

Memoria del 2011 del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

Servicios Generales de Investigación (SGIker)

11 de febrero de 2013

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

Índice

1. Introducción	4
1.1. Año 2011	6
2. El IZO-SGI en cifras	7
3. Descripción del equipamiento	9
3.1. Arina	9
3.2. Péndulo	9
3.3. Ikerbasque	9
3.4. Recursos web	9
4. Software	11
5. Acciones y proyectos	12
5.1. Arina	12
5.2. Péndulo	12
5.3. Máquina Ikerbasque	13
5.4. Proyecto GPGPUEHU	13
5.5. Revisión de la tarifa	13
6. Uso de los recursos	14
6.1. Arina	14
6.1.1. Investigadores	15
6.1.2. Trabajos	16
6.2. Péndulo	18
7. Encuesta de satisfacción	20
8. Participación en eventos y formación	21
8.1. Conferencias impartidas por los Técnicos	21
8.2. Eventos a los que se ha asistido	21
9. Web	22
9.1. Página web	22
9.2. Blog del Servicio	22
9.3. Lista de distribución	22
10. Bibliometría	23
10.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio	23
A. Datos de uso de Arina	26
B. Estadísticas de la web del Servicio	29
C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI	34

D. Publicaciones del Servicio	37
D.1. Datos históricos	37
D.2. Publicaciones recogidas	37

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), 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 a los investigadores 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.

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 o líneas:

- Secuenciación y genética.
- Arquitectura de computadores.
- Simulación de explosiones de Coulomb.
- Propiedades electrónicas de aislantes topológicos.
- Epigenética.
- Diseño de fármacos.
- Espectroscopía de nanotubos funcionalizados.
- Propiedades estructurales y dinámicas de sólidos y materiales funcionales.
- Cristalografía matemática y computacional.
- Inteligencia computacional.

- Procesamiento del lenguaje.
- Desarrollo y aplicaciones de cicloadiciones organocatalíticas asimétricas.
- Estudios de CFD de cápsulas de almacenamiento de combustible nuclear gastado.
- Dinámica, estereodinámica y cinética de reacciones.
- Funciones de distribución numéricas.
- Estudios CFD en separadores inerciales.
- Diseño de miméticos multitópicos.
- Nanotecnología, estudio en nanoestructuras.
- Colorantes láser.
- Fosfafluoroquímica.
- Estudios CFD en pilas de combustible.
- Materiales magnéticos para discos duros.
- 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.
- Sistemas TDT de nueva generación.
- Álgebra y teoría de grupos.
- 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 2011

La acción más importante del 2011 fue la ampliación realizada en Noviembre del 2011 dentro del convenio de colaboración con el CIC nanoGUNE. Con este convenio se amplió Arina con 648 nuevos cores (de la familia Xeon), se amplió el sistema de archivos paralelo basado en Lustre en ancho de banda y capacidad hasta los 22 TB netos. El Servicio también ha ampliado el almacenamiento de los investigadores (**home**) hasta los 5.6 TB netos configurados en alta disponibilidad. La ampliación se realizó sin interrupción del servicio y sin que tuviera ninguna incidencia significativa en el mismo.

En Mayo se comenzó a usar el 20 % de uso de la máquina de Ikerbasque que se le ha cedido a la UPV/EHU.

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 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 y redacta el blog HPC en Ehusfera. 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 y GPGPUEHU, continuación del primero, para el estudio de tecnologías emergentes en cálculo intensivo.

2. El IZO-SGI en cifras

	2009	2010	2011
Cores de cálculo	440	872	1.520 [§]
Millones de horas de cálculo consumidas	2,11	2,26 [†]	5,76
Investigadores activos	101	98	90
Grupos activos	53	40	42
Cuentas nuevas	49	33	33
Satisfacción de los usuarios*	8,9	8,8	8,8
Artículos científicos**	44	58	57
Visitas web	4.925	5.957	8.022
Páginas vistas	58.731	40.987	30.042
Posts en el blog HPC	-	29	34
Visitas del blog HPC	-	1.431	3.818
Arina			
Cores de cálculo	320	752	1.360
Millones de horas consumidas	2,07	2,11	5,20
Promedio de ocupación	75 %	47 % [†]	74 %
Trabajos enviados	38.497	65.179	68.991
Trabajos de más de 2 minutos [‡]	28.377	50.624	51.735
Horas promedio por trabajo ^{††}	76	44	101
Horas medio de espera (Arina) ^{‡‡}	5,7	3,8	3,8
Péndulo			
Cores de cálculo	120	120	120
Millones de horas consumidas	0,02	0,15	0,09
Ikerbasque			
Cores de cálculo	-	-	208
Millones de horas consumidas	-	-	0,47

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

§ La ampliación entre 2010 y 2011 se hizo el último mes por lo que no ha tenido mucho peso en las estadísticas.

† 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 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.

‡ Los trabajos de menos de 2 minutos se deben normalmente a trabajos fallidos que terminan inmediatamente en error. En cualquier caso, aún 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. Descripción del equipamiento

3.1. Arina

El IZO-SGI, adscrito a los Servicios Generales de Investigación (SGIker) de la UPV/EHU, dispone de un cluster que en 2011 se amplió hasta los ~ 1400 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. 24 cores ya se han estropeado.

40 cores opteron Se pusieron en marcha en la ampliación de 2006. 8 cores ya no funcionan.

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

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

Sistemas de archivos Se tienen dos sistemas de archivos paralelos de alto rendimiento de 4.7 TB (instalado en 2006) y de 22 TB (instalado en 2010 y ampliado el 2011).

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

Este cluster se ha convertido en la principal herramienta de cálculo de los grupos de investigación de la UPV/EHU. 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.

3.2. 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.

3.3. Ikerbasque

El Gobierno Vasco ha cedido el uso de 208 cores en una máquina que poseen para uso por parte del IZO-SGI. Son nodos Xeon de 8 cores con 64 GB de RAM.

3.4. 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.

4. 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, 16 licencias Flotantes y ADF-Gui (3.250 €).
- 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 (comprada el 2010 -8.500 \$- para dos años).
- StarCCM+/Star-CD. 8 licencias de Investigación y 8 de HPC (3000 €).
- Matlab. (212 €).
- Terachem. (Licencia para 4 nodos (1890 \$).
- Compilador de PGI (2800 \$).
- Turbomole (4.800 €).
- HMPP (1.690 €).

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.

5. Acciones y proyectos

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

5.1. Arina

La acción más destacable ha sido la ampliación de la capacidad de cálculo del Servicio, gracias al contrato de colaboración firmado con el nanoGUNE. Se compraron 54 nodos con 12 cores Xeon cada uno, se amplió el sistema de archivos paralelo lustre a 22 TB. Se aprovechó el momento de la ampliación para hacer un cambio del `$home` de Arina. Se compró una cabina de discos Optima2000 de mayor capacidad y mejor rendimiento con dos servidores para configurarla en alta disponibilidad. La ampliación se hizo sin parada del Servicio.

■ Características comunes de la ampliación

- Procesador Xeon 2.4 GHz E5520 y disco local para `/scratch` de 170 GB.
- Conexión infiniband QDR con un ancho de banda de 40 Gb/s.
- Sistema de archivos paralelo Lustre de 22 TB netos.

■ Características específicas

- 35 Nodos con 24 GB de RAM.
- 18 Nodos con 48 GB de RAM.
- 1 Nodo con 96 GB de RAM.

La ampliación ha supuesto pasar de 752 cores a 1400 cores de rendimiento superior, por lo que prácticamente la potencia de cálculo se ha doblado.

Se sigue probando conjuntamente con el CIDIR la posibilidad de utilizar el sistema de almacenamiento masivo del CIDIR. De momento, no está claro como funcionaría esta opción y hay que analizar su viabilidad.

5.2. 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 estuvo paralizado en 2011.

5.3. Máquina Ikerbasque

Se ha cedido parte del uso de una máquina del Gobierno Vasco gestionada por Ikerbasque a través de I2Basque a la UPV/EHU. El Servicio gestiona ésta cesión y da soporte a sus investigadores. Dado que no se poseen privilegios de administrador y el sistema es completamente diferente a Arina sólo se han abierto unas cuentas a investigadores que para sacarle el máximo partido pero reduciendo la carga de trabajo. Así se han seguido estos criterios:

- Que los investigadores a los que se les da acceso tengan habilidad en Linux para adaptarse rápidamente.
- Usen un determinado software que reduzca el mantenimiento.
- Usen software no ligado a licencias que impidan su instalación en esta máquina.
- Sean grandes usuarios que puedan llenar todos los recursos que nos ceden.

