

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

Servicios Generales de Investigación (SGIker)

**2016**

25 de octubre de 2017

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

## Índice

<b>1. Resumen y agradecimiento</b>	<b>4</b>
<b>2. El IZO-SGI en cifras</b>	<b>5</b>
<b>3. Introducción</b>	<b>7</b>
3.1. Año 2016 . . . . .	10
<b>4. Descripción del equipamiento</b>	<b>11</b>
4.1. Equipamiento propio . . . . .	11
4.2. Equipamiento de las TICs . . . . .	11
<b>5. Software</b>	<b>12</b>
<b>6. Acciones y proyectos</b>	<b>13</b>
6.1. Arina . . . . .	13
<b>7. Uso de los recursos</b>	<b>14</b>
7.1. Arina . . . . .	14
7.1.1. Personal investigador . . . . .	15
7.1.2. Trabajos . . . . .	17
<b>8. Participación en eventos y formación</b>	<b>21</b>
8.1. Formación impartida . . . . .	21
8.2. Presentaciones realizadas . . . . .	21
8.3. Eventos Organizados . . . . .	21
8.4. Participación en Congresos . . . . .	21
<b>9. Tarifas del Servicio</b>	<b>22</b>
<b>10. Encuesta de satisfacción</b>	<b>24</b>
10.1. Datos de satisfacción del IZO-SGI . . . . .	24
10.2. Observaciones realizadas . . . . .	24
<b>11. Actividad web</b>	<b>27</b>
11.1. Página web . . . . .	27
11.1.1. Página de monitorización del Servicio . . . . .	27
11.1.2. Formularios del Servicio . . . . .	27
11.2. Blog del Servicio . . . . .	27
11.3. Twitter . . . . .	27
11.4. Facebook . . . . .	28
11.5. Lista de distribución . . . . .	28
<b>12. Bibliometría</b>	<b>29</b>
12.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio . . . . .	29

<b>13. Apéndices</b>	<b>32</b>
<b>A. Descripción detallada del equipamiento</b>	<b>33</b>
A.1. Arina . . . . .	33
A.2. Servicios e infraestructura de la VGTIC . . . . .	33
A.3. Otros servicios . . . . .	34
<b>B. Datos de uso de Arina</b>	<b>36</b>
<b>C. Estadísticas de la web del Servicio</b>	<b>39</b>
<b>D. Posts sobre HPC publicado en el blog</b>	<b>43</b>
<b>E. Publicaciones del Servicio</b>	<b>44</b>
E.1. Datos históricos . . . . .	44
E.2. Publicaciones recogidas . . . . .	44

## 1. Resumen y agradecimiento

El Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico) de la UPV/EHU sigue intentando mejorar sus indicadores. Entre los aspectos positivos del 2016 (ver siguiente sección *El IZO-SGI en cifras*) cabe destacar:

- El aumento significativo en la ocupación del cluster sin apenas aumento en el tiempo de espera.
- La actualización de sistema operativo de la ampliación de 2014, lo que permitirá alargar la vida de estos recursos.
- La ampliación realizada en 2016 que es la primera fase habiendo otra segunda fase que se realizará en 2017.
- El aumento en el número de publicaciones ha sido considerable, se han recogido 95 artículos que han usado el servicio durante el 2016.

El Servicio sigue manteniendo una excelente puntuación en la encuesta de satisfacción realizada al personal investigador usuario del Servicio.

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

## 2. El IZO-SGI en cifras

	<b>2.012</b>	<b>2.013</b>	<b>2.014</b>	<b>2.015</b>	<b>2.016</b>
Cores de cálculo	1.520	1.400	1.300 <sup>§</sup>	1.852	2.272 <sup>#</sup>
Millones de horas de cálculo consumidas	11,27	10,4	10,1	13,99	15,2
Investigadores activos	89	99	107	104	116
Grupos activos	40	47	45	42	38
Cuentas nuevas	20	34	23	43	43
Satisfacción de los usuarios*	9,3	9,3	9,6	9,5	9,5
Artículos científicos**	74	87	75	85	94
Visitas web	9.899	5.924	2.340	2.902	5.152
Páginas vistas	30.738	20.323	12.057	10.799	12.887
Posts en el blog HPC	27	47	36	30	11
Visitas del blog HPC	4.741	24.613	23.677	20.670	18.554
<b>Arina</b>					
Cores de cálculo	1.360	1.320	1.300	1.892	2.172 <sup>#</sup>
Millones de horas consumidas	9,6	9,8	10,1	14,0	15,2
Promedio de ocupación	79 %	83 %	87 %	86 %	92 %
Trabajos enviados	98.383	100.214	76.912	115.681	115.172
Trabajos de más de 2 minutos <sup>‡</sup>	78.846	75.406	64.335	100.131	98.472
Horas promedio por trabajo <sup>††</sup>	122	130	156	140	132
Horas promedio de espera †	5,2	5,5	10,0	14	15,1
<b>Péndulo</b>					
Cores de cálculo	80	80	70	—	—
Millones de horas consumidas	0,07	0,04	0,006	—	—
<b>Ikerbasque<sup>##</sup></b>					
Cores de cálculo	208	208	—	—	—
Millones de horas consumidas	1,6	0,55	—	—	—

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

§ La ampliación 2.014 se pusieron en producción el último mes por lo que no ha tenido mucho peso en las estadísticas.

## La máquina se apagó en Abril del 2.013.

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

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

- † Los trabajos se ejecutan a través de un sistema de colas que asigna a cada trabajo los recursos que se le han solicitado y ordena su ejecución para optimizar el uso del cluster. El tiempo en cola es el tiempo que están esperando los trabajos hasta que se liberan los recursos que necesitan y entran en ejecución.
  - \* Encuesta de satisfacción de los usuarios realizada por la Unidad de Calidad e Innovación.
- \*\* En los que se agradece al IZO-SGI.
- ‡ La ampliación fue en Septiembre con 420 cores.

### 3. Introducción

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

En esta era, la digitalización de la información está alcanzando límites sin precedentes. Cada vez se tiene información de más sistemas, más precisa, de más variables, cada menor intervalo de tiempo, etc. lo que supone grandes cantidades de datos que son necesarios procesar y analizar para obtener información. Este es el reto del *Big Data* que requiere de potentes sistemas para su tratamiento. La industria 4.0 es un ejemplo de actividad tecnológica que incluye ambos aspectos: simulación y big data.

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

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

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

Este es un Servicio General de Investigación (SGIker) a disposición del personal investigador de la UPV/EHU, empresas y OPIs que lo soliciten, por lo que

los usuarios del Servicio General abarcan un amplio espectro de la Ciencia y la Ingeniería con investigaciones en las siguientes áreas o líneas:

- Secuenciación y genética.
- Nanomateriales semiconductores y magnéticos nanoporosos.
- Simulación de explosiones de Coulomb.
- Diseño de fármacos.
- Fotofísica, fotoquímica y dinámica vibracional de moléculas de interés biológico.
- Propiedades estructurales y dinámicas de sólidos y materiales funcionales.
- Cristalografía matemática y computacional.
- Inteligencia computacional.
- Procesamiento del lenguaje.
- Dinámica, estereodinámica y cinética de reacciones.
- Estudios de CFD de cápsulas de almacenamiento de combustible nuclear gastado.
- Estudios de CFD de ventilación y confort.
- Estudios CFD sobre generadores de vórtices para aerogeneradores, alas, etc.
- Diseño de miméticos multiópicos.
- Nanotecnología, estudio en nanoestructuras.
- Simulaciones Monte Carlo.
- Colorantes láser.
- Fosfafluoroquímica.
- Propiedades térmicas de materiales heterogéneos.
- Plegado de proteínas.
- Materiales magnéticos para discos duros.
- Nanomagnetismo.
- Análisis estadísticos multivariantes.
- Procesos ultrarápidos en química física.

- Dinámica y control de átomos fríos.
- Reconstrucción tridimensional de partículas biológicas observadas mediante TEM.
- Álgebra y teoría de grupos.
- Algoritmos de descomposición de problemas de programación estocástica.
- Funciones de distribución numéricas para contrastes de raíces unitarias estacionales.
- Materiales magnónicos artificiales controlados dinámicamente.
- Almacenamiento eficiente para depósitos RDF.
- Nanoclusters of semiconducting materials: properties, doping and selfassembly.
- Nanoclusters of semiconducting materials: (Bio)Functionalization.
- Aluminum interaction with bioligands.
- Protein damage Caused by ROS and RNS species and its prevention by antioxydants.
- Non-Covalent interactions.
- Water solvation of sodium on Cu(111) surfaces.
- Electronic and optical properties of MM compounds.
- Nanomecánica de proteínas de la matriz extracelular.
- Daño por radiación de materiales.
- Heteroestructuras de materiales óxidos.
- Polimerización y catálisis orgánica.
- Seguridad en redes de datos.
- Nuevas tecnologías y sistemas de transmisión.
- Sistemas de información.
- Determinación de isótopos radiactivos en muestras ambientales e industriales.
- etc.

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

### 3.1. Año 2016

En Septiembre se puso en producción la ampliación de recursos del Servicio con los siguientes elementos:

- 14 Nodos de cálculo de 28 cores (2 x Xeon E5-2680 v4 @ 2.40GHz) y 128 GB de memoria RAM.
- Un nodo con 2 tarjetas GPGPU Nvidia Kepler K4 y 28 cores (2 x Xeon E5-2680 v4 @ 2.40GHz) y 128 GB de memoria RAM.
- Interconexión infiniband FDR a 56 Gb/s.
- Un servidor de gestión.
- Demás elementos secundarios y servicios de instalación.

Esta ampliación es la primera fase, y la segunda fase se instalará a principios de 2017. Por ello no fue muy grande y fue inmediatamente absorbida por los investigadores lo que revela la necesidad que existía.

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

El Servicio ha seguido proporcionado recursos, consultoría y apoyo en cálculo científico a el personal investigador de la UPV/EHU siendo esta también su principal actividad. Pertenece a la Red Nacional de e-Ciencia donde participa en el área de supercomputación y a la red HP-CAST Ibérica. Ha asistido a congresos y conferencias. Mantiene la página web del Servicio con información útil para el personal investigador sobre el mismo y redacta el blog HPC en la Ehusfera. El IZO-SGI, por otra parte, ha invertido entorno a 10.000 € en la compra y/o actualización de varios programas científicos con licencia corporativa y 13.000 € en renovación de soporte de la máquinas.

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

## 4. Descripción del equipamiento

### 4.1. Equipamiento propio

Dentro de los recursos propios del IZO-SGI, durante el 2016 se ha ampliado a 2272 cores, varios nodos de computación con GPGPUs, sistemas de memoria compartida y 3 sistemas de ficheros de alto rendimiento basados en Lustre y servidores de servicio. En el Apéndice A se pueden tener más detalles técnicos de los mismos.

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

### 4.2. Equipamiento de las TICs

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

## 5. Software

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

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

**ADF.** 4 licencias Flotantes y ADF-Gui (2.100 €).

**Star-CCM+.** Licencia Power on Demand (6.500 €).

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

**Turbomole.** Renovación 1.200 €.

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

## 6. Acciones y proyectos

El 2016 se ha caracterizado por la ampliación que se ha efectuado y que comentamos en la siguiente subsección

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

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

### 6.1. Arina

La ampliación que se ha estado proyectando se va a realizar en dos fases, la primera fase se ha ejecutado en 2016. Esta fase ha consistido en una compleja actualización de Katramila, sus nodos y el sistema de ficheros `gscratch`. Posteriormente se ha instalado un ampliación de 420 cores.

## 7. Uso de los recursos

Por motivos de facturación y para facilitar esta tanto al Servicio como al personal investigador, muchos de cuyos proyectos han de cerrarse el 31 de Diciembre, el año se contabiliza desde el 1-12-2015 al 30-11-2016.

En el 2.016 en el IZO-SGI han calculado 38 grupos o proyectos de investigación en las áreas de Física, Química, Mineralogía, Biología, Genética, Informática, Ingeniería, Matemáticas, Antropología, etc. Se han abierto 43 nuevas cuentas de usuario y 118 investigadores realizaron cálculos.

### 7.1. Arina

Arina ha estado funcionando 24 horas 365 días al año y su uso durante el mismo ha sido de 633.143 días de cálculo (15,2 millones de horas) lo que supone un **92 %** de ocupación.

