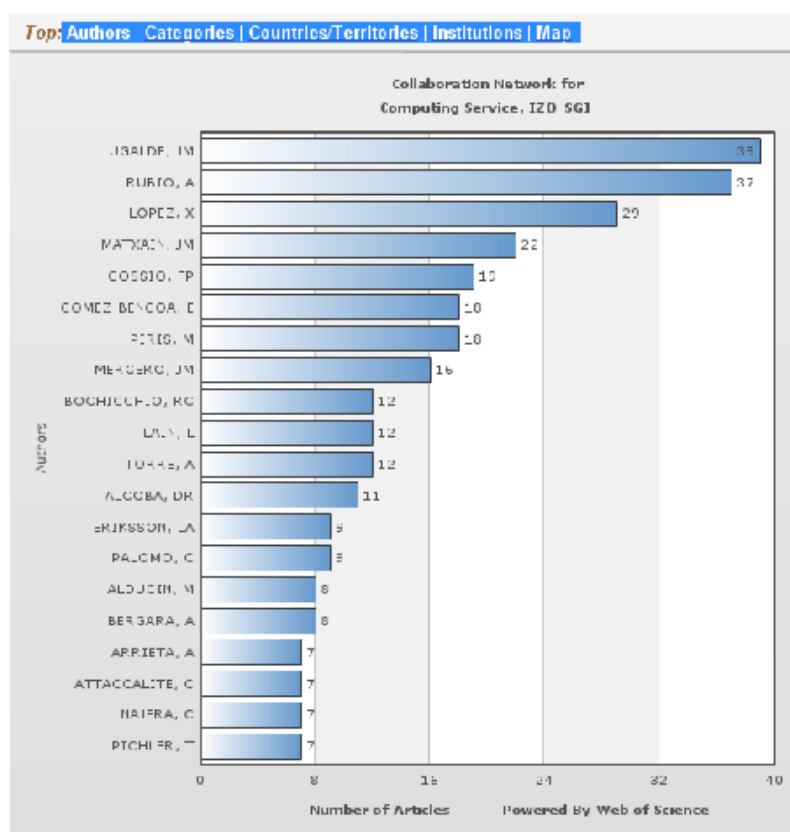


Figura 12: . Autores que más citan el Servicio según la WOK.

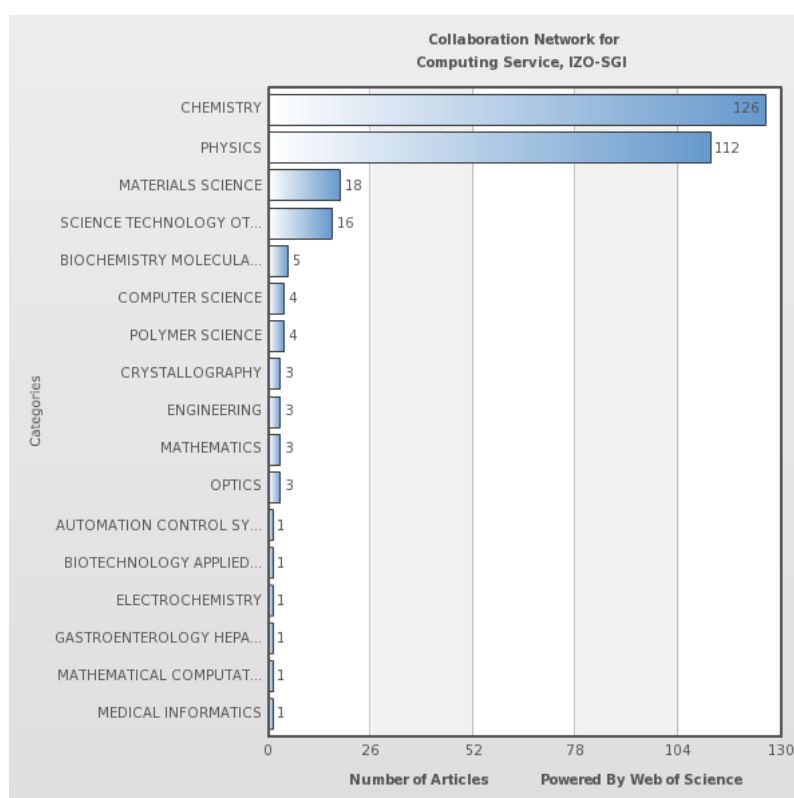


Figura 13: . Áreas de investigación en las que los usuarios han publicado artículos citando al Servicio.