Se comenzaron a abrir cuentas y configurar el entorno de computación de la UPV/EHU en Mayo de 2011.

5.4. Proyecto GPGPUEHU

El servicio lidera el proyecto GPGPU en la cual participan 13 investigadores de 7 departamentos diferentes de la UPV/EHU. 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.

5.5. 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) (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 0.09 € 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.

6. Uso de los recursos

Por motivos de facturación el año se contabiliza desde el 1-12-2010 al 30-11-2011.

En el 2011 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 33 nuevas cuentas de usuario y 90 investigadores realizaron cálculos. En total se han consumido 240.041 días de cálculo, 5,76 millones de horas de cálculo.

6.1. Arina

Arina ha estado funcionando prácticamente 24 horas 365 días al año y su uso durante el mismo ha sido de 216.712 días de cálculo (5,2 millones de horas) lo que supone un **74 %** de ocupación. En Noviembre se puso en producción la ampliación que fue inmediatamente absorbida, sobrepasando la media de este mes el techo de 740 cores que se tenía en Octubre. En la figura 1 se muestra el uso durante el año contable de Arina, cada punto se ha promediado sobre 24 horas. Durante la primera semana de la instalación de la ampliación no se recogieron datos instantáneos la ocupación.

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

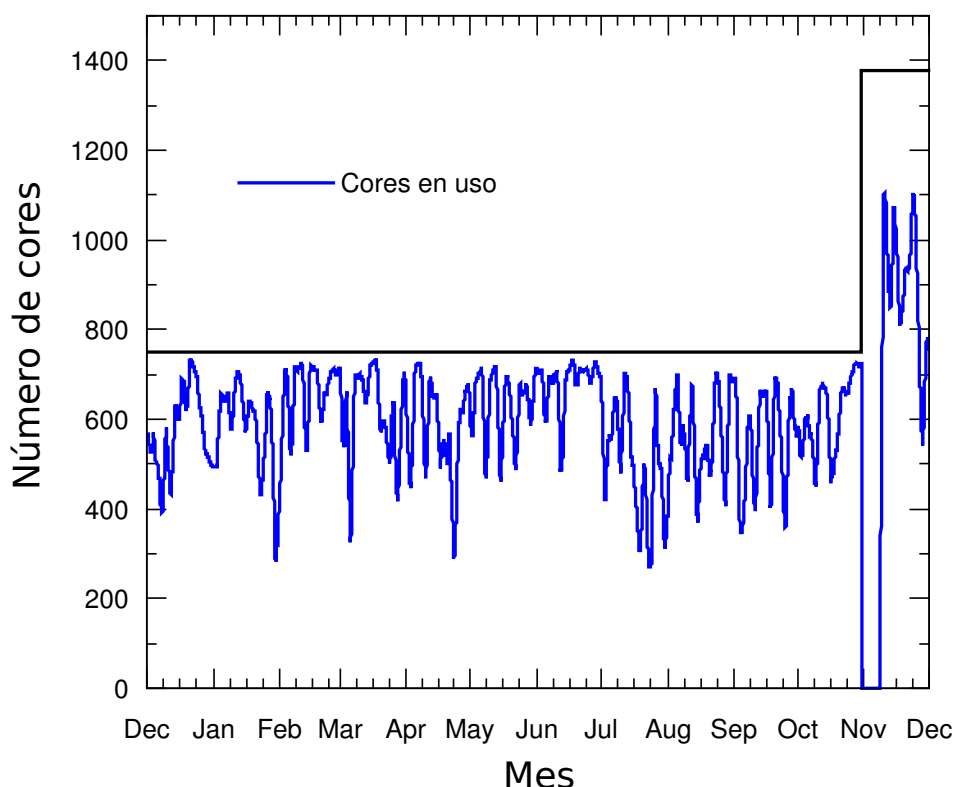


Figura 1: Uso de Arina en el año contable. Cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

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 68.911 trabajos de los cuales 51.735 duraron más de 2 minutos, es decir, podemos suponer que la mayoría de los 18.287 que duraron menos de dos minutos fueron scripts o inputs con algún tipo de error. Una estimación del tiempo promedio por trabajo nos da 101 horas.

6.1.1. Investigadores

Este año un total de 90 investigadores han calculado en el Arina. 36 han calculado más de 500 días. El mayor usuario empleó 56.029 días de cálculo. Por debajo, pero con más de 30 días de cómputo, hay 32 investigadores y con menos de 10 días calculados hay 22 investigadores. En la figura 2 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por investigador y en la tabla 2 del apéndice A se pueden encontrar los datos completos.

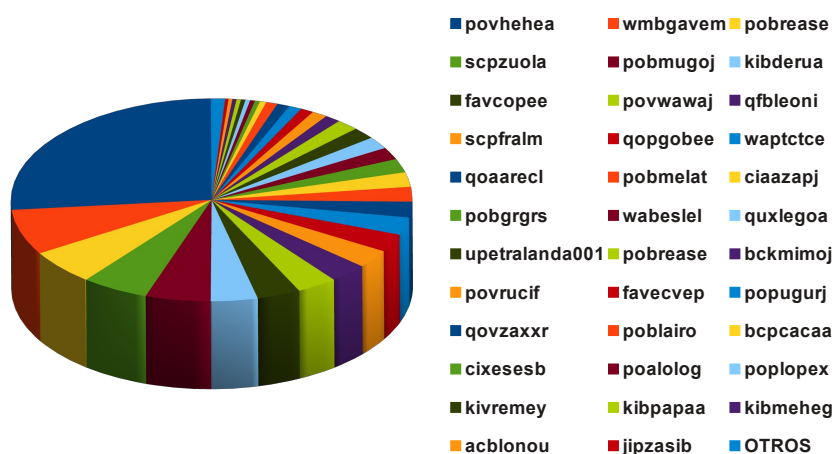


Figura 2: Uso de Arina por investigador. En *otros* están agrupados los investigadores con menos de 500 días calculados.

42 grupos de investigación han calculado en Arina. 13 grupos han calculado intensivamente (más de 1.000 días de cálculo). El grupo que más ha usado Arina ha empleado 56.029 días. 9 han sido los grupos que han calculado más de 100 días y 10 grupos entre 10 y 100 días. Finalmente tenemos 10 grupos que han calculado menos de 10 días. En la figura 3 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por grupo y en la tabla 3 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 110.700 días de cálculo. De esta figura igualmente obtenemos que la Química es la ciencia que más emplea Arina con un 80 % del tiempo de cálculo seguido de la Física con un 15 % del tiempo, el 5 % 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

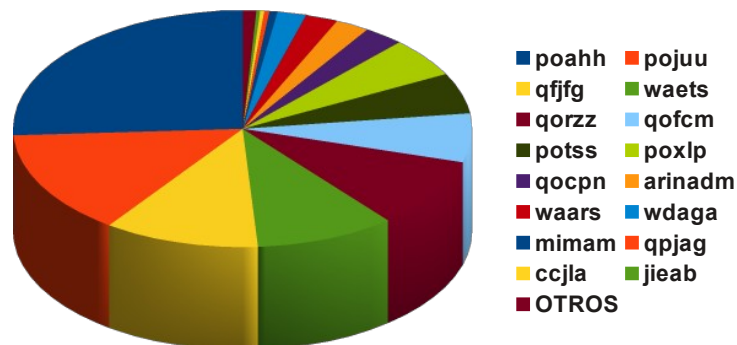


Figura 3: Uso de Arina por grupo. En *otros* están agrupados los grupos con menos de 500 días calculados.

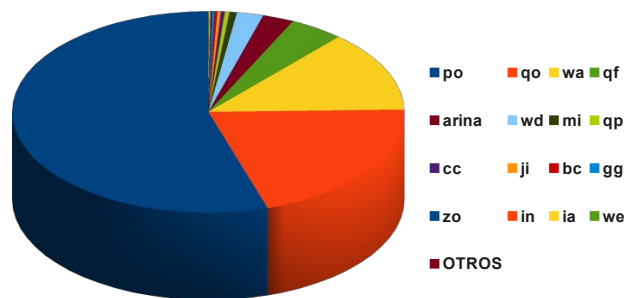


Figura 4: Uso de Arina por departamento.

la mayor parte de los grupos usuarios de Arina que han empleado el 85% del tiempo de cálculo usado (180.456 días), seguido de Bizkaia con un 14% (30.840 días). Los grupos que usan computación en Gasteiz son 2 y han empleado menos de un 1% del cálculo de Arina (218 días). En la figura 5 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por campus.