El uso ha sido bastante homogéneo, con un gran aprovechamiento de Arina y que el personal investigador ha podido trabajar con agilidad. El tiempo de espera promedio ha sido ligeramente superior al del año pasado, 15,2 horas; aunque esto se debe principalmente a que algunos usuarios envían listas muy largas de trabajos. Este año se han enviado a Arina 115.681 trabajos de los cuales 98.478 duraron más de 2 minutos. Realizamos la suposición de que la mayoría de los que duraron menos de dos minutos fueron scripts o inputs con algún tipo de error, aunque en número suponen muchos trabajos dada su corta duración son una parte mínima de tiempo de cálculo. El tiempo promedio por trabajo a sido de 132 horas ligeramente inferior a las 140 del año 2.015.

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

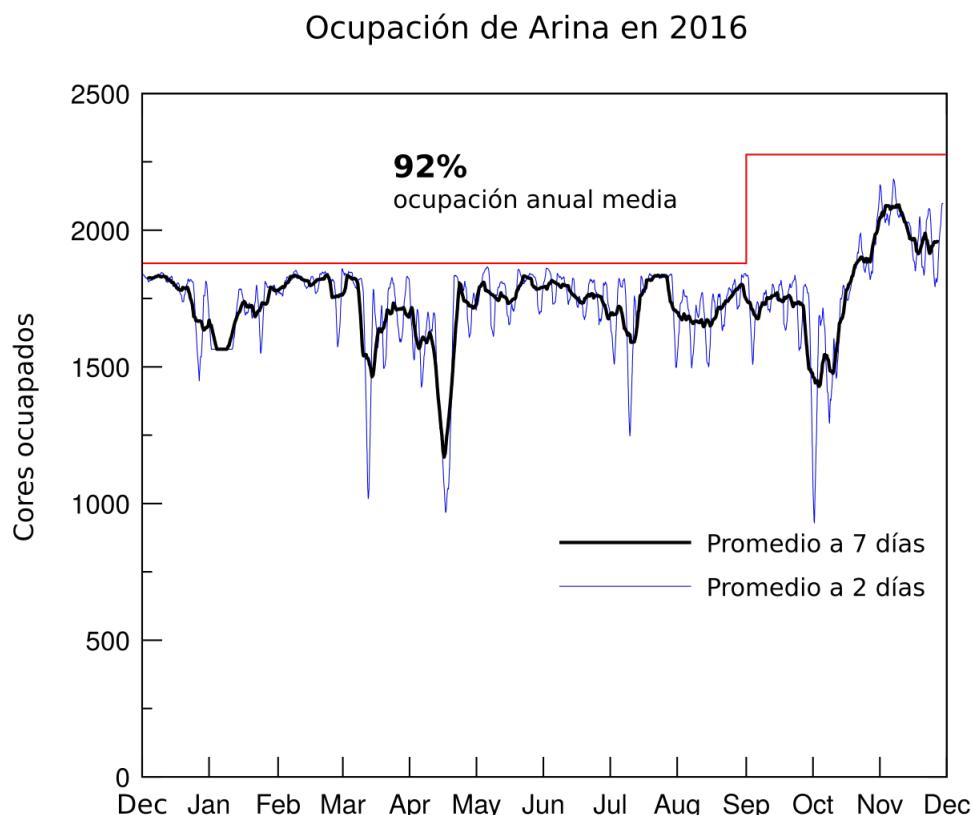
Uno de los objetivos del Servicio es conseguir la mayor ocupación posible de Arina dado que supone una mayor amortización del equipamiento. No obstante, la ocupación óptima de Arina tiene su techo en torno al 80 %, límite a partir del cual las colas se empiezan a alargar. La ocupación del 2.016 ha llegado hasta el 92 %, indicadora de la necesidad de ampliar los recursos, ampliación que justo se puso en marcha a finales del 2.016. El tiempo de espera ha seguido aumentando hasta las 15 horas, otro indicador de la necesidad de ampliar. No obstante, hay muchos usuarios muy intensivos que lanzan grandes cantidades de trabajos que tienen largos tiempos de espera, mientras que la mayoría de los usuarios más modestos apenas ven alterados sus tiempos de espera.

### 7.1.1. Personal investigador

Este año el personal investigador que ha calculado en Arina asciende a un total de 118, Figura 2. 57 investigadores han calculado más de 500 días. El investigador que mas calculó empleó 85.554 días de cálculo, este investigador fue el 16º en uso el 2.015. Por debajo con menos de 500 pero más de 30 días de cómputo hay 33 investigadores/as (similar que el año pasado) y con menos de 30 días calculados hay 28. En la tabla 2 del Apéndice B se pueden encontrar los datos completos.

37 grupos de investigación han calculado en Arina, Figura 3. 19 grupos han calculado intensivamente (más de 1.000 días de cálculo), el mismo número que el año anterior. El grupo que más ha usado Arina ha empleado 169.322 días. 7 han sido los grupos que han calculado entre 1.000 y 100 días y 11 grupos menos de 100 días. En la tabla 3 del Apéndice B se pueden encontrar los datos completos.

Si agrupamos los grupos de investigación por departamentos, Figura 4, el depar-

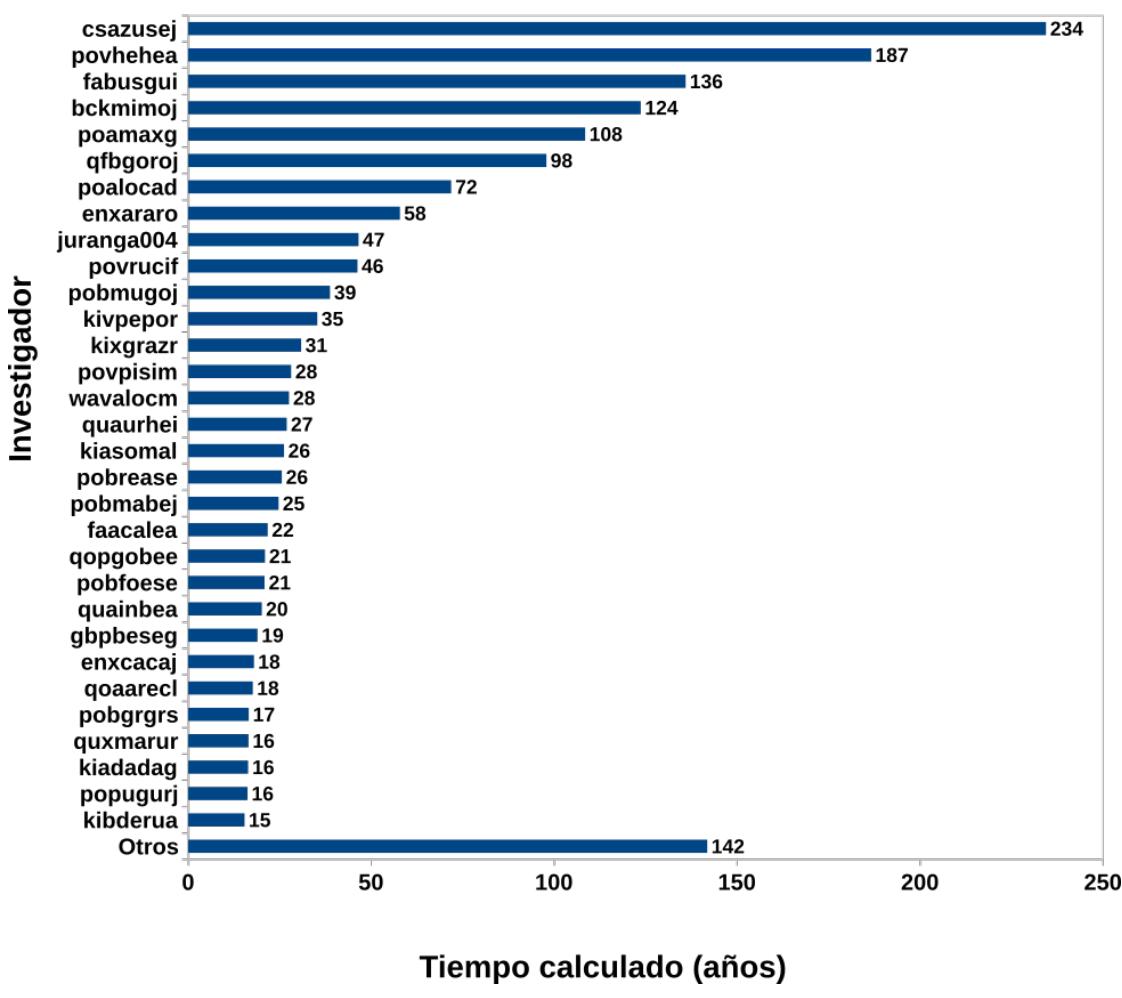


**Figura 1:** Uso de Arina en el año contable (periodo 12/2013-11/2014) donde se observa el gran uso de la infraestructura. Se toman medidas cada 15 minutos pero para eliminar ruido se ha promediado sobre dos días para eliminar la variación día/noche y cada 7 días para promediar igualmente el efecto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

tamento de Ciencia y Tecnología de Polímeros es el que agrupa al mayor número de usuarios de Arina y que empleó 181.333 días de cálculo, 30.000 días menos que el año anterior. Este año es de resaltar el aumento en el uso por parte del departamento de Química Física, que ha pasado de 76.285 días a 171.618.

En cuanto al uso por campus este año el uso se ha equilibrado respecto a años anteriores, sobre todo por el aumento en el uso del departamento de Química Física de Leioa. Así, el 38 % ha sido usado por usuarios del campus de Gipuzkoa, un 29 % de Bizkaia y los usuarios externos rondan el 30 %. El uso de los investigadores de Araba continua siendo muy bajo, como se puede ver en la Figura 5.

### Uso de Arina por los principales investigadores

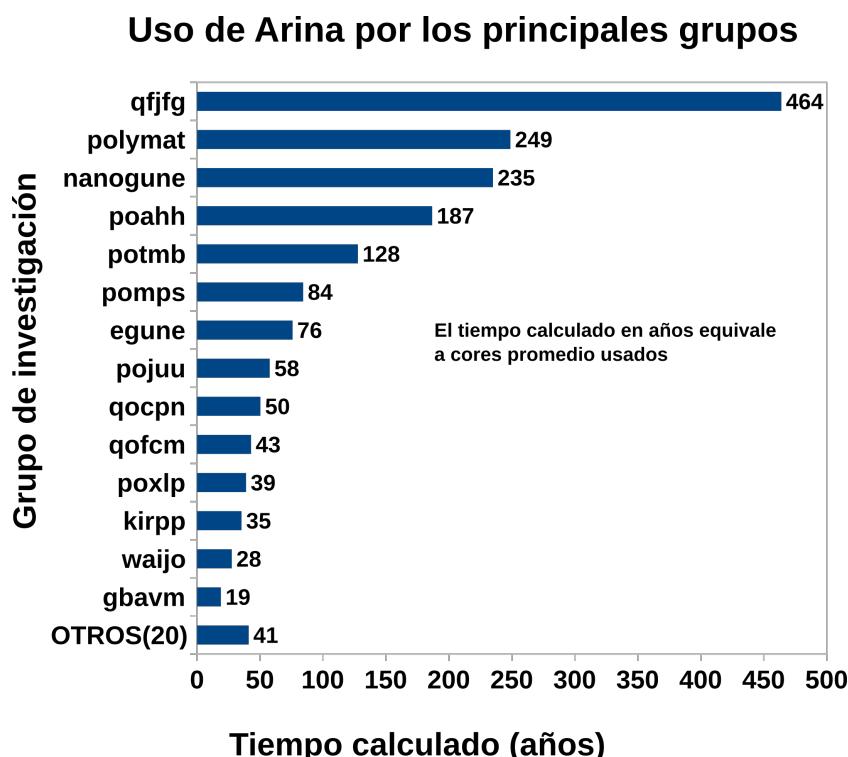


**Figura 2:** La distribución del tiempo de cálculo empleado en el cluster Arina por el personal investigador muestra su utilidad a un amplio espectro, desde grandes usuarios hasta los más puntuales. En OTROS está agrupado el personal investigador con menos de 15 años calculados.

### 7.1.2. Trabajos

Hemos analizado también los trabajos enviados a Arina. De estos, en una gran medida, podemos controlar qué programa ejecutaban dado que o bien usaban alguna herramienta especial diseñada por el Servicio que permite identificar el trabajo, o alguna cola especial o porque ciertos programas que han sido usados por usuarios específicos y/o es el único programa que han usado. El resto que no podemos filtrar o aquellos cuyo uso ha sido menor a 5.000 días de cálculo han sido agrupados como *OTROS* en la Figura 6. Los datos no son muy precisos pero son una foto lo suficientemente ilustrativa. Los programas Gaussian y Siesta han sido los más usados, con un porcentaje del 48 y 13 respectivamente. El aumento de Gaussian ha sido significativo respecto al año pasado impulsado por el departamento de Química Física. En tercer lugar está Plasma, un programa creado por un investigador de la UPV/EHU, que sigue estando entre los programas más usados, por encima del 10 %. Destacamos también que CP2K, Amber y VASP aparecen entre los programas más usados, siguiendo la tendencia de los años anteriores.