12. Previsiones para el 2011

12.1. Proyectos futuros

- El principal objetivo será mejorar el sistema de almacenamiento de datos de Arina. Ya está aceptado el presupuesto para ampliar la capacidad de almacenamiento disponible en Arina.
- El IZO-SGI tendrá también a su disposición 200 cores del cluster IBM que dispone Ikerbasque.
- Sigue estando pendiente la actualización de Péndulo, actualizando el sistema operativo a 64 bits e incluyendo la nueva sala de PCs.
- Se completará la alta disponibilidad en Arina con la inclusión de Torque-Maui en la misma.
- Inicio del estudio de la próxima ampliación.
- Finalización del proyecto SCICOMP y evaluación sobre su continuidad.
- Seguimos insistiendo en la necesidad de la incorporación de más personal para el IZO-SGI.

APÉNDICES

A. Datos de uso de Arina

Tabla 3: Días de cálculo empleados en Arina por los investigadores. Aquellos que tienen 0 es porque no llegan a un día de cálculo.

Investigador	Días	Investigador	Días
povhehea	8848.45	inpesalg	67.75
kibderua	7485.60	qfpbaprj	42.45
pobmugoj	6194.13	waxpoxxy	40.29
qopgobee	5966.97	kixgarip	38.21
povwawaj	5749.00	qfbtomue	38.07
bckmimoj	4511.89	ggbrefof	33.21
pobgrgrs	4135.57	bcpdiaro	30.73
qobconde	3944.80	wmbgagui	29.72
qovzaxxr	3587.41	pobmabej	29.55
popugurj	3534.65	qoavasay	28.08
webpegoo	3167.53	ikastle02	24.11
pobmelat	2675.70	jiparkob	20.77
favcopee	2585.75	ikastle14	19.84
ciaazapj	2125.85	qfbloala	18.36
qoparaya	2111.01	wevayfea	15.67
qoprualg	2012.12	inpfegau	14.82
kivremey	1992.11	qfptogaa	14.02
waptctce	1780.18	wuppobam	11.60
poplopex	1662.80	wapgoesj	9.93
pobpopoc	1418.84	pobinini	6.79
pobmabej	1398.24	qobmimuj	6.45
qoaarecl	1091.47	ikastle04	5.44
qfbagcae	1005.57	ikastle09	5.36
wmbgavem	800.03	povgosal	4.39
wabeslel	751.37	vcpolcac	4.05
povrucif	688.71	ikastle03	3.31
naanunuw	544.99	qopaydim	2.74
bcpremae	542.40	qfploarf	1.96
favecvep	524.50	qfplapel	1.60
scpchxxl	503.24	ikastle06	1.39
poblairo	491.38	webapfee	0.11
qopcomof	405.54	wmbmacam	0.09
bpcacaa	376.41	sgpfemae	0.05
ggpocrue	337.27	qfpfegoj	0.03
bcpmooci	255.14	wepplmuf	0.01
webogare	231.01	qfxaldad	0.01

continua en la siguiente página

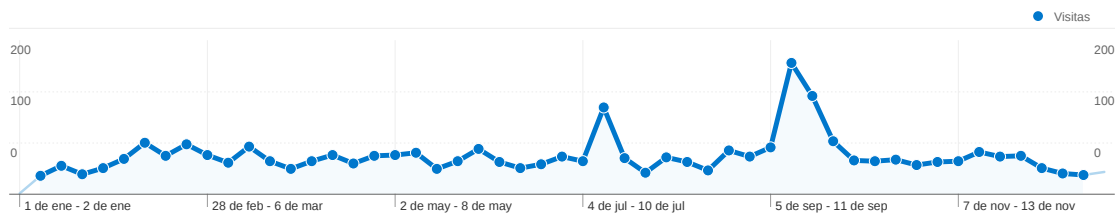
continua de la página anterior

Investigador	Días	Investigador	Días
qopderuj	212.19	orabixxc	0.01
quxlegoa	190.07	ikastle13	0.01
povpisim	182.30	ikastle11	0.01
pobfoese	182.02	wmberloi	0.00
wabgala	172.56	poxrariv	0.00
epppema	167.00	lgsroarm	0.00
upetralanda001	150.04	ikastle15	0.00
ggpsamam	139.96	ikastle12	0.00
qfpgapae	98.95	ikastle10	0.00
kiazuirx	90.37	ikastle07	0.00
pobmugoj	80.69	ikastle01	0.00
webzucaa	68.03	baxakake	0.00