6.1.2. 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 que han sido usados por usuarios específicos 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

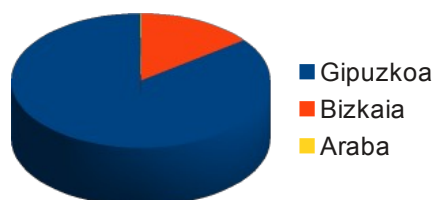


Figura 5: Uso de Arina por campus.

ilustrativa. El 37 % del tiempo usado ha sido con Gaussian, el programa más usado y con más usuarios de Arina. En segundo lugar está plasma, que ha consumido el 26 % del tiempo de cpu Arina, y es un programa creado por un investigador del servicio.

Analizando los trabajos, independientemente de su naturaleza, vemos que un 97 % 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 y los trabajos que usan menos de un día de cálculo suponen alrededor de 6.788 días de cálculo. En el otro extremo los mayores trabajos que consumen más de un mes de cómputo supone un 50 % 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.

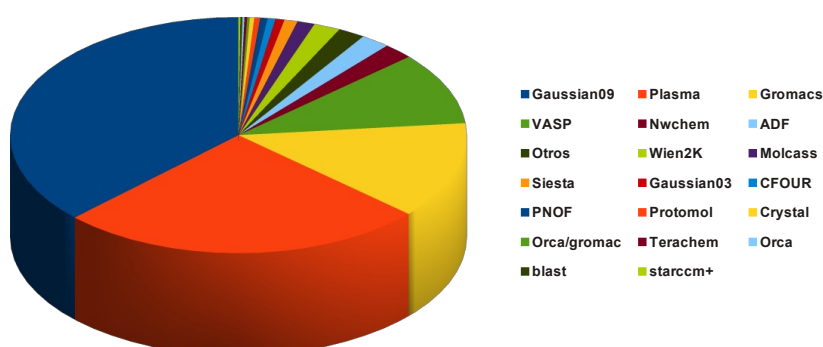


Figura 6: Tiempo consumido por los programas.

Si separamos los trabajos en función del número de cores que emplean obtenemos la figura

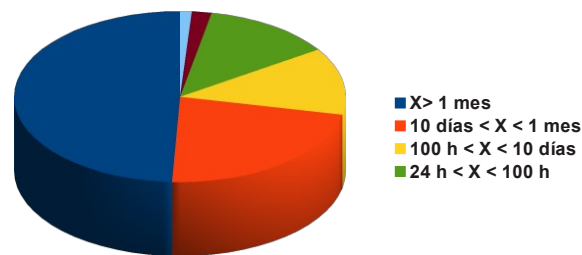


Figura 7: Tiempo consumido por los trabajos en función del tiempo que emplea cada uno.

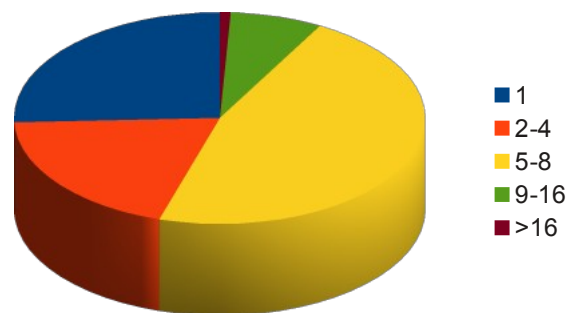


Figura 8: Tiempo consumido por los trabajos en función del número de cores.

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. La ampliación que se llevo a cabo en Noviembre, consistió de nodos de 12 cores, pero estos, todavía no han tenido tiempo para tener peso en las estadísticas.

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.

6.2. 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 3645 días repartidos en 5 grupos de investigación y los administradores (pruebas y benchmarks). En la figura 9 se muestra el uso durante el año contable de Arina, cada punto se ha promediado

sobre 24 horas.

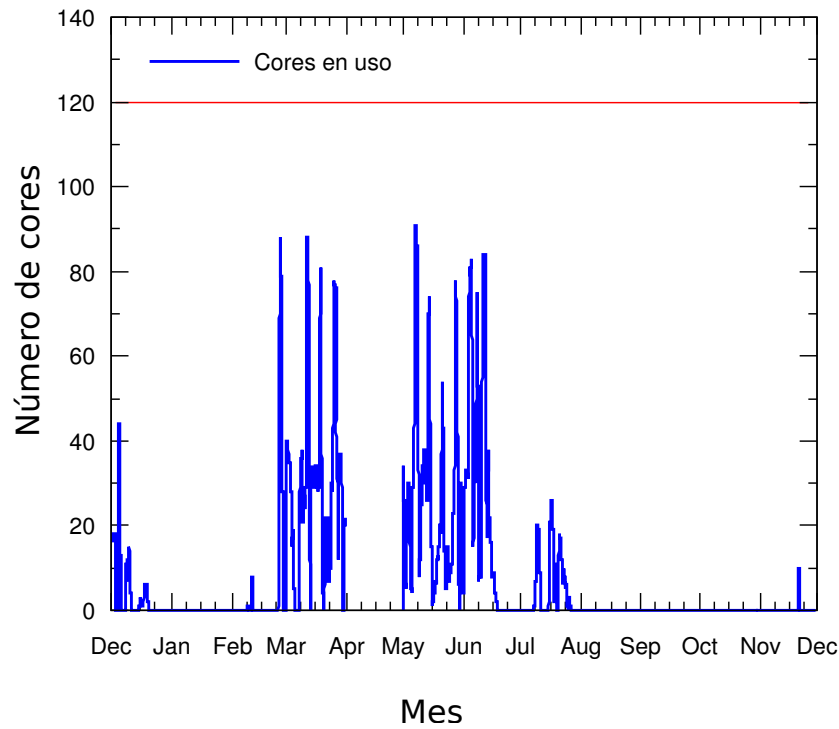


Figura 9: Uso de Péndulo en el año contable. Cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

En la tabla 1 se muestra el tiempo empleado por cada grupo. Este uso representa aproximadamente un 12 % 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 el día y hay que acomodar los trabajos en la ventana nocturna.

Tabla 1: Uso de los grupos de investigación de Péndulo

Grupo	Días
qorzz	2.534,0
jtjob	712,8
mtgfa	236,0
zoicu	137,1
arinadm	10,0
poxlp	4,2

7. 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 33 respuestas con una valoración media de 4,39 sobre 5 (8,78 sobre 10). De la encuesta podemos destacar la baja puntuación (3,35 sobre 5) de las tarifas, ya varios comentarios al respecto. 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.

Se recibieron varios comentarios (ver apéndice C) se han abordado tomando diferentes medidas.

8. Participación en eventos y formación

8.1. Conferencias impartidas por los Técnicos

- Clases impartidas en la Asignatura de Simulación y Modelización del máster de Nuevos Materiales.
- “High Performance Computing at the UPV/EHU. A powerful tool to solve Numerical Problems”, Multiphysics, Multiscale, and Optimization Problems 2011”, 6 y 7 de Junio 2011.

8.2. Eventos a los que se ha asistido

- Reuniones regulares del grupo de administradores Café-IT-o.
- Asistencia al Congreso WATOC celebrado en Santiago de Compostela.

9. Web

9.1. 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 8.022 veces por 2.688 usuarios absolutos que han visitado 30.042 páginas, en el apéndice B hay un resumen de las estadísticas de la web.

9.2. Blog del Servicio

El 2010 se creó el blog del Servicio <http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/> para dar difusión a información relacionada con el Cálculo Científico y el Servicio. El 2011 se han publicaron 34 posts y recibió 3.818 visitas durante ese año.

9.3. Lista de distribución

Se han enviado 73 anuncios y notificaciones a la lista de distribución del Servicio.

10. 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.

10.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio

Este año han agradecido al Servicio en sus publicaciones 57 artículos científicos, 4 tesis y 1 DEAs. 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 (se incluyen los del 2012), junto a ciertos datos estadísticos como el índice h del IZO-SGI. 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.