Analizando los trabajos, desde la perspectiva de su uso de tiempo de cálculo, evaluado como el tiempo que el trabajo ha estado calculando por el número de cores que emplea, un 98 % del tiempo de cálculo se emplea en trabajos de más de un día de uso por core, Figura 7. Evidentemente, con trabajos pequeños es más



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

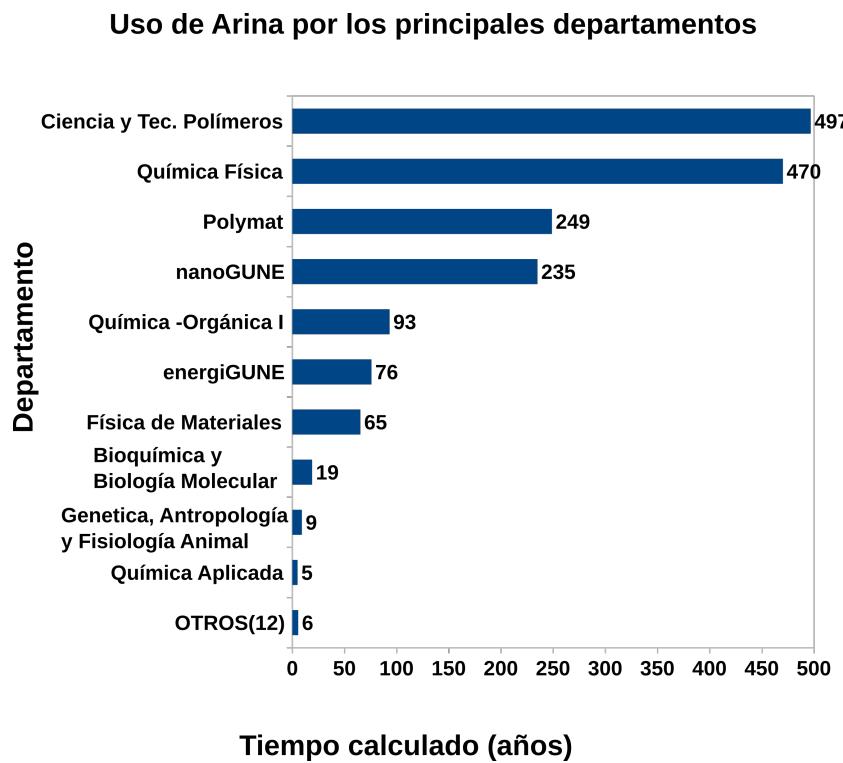


Figura 4: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por departamento con importante contribución de Química especialmente y Física.

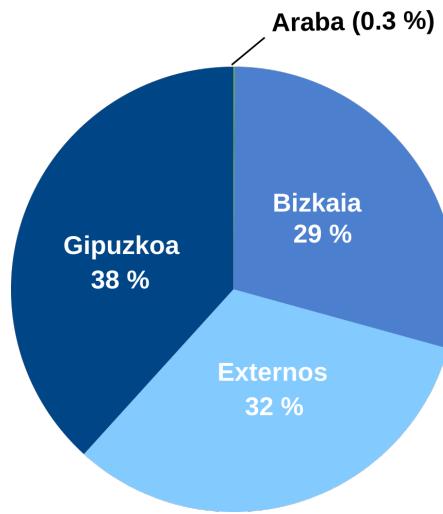
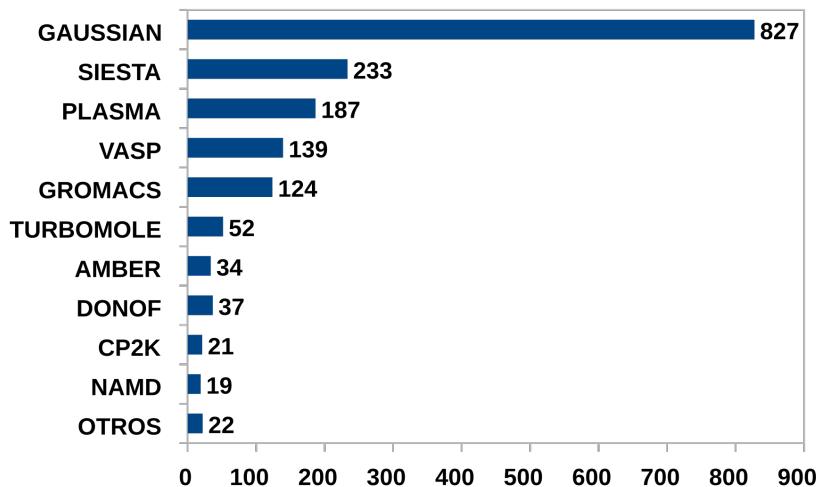


Figura 5: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por campus. Este año el uso de los campus de Gipuzkoa y Bizkaia se equilibra.

difícil acumular tiempo de cálculo. Los trabajos que usan entre 1 y 10 días de cálculo suponen un 17% de los días de cálculo. En el otro extremo, los mayores

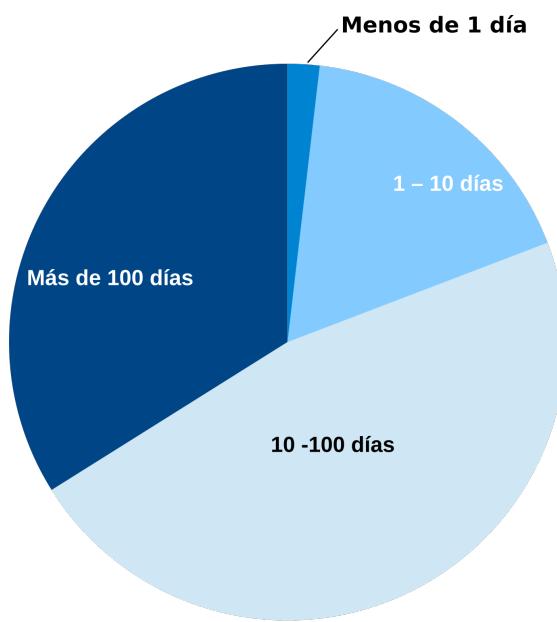


**Figura 6:** Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por diferentes programas. Este año unos pocos consumen la mayor parte del tiempo.

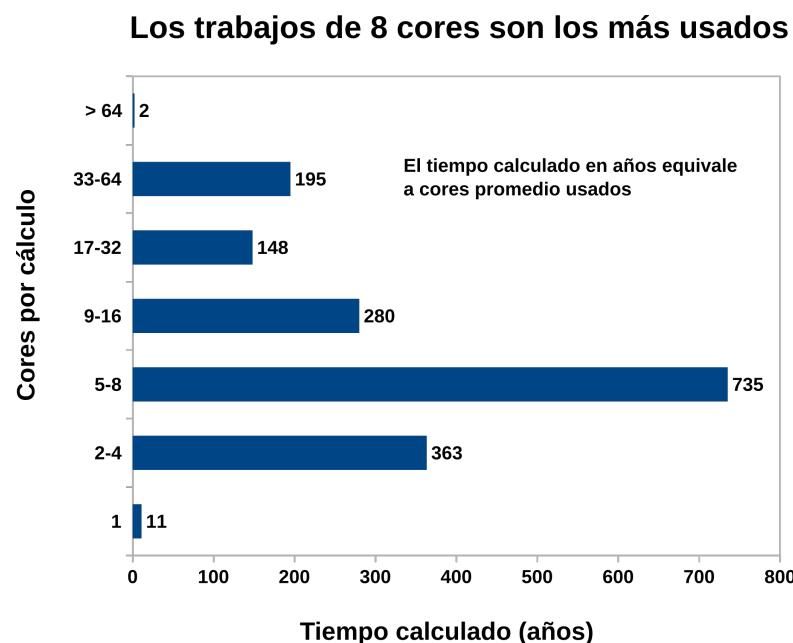
trabajos que emplean más de 10 días de cómputo suponen un 80 % del tiempo consumido (75 % el año anterior). Un porcentaje muy alto que refuerza la necesidad de clusters como Arina con muchos nodos y estables que permiten la ejecución de estos trabajos de forma rutinaria y cómoda.

En la Figura 8 clasificamos los trabajos en función del número de cores que emplean. Siempre recomendamos usar 1, 4, 8 cores o un múltiplo de 8. Ello explica los diferentes rangos mostrados en la Figura 8. El 42 % de los trabajos corresponden a 5-8 cores. Esto es debido a que podemos considerar la unidad de cálculo el nodo que posee 8 cores y que una mayoría del personal investigador lanza sus cálculos a 8 cores. Los siguientes rangos más usados han sido 1-4 cores (21 %), mientras que el año pasado fue el 9-16 (este año este rango ha sido usado por el 16 % de los trabajos). Otra vez este cambio ha sido debido a los cálculos del departamento de Química Física. El 8 % del tiempo se ha empleado en trabajos que usan más de 17-32 cores, es decir, se han ejecutado en paralelo en más de 1 nodo y se ha notado un gran aumento en el rango 33-64. Nuevamente el que cerca del 80 % de los trabajos se ejecuta en 8 cores o más, pone de manifiesto la necesidad ordenadores multiprocesador como Arina.

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



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



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

## 8. Participación en eventos y formación

### 8.1. Formación impartida

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

“Simulación y modelización de nuevos materiales” del Máster Interuniversitario nacional en nuevos materiales

### 8.2. Presentaciones realizadas

“An introduction to HPC and its applications in Bio/Med Sciences“, Internal Seminars on Biosciences and Biomedicine Internal Seminars on Biosciences and Biomedicine, Leioa

“Supercomputación desde la investigación de vanguardia a la vida cotidiana”, “XII Semana de la Ciencia“, Universidad de la Rioja, Logroño

“Computación Científica”, Seminarios internos del CIDIR.

### 8.3. Eventos Organizados

Participación en la organización del Summer School “DYNAPAEUTICS”

### 8.4. Participación en Congresos

HPC Knowledge Meeting'16, HPCK, Barcelona

5º Fujitsu HPC User Group, Cáceres.

## 9. Tarifas del Servicio

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

### ▪ Tarifa de CPU

#### • Tarifa interna UPV/EHU

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

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

#### • Tarifa para otros organismos públicos

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

#### • Tarifa para organismos privados

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

### ▪ Tarifa de almacenamiento.

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

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

**Tabla 1:** Tarifa de almacenamiento

Rango de uso de CPU (en días al año)	Tarifa de disco (€/GB) al mes
$2.500 < \text{cpu} < \infty$	0,1
$100 < \text{cpu} < 2500$	0,5
$1 < \text{cpu} < 100$	1,0
$0 < \text{cpu} < 1$	1,5

## 10. Encuesta de satisfacción

La Unidad de Calidad e Innovación de los SGIker realiza una encuesta anual de satisfacción sobre el IZO-SGI. Los resultados del Servicio son excelentes.

Se recibieron 63 respuestas del personal investigador del Servicio con una valoración general de 4,76 sobre 5 (9,52 sobre 10). De la encuesta podemos destacar que todas las respuestas están entorno a la valoración general de 4,8 excepto la correspondiente a la valoración de las tarifas con la puntuación más baja de 4 sobre 5. En realidad 4 puntos no representa una puntuación muy baja en valores absolutos pero si en términos relativos si se lo compara con la valoración del resto de elementos evaluados del Servicio. Esta tendencia se viene repitiendo año tras año.

### 10.1. Datos de satisfacción del IZO-SGI

La puntuación está en una escala de 0 a 5.

