

Memoria del 2012 del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

Servicios Generales de Investigación (SGIker)

18 de octubre de 2013

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

Índice

1. Introducción	4
1.1. Año 2012	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	10
4. Software	11
5. Acciones y proyectos	12
5.1. Arina	12
5.2. Péndulo	12
5.3. Máquina Ikerbasque	12
5.4. Proyecto GPGPUEHU	13
5.5. Tarifas del Servicio	13
6. Uso de los recursos	15
6.1. Arina	15
6.1.1. Investigadores	16
6.1.2. Trabajos	17
6.2. Péndulo	20
7. Encuesta de satisfacción	22
8. Participación en eventos y formación	23
8.1. Conferencias impartidas por los técnicos	23
9. Actividad web	24
9.1. Página web	24
9.2. Blog del Servicio	24
9.3. Lista de distribución	24
10. Bibliometría	25
10.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio	25
11. Apéndices	28
A. Datos de uso de Arina	29
B. Estadísticas de la web del Servicio	32
C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI	38

D. Publicaciones del Servicio	41
D.1. Datos históricos	41
D.2. Publicaciones recogidas	42

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. 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.

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.
- Dinámica, estereodinámica y cinética de reacciones.
- Funciones de distribución numéricas.
- Estudios de CFD de cápsulas de almacenamiento de combustible nuclear gastado.
- Estudios CFD en separadores inerciales.
- Estudios de CFD de ventilación y confort.
- Estudios CFD sobre generadores de vórtices para aerogeneradores, alas, etc.
- Diseño de miméticos multiópticos.
- Nanotecnología, estudio en nanoestructuras.
- Colorantes láser.
- Fosfafluoroquímica.
- Materiales magnéticos para discos duros.
- Nanomagnetismo.
- Análisis estadísticos multivariantes.
- Procesos ultrarápidos en química física.
- Dinámica y control de átomos fríos.
- Análisis de población electrónica y matrices de densidad.
- Reconstrucción tridimensional de partículas biológicas observadas mediante TEM.
- Sistemas TDT de nueva generación.
- Álgebra y teoría de grupos.
- Algoritmos de descomposición de problemas de programación estocástica.
- Funciones de distribución numéricas para contrastes de raíces unitarias estacionales.
- Optimización para GPGPU.
- Materiales magnónicos artificiales controlados dinámicamente.
- Almacenamiento eficiente para depósitos RDF.

- Nanoclusters of semiconducting materials: properties, doping and selfassembling.
- Nanoclusters of semiconducting materials: (Bio)Functionalization.
- Aluminum interaction with bioligands.
- Protein damage Caused by ROS and RNS species and its prevention by antioxydants.
- Non-Covalent interactions.
- etc.

No obstante, a pesar de esta multidisciplinaridad, 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,...

1.1. Año 2012

Tras la ampliación realizada a Arina a finales del 2011 a través de un convenio de colaboración con el nanoGUNE, el 2012 ha sido un año sin ampliaciones, lo que ha supuesto que haya sido un año muy estable. Tal es así, que hay un cálculo que se puso en marcha el 1 de Enero de 2012 finalizó el 18 de Abril de 2013, 1 año, 4 meses y 16 días después. Gracias a esta estabilidad la ocupación del cluster Arina ha alcanzado el 79 % de ocupación (al no haber terminado el cálculo que lleva un año, este no se contabiliza). Teniendo en cuenta también que el 6 % de las maquinas están obsoletas, esta ocupación se puede considerar como muy alta e indicadora de la necesidad de una ampliación que concuerda con las políticas de ampliación del servicio.

La máquina de Ikerbasque se ha seguido usando con altibajos, a pesar de lo cual la ocupación media de la parte asignada a la UPV/EHU ha llegado al 88 %. Ha habido meses en los que se ha usado poco y otros mucho, incluso por encima del 20 % asignado a la UPV/EHU. Se acordó con I2BASQUE el uso flexible de los límites para maximizar el uso y aprovechamiento de la máquina redundando en un beneficio general.

El Servicio ha seguido proporcionado recursos, consultoría y apoyo en cálculo científico a todos los investigadores de la UPV/EHU siendo esta también 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. 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 los investigadores sobre el mismo y redacta el blog HPC en la Ehusfera. El IZO-SGI, por otra parte, ha invertido entorno a 8.000 € en la compra y/o actualización de varios programas científicos con licencia corporativa. Se lidera el proyecto GPGPUEHU para el estudio de tecnologías emergentes en cálculo intensivo.