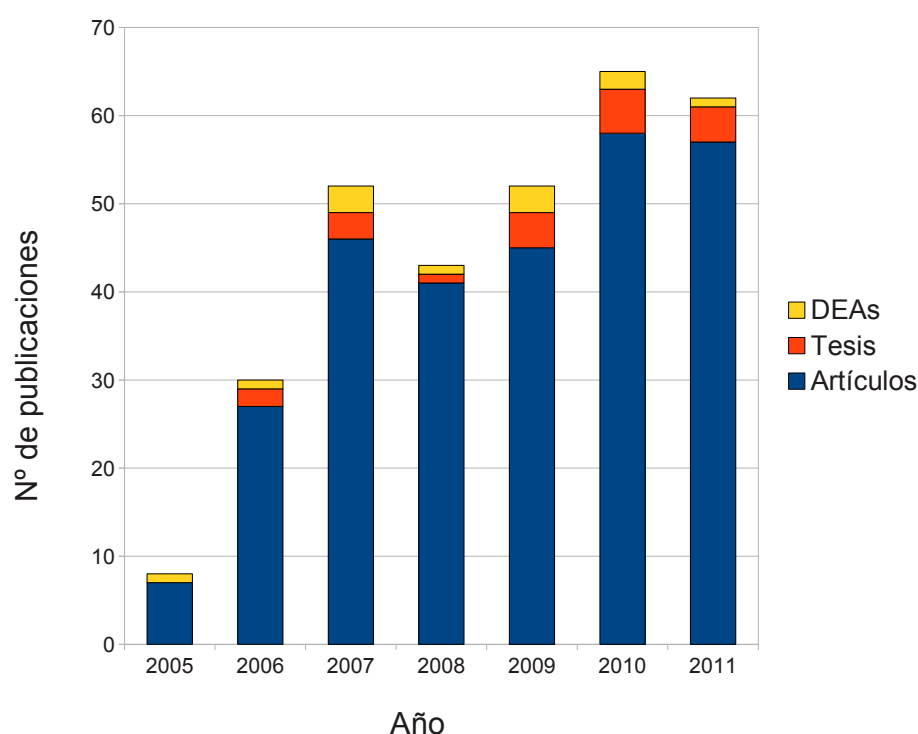


Figura 10: . Evolución del número de publicaciones.

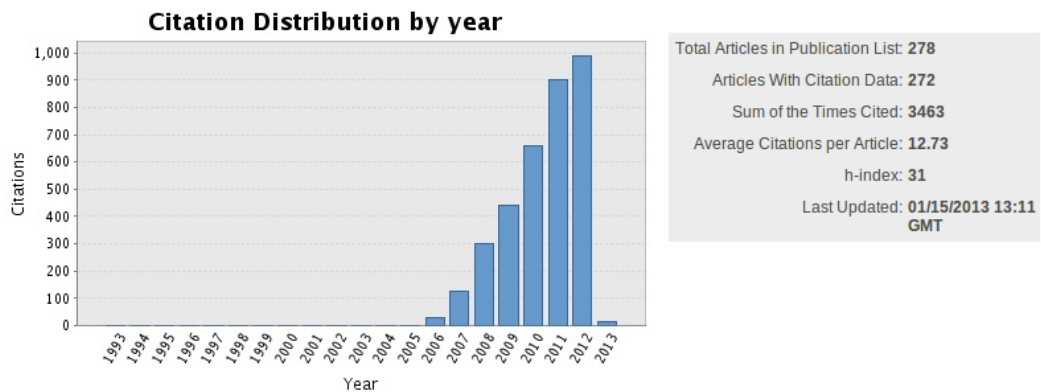


Figura 11: . Número de citas realizadas a artículos que citan al Servicio según la WOK.

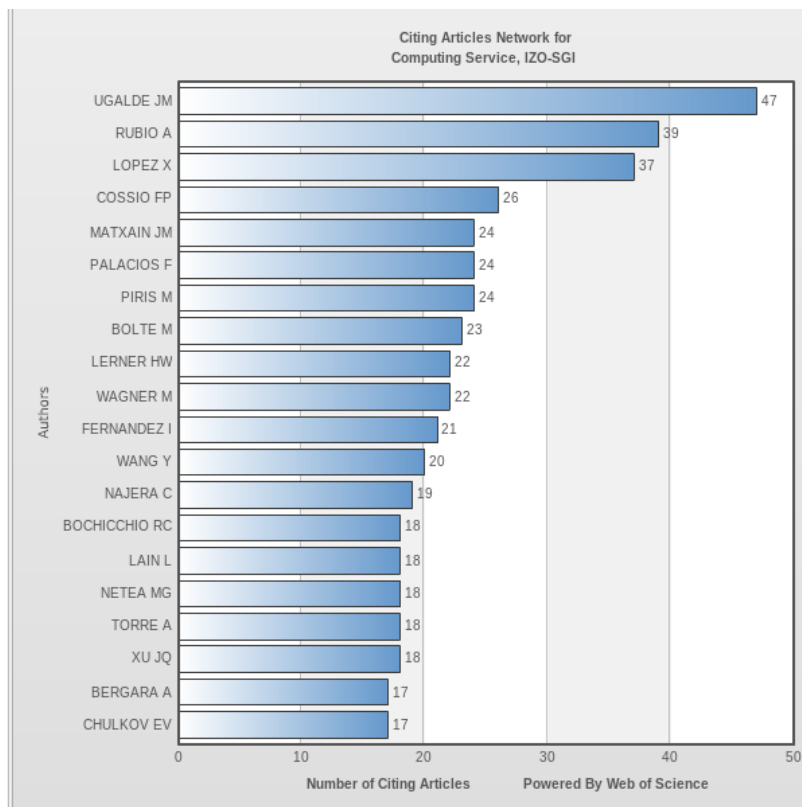


Figura 12: . Autores que más citan el Servicio según la WOK.

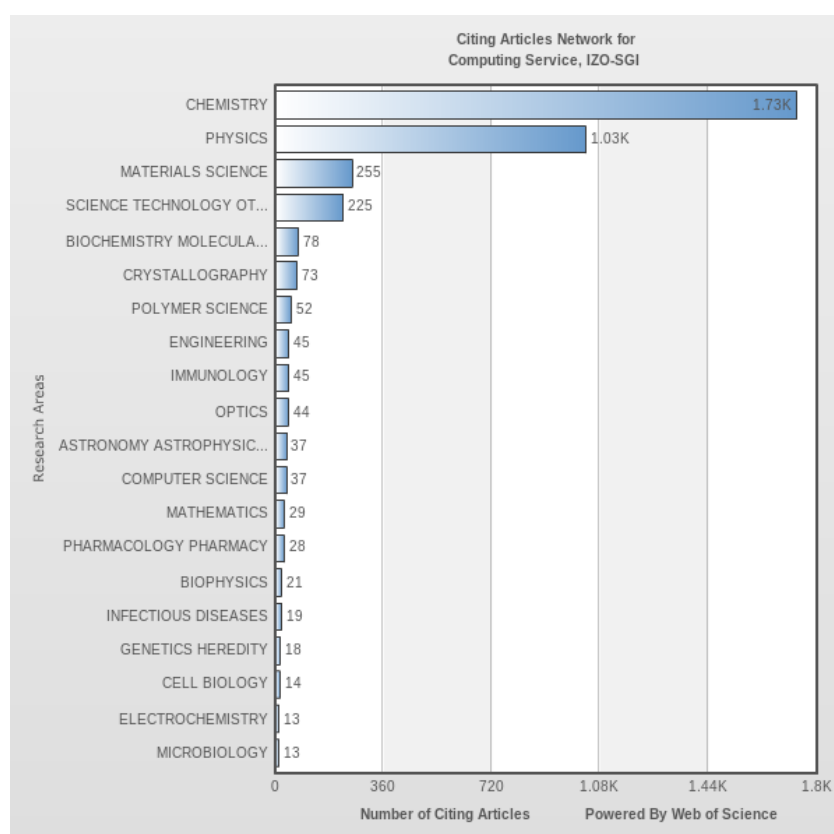


Figura 13: . Áreas de investigación en las que los usuarios han publicado artículos citando al Servicio.