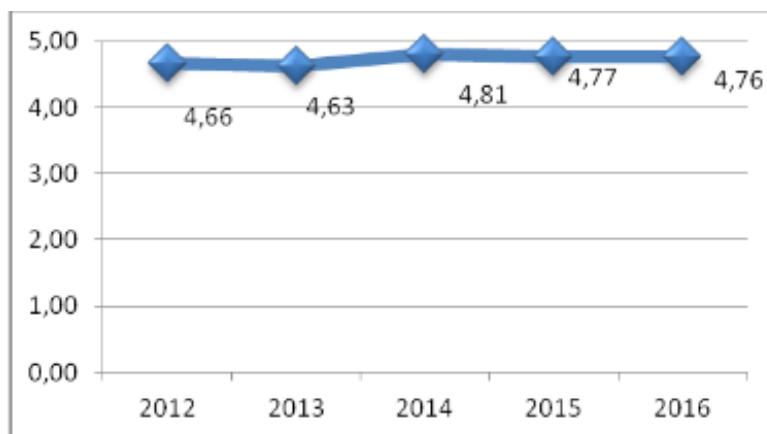
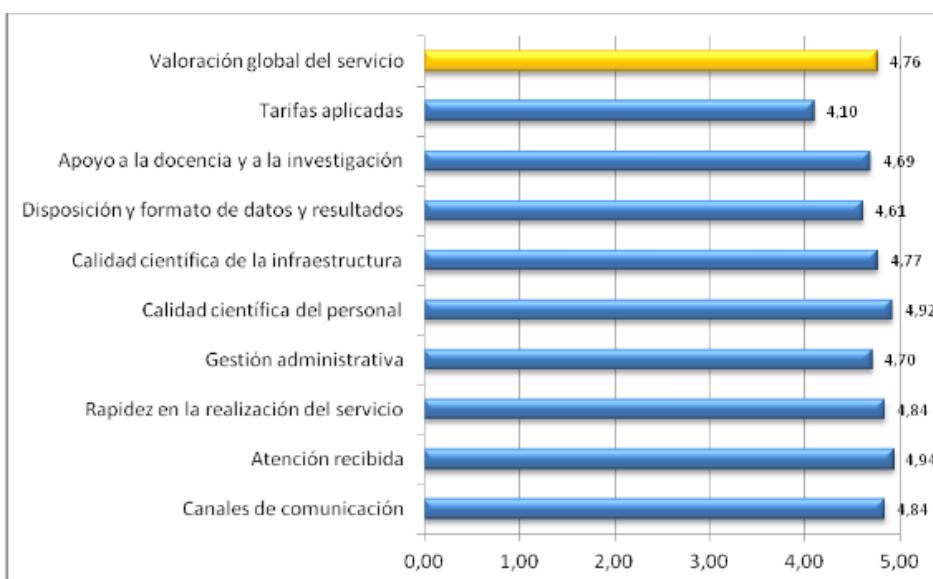


Figura 9: Evolución de la valoración durante los últimos años.

### 10.2. Observaciones realizadas

- The staff was always very helpful when a problem occurred.
- Hay dos personas de soporte técnico controlando el ordenador Arina, casualmente una de ellas ha debido de solicitar una excedencia. Por consiguiente, una sola persona dando soporte a todos los usuarios es insuficiente. Debería de existir más personal de soporte para poder hacer frente a la demanda. Y



**Figura 10:** Valoración del 2016.

si alguien cae enfermo o tiene que estar fuera por el motivo que sea, que no se note tanto la falta de personal.

- Estos días, desde SGIker, se está cuestionando la continuidad del software "STAR-CCM+", atendiendo criterios de rentabilidad económica. Creo personalmente que posibilitar el uso de este software supone un alto valor añadido para la docencia de diferentes asignaturas en nuestro área de conocimiento, Mecánica de Fluidos, y posibilita también grandes posibilidades de desarrollo en I+D+i para el mismo área. Si el servicio va ligado al uso de sistema de colas en ARINA (que se nos comenta está infroutilizado), creo que se debería haber dejado claro de partida. Dado que algunos profesores (no es mi caso) han optado por la compra de estaciones de trabajo potentes, restando importancia a la supercomputación en ARINA. En mi caso, uso ARINA cuando lo necesito y siempre me ha parecido la opción más atractiva técnicamente, y rentable económicamente. Por otro lado, para simulación de casos menores, con el PC es suficiente (cada vez los PC dan mayor cobertura en el análisis de casos cada vez más complejos: número de celdas del, mallado, adición de modelos físicos, etc). El servicio que dan los profesionales es excepcional, respondiendo y resolviendo problemas de forma adecuada en plazos muy cortos de tiempo. Esperando que tengan en consideración estos comentarios. Un cordial saludo.
- Sakondu orain arte hartutako norabidean.
- The facility is sometimes busy and more nodes will be welcomed.
- Services are very expensive.

- El precio del tiempo de cálculo es excesivo.
- Los precios son algo elevados para un usuario habitual.

## 11. Actividad web

### 11.1. Página web

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

La web del Servicio sigue cumpliendo su misión de información básica y manual del Servicio. Contiene información sobre el hardware y software del Servicio, su uso, informes, estadísticas, manuales, monitorización en línea de las máquinas, etc. Ésta ha sido visitada 5.152 veces por 3.503 usuarios únicos que han visitado 12.887 páginas. Se aprecia un incremento significativo en el número de visitas de la web respecto a años anteriores. En el Apéndice C hay un resumen de las estadísticas de la web.

#### 11.1.1. Página de monitorización del Servicio

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

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

#### 11.1.2. Formularios del Servicio

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

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

### 11.2. Blog del Servicio

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

En el blog del Servicio (<http://www.ehu.es/ehusfera/hpc/>), se divulga y difunde información relacionada con el Cálculo Científico, el Servicio, HPC, Linux, etc. Se publicaron únicamente 12 entradas (un número muy inferior frente a las 30 del 2.015) y recibieron 18.554 visitas durante el 2.016, cifra inferior también a la del 2.015, probablemente motivada por el descenso en el número de publicaciones. En el Apéndice D hemos listado las entradas sobre HPC escritas el 2.015.

### 11.3. Twitter

<https://twitter.com/izosgi>

En la cuenta twitter del Servicio –IZO-SGI, HPC @UPVEHU (@izosgi)– se comparte información sobre HPC y el Servicio. Por ejemplo, se twittean las en-

tradas en el blog. El número de seguidores del servicio en twitter (@izosgi) ha aumentado a 200.

## 11.4. Facebook

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

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

## 11.5. Lista de distribución

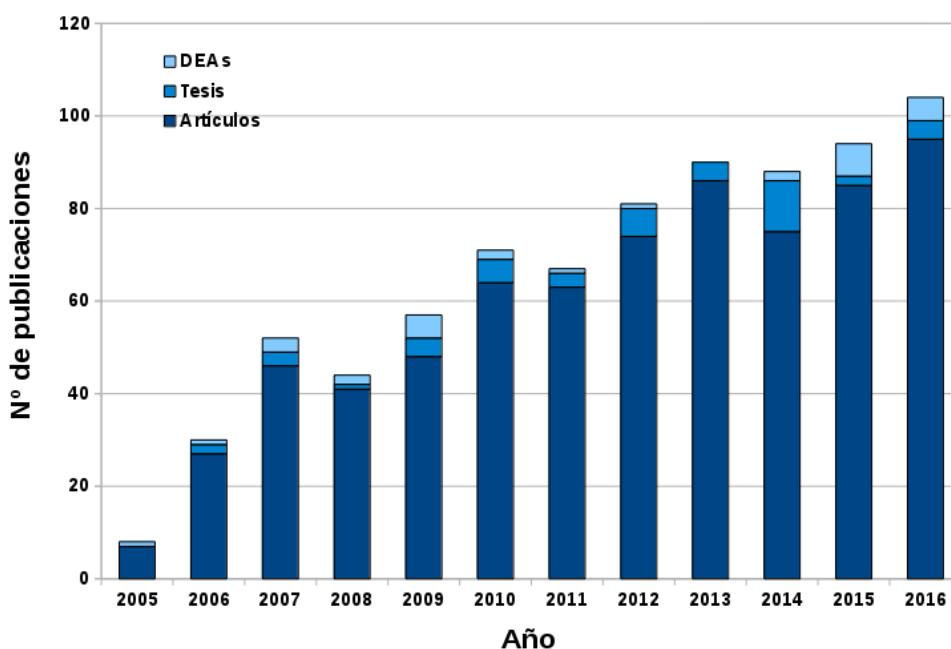
<http://list.ehu.es/mailman/listinfo/arina-pruebas>

Lista de distribución de correo del Servicio por el que se envían comunicaciones directas al personal investigador dado de alta en el Servicio. Se han enviado 24 anuncios y notificaciones a la lista de distribución del Servicio que tiene 361 subscriptores.

## 12. Bibliometría

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

### 12.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio

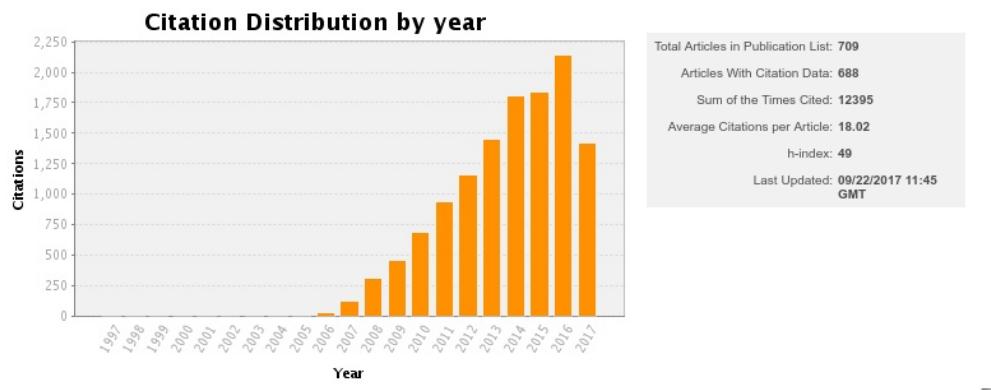


**Figura 11:** . Evolución del número de publicaciones.

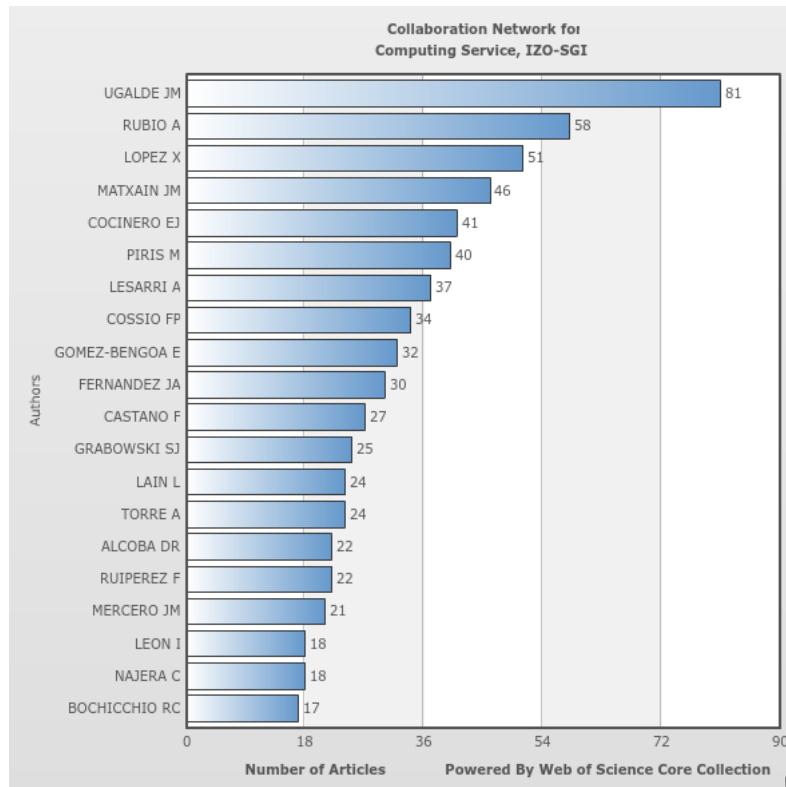
Este año han agradecido al Servicio en sus publicaciones 95 artículos científicos y 4 tesis. En la gráfica 11 podemos ver la evolución del número de publicaciones desde la creación del IZO-SGI. Los datos concretos se encuentran en el Apéndice E donde también se recogen las referencias de los artículos publicados en 2016. Se puede obtener más información en la página de publicaciones del Servicio y en el ResearchID del IZO-SGI (F-3072-2010).

En la figura 12 se muestran el número de citas realizadas a artículos, junto a ciertos datos estadísticos como el índice *h* del IZO-SGI. En la Figura 13 se muestran a los autores que más citan el IZO-SGI.