2. El IZO-SGI en cifras

	2009	2010	2011	2012
Cores de cálculo	440	872 [§]	1.520 [§]	1.520
Millones de horas de cálculo consumidas	2,11	2,26	5,76	11,27
Investigadores activos	101	98	90	89
Grupos activos	53	40	39	40
Cuentas nuevas	49	33	31	20
Satisfacción de los usuarios*	8,9	8,8	8,8	9,3
Artículos científicos**	48	64	63	74
Visitas web	4.925	5.957	8.022	9.899
Páginas vistas	58.731	40.987	30.042	30.738
Posts en el blog HPC	-	29	34	27
Visitas del blog HPC	-	1.431	3.818	4.741
Arina				
Cores de cálculo	320	752	1.360	1.360
Millones de horas consumidas	2,07	2,11	5,20	9,6
Promedio de ocupación	75 %	47 % [†]	74 %	79 %
Trabajos enviados	38.497	65.179	68.991	98.383
Trabajos de más de 2 minutos [‡]	28.377	50.624	51.735	78.846
Horas promedio por trabajo ^{††}	76	44	100	122
Horas medio de espera (Arina) ^{‡‡}	5,7	3,8	3,8	5,2
Péndulo				
Cores de cálculo	120	120	120	80
Millones de horas consumidas	0,02	0,15	0,09	0,07
Ikerbasque				
Cores de cálculo	-	-	208	208
Millones de horas consumidas	-	-	0,47	1,6

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, aun de no ser así, dada su corta duración no repercuten en el cluster.

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

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

es el tiempo que están esperando los trabajos hasta que se liberan los recursos que necesitan y entran en ejecución.

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

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

3. 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. Durante el 2012, algunos de los mas viejos han dejado a funcionar, quedando en estos momentos 1344 Cores. En detalle:

208 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. 72 cores ya se han estropeado, 56 mas están obsoletos.

24 cores opteron Se pusieron en marcha 40 cores en la ampliación de 2006. 16 cores ya no funcionan, y el resto están obsoletos.

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).

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

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 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 2013 dependiendo de la disponibilidad de los técnicos. Esta migración tampoco se ha podido terminar durante el 2012, por la carga de trabajo existente. Pensamos que se podrá hacer durante el 2013, principalmente gracias al proyecto Saiotek.

3.3. Ikerbasque

El Gobierno Vasco cedió en 2011 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 y se han estado usando durante todo el 2012.

3.4. Recursos web

Página web del Servicio. La página web del Servicio contiene información sobre el hardware y software del Servicio, su uso, informes, estadísticas, manuales, monitorización en línea de las máquinas, etc.

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

HPC, blog del Servicio. En el blog se publican anuncios, noticias, convocatorias, etc y se divulga sobre HPC y el Servicio. Además, se está creando poco a poco una guía de comandos de Linux.

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

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

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

Formularios del Servicio. Página de donde se agrupan los formularios para solicitar una cuenta, subir publicaciones, etc.

<http://www.ehu.es/sgi/CUENTA/index.php>

Lista de distribución. Lista de distribución de correo del Servicio por el que se envían comunicaciones directas a los investigadores dados de alta en el Servicio.

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

4. Software

Además de 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. 64 licencias Flotantes y ADF-Gui (4.100 €).

Schrodinger Program Suite. Comprada el 2011 para dos años (8.500 \$). Token Library for Impact, Liaison, Jaguar, Jaguar pKa, MacroModel, Epik, QikProp, SiteMap, Strike, Confgen, Minta, LigPrep, Glide, XP Visualizer, QSite, including 18 interchangeable tokens.

Star-CCM+. 8 licencias de Investigación y 8 de HPC (3250 €).

Matlab. 2 licencias (212 €).

Compilador de PGI. (770 \$).

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 durante el 2012 no se ha llevado a cabo ninguna acción que afectara de manera especial en el funcionamiento del Servicio, ya que al no haber ampliación ni incidencias de parada la máquina ha funcionado muy estable durante todo el año.

Aparte del funcionamiento de la máquina, habría que señalar que se realizó un proceso de preselección de un bioinformático para luego presentar al seleccionado a las convocatorias de personal técnico al MINECO. Después de realizar el proceso, por un giro de último momento en los requisitos de la convocatoria del MINECO, el candidato seleccionado no se podía presentar y no se envió ninguna solicitud.

5.1. Arina

La acción más destacable ha sido empezar a preparar la ampliación de la capacidad de cálculo del Servicio para el 2013. A finales del 2012 empezamos a reunirnos con los diferentes proveedores de hardware (Bull, HP, Dell, IBM, Fujitsu, etc) para preparar el diseño de la futura ampliación.