A. Datos de uso de Arina

Tabla 2: 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	56029.33	pobinini	225.94
wmbgavem	15407.80	qopcomof	223.40
pobrease	11880.07	waxpoxxy	211.12
scpzuola	11532.73	ggpsamam	181.84
pobmugoj	11158.34	webogare	168.19
kibderua	8020.78	inpesalg	163.58
favcopee	7430.38	ggpzamai	163.27
povwawaj	6871.87	qoprualg	161.91
qfbleoni	6507.98	etpdihei	160.74
scpfraim	6148.51	poxmafie	139.66
qopgobee	6123.56	wabgalaj	135.07
waptctce	5930.03	bcpfima	101.83
qoaarecl	5327.32	qfpfegoj	97.64
pobmelat	5028.15	iapgarue	90.61
ciaazapj	4931.17	pobfoese	82.60
pobgrgrs	4657.89	webzucaa	75.88
wabeslel	4137.74	qobmimuj	75.85
quxlegoa	4129.07	qfbagcae	75.34
upetralanda001	4053.03	qfpbapri	67.57
pobrease	3837.98	bcpitaia	61.25
bckmimoj	2703.00	qfpgapae	56.80
povrucif	2658.17	epppema	36.45
favecvep	2245.59	pobmabej	30.38
popugurj	2218.50	wapgoesj	13.76
qovzaxxr	2139.18	sckwankm	13.36
poblairo	1958.39	mapalmau	12.83
bcpcaaa	1107.44	qfbloala	7.18
cixesesb	885.23	iqpagura	5.82

continua en la siguiente página

continua de la página anterior

Investigador	Días	Investigador	Días
poalolog	831.84	mapmemam	5.66
poplopex	796.26	wuppobam	4.76
kivremey	772.40	ccbsaalr	3.43
kibpapaa	744.33	baxakake	3.41
kibmeheg	703.49	ccpsoeta	3.28
acblonou	658.88	ikastle01	2.67
jipzasib	564.07	qfptogaa	2.38
quxbabai	561.79	sgpfemae	1.62
qoparaya	486.63	gbbaghej	1.54
wabpepaa	428.83	pmarkaide001	1.45
bcpremae	387.45	wapgoesj	1.02
wmpetali	378.17	gbbsaeur	0.40
qobconde	371.52	bcpmamza	0.37
bcpdiaro	296.27	meppesag	0.30
pobmabej	288.01	qfxaldad	0.27
poxmafie	268.06	jtpanlod	0.22
kixmagre	241.68	webpegoo	0.21

Tabla 3: 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
poahh	56029.33	etjfm	160.74
pojuu	30897.95	iaegr	90.61
qfjfg	23750.94	wenzu	76.09
waets	21337.83	lgsgi	75.85
qorzz	20564.74	qfila	67.57
qofcm	14429.65	bcizb	61.25
potss	12148.13	qfegp	56.80
poxlp	11592.49	iaffm	36.45
qocpn	6123.56	pomps	30.38
arinadm	5196.34	wakgg	13.76
waars	4926.11	magps	12.83
wdaga	4431.20	qfala	7.18
mimam	1209.27	qtftp	5.96
qpjag	772.40	iqaaau	5.82
ccjla	662.31	wuebp	4.76
jieab	567.34	qflp	2.68
bcdbu	387.45	pomaster	2.67
ggmer	346.56	gbdga	1.94
zoicu	296.27	gpucomp	1.62
injbi	163.58	wajge	1.02
qofpg	161.91	qfjvv	0.37

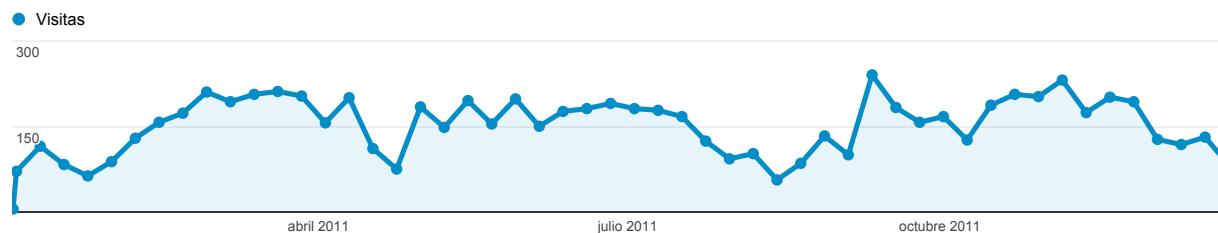
B. Estadísticas de la web del Servicio

Visión general de público

01/01/2011 - 31/12/2011

● % de visitas: 100,00%

Visión general



2.688 usuarios han visitado este sitio.



Visitas: 8.022



Visitantes exclusivos: 2.688



Páginas vistas: 30.042



Páginas / Visita: 3,74



Duración media de la visita: 00:05:26



Porcentaje de rebote: 46,00%



Porcentaje de visitas nuevas: 32,14%



■ 67,85% Returning Visitor

5.443 Visitas

■ 32,15% New Visitor

2.579 Visitas

Sistema operativo	Visitas	% Visitas
1. Windows	4.273	53,27%
2. Linux	3.199	39,88%
3. Macintosh	455	5,67%
4. Android	43	0,54%
5. (not set)	23	0,29%
6. iPad	10	0,12%
7. iPhone	6	0,07%
8. iPod	4	0,05%
9. SymbianOS	4	0,05%
10. Nokia	3	0,04%

[ver todo el informe](#)

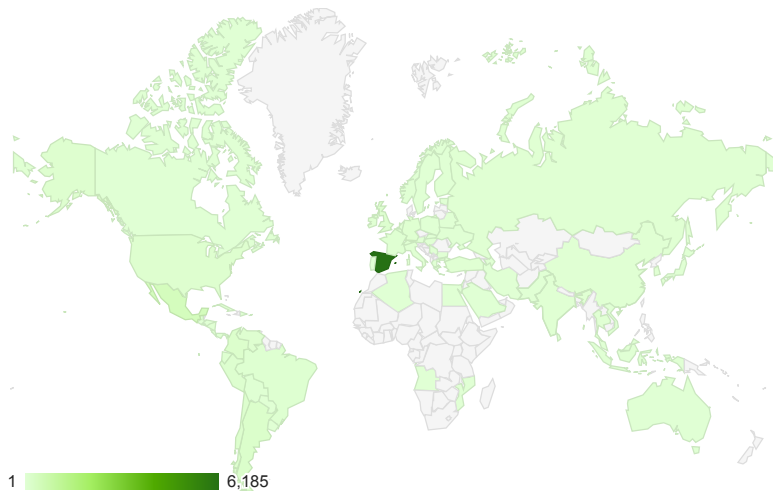
Ubicación

01/01/2011 - 31/12/2011

 % de visitas: 100,00%

Gráfico de visitas por ubicación

Uso del sitio



Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
8.022	3,74	00:05:26	32,14%	46,00%
% del total: 100,00% (8.022)	Promedio del sitio: 3,74 (0,00%)	Promedio del sitio: 00:05:26 (0,00%)	Promedio del sitio: 32,14% (0,00%)	Promedio del sitio: 46,00% (0,00%)

Pais/territorio	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
1. Spain	6.185	4,33	00:06:45	17,51%	38,11%
2. Mexico	413	1,34	00:00:51	89,59%	81,60%
3. Argentina	160	1,39	00:01:47	88,75%	71,25%
4. Colombia	152	1,59	00:00:42	88,82%	74,34%
5. Chile	119	1,78	00:01:43	87,39%	70,59%
6. Peru	92	1,40	00:00:51	88,04%	78,26%
7. United Kingdom	89	4,72	00:00:49	28,09%	35,96%
8. United States	87	1,84	00:00:33	83,91%	73,56%
9. Venezuela	70	1,21	00:00:28	82,86%	80,00%
10. Brazil	64	1,44	00:00:25	53,12%	79,69%