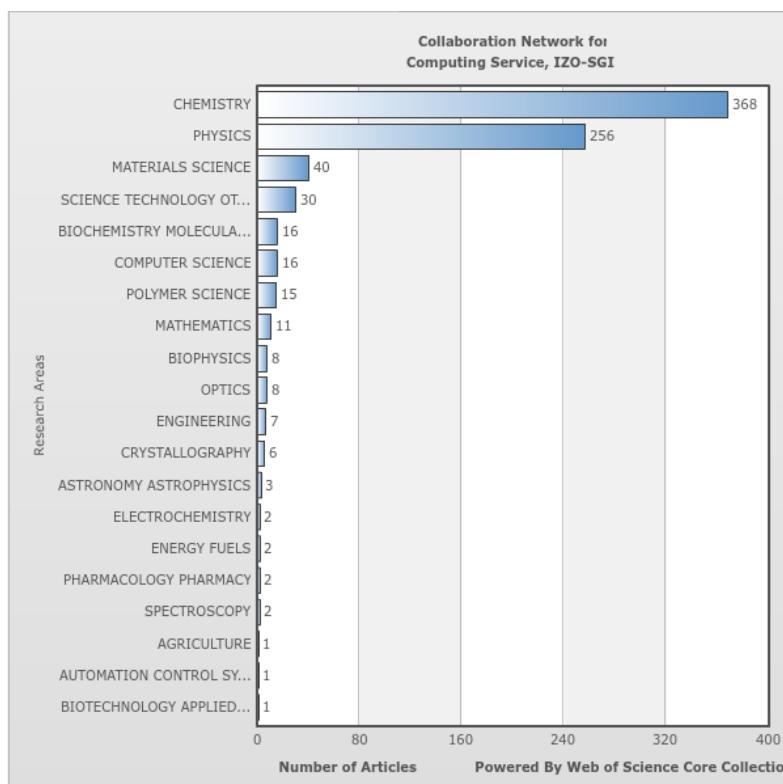
Muestra de la multidisciplinariedad del IZO-SGI es la Figura 14, donde se reflejan las diversas áreas de investigación en las que el personal investigador que usa el Servicio han publicado de acuerdo al ResearchID F-3072-2010 del IZO-SGI.



**Figura 12:** . Número de citas realizadas a artículos que citan al Servicio según la WOK (considerando los últimos 500 artículos).



**Figura 13:** . Autores que más citan el Servicio según la WOK (considerando los últimos 500 artículos).



**Figura 14:** . Áreas de investigación en las que los usuarios han publicado artículos citando al Servicio (considerando los últimos 500 artículos).

## 13. Apéndices

## A. Descripción detallada del equipamiento

### A.1. Arina

Los recursos propios de IZO-SGI disponen de un cluster con 2.272 cores para cálculo, nodos de computación con GPGPUs, 3 sistemas de ficheros de alto rendimiento basados en Lustre y servidores de gestión. En concreto:

**80 cores Itanium2** Se puso en marcha a finales del 2004 con 56 procesadores Itanium2. Se amplió a finales del 2006 con otros 32 procesadores Itanium2 y, en

2008, con 192 nuevos cores Itanium2. Quedan 80 cores, que están obsoletos, y el resto ya se ha estropeado.

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

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

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

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

**448 cores xeon E5-2680 v4** Adquiridos durante el 2016.

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

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

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

### A.2. Servicios e infraestructura de la VGTIC

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

El equipamiento está instalado en el Centro de Proceso de Datos (CPD) de la UPV/EHU. El CPD de 450 m<sup>2</sup> y de nueva construcción, en 2006, es un lugar habilitado para la ubicación de computadores y está capacitado con todos los sistemas necesarios para garantizar el correcto funcionamiento de ellos. Dispone de:

- Sistemas de climatización de precisión por expansión directa exclusivo y sistema de descalcificación del agua. Los 7 aparatos de aire acondicionado disponen de una potencia agregada de 208KW, lo que asegura una redundancia N+1 ante posibles fallos.
- Sistema contra incendios. Sistema de detección de incendios mediante detectores ópticos y térmicos. Sistema de extinción por agua nebulizada HI-FOG, que preserva la integridad del equipamiento informático en caso de activación.
- Acometida desde dos transformadores independientes.
- Doble rama eléctrica para los equipos IT, cada una con SAIs (sistemas de alimentación ininterrumpida) independiente y cuadros de baja tensión independientes. Permite redundancia y mantenimiento en caliente de la instalación eléctrica.
- Grupo electrógeno de 750 KVA con dos días de autonomía sin necesidad de repostar.
- Control de acceso, alarmas y vigilancia mediante circuito cerrado de TV.
- Copias de seguridad de datos y sistemas de las máquinas.
- Monitorización por parte de operadores in-situ y sistema de gestión y control de las instalaciones.
- Metodología 5S para la mejora de la calidad.

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

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

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

### A.3. Otros servicios

La Vicegerencia de las TICs mantiene la red de datos de la UPV/EHU que está formada por tecnologías de primera línea y de última generación. Esto permite que se puedan establecer conexiones con gran ancho de banda (hasta 10Gbps) y un alto grado de seguridad, algo fundamental para trabajar con eficacia en una infraestructura a la que hay que conectarse remotamente. La red dispone de elementos

hardware redundantes y líneas de comunicación duplicadas con caminos diversificados, así como firewall perimetral, zonas de red desmilitarizadas, balanceadoras, sistemas hardware de detección de orígenes inseguros o potencialmente peligrosos, etc. La conexión con Internet, hacia el exterior, se realiza a través de i2Basque, la red de datos autonómica, que a su vez conecta con RedIRIS, la red académica y de investigación española.

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

## B. Datos de uso de Arina

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

Investigador	Días	Investigador	Días
csazusej	85.554,97	quuxlegoa	445,01
povhehea	68.121,33	poplopex	442,19
fabusgui	49.617,16	wubcavaa	399,67
bckmimoj	45.135,19	doxcarei	378,83
poamaxg	39.597,51	qoprualg	367,18
qfbgoroj	35.727,24	dixsasam	361,84
poalocad	26.226,20	faaavzae	292,15
enxararo	21.117,04	poagumaj	288,02
juranga004	16.989,48	scavinam	287,97
povrucif	16.886,36	ciazuulm	264,40
pobmugoj	14.146,00	pmarkaide001	251,52
kivpepor	12.880,07	ciaaansap	236,22
kixgrazr	11.268,35	quamearx	216,58
povpisim	10.269,15	kixsasal	206,11
wavalocm	10.056,63	qfbleoni	204,45
quaурhei	9.828,90	pobsisis	195,74
kiasomal	9.560,53	poakaxxb	170,63
pobrease	9.340,10	naagagaa	138,48
pobmabej	9.016,47	opalpec	134,45
faacalea	7.929,85	kiaurbao	126,83
qopgobee	7.662,78	mapmemam	95,50
pobfoese	7.619,96	scpridei	93,99
quainbea	7.343,15	kixbebej	93,09
gbpbeseg	6.910,66	bixbrdem	81,31
enxcacaj	6.562,01	povracoe	78,00
qoaarecl	6.442,32	poatealx	74,26
pobgrgrs	6.041,76	wuppobam	65,54

*Continua en la siguiente página.*

*Continua de la página anterior.*

Investigador	Días	Investigador	Días
quuxmarur	6.011,54	faaatnaa	57,43
kiadadag	5.975,27	nanululr	54,85
popugurj	5.910,48	poasobas	39,26
kibderua	5.620,88	qapceruj	33,80
poblairo	4.893,31	ciaarimei	17,19
quvvvalom	3.555,67	qipvigap	14,90
qovzaxxr	3.218,73	kibguvej	14,23
povmieci	3.184,09	kiadugat	12,48
favcopee	2.583,05	wepgaara	12,05
anpgaetk	2.496,18	bcpitaia	11,30
oraruori	2.114,05	qfparsaf	9,58
qoparaya	2.088,60	quapuoli	9,48
pobcacad	1.972,01	acplraig	8,50
qobsalae	1.844,71	qfbloala	6,03
navdesad	1.622,08	qfpmmamav	5,75
poajejec	1.585,31	pobromam	4,04
qopcomof	1.410,22	paslobej	3,07
poagiaie	1.293,94	qoaarecl	2,98
pobmelat	1.246,94	ggpagrom	1,23
kiaolfelb	1.129,15	poairurm	1,09
pobrease	1.014,39	enxkakan	0,96
qfpmamoh	1.012,15	qobfifib	0,87
favecvep	925,35	quxlilij	0,51
sckwankm	872,31	quaduree	0,12
doxcarei	839,86	poxtoesj	0,09
wmpetali	803,18	qfxaldad	0,06
poaorloi	801,67	wapbabam	0,04
qfpbaprj	770,14	poagafrm	0,01
kiarorom	618,63	wepgopej	0,00
ggplaarj	591,92	upetalanda001	0,00
mapalmau	495,10	quxtaxxs	0,00
webogare	479,41	bcpremae	0,00

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

Grupo	Días	Grupo	Días
qfjfg	169.322,15	ggmer	844,67
polymat	90.813,20	wdaga	803,18
nanogune	85.748,31	poemg	681,04
poahh	68.121,33	qtftp	590,60
potmb	46.614,40	qofpg	501,63
pomps	30.734,78	wuash	399,67
egune	27.683,00	gbdga	81,31
pojuu	21.068,04	wuebp	65,54
qocpn	18.362,80	faraz	57,43
qofcm	15.656,01	qijgl	14,90
poxlp	14.204,16	weaga	12,05
kirpp	12.880,07	bcizb	11,30
waijo	10.056,63	jiads	8,50
gbavm	6.910,66	pajlb	3,07
anjbc	2.496,18	qufff	0,51
qfila	2.296,89	qflp	0,06
qambm	1.878,50	wadsp	0,04
arinadm	1.726,35	wejcm	0,00
nanopeji	1.622,08	bcdbu	0,00
waars	872,31		

## C. Estadísticas de la web del Servicio

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

## Visión general de audiencia

 Todos los usuarios  
100,00 % Sesiones

1 ene. 2016 - 31 dic. 2016

### Visión general

● Sesiones



Sesiones

5.152

Usuarios

3.503

Número de visitas a páginas

12.887

New Visitor

Returning Visitor

Páginas/sesión

2,50

Duración media de la sesión

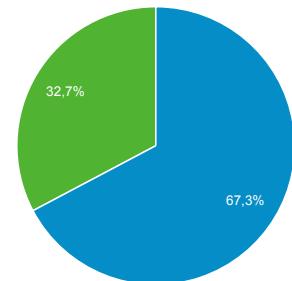
00:02:02

Porcentaje de rebote

56,37 %

% de nuevas sesiones

67,22 %



### Idioma

Sesiones % Sesiones

1. es	1.479	28,71 %
2. es-es	965	18,73 %
3. en-us	772	14,98 %
4. (not set)	739	14,34 %
5. es-419	419	8,13 %
6. en	219	4,25 %
7. es-mx	123	2,39 %
8. Secret.google.com You are invited! Enter only with this ticket URL. Copy it. Vote for Trump!	116	2,25 %
9. eu	38	0,74 %
10. pt-br	31	0,60 %