Tabla 4: Días de cálculo empleados en Arina por los grupos de investigación. Aquellos que tienen 0 es porque no llegan a un día de cálculo.

Grupo	Días	Grupo	Días
pojju	21282.94	inffi	259.19
qofcm	15069.25	iaffm	167.00
poahh	8848.45	wdaga	150.04
qfjfg	7812.24	qfegp	98.95
qocpn	5966.97	injbi	67.75
poxlp	3598.20	pomaster	63.86
qorzz	3587.42	qfila	44.41
wenzu	3251.23	qfjmf	38.07
arinadm	2906.71	zoicu	30.73
waets	2670.59	wmjpt	29.81
qofpg	2224.30	jiads	20.77
qpjag	1992.11	qflp	15.63
pomps	1580.54	injss	14.82
waars	1505.67	wuebp	11.60
potss	1418.84	wajge	9.93
qffca	1023.93	lgsgi	6.45
nanogune	544.99	wepmf	0.12
bcdbu	542.40	gpucomp	0.05
ggmer	510.43	users	0.00

B. Estadísticas de la web del Servicio



1.663 usuarios han visitado este sitio.

 **5.957** Visitas

 **1.663** Visitantes únicos absolutos

 **40.987** Páginas vistas

 **6,88** Promedio de páginas vistas

 **00:05:33** Tiempo en el sitio

 **28,03%** Porcentaje de rebote

 **26,12%** Nuevas visitas

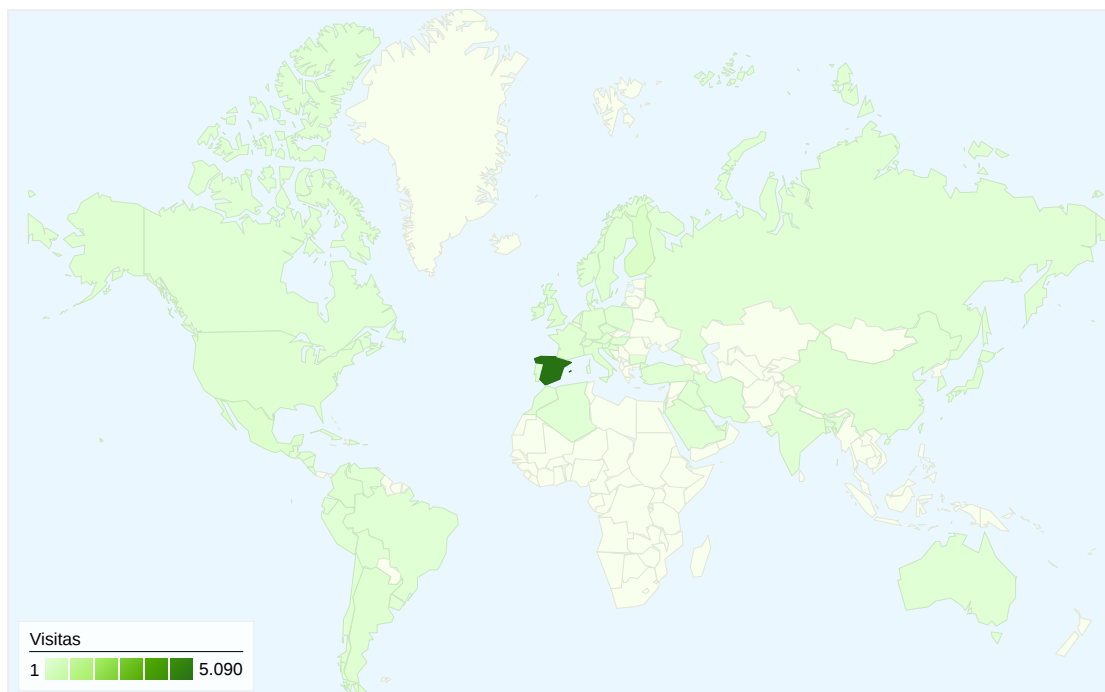
Perfil técnico

Navegador	Visitas	Porcentaje de visitas
Firefox	2.794	46,90%
Internet Explorer	1.500	25,18%
Chrome	1.113	18,68%
Opera	225	3,78%
Safari	200	3,36%