Filas 1 - 10 de 69

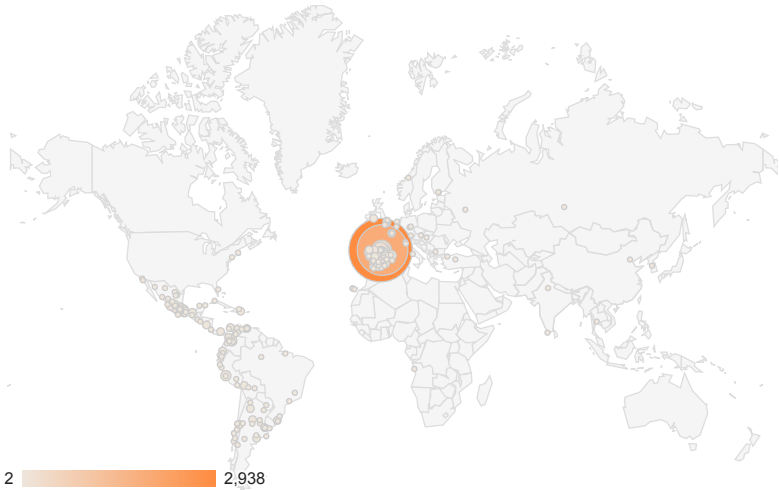
Ubicación

01/01/2011 - 31/12/2011

 % de visitas: 100,00%

Gráfico de visitas por ubicación

Uso del sitio



Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
8.022	3,74	00:05:26	32,14%	46,00%
% del total: 100,00% (8.022)	Promedio del sitio: 3,74 (0,00%)	Promedio del sitio: 00:05:26 (0,00%)	Promedio del sitio: 32,14% (0,00%)	Promedio del sitio: 46,00% (0,00%)

Ciudad	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
1. Bilbao	2.938	4,91	00:09:27	9,80%	35,98%
2. San Sebastian	1.895	4,23	00:05:04	12,82%	35,15%
3. Eibar	297	3,03	00:04:01	3,37%	33,67%
4. Logrono	200	5,44	00:06:45	7,00%	15,00%
5. Madrid	183	2,56	00:01:46	63,39%	61,20%
6. Las Arenas	142	3,44	00:05:58	15,49%	40,14%
7. Mexico City	115	1,36	00:00:59	78,26%	78,26%
8. (not set)	74	1,55	00:00:23	51,35%	68,92%
9. Vitoria	72	3,68	00:01:21	40,28%	40,28%
10. Barcelona	62	1,85	00:00:57	91,94%	66,13%

Filas 1 - 10 de 524

01/01/2011 - 31/12/2011

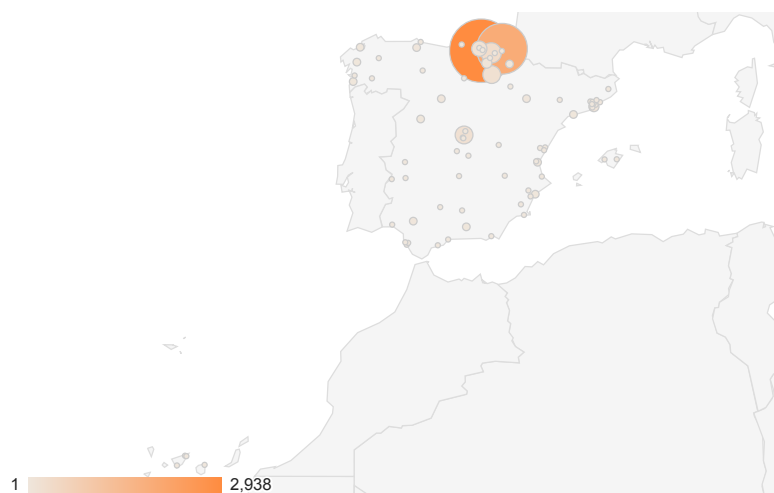
Ubicación

TODAS » PAÍS/TERRITORIO: Spain

 % de visitas: 77,10%

Gráfico de visitas por ubicación

Uso del sitio



Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
6.185	4,33	00:06:45	17,51%	38,11%
% del total: 77,10% (8.022)	Promedio del sitio: 3,74 (15,67%)	Promedio del sitio: 00:05:26 (24,23%)	Promedio del sitio: 32,14% (-45,51%)	Promedio del sitio: 46,00% (-17,15%)

Ciudad	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
1. Bilbao	2.938	4,91	00:09:27	9,80%	35,98%
2. San Sebastian	1.895	4,23	00:05:04	12,82%	35,15%
3. Eibar	297	3,03	00:04:01	3,37%	33,67%
4. Logrono	200	5,44	00:06:45	7,00%	15,00%
5. Madrid	183	2,56	00:01:46	63,39%	61,20%
6. Las Arenas	142	3,44	00:05:58	15,49%	40,14%
7. Vitoria	72	3,68	00:01:21	40,28%	40,28%
8. Barcelona	62	1,85	00:00:57	91,94%	66,13%
9. Valencia	36	2,31	00:01:08	66,67%	75,00%
10. Sevilla	26	1,65	00:00:49	88,46%	76,92%

Filas 1 - 10 de 79

C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI

La puntuación está en una escala de 0 a 5.

Informática Aplicada a la Investigación (33 respuestas)

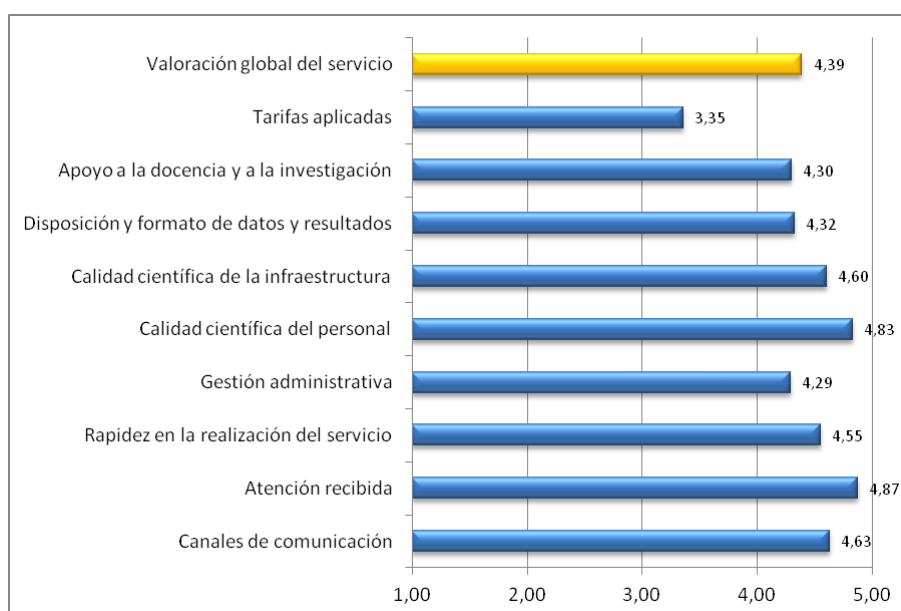
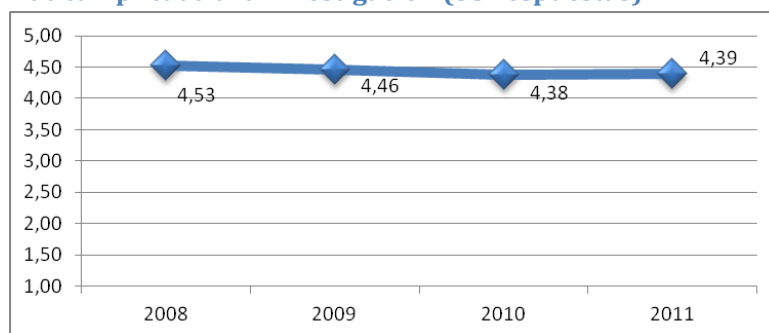


Figura 28. Resultados obtenidos en el Servicio de Informática Aplicada a la Investigación.

Observaciones realizadas:

- Todo perfecto. Quizá un poco más de agilidad en la facturación. (**Responsable de proyecto, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Tarifak ikusita, gure zerbitzari propioak erostea erabaki dugu. (**Profesor, usuario por primera vez, de una a seis veces al año**).
- El personal al cargo del servicio es excepcional, tanto en su preparación y cualificación técnica como en su amabilidad de trato. Son irremplazables y le añaden un tremendo valor al servicio de cálculo. Las tarifas, aunque han sido suavizadas, me siguen

resultando caras. (**Profesor José Andrés Fernández, usuario habitual, más de una vez al mes**).