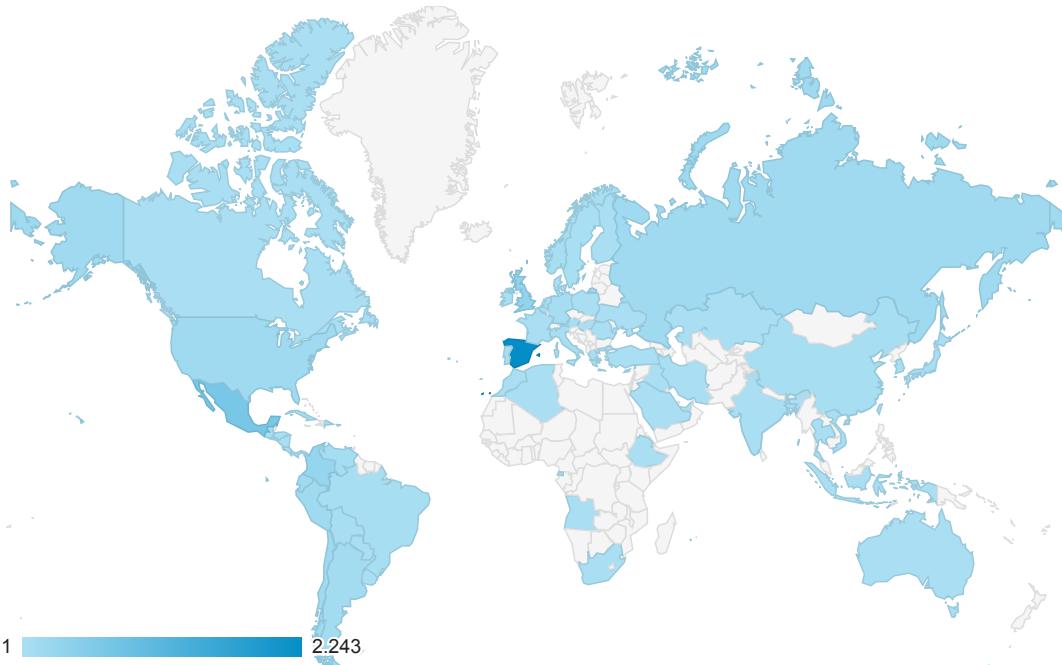
## Ubicación

 Todos los usuarios  
100,00 % Sesiones

1 ene. 2016 - 31 dic. 2016

### Gráfico de visitas por ubicación

Resumen



País	Sesiones	% de nuevas sesiones	Usuarios nuevos	Porcentaje de rebote	Páginas/sesión	Duración media de la sesión	Porcentaje de conversiones del objetivo	Objetivos cumplidos	Valor del objetivo
	5.152 % del total: 100,00 % (5.152)	67,26 % Media de la vista: 67,22 % (0,06 %)	3.465 % del total: 100,06 % (3.463)	56,37 % Media de la vista: 56,37 % (0,00 %)	2,50 Media de la vista: 2,50 (0,00 %)	00:02:02 Media de la vista: 00:02:02 (0,00 %)	0,00 % Media de la vista: 0,00 % (0,00 %)	0 % del total: 0,00 % (0)	0,00 \$ % del total: 0,00 % (0,00 \$)
1. <a href="#">Spain</a>	<b>2.243</b> (43,54 %)	40,04 %	898 (25,92 %)	39,05 %	3,74	00:03:21	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
2. <a href="#">Mexico</a>	<b>669</b> (12,99 %)	89,39 %	598 (17,26 %)	80,42 %	1,33	00:01:11	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
3. <a href="#">United Kingdom</a>	<b>323</b> (6,27 %)	99,69 %	322 (9,29 %)	45,51 %	2,06	00:00:01	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
4. <a href="#">Colombia</a>	<b>268</b> (5,20 %)	90,30 %	242 (6,98 %)	78,36 %	1,38	00:01:07	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
5. <a href="#">United States</a>	<b>145</b> (2,81 %)	95,86 %	139 (4,01 %)	82,76 %	1,34	00:00:19	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
6. <a href="#">Ecuador</a>	<b>144</b> (2,80 %)	92,36 %	133 (3,84 %)	83,33 %	1,31	00:00:59	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
7. <a href="#">Chile</a>	<b>143</b> (2,78 %)	90,91 %	130 (3,75 %)	79,72 %	1,31	00:00:40	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
8. <a href="#">(not set)</a>	<b>142</b> (2,76 %)	100,00 %	142 (4,10 %)	69,01 %	1,61	<00:00:01	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
9. <a href="#">Peru</a>	<b>140</b> (2,72 %)	91,43 %	128 (3,69 %)	75,71 %	1,54	00:01:15	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
10. <a href="#">Russia</a>	<b>138</b> (2,68 %)	5,07 %	7 (0,20 %)	11,59 %	1,91	00:04:31	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)

Filas 1 - 10 de 69

## Ubicación

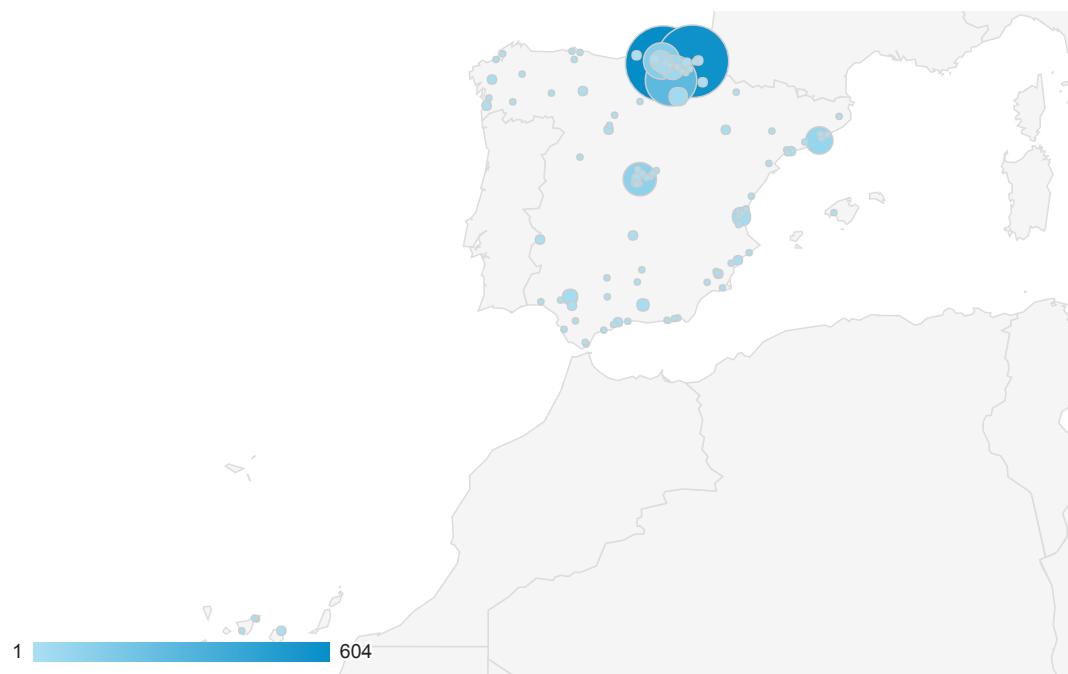
TODAS » PAÍS: Spain

1 ene. 2016 - 31 dic. 2016

 Todos los usuarios  
43,54 % Sesiones

### Gráfico de visitas por ubicación

Resumen



Ciudad	Adquisición			Comportamiento			Conversiones		
	Sesiones	% de nuevas sesiones	Usuarios nuevos	Porcentaje de rebote	Páginas/sesión	Duración media de la sesión	Porcentaje de conversiones del objetivo	Objetivos cumplidos	Valor del objetivo
	2.243 % del total: 43,54 % (5.152)	40,04 % Media de la vista: 67,22 % (-40,44 %)	898 % del total: 25,93 % (3.463)	39,05 % Media de la vista: 56,37 % (-30,71 %)	3,74 Media de la vista: 2,50 (49,33 %)	00:03:21 Media de la vista: 00:02:02 (65,15 %)	0,00 % Media de la vista: 0,00 % (0,00 %)	0 % del total: 0,00 % (0)	0,00 \$ % del total: 0,00 % (0,00 \$)
1. Bilbao	<b>604</b> (26,93 %)	38,74 %	234 (26,06 %)	33,11 %	3,88	00:03:22	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
2. San Sebastian	<b>568</b> (25,32 %)	24,47 %	139 (15,48 %)	30,46 %	4,88	00:04:44	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
3. Vitoria-Gasteiz	<b>284</b> (12,66 %)	15,49 %	44 (4,90 %)	20,77 %	3,79	00:04:33	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
4. Leioa	<b>137</b> (6,11 %)	23,36 %	32 (3,56 %)	33,58 %	4,49	00:02:54	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
5. Madrid	<b>107</b> (4,77 %)	74,77 %	80 (8,91 %)	67,29 %	2,14	00:00:50	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
6. Barcelona	<b>73</b> (3,25 %)	72,60 %	53 (5,90 %)	58,90 %	1,95	00:00:43	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
7. Durango	<b>52</b> (2,32 %)	23,08 %	12 (1,34 %)	40,38 %	2,96	00:02:41	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
8. Las Arenas	<b>40</b> (1,78 %)	27,50 %	11 (1,22 %)	50,00 %	5,50	00:05:57	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
9. Logrono	<b>35</b> (1,56 %)	37,14 %	13 (1,45 %)	40,00 %	6,97	00:04:08	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)
10. Valencia	<b>33</b> (1,47 %)	100,00 %	33 (3,67 %)	72,73 %	1,58	00:00:21	0,00 %	0 (0,00 %)	0,00 \$ (0,00 %)

## D. Posts sobre HPC publicado en el blog

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

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

## E. Publicaciones del Servicio

### E.1. Datos históricos

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

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

Año	Publicaciones	Año	Publicaciones
<b>2016</b>	95	<b>2010</b>	65
<b>2015</b>	85	<b>2009</b>	48
<b>2014</b>	75	<b>2008</b>	41
<b>2013</b>	88	<b>2007</b>	46
<b>2012</b>	74	<b>2006</b>	27
<b>2011</b>	63	<b>2005</b>	7

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

Año	Tesis	Año	Tesis
<b>2016</b>	4	<b>2010</b>	5
<b>2015</b>	2	<b>2009</b>	3
<b>2014</b>	11	<b>2008</b>	1
<b>2013</b>	4	<b>2007</b>	3
<b>2012</b>	6	<b>2006</b>	2
<b>2011</b>	3		

### E.2. Publicaciones recogidas

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

Año	PFM/PFG	Año	PFM/PFG
<b>2016</b>	5		
<b>2015</b>	7	<b>2010</b>	2
<b>2014</b>	2	<b>2009</b>	5
<b>2013</b>	0	<b>2008</b>	1
<b>2012</b>	1	<b>2007</b>	3
<b>2011</b>	1	<b>2006</b>	1

- [1] D. Albesa-Jove, Z. Svetlikova, M. Tersa, E. Sancho-Vaello, A. Carreras-Gonzalez, P. Bonnet, P. Arrasate, A. Eguskiza, S. K. Angala, J. O. Cifuentes, J. Kordulakova, M. Jackson, K. Mikusova, and M. E. Guerin. Structural basis for selective recognition of acyl chains by the membrane-associated acyltransferase pata. *Nature Communications*, 7:12, 2016.
- [2] D. R. Alcoba, A. Torre, L. Lain, G. E. Massaccesi, O. B. Ona, P. W. Ayers, M. Van Raemdonck, P. Bultinck, and D. Van Neck. Performance of shannon-entropy compacted n-electron wave functions for configuration interaction methods. *Theoretical Chemistry Accounts*, 135(6):11, 2016.
- [3] Spjt Bachollet, D. Volz, B. Fiser, S. Munch, F. Ronicke, J. Carrillo, H. Adams, U. Schepers, E. Gomez-Bengoa, S. Bräse, and J. P. A. Harrity. A modular class of fluorescent difluoroboranes: Synthesis, structure, optical properties, theoretical calculations and applications for biological imaging. *Chemistry-a European Journal*, 22(35):12430–12438, 2016.
- [4] N. Ballard, S. Hamzehlou, F. Ruiperez, and J. M. Asua. On the termination mechanism in the radical polymerization of acrylates. *Macromolecular Rapid Communications*, 37(16):1364–1368, 2016.
- [5] J. Beardmore, X. Lopez, J. I. Mujika, and C. Exley. What is the mechanism of formation of hydroxyaluminosilicates? *Scientific Reports*, 6:8, 2016.
- [6] D. Briones, B. Fernandez, A. J. Calahorro, D. Fairen-Jimenez, R. Sanz, F. Martinez, G. Orcajo, E. San Sebastian, J. M. Seco, C. S. Gonzalez, J. Llopis, and A. Rodriguez-Dieguet. Highly active anti-diabetic metal-organic framework. *Crystal Growth & Design*, 16(2):537–540, 2016.
- [7] D. Casanova and A. I. Krylov. Quantifying local exciton, charge resonance, and multiexciton character in correlated wave functions of multichromophoric systems. *Journal of Chemical Physics*, 144(1):10, 2016.
- [8] D. Casanova, J. M. Matxain, and J. M. Ugalde. Plasmonic resonances in the al-13(-) cluster: Quantification and origin of exciton collectivity. *Journal of Physical Chemistry C*, 120(23):12742–12750, 2016.
- [9] A. Cayuelas, O. Larranaga, C. Najera, J. M. Sansano, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Taniaphos.agf-catalyzed enantioselective 1,3-dipolar cycloaddition of stabilized azomethine ylides derived from 2,2-dimethoxyacetaldehyde. *Tetrahedron*, 72(40):6043–6051, 2016.
- [10] A. Cayuelas, R. Ortiz, C. Najera, J. M. Sansano, O. Larranaga, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Enantioselective synthesis of polysubstituted spiro-nitroprolinates mediated by a (r,r)-me-duphos agf-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition. *Organic Letters*, 18(12):2926–2929, 2016.