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

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. Este intervención viene reforzada por el hecho de que el servidor que gestiona Péndulo es antiguo. Recordar que este servidor fue cedido por el CIDIR. Por las limitaciones de tiempo de los técnicos, este proyecto de actualización estuvo paralizado en 2012.

5.3. Máquina Ikerbasque

En 2011 se cedió parte del uso de una máquina del Gobierno Vasco gestionada por Ikerbasque a través de I2Basque a la UPV/EHU, el 20 % en concreto. El Servicio gestiona esta 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 a esta infraestructura, pero reduciendo la carga de trabajo para los técnicos del Servicio y los inconvenientes de la adaptación a los investigadores. 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 comerciales o restrictivas que impidan su instalación en esta máquina.
- Sean grandes usuarios, i.e., consumidores de tiempo y cpu y así puedan copar todos los recursos que se nos ceden.

5.4. Proyecto GPGPUEHU

El Servicio lidera el proyecto GPGPUEHU en la cual participan 13 investigadores de 7 departamentos diferentes de la UPV/EHU. El proyecto está enfocado a la adaptación del 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 además de adaptar software a esta tecnología.

5.5. Tarifas del Servicio

En este año no se ha procedido a revisar la tarifa. Por lo que esta siguen siendo la indicada a continuación.

- **Tarifa de CPU**

- **Tarifa interna UPV/EHU**

0.04 € por hora y core hasta que el grupo alcance un uso del 3.7 % sobre tiempo total disponible en el servicio (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 décima parte del primer tramo.

- **Tarifa para otros organismos públicos**

La tarifa por el uso de los recursos computacionales es de 0.064 € 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 0.08 € 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
$2500 < \text{cpu} < \infty$	0.1
$100 < \text{cpu} < 2500$	0.5
$1 < \text{cpu} < 100$	1.0
$0 < \text{cpu} < 1$	1.5

6. Uso de los recursos

Por motivos de facturación y para facilitar esta tanto al Servicio como a los Investigadores, muchos de cuyos proyectos han de cerrarse el 31 de Diciembre, el año se contabiliza desde el 1-12-2011 al 30-11-2012.

En el 2012 en el IZO-SGI han calculado 40 grupos o proyectos de investigación en las áreas de Física, Química, Mineralogía, Biología, Genética, Informática, Ingeniería, Matemáticas, Antropología, etc. Se han abierto 20 nuevas cuentas de usuario y 89 investigadores realizaron cálculos. En total se han consumido 469.583 días de cálculo, 11,27 millones de horas de cálculo.

6.1. Arina

Arina ha estado funcionando 24 horas 365 días al año y su uso durante el mismo ha sido de 400.270 días de cálculo (9,6 millones de horas) lo que supone un **79 %** de ocupación. En Noviembre del 2011 se puso en producción la ampliación que fue rápidamente absorbida y ya en Febrero la máquina estaba completamente ocupada. Tras la ampliación, Arina ha estado en funcionamiento ininterrumpido durante el 2012 como se puede ver en la alta ocupación de este año, por ejemplo, el descenso en la ocupación en Agosto ha sido muy leve.