- Nire ustez, kalkulu zientifikoei buruzko kurtso bat eskaintzea interesgarria izango zen. (**PIF, usuario por primera vez, más de una vez al mes**).
- Mejorar el encolamiento de servicios. Por ejemplo priorizar trabajos de GPU en los nodos de GPU. A veces se cuelan en esos nodos trabajos genéricos y hacen esperar excesivamente a otros trabajos. (**PIC, usuario por primera vez, de una a seis veces al año**).
- Más información sobre la estructura del servicio y mejor estructurada. Prestaciones y características de ARINA, GUINNESS, etc y de los diferentes tipos de colas. Diagrama del sistema. (**Profesor, usuario por primera vez, más de una vez al mes**).
- Servicio muy bueno y necesario. Sin embargo, las tarifas son elevadísimas para los usuarios habituales. Destinar 10000-12000 € todos los años a cálculos computacionales me parece un precio abusivo. (**Emilio J. Cocinero, responsable de proyecto, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- We are very happy with the service. The decrease in the rate for heavy users is very important for us and we are glad that it was implemented last year. My only suggestion is to think of continuing enlarging the facility so that it can compete with first tier research universities in Europe and the US. Thanks. (**Ronen Zangi, Ikerbasque, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- More processors and more disk space are needed. It is a nice that parallel jobs can now run with 12 processors instead of 8, but more than 12 processors would be desirable for my very demanding simulations. (**Andreas Heidenreich, Ikerbasque, 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 4: Artículos científicos en los que se menciona el uso del IZO-SGI.

Año	Publicaciones
2005	7
2006	27
2007	46
2008	41
2009	45
2010	57
2011	57

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

Año	Tesis
2006	2
2007	3
2008	1
2009	4
2010	5
2011	4

Tabla 6: 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
2011	2

D.2. Publicaciones recogidas

- [1] Diego R Alcoba, Roberto C Bochicchio, Luis Lain, and Alicia Torre. Domain-Averaged Fermi Hole and Domain-Restricted Reduced Density Matrices: A Critical Comparison. *International Journal of Quantum Chemistry*, 111:256–262, 2011.
- [2] Diego R Alcoba, Alicia Torre, Luis Lain, and Roberto C Bochicchio. Descriptions of local spins in the three-dimensional physical space. *Chemical Physics Letters*, 504:236–240, 2011.
- [3] Diego R Alcoba, Alicia Torre, Luis Lain, and Roberto C Bochicchio. Determination of Local Spins by Means of a Spin-Free Treatment. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 7:3560–3566, 2011.
- [4] Ibon Alkorta, Jose Elguero, Mohammad Solimannejad, and Slawomir J Grabowski. Dihydrogen Bonding vs Metal-sigma Interaction in Complexes between H(2) and Metal Hydride. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:201–210, 2011.
- [5] Boris B Averkiev, Manjeera Mantina, Rosendo Valero, Ivan Infante, Attila Kovacs, Donald G Truhlar, and Laura Gagliardi. How accurate are electronic structure methods for actinoid chemistry? *Theoretical Chemistry Accounts*, 129:657–666, 2011.
- [6] Ainhoa Calderon-Casado, Gotzone Barandika, Begona Bazan, Miren-Karmele Urtiaga, Oriol Vallcorba, Jordi Rius, Carles Miravittles, and Maria-Isabel Arriortua. Solid-state transformation of the MOF Ni-2(bipy)(1.5)(PDC)(2)(H2O)(2) center dot 3.5H(2)O. *Crystengcomm*, 13:6831–6838, 2011.
- [7] Letizia Chiodo, Martin Salazar, Aldo H Romero, Savio Laricchia, Fabio Della Sala, and Angel Rubio. Structure, electronic, and optical properties of TiO2 atomic clusters: An ab initio study. *Journal of Chemical Physics*, 135, 2011.
- [8] Emilio J Cocinero, Francisco J Basterretxea, Patricia Ecija, Alberto Lesarri, Jose A Fernandez, and Fernando Castano. Conformational behaviour, hydrogen bond competition and intramolecular dynamics in vanillin derivatives: acetovanillone and 6-hydroxy-3-methoxyacetophenone. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13:13310–13318, 2011.
- [9] Emilio J Cocinero, Alberto Lesarri, Patricia Ecija, Francisco Basterretxea, Jose A Fernandez, and Fernando Castano. Competing hydrogen bonding in methoxyphenols: The rotational spectrum of o-vanillin. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 267:112–117, 2011.
- [10] Peter L Cook, Wanli Yang, Xiaosong Liu, Juan Maria Garcia-Lastra, Angel Rubio, and F J Himpsel. Unoccupied states in Cu and Zn octaethyl-porphyrin and phthalocyanine. *Journal of Chemical Physics*, 134, 2011.
- [11] Pierluigi Cudazzo, Matteo Gatti, Friedrich Roth, Benjamin Mahns, Martin Knupfer, and Angel Rubio. Plasmon dispersion in molecular solids: Picene and potassium-doped picene. *Physical Review B*, 84, 2011.
- [12] Jesus M de los Santos, Roberto Ignacio, Gloria Rubiales, Domitila Aparicio, and Francisco Palacios. Hetero-Diels-Alder Reaction of Phosphinyl and Phosphonyl Nitroso Alkenes with Conjugated Dienes: An Aza-Cope Rearrangement. *Journal of Organic Chemistry*, 76:6715–6725, 2011.

-
- [13] Patricia Ecija, Emilio J Cocinero, Alberto Lesarri, Judith Millan, Francisco Basterretxea, Jose A Fernandez, and Fernando Castano. Discriminating the structure of exo-2-aminonorborene using nuclear quadrupole coupling interactions. *Journal of Chemical Physics*, 134, 2011.
- [14] S V Eremeev, G Bihlmayer, M Vergniory, Yu M Koroteev, T V Menshchikova, J Henk, A Ernst, and E V Chulkov. Ab initio electronic structure of thallium-based topological insulators. *Physical Review B*, 83, 2011.
- [15] Luca Evangelisti, Gang Feng, Patricia Ecija, Emilio J Cocinero, Fernando Castano, and Walther Caminati. The Halogen Bond and Internal Dynamics in the Molecular Complex of CF(3)Cl and H(2)O. *Angewandte Chemie-International Edition*, 50:7807–7810, 2011.
- [16] Luca Evangelisti, Alberto Lesarri, Michaela K Jahn, Emilio J Cocinero, Walther Caminati, and Jens-Uwe Grabow. N-Methyl Inversion and Structure of Six-Membered Heterocyclic Rings: Rotational Spectrum of 1-Methyl-4-piperidone. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:9545–9551, 2011.
- [17] Ferran Feixas, Eduard Matito, Jordi Poater, and Miquel Sola. Understanding Conjugation and Hyperconjugation from Electronic Delocalization Measures. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:13104–13113, 2011.
- [18] Ferran Feixas, Jelle Vandenbussche, Patrick Bultinck, Eduard Matito, and Miquel Sola. Electron delocalization and aromaticity in low-lying excited states of archetypal organic compounds. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13:20690–20703, 2011.
- [19] Arkaitz Fidalgo-Marijuan, Gotzone Barandika, Begona Bazan, Miren-Karmele Urtiaga, and Maria-Isabel Arriortua. Self-assembly of iron TCPP (meso-tetra(4-carboxyphenyl)porphyrin) into a chiral 2D coordination polymer. *Polyhedron*, 30:2711–2716, 2011.
- [20] Franck Fuster and Slawomir J Grabowski. Intramolecular Hydrogen Bonds: the QTAIM and ELF Characteristics. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:10078–10086, 2011.
- [21] Enrique Gomez-Bengoa, Aitor Landa, Aitziber Lizarraga, Antonia Mielgo, Mikel Oiarbide, and Claudio Palomo. Catalytic asymmetric alpha-alkylation of aldehydes via a S(N)2'-type addition-elimination pathway. *Chemical Science*, 2:353–357, 2011.
- [22] Eduardo Gomez-Torres, Diego A Alonso, Enrique Gomez-Bengoa, and Carmen Najera. Conjugate Addition of 1,3-Dicarbonyl Compounds to Maleimides Using a Chiral C-2-Symmetric Bis(2-aminobenzimidazole) as Recyclable Organocatalyst. *Organic Letters*, 13:6106–6109, 2011.
- [23] S J Grabowski. Halogen Bond and Its Counterparts: Bent's Rule Explains the Formation of Nonbonding Interactions. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:12340–12347, 2011.
- [24] S J Grabowski and P Lipkowski. Characteristics of X-H center dot center dot center dot pi Interactions: Ab Initio and QTAIM Studies. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:4765–4773, 2011.