- [11] J. Cechal, C. S. Kley, R. Petuya, F. Schramm, M. Ruben, S. Stepanow, A. Arnau, and K. Kern. Co<sub>2</sub> binding and induced structural collapse of a surface-supported metal-organic network. *Journal of Physical Chemistry C*, 120(33):18622–18630, 2016.
- [12] J. Cepeda, E. S. Sebastian, D. Padro, A. Rodriguez-Dieguez, J. A. Garcia, J. M. Ugalde, and J. M. Seco. A Zn based coordination polymer exhibiting long-lasting phosphorescence. *Chemical Communications*, 52(56):8671–8674, 2016.
- [13] F. Corsetti, P. Matthews, and E. Artacho. Structural and configurational properties of nanoconfined monolayer ice from first principles. *Scientific Reports*, 6:12, 2016.
- [14] F. Corsetti, J. Zubeltzu, and E. Artacho. Enhanced configurational entropy in high-density nanoconfined bilayer ice. *Physical Review Letters*, 116(8):5, 2016.
- [15] S. Das, T. S. Herng, J. L. Zafra, P. M. Burrezo, M. Kitano, M. Y. Ishida, T. Y. Gopalakrishna, P. Hu, A. Osuka, J. Casado, J. Ding, D. Casanova, and J. S. Wu. Fully fused quinoidal/aromatic carbazole macrocycles with poly-radical characters. *Journal of the American Chemical Society*, 138(24):7782–7790, 2016.
- [16] A. de Cozar, O. Larranaga, F. M. Bickelhaupt, E. S. Sebastian, E. Ortega-Carrasco, J. D. Marechal, A. Lledos, and F. P. Cossio. New insights into the reactivity of cisplatin with free and restrained nucleophiles: Microsolvation effects and base selectivity in cisplatin-dna interactions. *Chempyschem*, 17(23):3932–3947, 2016.
- [17] A. R. de Luzuriaga, J. M. Matxain, F. Ruiperez, R. Martin, J. M. Asua, G. Cabanero, and I. Odriozola. Transient mechanochromism in epoxy vitrimer composites containing aromatic disulfide crosslinks. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(26):6220–6223, 2016.
- [18] F. Diaba, E. Gomez-Bengoa, J. M. Cuerva, J. Bonjoch, and J. Justicia. Synthesis of substituted gamma- and delta-lactams based on titanocene(iii)-catalysed radical cyclisations of trichloroacetamides. *Rsc Advances*, 6(60):55360–55365, 2016.
- [19] P. Ecija, I. Uriarte, L. Spada, B. G. Davis, W. Caminati, F. J. Basterretxea, A. Lesarri, and E. J. Cocinero. Furanosic forms of sugars: conformational equilibrium of methyl beta-d-ribofuranoside. *Chemical Communications*, 52(37):6241–6244, 2016.
- [20] P. Ecija, M. Vallejo-Lopez, I. Uriarte, F. J. Basterretxea, A. Lesarri, J. A. Fernandez, and E. J. Cocinero. Scopine isolated in the gas phase. *Chempyschem*, 17(19):3030–3034, 2016.

- [21] N. Epelde-Elezcano, V. Martinez-Martinez, E. Duque-Redondo, I. Temino, H. Manzano, and I. Lopez-Arbeloa. Strategies for modulating the luminescence properties of pyronin y dye-clay films: an experimental and theoretical study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(12):8730–8738, 2016.
- [22] L. B. Favero, I. Uriarte, L. Spada, P. Ecija, C. Calabrese, W. Caminati, and E. J. Cocinero. Solving the tautomeric equilibrium of purine through analysis of the complex hyperfine structure of the four n-14 nuclei. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 7(7):1187–1191, 2016.
- [23] T. D. Fernandes, P. Vizcaino-Milla, Jmjm Ravasco, A. Ortega-Martinez, J. M. Sansano, C. Najera, P. R. R. Costa, B. Fiser, and E. Gomez-Bengoa. Bi-functional primary amine 2-aminobenzimidazole organocatalyst anchored to trans-cyclohexane-1,2-diamine in enantioselective conjugate additions of aldehydes. *Tetrahedron-Asymmetry*, 27(2-3):118–122, 2016.
- [24] B. Fernandez, A. Gomez-Vilchez, C. Sanchez-Gonzalez, J. Bayon, E. San Sebastian, S. Gomez-Ruiz, C. Lopez-Chaves, P. Aranda, J. Llopis, and A. Rodriguez-Dieguez. Novel anti-diabetic and luminescent coordination compounds based on vanadium. *New Journal of Chemistry*, 40(6):5387–5393, 2016.
- [25] B. Fernandez, I. Oyarzabal, J. M. Seco, E. San Sebastian, D. Fairen-Jimenez, S. Gomez-Ruiz, A. Salinas-Castillo, A. J. Calahorro, and A. Rodriguez-Dieguez. Luminescence and magnetic properties of two three -dimensional terbium and dysprosium mofs based on azobenzene-4,4 '-dicarboxylic linker. *Polymers*, 8(2):10, 2016.
- [26] M. Fernandez-Pendas, E. Akhmatskaya, and J. M. Sanz-Serna. Adaptive multi-stage integrators for optimal energy conservation in molecular simulations. *Journal of Computational Physics*, 327:434–449, 2016.
- [27] B. Fiser, Z. Mucsi, E. Gomez-Bengoa, B. Viskolcz, S. J. K. Jensen, and I. G. Csizmadia. Reply to comment on radicalicity: A scale to compare reactivities of radicals”. *Chemical Physics Letters*, 654:141–141, 2016.
- [28] A. Garcia-Arribas, E. Fernandez, A. Svalov, G. V. Kurlyandskaya, and J. M. Barandiaran. Thin-film magneto-impedance structures with very large sensitivity. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 400:321–326, 2016.
- [29] A. B. Garcia-Arribas, E. Axpe, J. I. Mujika, D. Merida, J. V. Bustos, J. Sot, A. Alonso, X. Lopez, J. A. Garcia, J. M. Ugalde, F. Plazaola, and F. M. Goni. Cholesterol-ceramide interactions in phospholipid and sphingolipid bilayers as observed by positron annihilation lifetime spectroscopy and molecular dynamics simulations. *Langmuir*, 32(21):5434–5444, 2016.

- [30] K. Garcia-Etxebarria, A. Jauregi-Miguel, I. Romero-Garmendia, L. Plaza-Izurieta, M. Legarda, I. Irastorza, and J. R. Bilbao. Ancestry-based stratified analysis of immunochip data identifies novel associations with celiac disease. *European Journal of Human Genetics*, 24(12):1831–1834, 2016.
- [31] D. Gau, R. Nougue, N. Saffon-Merceron, A. Baceiredo, A. De Cozar, F. P. Cossio, D. Hashizume, and T. Kato. Donor-stabilized 1,3-disila-2,4-diazacyclobutadiene with an nonbonded si center dot center dot center dot si distance compressed to a si=si double bond length. *Angewandte Chemie-International Edition*, 55(47):14673–14677, 2016.
- [32] M. Goirienna-Goikoetxea, A. Garcia-Arribas, M. Rouco, A. V. Svalov, and J. M. Barandiaran. High-yield fabrication of 60 nm permalloy nanodiscs in well-defined magnetic vortex state for biomedical applications. *Nanotechnology*, 27(17):10, 2016.
- [33] C. F. A. Gomez-Duran, I. Esnal, I. Valois-Escamilla, A. Urias-Benavides, J. Banuelos, I. L. Arbeloa, I. Garcia-Moreno, and E. Pena-Cabrera. Near-ir bodipy dyes a la carte-programmed orthogonal functionalization of rationally designed building blocks. *Chemistry-a European Journal*, 22(3):1048–1061, 2016.
- [34] A. D. Gomez-Infante, J. Banuelos, I. Valois-Escamilla, D. Cruz-Cruz, R. Prieto-Montero, I. Lopez-Arbeloa, T. Arbeloa, and E. Pena-Cabrera. Synthesis, properties, and functionalization of nonsymmetric 8-methylthiobodipys. *European Journal of Organic Chemistry*, (29):5009–5023, 2016.
- [35] J. Gonzalez, I. Banos, I. Leon, J. Contreras-Garcia, E. J. Cocinero, A. Lesarri, J. A. Fernandez, and J. Millan. Unravelling protein-dna interactions at molecular level: A dft and nci study. *Journal of chemical theory and computation*, 12(2):523–34, 2016.
- [36] X. Gonze, F. Jollet, F. A. Araujo, D. Adams, B. Amadon, T. Appelencourt, C. Audouze, J. M. Beuken, J. Bieder, A. Bokhanchuk, E. Bousquet, F. Brunerval, D. Caliste, M. Cote, F. Dahm, F. Da Pieve, M. Delaveau, M. Di Gennaro, B. Dorado, C. Espejo, G. Geneste, L. Genovese, A. Gerossier, M. Giantomasassi, Y. Gillet, D. R. Hamann, L. He, G. Jomard, J. L. Janssen, S. Le Roux, A. Levitt, A. Lherbier, F. Liu, I. Lukacevic, A. Martin, C. Martins, M. J. T. Oliveira, S. Ponce, Y. Pouillon, T. Rangel, G. M. Rignanese, A. H. Romero, B. Rousseau, O. Rubel, A. A. Shukri, M. Stankovski, M. Torrent, M. J. Van Setten, B. Van Troeye, M. J. Verstraete, D. Waroquiers, J. Wiktor, B. Xu, A. Zhou, and J. W. Zwanziger. Recent developments in the abinit software package. *Computer Physics Communications*, 205:106–131, 2016.
- [37] Q. Gou, L. Spada, M. Vallejo-Lopez, S. Melandri, A. Lesarri, E. J. Cocinero, and W. Caminati. Intermolecular hydrogen bonding in 2-fluoropyridine-water. *Chemistryselect*, 1(6):1273–1277, 2016.

- [38] S. J. Grabowski. Analysis of hydrogen bonds in crystals. *Crystals*, 6(5):5, 2016.
- [39] S. J. Grabowski. Complexes of carborane acids linked by strong hydrogen bonds: acidity scales. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(24):16152–16160, 2016.
- [40] S. J. Grabowski. Fhf (-) - the strongest hydrogen bond under the influence of external interactions. *Crystals*, 6(1):17, 2016.
- [41] S. J. Grabowski and F. Ruiperez. Dihydrogen bond interactions as a result of h-2 cleavage at cu, ag and au centres. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(18):12810–12818, 2016.
- [42] S. J. Grabowski, J. M. Ugalde, D. M. Andrada, and G. Frenking. Comparison of hydrogen and gold bonding in xhx (-), xaux (-), and isoelectronic nghng (+), ngaung (+) (x=halogen, ng=noble gas). *Chemistry-a European Journal*, 22(32):11317–11328, 2016.
- [43] R. Grande-Aztatzi, E. Formoso, J. M. Mercero, J. M. Matxain, S. J. Grabowski, and J. M. Ugalde. Structural and optical properties of the naked and passivated al5au5 bimetallic nanoclusters. *Journal of Chemical Physics*, 144(11):7, 2016.
- [44] R. Grande-Aztatzi, E. Formoso, J. I. Mujika, J. M. Ugalde, and X. Lopez. Phosphorylation promotes al(iii) binding to proteins: Gegegsogg as a case study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(10):7197–7207, 2016.
- [45] R. Grande-Aztatzi, J. M. Mercero, and J. M. Ugalde. The stability of biradicaloid versus closed-shell e(mu-xr) (2) (e = p, as; x = n, p, as) rings. does aromaticity play a role? *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(17):11879–11884, 2016.
- [46] E. Gruber, R. A. Wilhelm, R. Petuya, V. Smejkal, R. Kozubek, A. Hierzenberger, B. C. Bayer, I. Aldazabal, A. K. Kazansky, F. Libisch, A. V. Krasheninnikov, M. Schleberger, S. Facsko, A. G. Borisov, A. Arnau, and F. Aumayr. Ultrafast electronic response of graphene to a strong and localized electric field. *Nature Communications*, 7:7, 2016.
- [47] A. Heidenreich, B. Gruner, M. Rometsch, S. R. Krishnan, F. Stienkemeier, and M. Mudrich. Efficiency of dopant-induced ignition of helium nanoplasmatics. *New Journal of Physics*, 18:10, 2016.
- [48] S. Henrion, B. Carboni, F. P. Cossio, T. Roisnel, J. M. Villalgordo, and F. Curreaux. Stereospecific synthesis of alpha-amino allylsilane derivatives through a 3,3 -allyl cyanate rearrangement. mild formation of functionalized disiloxanes. *Journal of Organic Chemistry*, 81(11):4633–4644, 2016.