Gráfico de visitas por ubicación

01/01/2010 - 31/12/2010

En comparación con: Sitio



5.957 visitas de 58 países/territorios

Uso del sitio

Visitas	Páginas/visita	Promedio de tiempo en el sitio	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
5.957	6,88	00:05:33	26,15%	28,03%
Porcentaje del total del sitio: 100,00%	Promedio del sitio: 6,88 (0,00%)	Promedio del sitio: 00:05:33 (0,00%)	Promedio del sitio: 26,12% (0,13%)	Promedio del sitio: 28,03% (0,00%)
País/territorio	Visitas	Visitas	Visitas	
Spain	5.090	85,45%	85,45%	
Finland	171	2,87%		
Mexico	92	1,54%		
United Kingdom	88	1,48%		
(not set)	52	0,87%		
Japan	47	0,79%		
Ireland	41	0,69%		
United States	41	0,69%		
Italy	37	0,62%		
Argentina	34	0,57%		

1 - 10 de 58

Gráfico de visitas por ubicación

01/01/2010 - 31/12/2010

En comparación con: Sitio



5.957 visitas de 332 ciudades

Uso del sitio

Visitas 5.957 Porcentaje del total del sitio: 100,00%	Páginas/visita 6,88 Promedio del sitio: 6,88 (0,00%)	Promedio de tiempo en el sitio 00:05:33 Promedio del sitio: 00:05:33 (0,00%)	Porcentaje de visitas nuevas 26,15% Promedio del sitio: 26,12% (0,13%)	Porcentaje de rebote 28,03% Promedio del sitio: 28,03% (0,00%)																				
Ciudad	Visitas	Visitas	Visitas																					
San Sebastian	2.172	36,46%	<table><tr><td>San Sebastian</td><td>36,46%</td></tr><tr><td>Bilbao</td><td>30,17%</td></tr><tr><td>Logrono</td><td>7,10%</td></tr><tr><td>Eibar</td><td>3,68%</td></tr><tr><td>Jyvaskyla</td><td>2,75%</td></tr><tr><td>Madrid</td><td>1,73%</td></tr><tr><td>Vitoria</td><td>1,54%</td></tr><tr><td>Urnieta</td><td>0,96%</td></tr><tr><td>(not set)</td><td>0,91%</td></tr><tr><td>Cambridge</td><td>0,91%</td></tr></table>		San Sebastian	36,46%	Bilbao	30,17%	Logrono	7,10%	Eibar	3,68%	Jyvaskyla	2,75%	Madrid	1,73%	Vitoria	1,54%	Urnieta	0,96%	(not set)	0,91%	Cambridge	0,91%
San Sebastian	36,46%																							
Bilbao	30,17%																							
Logrono	7,10%																							
Eibar	3,68%																							
Jyvaskyla	2,75%																							
Madrid	1,73%																							
Vitoria	1,54%																							
Urnieta	0,96%																							
(not set)	0,91%																							
Cambridge	0,91%																							
Bilbao	1.797	30,17%																						
Logrono	423	7,10%																						
Eibar	219	3,68%																						
Jyvaskyla	164	2,75%																						
Madrid	103	1,73%																						
Vitoria	92	1,54%																						
Urnieta	57	0,96%																						
(not set)	54	0,91%																						
Cambridge	54	0,91%																						