- [25] Slawomir J Grabowski. Red- and Blue-Shifted Hydrogen Bonds: the Bent Rule from Quantum Theory of Atoms in Molecules Perspective. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:12789–12799, 2011.
- [26] K Y Guslienکو, G R Aranda, and J Gonzalez. Spin torque and critical currents for magnetic vortex nano-oscillator in nanopillars, 2011.
- [27] Andreas Heidenreich and Joshua Jortner. Kinetic energy distribution of multiply charged ions in Coulomb explosion of Xe clusters. *Journal of Chemical Physics*, 134, 2011.
- [28] Slawomir Janusz Grabowski. What Is the Covalency of Hydrogen Bonding? *Chemical Reviews*, 111:2597–2625, 2011.
- [29] Elisa Jimenez-Izal, Jon M Matxain, Mario Piris, and Jesus M Ugalde. Thermal Stability of Endohedral First-Row Transition-Metal TM@Zn(i)S(i) Structures, i=12, 16. *Journal of Physical Chemistry C*, 115:7829–7835, 2011.
- [30] Maj-Britt Suhr Kirketerp, Leonardo Andres Espinosa Leal, Daniele Varsano, Angel Rubio, Thomas J D Jorgensen, Kristine Kilsa, Mogens Brondsted Nielsen, and Steen Brondsted Nielsen. On the intrinsic optical absorptions by tetrathiafulvalene radical cations and isomers. *Chemical Communications*, 47:6900–6902, 2011.
- [31] L Lain, A Torre, D R Alcoba, and R C Bochicchio. A study of the relationships between unpaired electron density, spin-density and cumulant matrices. *Theoretical Chemistry Accounts*, 128:405–410, 2011.
- [32] Julen Larrucea. Car-Parrinello molecular dynamics study of the coordination on Al(3+) (aq). *Physica Scripta*, 84, 2011.
- [33] R M Lobayan, R C Bochicchio, A Torre, and L Lain. Electronic Structure and Effectively Unpaired Electron Density Topology in closo-Boranes: Nonclassical Three-Center Two-Electron Bonding. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 7:979–987, 2011.
- [34] Xabier Lopez, Mario Piris, Jon M Matxain, Fernando Ruiperez, and Jesus M Ugalde. Natural Orbital Functional Theory and Reactivity Studies of Diradical Rearrangements: Ethylene Torsion as a Case Study. *Chemphyschem*, 12:1673–1676, 2011.
- [35] Xabier Lopez, Fernando Ruiperez, Mario Piris, Jon M Matxain, and Jesus M Ugalde. Diradicals and Diradicaloids in Natural Orbital Functional Theory. *Chemphyschem*, 12:1061–1065, 2011.
- [36] A P Manso, F F Marzo, M Garmendia Mujika, J Barranco, and A Lorenzo. Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36:6795–6808, 2011.
- [37] N H March and A Rubio. Structural and Electronic Properties of Low-Dimensional C-Nanoassemblies and Possible Analogues for Si (and Ge). *Journal of Nanomaterials*, 2011.

-
- [38] Enrique E Maroto, Abel de Cozar, Salvatore Filippone, Angel Martin-Domenech, Margarita Suarez, Fernando P Cossio, and Nazario Martin. Hierarchical Selectivity in Fullerenes: Site-, Regio-, Diastereo-, and Enantiocontrol of the 1,3-Dipolar Cycloaddition to C(70). *Angewandte Chemie-International Edition*, 50:6060–6064, 2011.
- [39] M Martin-Rodriguez, C Najera, J M Sansano, A de Cozar, and F P Cossio. Binap-Gold(I) versus Binap-Silver Trifluoroacetate Complexes as Catalysts in 1,3-Dipolar Cycloadditions of Azomethine Ylides. *Chemistry-a European Journal*, 17:14224–14233, 2011.
- [40] Maria Martin-Rodriguez, Carmen Najera, Jose M Sansano, Abel de Cozar, and Fernando P Cossio. Chiral gold(I) vs chiral silver complexes as catalysts for the enantioselective synthesis of the second generation GSK-hepatitis C virus inhibitor. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, 7:988–996, 2011.
- [41] G Martinez-Guajardo, Z Gomez-Saldoval, D F Jana, P Calaminici, C Corminboeuf, and G Merino. Can an eight pi-electron bare ring be planar? *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13:20615–20619, 2011.
- [42] Gerardo Martinez-Guajardo, Alina P Sergeeva, Alexander I Boldyrev, Thomas Heine, Jesus M Ugalde, and Gabriel Merino. Unravelling phenomenon of internal rotation in B-13(+) through chemical bonding analysis. *Chemical Communications*, 47:6242–6244, 2011.
- [43] J M Matxain, M Piris, F Ruiperez, X Lopez, and J M Ugalde. Homolytic molecular dissociation in natural orbital functional theory. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 13:20129–20135, 2011.
- [44] J I Mujika, X Lopez, E Rezabal, R Castillo, S Marti, V Moliner, and J M Ugalde. A QM/MM study of the complexes formed by aluminum and iron with serum transferrin at neutral and acidic pH. *Journal of Inorganic Biochemistry*, 105:1446–1456, 2011.
- [45] J I Mujika, F Ruiperez, I Infante, J M Ugalde, C Exley, and X Lopez. Pro-oxidant Activity of Aluminum: Stabilization of the Aluminum Superoxide Radical Ion. *Journal of Physical Chemistry A*, 115:6717–6723, 2011.
- [46] J I Mujika, J M Ugalde, and X Lopez. Computational evaluation of pK(a) for oxygenated side chain containing amino acids interacting with Aluminum. *Theoretical Chemistry Accounts*, 128:477–484, 2011.
- [47] J Perez, R Carrascosa, L Garcia, G Barandika, A Calderon-Casado, E Perez, J L Serrano, and M D Santana. Coordination to metal centers: A tool to fix high energy conformations in organic molecules. Application to 2,4,4-trimethyl-1,5,9-triazacyclododec-1-ene and related macrocycles. *Dalton Transactions*, 40:9504–9511, 2011.
- [48] M Piris, X Lopez, F Ruiperez, J M Matxain, and J M Ugalde. A natural orbital functional for multiconfigurational states. *Journal of Chemical Physics*, 134, 2011.
- [49] Yuri Reyes and Jose M Asua. Revisiting Chain Transfer to Polymer and Branching in Controlled Radical Polymerization of Butyl Acrylate. *Macromolecular Rapid Communications*, 32:63–67, 2011.

- [50] Yuri Reyes, Aitziber Lopez, and Jose M Asua. Modeling the Microstructure of Acrylic-Polyurethane Hybrid Polymers Synthesized by Miniemulsion Polymerization. *Macromolecular Reaction Engineering*, 5:352–360, 2011.
- [51] Elixabete Rezabal, Juergen Gauss, Jon M Matxain, Robert Berger, Martin Diefenbach, and Max C Holthausen. Quantum chemical assessment of the binding energy of CuO(+). *Journal of Chemical Physics*, 134, 2011.
- [52] R Rodriguez, D Gau, T Kato, N Saffon-Merceron, A De Cozar, F P Cossio, and A Baceiredo. Reversible Binding of Ethylene to Silylene-Phosphine Complexes at Room Temperature. *Angewandte Chemie-International Edition*, 50:10414–10416, 2011.
- [53] Fernando Ruiperez, Francesco Aquilante, Jesus M Ugalde, and Ivan Infante. Complete vs Restricted Active Space Perturbation Theory Calculation of the Cr(2) Potential Energy Surface. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 7:1640–1646, 2011.
- [54] Fernando Ruiperez, Jesus M Ugalde, and Ivan Infante. Electronic Structure and Bonding in Heteronuclear Dimers of V, Cr, Mo, and W: a CASSCF/CASPT2 Study. *Inorganic Chemistry*, 50:9219–9229, 2011.
- [55] O Ruiz-Larranaga, C Manzano, M Iriondo, J M Garrido, E Molina, R Vazquez, R A Juste, and A Estonba. Genetic variation of toll-like receptor genes and infection by Mycobacterium avium ssp paratuberculosis in Holstein-Friesian cattle. *Journal of Dairy Science*, 94:3635–3641, 2011.
- [56] Ronen Zangi. Driving Force for Hydrophobic Interaction at Different Length Scales. *Journal of Physical Chemistry B*, 115:2303–2311, 2011.
- [57] A. Zugarramurdi, A. G. Borisov, N. Zabala, E. V. Chulkov, and M. J. Puska. *Phys. Rev. B*, 83:035402, 2011.