- [49] R. Huang, H. Phan, T. S. Herng, P. Hu, W. D. Zeng, S. Q. Dong, S. Das, Y. J. Shen, J. Ding, D. Casanova, and J. S. Wu. Higher order pi-conjugated polycyclic hydrocarbons with open-shell singlet ground state: Nonazethrene versus nonacene. *Journal of the American Chemical Society*, 138(32):10323–10330, 2016.
- [50] M. Isik, F. Ruiperez, H. Sardon, A. Gonzalez, S. Zulfiqar, and D. Mecerreyes. Innovative poly(ionic liquid)s by the polymerization of deep eutectic monomers. *Macromolecular Rapid Communications*, 37(14):1135–1142, 2016.
- [51] M. Isik, S. Zulfiqar, F. Edhaim, F. Ruiperez, A. Rothenberger, and D. Mecerreyes. Sustainable poly(ionic liquids) for co<sub>2</sub> capture based on deep eutectic monomers. *Acs Sustainable Chemistry & Engineering*, 4(12):7200–7208, 2016.
- [52] Mehmet Isik, Fernando Ruiperez, Haritz Sardon, Alba Gonzalez, Sonia Zulfiqar, and David Mecerreyes. Innovative poly(ionic liquid)s by the polymerization of deep eutectic monomers. *Macromolecular rapid communications*, 37(14):1135–42, 2016.
- [53] J. Z. A. Laloo, L. Rhyman, P. Ramasami, F. M. Bickelhaupt, and A. de Cozar. Ion-pair s(n)2 substitution: Activation strain analyses of counter-ion and solvent effects. *Chemistry-a European Journal*, 22(13):4431–4439, 2016.
- [54] I. Leon, P. F. Arnaiz, I. Usabiaga, and J. A. Fernandez. Mass resolved ir spectroscopy of aniline-water aggregates. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(39):27336–27341, 2016.
- [55] I. Leon, F. Ruiperez, J. M. Ugalde, and Wang Lai-Sheng. Probing the electronic structure and au-c chemical bonding in aucn- and auchn- (n = 2, 4, and 6) using high-resolution photoelectron spectroscopy. *Journal of Chemical Physics*, 145(6):064304 (11 pp.)–064304 (11 pp.), 2016.
- [56] D. Lopez-Carballera and F. Ruiperez. Evaluation of modern dft functionals and g3n-rad composite methods in the modelization of organic singlet diradicals. *Journal of Molecular Modeling*, 22(4):15, 2016.
- [57] A. Mace, S. Touchet, P. Andres, F. Cossio, V. Dorcet, F. Carreaux, and B. Carboni. 3,3 -sigmatropic rearrangement/allylboration/cyclization sequence: Enantioenriched seven-membered-ring carbamates and ring contraction to pyrrolidines. *Angewandte Chemie-International Edition*, 55(3):1025–1029, 2016.
- [58] H. Manzano, I. Esnal, T. Marques-Matesanz, J. Banuelos, I. Lopez-Arbeloa, M. J. Ortiz, L. Cerdan, A. Costela, I. Garcia-Moreno, and J. L. Chiara. Unprecedented j-aggregated dyes in pure organic solvents. *Advanced Functional Materials*, 26(16):2756–2769, 2016.

- [59] E. Martinez-Perinan, A. de Juan, Y. Pouillon, C. Schierl, V. Strauss, N. Martin, A. Rubio, D. M. Guldi, E. Lorenzo, and E. M. Perez. The mechanical bond on carbon nanotubes: diameter-selective functionalization and effects on physical properties. *Nanoscale*, 8(17):9254–9264, 2016.
- [60] E. Matito. An electronic aromaticity index for large rings. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(17):11839–11846, 2016.
- [61] E. Matito, D. Casanova, X. Lopez, and J. M. Ugalde. Exact exchange-correlation functional for the infinitely stretched hydrogen molecule. *Theoretical Chemistry Accounts*, 135(9):4, 2016.
- [62] J. M. Matxain, J. M. Asua, and F. Ruiperez. Design of new disulfide-based organic compounds for the improvement of self-healing materials. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(3):1758–1770, 2016.
- [63] G. M. Meconi, N. Ballard, J. M. Asua, and R. Zangi. Adsorption and desorption behavior of ionic and nonionic surfactants on polymer surfaces. *Soft Matter*, 12(48):9692–9704, 2016.
- [64] J. M. Mercero, M. Rodriguez-Mayorga, E. Matito, X. Lopez, and J. M. Ugalde. The electron-pair density distribution of the (1,3)pi(u) excited states of h-2. *Canadian Journal of Chemistry*, 94(12):998–1001, 2016.
- [65] I. Mitxelena and M. Piris. Molecular electric moments calculated by using natural orbital functional theory. *Journal of Chemical Physics*, 144(20):6, 2016.
- [66] Z. Monasterio, M. Sagartzazu-Aizpurua, J. I. Miranda, Y. Reyes, and J. M. Aizpurua. Cationic 1,2,3-triazolium alkynes: Components to enhance 1,4-regioselective azide-alkyne cycloaddition reactions. *Organic Letters*, 18(4):788–791, 2016.
- [67] C. Najera, J. M. Sansano, and E. Gomez-Bengoa. Heterocycle-based bifunctional organocatalysts in asymmetric synthesis. *Pure and Applied Chemistry*, 88(6):561–578, 2016.
- [68] O. B. Ona, O. De Clercq, D. R. Alcoba, A. Torre, L. Lain, D. Van Neck, and P. Bultinck. Atom and bond fukui functions and matrices: A hirshfeld-i atoms-in-molecule approach. *Chemphyschem*, 17(18):2881–2889, 2016.
- [69] J. L. Osa, J. A. Sanchez, N. Ortega, I. Iordanoff, and J. L. Charles. Discrete-element modelling of the grinding contact length combining the wheel-body structure and the surface-topography models. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 110:43–54, 2016.

- [70] C. Parra, C. Bosch, E. Gomez-Bengoa, J. Bonjoch, and B. Bradshaw. Asymmetric synthesis of octahydroindoles via a domino robinson annulation/5-endo intramolecular aza-michael reaction. *Journal of Organic Chemistry*, 81(21):10172–10179, 2016.
- [71] A. Pascual-Escudero, A. de Cozar, F. P. Cossio, J. Adrio, and J. C. Carretero. Alkenyl arenes as dipolarophiles in catalytic asymmetric 1,3-dipolar cycloaddition reactions of azomethine ylides. *Angewandte Chemie-International Edition*, 55(49):15334–15338, 2016.
- [72] U. Petralanda and I. Etxebarria. A unified description of the double perovskite family  $\text{sr}_2\text{mwo}_6$  within a rigid ion model. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(37):26033–26039, 2016.
- [73] M. Piris and N. H. March. Chemical and ionization potentials: Relation via the pauli potential and nof theory. *International Journal of Quantum Chemistry*, 116(11):805–818, 2016.
- [74] M. Piris and N. H. March. Potential energy curves for p-2 and p-2(+) constructed from a strictly n-representable natural orbital functional. *Physics and Chemistry of Liquids*, 54(6):797–801, 2016.
- [75] Mario Piris, Xabier Lopez, and Jesus M. Ugalde. The bond order of c2 from a strictly n-representable natural orbital energy functional perspective. *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)*, 22(12):4109–15, 2016.
- [76] A. Prlj, M. E. Sandoval-Salinas, D. Casanova, D. Jacquemin, and C. Corminboeuf. Low-lying pi pi\* states of heteroaromatic molecules: A challenge for excited state methods. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 12(6):2652–2660, 2016.
- [77] P. Ramirez-Lopez, A. Ros, B. Estepa, R. Fernandez, B. Fiser, E. Gomez-Bengoa, and J. M. Lassaletta. A dynamic kinetic c-p cross-coupling for the asymmetric synthesis of axially chiral p,n ligands. *Acs Catalysis*, 6(6):3955–3964, 2016.
- [78] D. E. Ramirez-Ornelas, E. Alvarado-Martinez, J. Banuelos, I. L. Arbeloa, T. Arbeloa, H. M. Mora-Montes, L. A. Perez-Garcia, and E. Pena-Cabrera. Formylbodipys: Privileged building blocks for multicomponent reactions. the case of the passerini reaction. *Journal of Organic Chemistry*, 81(7):2888–2898, 2016.
- [79] C. Ray, J. Banuelos, T. Arbeloa, B. L. Maroto, F. Moreno, A. R. Agarrabeitia, M. J. Ortiz, I. Lopez-Arbeloa, and S. de la Moya. Push-pull flexibly-bridged bis(halobodipys): solvent and spacer switchable red emission. *Dalton Transactions*, 45(29):11839–11848, 2016.

- [80] C. Ray, E. M. Sanchez-Carnerero, F. Moreno, B. L. Maroto, A. R. Agarrabeitia, M. J. Ortiz, I. Lopez-Arbeloa, J. Banuelos, K. D. Cohovi, J. L. Lunkley, G. Muller, and S. de la Moya. Bis(halobodipys) with labile helicity: Valuable simple organic molecules that enable circularly polarized luminescence. *Chemistry-a European Journal*, 22(26):8805–8808, 2016.
- [81] M. Rodriguez-Mayorga, E. Ramos-Cordoba, P. Salvador, M. Sola, and E. Matito. Bonding description of the harpoon mechanism. *Molecular Physics*, 114(7-8):1345–1355, 2016.
- [82] E. Ruggiero, C. Garino, J. C. Mareque-Rivas, A. Habtemariam, and L. Salassa. Upconverting nanoparticles prompt remote near-infrared photoactivation of ru(ii)-arene complexes. *Chemistry-a European Journal*, 22(8):2801–2811, 2016.
- [83] D. Scarpi, M. Petrovic, B. Fiser, E. Gomez-Bengoia, and E. G. Occhiato. Construction of cyclopenta b indol-1-ones by a tandem gold(i)-catalyzed rearrangement/nazarov reaction and application to the synthesis of bruceolline h. *Organic Letters*, 18(15):3922–3925, 2016.
- [84] D. Sokolovski and M. Pons. Adiabaticity in a time-dependent trap: A universal limit for the loss by touching the continuum. *Physical Review A*, 94(1), 2016.
- [85] J. Uranga, O. Lakuntza, E. Ramos-Cordoba, J. M. Matxain, and J. I. Mujika. A computational study of radical initiated protein backbone homolytic dissociation on all natural amino acids. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(45):30972–30981, 2016.
- [86] I. Uriarte, P. Ecija, L. Spada, E. Zabalza, A. Lesarri, F. J. Basterretxea, J. A. Fernandez, W. Caminati, and E. J. Cocinero. Potential energy surface of fluoroxene: experiment and theory. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(5):3966–3974, 2016.
- [87] I. Usabiaga, J. Gonzalez, P. F. Arnaiz, I. Leon, E. J. Cocinero, and J. A. Fernandez. Modeling the tyrosine-sugar interactions in supersonic expansions: glucopyranose-phenol clusters. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(18):12457–12465, 2016.
- [88] P. Vins, A. de Cozar, I. Rivilla, K. Novakova, R. Zangi, J. Cvacka, I. Arrastia, A. Arrieta, P. Drasar, J. I. Miranda, and F. P. Cossio. Cyclopropanation reactions catalysed by dendrimers possessing one metalloporphyrin active site at the core: linear and sigmoidal kinetic behaviour for different dendrimer generations. *Tetrahedron*, 72(8):1120–1131, 2016.
- [89] N. Vogt, J. Demaison, E. J. Cocinero, P. Ecija, A. Lesarri, H. D. Rudolph, and J. Vogt. The equilibrium molecular structures of 2-deoxyribose and fructose by the semiexperimental mixed estimation method and coupled-cluster computations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(23):15555–15563, 2016.

- 
- [90] M. Wanko, S. Cahangirov, L. Shi, P. Rohringer, Z. J. Lapin, L. Novotny, P. Ayala, T. Pichler, and A. Rubio. Polyyne electronic and vibrational properties under environmental interactions. *Physical Review B*, 94(19):6, 2016.
  - [91] A. Yuen, A. Bossion, E. Gomez-Bengoa, F. Ruiperez, M. Isik, J. L. Hedrick, D. Mecerreyes, Y. Y. Yang, and H. Sardon. Room temperature synthesis of non-isocyanate polyurethanes (nipus) using highly reactive n-substituted 8-membered cyclic carbonates. *Polymer Chemistry*, 7(11):2105–2111, 2016.
  - [92] R. Zangi and D. Roccatano. Strings-to-rings transition and antiparallel dipole alignment in two-dimensional methanols. *Nano Letters*, 16(5):3142–3147, 2016.
  - [93] J. Zubeltzu, F. Corsetti, M. V. Fernandez-Serra, and E. Artacho. Continuous melting through a hexatic phase in confined bilayer water. *Physical Review E*, 93(6):8, 2016.
  - [94] S. Zulfiqar, D. Mantione, O. El Tall, M. I. Sarwar, F. Ruiperez, A. Rothenberger, and D. Mecerreyes. Nanoporous amide networks based on tetraphenyladamantane for selective co<sub>2</sub> capture. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(21):8190–8197, 2016.
  - [95] I. Zumeta, C. Mendicute-Fierro, I. Bustos, M. A. Huertos, A. Rodriguez-Dieguez, J. M. Seco, E. San Sebastian, and M. A. Garralda. Irida-beta-ketoimines derived from hydrazines to afford metallapyrazoles or n-n bond cleavage: A missing metallacycle disclosed by a theoretical and experimental study. *Inorganic Chemistry*, 55(20):10284–10293, 2016.