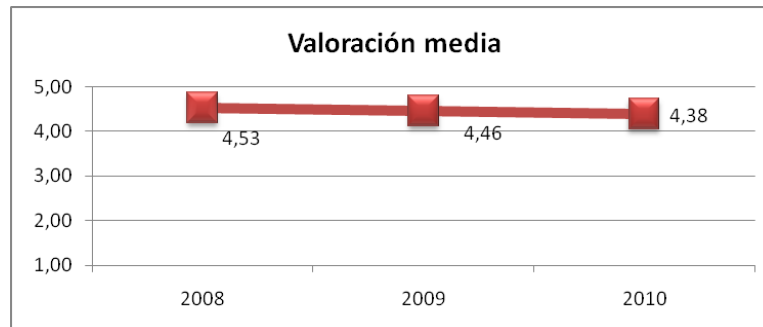
1 - 10 de 332

C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI

Informática Aplicada a la Investigación

(23 resultados)

Informe de Satisfacción de los Usuarios SGIker - 2010



Observaciones realizadas:

- Notificaciones más frecuentes respecto al espacio ocupado por el grupo entero para los datos. (**PIC, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Sigue siendo muy caro, incluso con la reducción aplicada. (**Responsable de proyecto, usuario habitual, más de una vez al mes**).

D. Publicaciones del Servicio

D.1. Datos históricos

En las siguientes tablas mostramos un resumen de las publicaciones recogidas por el Servicio.

Tabla 5: Artículos científicos en los que se menciona el uso del IZO-SGI.

Año	Publicaciones
2005	7
2006	27
2007	46
2008	41
2009	44
2010	54

Tabla 6: Tesis en las que se menciona el uso del IZO-SGI.

Año	Tesis
2006	2
2007	3
2008	1
2009	4
2010	5

Tabla 7: DEAs científicos en los que se menciona el uso del IZO-SGI.

Año	DEAs
2005	1
2006	1
2007	3
2008	1
2009	3
2010	2

D.2. Publicaciones recogidas

-
- [1] M. Aginagalde, Y. Vara, A. Arrieta, R. Zangi, V. L. Cebolla, A. Delgado-Camon, and F. P. Cossio. Tandem 8+2 cycloaddition- 2+6+2 dehydrogenation reactions involving imidazo 1,2-a pyridines and imidazo 1,2-a pyrimidines. *Journal of Organic Chemistry*, 75(9):2776–2784, 2010.
- [2] D. R. Alcoba, R. C. Bochicchio, L. Lain, and A. Torre. On the measure of electron correlation and entanglement in quantum chemistry based on the cumulant of the second-order reduced density matrix. *Journal of Chemical Physics*, 133(14), 2010.
- [3] M. Alducin, D. Sanchez-Portal, A. Arnau, and N. Lorente. Mixed-valency signature in vibrational inelastic electron tunneling spectroscopy. *Physical Review Letters*, 104(13), 2010.
- [4] C. Attaccalite, L. Wirtz, M. Lazzeri, F. Mauri, and A. Rubio. Doped graphene as tunable electron-phonon coupling material. *Nano Letters*, 10(4):1172–1176, 2010.
- [5] P. Ayala, R. Arenal, A. Loiseau, A. Rubio, and T. Pichler. The physical and chemical properties of heteronanotubes. *Reviews of Modern Physics*, 82(2):1843–1885, 2010.
- [6] P. Ayala, R. Arenal, M. Rummeli, A. Rubio, and T. Pichler. The doping of carbon nanotubes with nitrogen and their potential applications. *Carbon*, 48(3):575–586, 2010.
- [7] P. Banuelos, J. M. Garcia, E. Gomez-Bengoa, A. Herrero, J. M. Odriozola, M. Oiarbide, C. Palomo, and J. Razkin. (1r)-(+)-camphor and acetone derived α ’-hydroxy enones in asymmetric diels-alder reaction: Catalytic activation by lewis and bronsted acids, substrate scope, applications in syntheses, and mechanistic studies. *Journal of Organic Chemistry*, 75(5):1458–1473, 2010.
- [8] A. Calderon-Casado, G. Barandika, B. Bazan, M. K. Urtiaga, and M. I. Arriortua. Unprecedented coordination modes for pdc (pyridine-2,5-dicarboxylate) in polymorphic 3d heterobimetallic compounds α - and β - $mna_2(pdc)_2(h_2o)_4$, with $m = ni, co$. *Crystengcomm*, 12(6):1784–1789, 2010.
- [9] L. Chiodo, J. M. Garcia-Lastra, A. Iacomino, S. Ossicini, J. Zhao, H. Petek, and A. Rubio. Self-energy and excitonic effects in the electronic and optical properties of tio2 crystalline phases. *Physical Review B*, 82(4), 2010.
- [10] L. Chiodo, J. M. García-Lastra, D. J. Mowbray, A. Iacomino, and A. Rubio. Tailoring electronic and optical properties of tio2: nanostructuring, doping and molecular-oxide interactions. *arXiv:1003.2341 [cond-mat.mtrl-sci]*, pages–, March 2010.
- [11] E. J. Cocinero, A. Lesarri, P. Ecija, J. U. Grabow, J. A. Fernandez, and F. Castano. Conformational equilibria in vanillin and ethylvanillin. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(39):12486–12493, 2010.
- [12] E. J. Cocinero, A. Lesarri, P. Ecija, J. U. Grabow, J. A. Fernandez, and F. Castano. N-methyl stereochemistry in tropinone: the conformational flexibility of the tropane motif. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(23):6076–6083, 2010.
- [13] M. Corso, M. J. Verstraete, F. Schiller, M. Ormaza, L. Fernandez, T. Greber, M. Torrent, A. Rubio, and J. E. Ortega. Rare-earth surface alloying: A new phase for gdau2. *Physical Review Letters*, 105(1), 2010.
- [14] I. Etxebarria, C. Capillas, and L. Elcoro. Alternative boundary conditions for monte carlo simulations based on self-consistent correlations: Application to the two- and three-dimensional ising models. *Physical Review E*, 81(3), 2010.

-
- [15] I. Etxebarria, J. M. Perez-Mato, and P. Boullay. The role of trilinear couplings in the phase transitions of aurivillius compounds. *Ferroelectrics*, 401:17–23, 2010.
- [16] E. Formoso, J. M. Matxain, X. Lopez, and D. M. York. Molecular dynamics simulation of bovine pancreatic ribonuclease a-cpa and transition state-like complexes. *Journal of Physical Chemistry B*, 114(21):7371–7382, 2010.
- [17] D. Garayalde, E. Gomez-Bengoa, X. G. Huang, A. Goeke, and C.Ñevado. Mechanistic insights in gold-stabilized nonclassical carbocations: Gold-catalyzed rearrangement of 3-cyclopropyl propargylic acetates. *Journal of the American Chemical Society*, 132(13):4720–4730, 2010.
- [18] J. M. Garcia-Lastra, P. L. Cook, F. J. Himpsel, and A. Rubio. Communication: Systematic shifts of the lowest unoccupied molecular orbital peak in x-ray absorption for a series of 3d metal porphyrins. *Journal of Chemical Physics*, 133(15):4, 2010.
- [19] J. M. Garcia-Lastra, D. J. Mowbray, K. S. Thygesen, A. Rubio, and K. W. Jacobsen. Modeling nanoscale gas sensors under realistic conditions: Computational screening of metal-doped carbon nanotubes. *Physical Review B*, 81(24), 2010.
- [20] B. Garcia-Ramiro, M. A. Illarramendi, I. Aramburu, J. Fernandez, and R. Balda. Analysis of lasing efficiency in neodymium doped laser crystal powders. *Optical Materials*, 33(2):211–214, 2010.
- [21] D. Gau, T. Kato, N. Saffon-Merceron, A. De Cozar, F. P. Cossio, and A. Baceiredo. Synthesis and structure of a base-stabilized c-phosphino-si-amino silyne. *Angewandte Chemie-International Edition*, 49(37):6585–6588, 2010.
- [22] E. Gomez-Bengoa, M. Maestro, A. Mielgo, I. Otazo, C. Palomo, and I. Velilla. A 4-hydroxypyrrolidine-catalyzed mannich reaction of aldehydes: Control of anti-selectivity by hydrogen bonding assisted by bronsted acids. *Chemistry-a European Journal*, 16(18):5333–5342, 2010.
- [23] S. J. Grabowski and J. M. Ugalde. Ab initio calculations on c6h6 center dot center dot center dot(hf)(n) clusters - x-h center dot center dot center dot pi hydrogen bond. *Canadian Journal of Chemistry-Revue Canadienne De Chimie*, 88(8):769–778, 2010.
- [24] S. J. Grabowski and J. M. Ugalde. Bond paths show preferable interactions: Ab initio and qtaim studies on the x-h center dot center dot center dot pi hydrogen bond. *Journal of Physical Chemistry A*, 114(26):7223–7229, 2010.
- [25] S. J. Grabowski and J. M. Ugalde. High-level ab initio calculations on low barrier hydrogen bonds and proton bound homodimers. *Chemical Physics Letters*, 493(1-3):37–44, 2010.
- [26] I. G. Gurtubay, R. Gaudoin, and J. M. Pitarke. Benchmark quantum monte carlo calculations of the ground-state kinetic, interaction and total energy of the three-dimensional electron gas. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 22(6), 2010.
- [27] I. G. Gurtubay, B. Rousseau, and A. Bergara. Undamped low-energy plasmon in alh3 at high pressure. *Physical Review B*, 82(8), 2010.
- [28] A. Heidenreich and J. Jortner. Effects of the nanoplasma electrons on coulomb explosion of xenon clusters. *Journal of Physical Chemistry C*, 114(48):20636–20647, 2010.
- [29] V. Herrera, Z. Palmillas, R. Pirri, Y. Reyes, J. R. Leiza, and J. M. Asua. Morphology of three-phase ps/pba composite latex particles containing in situ produced block copolymers. *Macromolecules*, 43(3):1356–1363, 2010.
- [30] E. Jimenez-Izal, J. M. Matxain, M. Piris, and J. M. Ugalde. Structure and stability of the endohedrally doped (x@cdisi)(i=4,9,12,15,16)(q=0,+/- 1), x = na, k, cl, br, nanoclusters. *Journal of Physical Chemistry C*, 114(6):2476–2483, 2010.

-
- [31] M. B. S. Kirketerp, M. A. Petersen, M. Wanko, H. Zettergren, A. Rubio, M. B. Nielsen, and S. B. Nielsen. Double-bond versus triple-bond bridges: Does it matter for the charge-transfer absorption by donor-acceptor chromophores? *Chemphyschem*, 11(12):2495–2498, 2010.
- [32] A. Kukovecz, D. Molnar, K. Kordas, Z. Gingl, H. Moilanen, R. Mingesz, Z. Konya, J. Maklin, N. Halonen, G. Toth, H. Haspel, P. Heszler, M. Mohl, A. Sapi, S. Roth, R. Vajtai, P. M. Ajayan, Y. Pouillon, A. Rubio, and I. Kiricsi. Carbon nanotube based sensors and fluctuation enhanced sensing. In R. E. I. Schropp, editor, *Physica Status Solidi C - Current Topics in Solid State Physics, Vol 7 No 3-4*, volume 7, pages 1217–1221. 2010.
- [33] J. Larrucea, E. Rezabal, T. Marino, N. Russo, and J. M. Ugalde. Ab initio study of microsolvated Al^{3+} -aromatic amino acid complexes. *Journal of Physical Chemistry B*, 114(27):9017–9022, 2010.
- [34] R. M. Lobayan, D. R. Alcoba, R. C. Bochicchio, A. Torre, and L. Lain. Topology of the electron density in open-shell systems. *Journal of Physical Chemistry A*, 114(2):1200–1206, 2010.
- [35] X. Lopez, M. Piris, J. M. Matxain, and J. M. Ugalde. Performance of pnof3 for reactivity studies: X bo and x cn isomerization reactions ($x = \text{h}, \text{li}$) as a case study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(40):12931–12934, 2010.
- [36] G. Martinez, J. Chirinos, M. E. G. Mosquera, T. Cuenca, and E. Gomez. An unusual n-bridged (amido)(hydrido)(phenoxido)aluminium dinuclear compound - the role of nitrogen substituents in determining nuclearity: A combined experimental and theoretical study. *European Journal of Inorganic Chemistry*, (10):1522–1529, 2010.
- [37] L. Martinez and A. Araluze. New tools for the construction of directed strongly regular graphs: Difference digraphs and partial sum families. *Journal of Combinatorial Theory Series B*, 100(6):720–728, 2010.
- [38] J. M. Matxain, M. Piris, X. Lopez, and J. M. Ugalde. Complete basis set limit extrapolation calculations with pnof3. *Chemical Physics Letters*, 499(1-3):164–167, 2010.
- [39] M. Micusik, A. Bonfond, Y. Reyes, A. Bogner, L. Chazeau, C. Plummer, M. Paulis, and J. R. Leiza. Morphology of polymer/clay latex particles synthesized by miniemulsion polymerization: Modeling and experimental results. *Macromolecular Reaction Engineering*, 4(6-7):432–444, 2010.
- [40] A. Mielgo, I. Velilla, E. Gomez-Bengoia, and C. Palomo. Bronsted acid assisted regio- and enantioselective direct o-nitroso aldol reaction catalysed by α,α -diphenylprolinol trimethylsilyl ether. *Chemistry-a European Journal*, 16(25):7496–7502, 2010.
- [41] S. Monturet, M. Alducin, and N. Lorente. Role of molecular electronic structure in inelastic electron tunneling spectroscopy: O-2 on $\text{Ag}(110)$. *Physical Review B*, 82(8), 2010.
- [42] A. R. Oganov, Y. M. Ma, Y. Xu, I. Errea, A. Bergara, and A. O. Lyakhov. Exotic behavior and crystal structures of calcium under pressure. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 107(17):7646–7651, 2010.
- [43] F. Palacios, C. Alonso, A. Arrieta, F. P. Cossio, J. M. Ezpeleta, M. Fuertes, and G. Rubiales. Lewis acid activated aza-diels-alder reaction of n-(3-pyridyl)aldimines: An experimental and computational study. *European Journal of Organic Chemistry*, (11):2091–2099, 2010.
- [44] O. Perez-Gonzalez, N. Zabala, A. G. Borisov, N. J. Halas, P. Nordlander, and J. Aizpurua. Optical spectroscopy of conductive junctions in plasmonic cavities. *Nano Letters*, 10(8):3090–3095, 2010.

-
- [45] M. Piris, J. M. Matxain, X. Lopez, and J. M. Ugalde. Communication: The role of the positivity n-representability conditions in natural orbital functional theory. *Journal of Chemical Physics*, 133(11), 2010.
- [46] M. Piris, J. M. Matxain, X. Lopez, and J. M. Ugalde. Communications: Accurate description of atoms and molecules by natural orbital functional theory. *Journal of Chemical Physics*, 132(3), 2010.
- [47] Y. Reyes and J. M. Asua. Modeling multiphase latex particle equilibrium morphology. *Journal of Polymer Science Part a-Polymer Chemistry*, 48(12):2579–2583, 2010.
- [48] B. Rousseau, I. Errea, and A. Bergara. Kohn anomalies and enhanced superconductivity in simple systems under pressure: Insights from the nearly free electron model. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 71(8):1159–1164, 2010.
- [49] A. Sakko, A. Rubio, M. Hakala, and K. Hamalainen. Time-dependent density functional approach for the calculation of inelastic x-ray scattering spectra of molecules. *Journal of Chemical Physics*, 133(17):6, 2010.
- [50] V. Terletskiy, V. Tyshchenko, I. Martinez-Ballesteros, J. Garaizar, and J. Bikandi. Validation of double digest selective label database for sequenced prokaryotic genomes. *Bioinformatics*, 26(3):417–418, 2010.
- [51] A. Torre, D. R. Alcoba, L. Lain, and R. C. Bochicchio. Relationships between cumulant and spin-density matrices: Application to the decomposition of spin. *Journal of Physical Chemistry A*, 114(6):2344–2349, 2010.
- [52] F. D. Vila, D. A. Strubbe, Y. Takimoto, X. Andrade, A. Rubio, S. G. Louie, and J. J. Rehr. Basis set effects on the hyperpolarizability of chcl_3 : Gaussian-type orbitals, numerical basis sets and real-space grids. *Journal of Chemical Physics*, 133(3), 2010.
- [53] R. Zangi. Can salting-in/salting-out ions be classified as chaotropes/kosmotropes? *Journal of Physical Chemistry B*, 114(1):643–650, 2010.
- [54] R. Zangi, A. Arrieta, and F. P. Cossio. Mechanism of dna methylation: The double role of dna as a substrate and as a cofactor. *Journal of Molecular Biology*, 400(3):632–644, 2010.