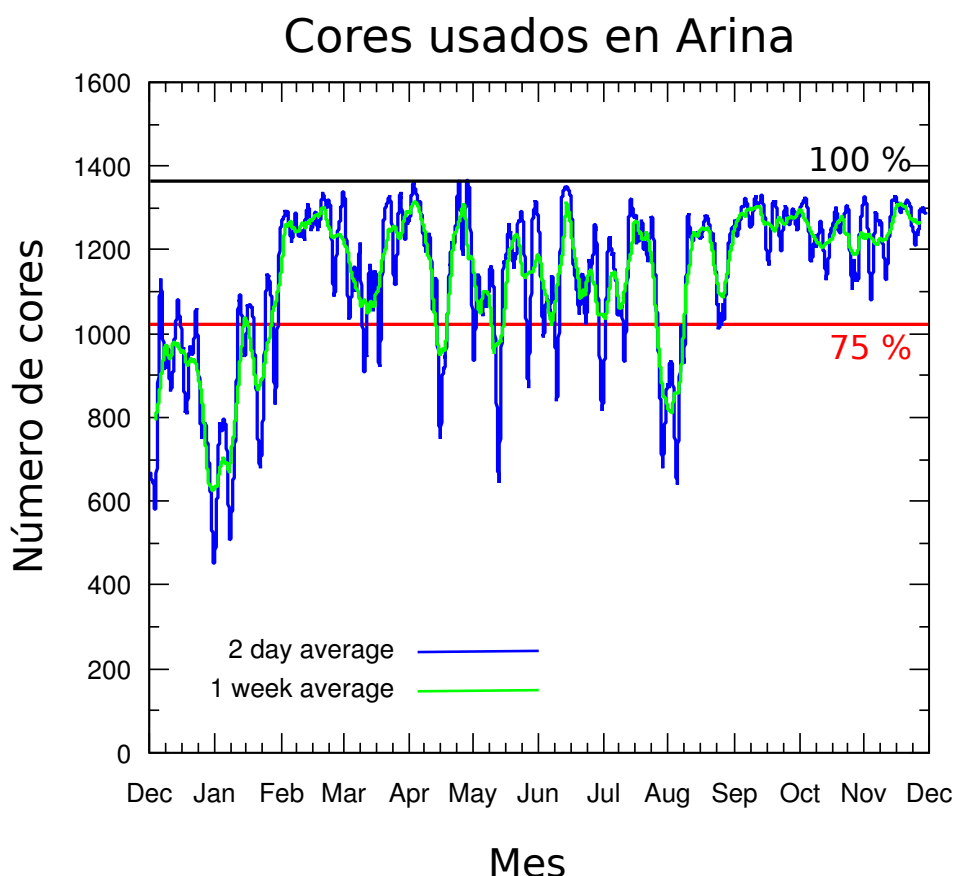


Figura 1: Uso de Arina en el año contable. Cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

El uso ha sido bastante homogéneo y podemos considerar que ha sido un gran aprovechamiento de Arina y que el investigador a podido trabajar con agilidad dado que el tiempo promedio de espera de un trabajo en la cola de ejecución ha sido de 5.2 horas, aunque ha supuesto un ligero aumento respecto a las 3,8 horas del 2011. Este año se han enviado a Arina 98.382 trabajos de los cuales 78.846 (un 58 % más que el año pasado) duraron más de 2 minutos. Realizamos la suposición de que la mayoría de los 19.536 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 ascendido a 121 horas desde las 101 horas del año pasado. Así pues, la ampliación realizada a finales de 2011 permitido lanzar muchos más trabajos y además estos han sido ligeramente más largos.

En la figura 1 se muestra el uso durante el año contable de Arina, cada punto es un promedio sobre 24 horas. Se ha de notar que a partir de Febrero la máquina está en la práctica completamente ocupada, dado que por las 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. 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. Sirva de ejemplo que respecto al 2011 la ocupación a crecido un 7 %, desde el 74 al 79 %, mientras que el tiempo de espera ha crecido un 37 %.

6.1.1. Investigadores

Este año un total de 89 investigadores han calculado en el Arina. 56 han calculado más de 500 días (el 2011 fueron 36). El mayor usuario empleó 52.956 días de cálculo, es el mismo que el año pasado que también uso un número de horas similar, 56.029. Por debajo, pero con más de 30 días de cómputo, hay 19 investigadores y con menos de 30 días calculados hay 17 investigadores. En la figura 2 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por investigador y en la tabla 3 del apéndice A se pueden encontrar los datos completos.

40 grupos de investigación han calculado en Arina. 21 grupos han calculado intensivamente (más de 1.000 días de cálculo), el año pasado fueron 13. El grupo que más ha usado Arina ha empleado 64.067 días. 8 han sido los grupos que han calculado más de 100 días y 6 grupos entre 10 y 100 días. Finalmente tenemos 5 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 4 del apéndice A se pueden encontrar los datos completos.

Si agrupamos los grupos de investigación por departamentos observamos en la figura 4 que el departamento de Ciencia y Tecnología de Polímeros es el que agrupa al mayor número de usuarios de Arina y que empleó 155.073 días de cálculo. De esta figura igualmente obtenemos que la Química es la ciencia que más emplea Arina con un 74 % del tiempo de cálculo, seguido de la Física con un 20 % del tiempo, el 5 % restante representa usuarios de ingeniería, biología, matemáticas, informática, bioinformática etc.

En cuanto al uso por campus se ve que en el Campus de Gipuzkoa es donde se encuentran la mayor parte de los grupos usuarios de Arina que han empleado el 80 % del tiempo de cálculo usado (el 2011 fue un 85 %), seguido de Bizkaia con un 19.5 %. Los grupos que usan computación en Gasteiz son 2 y han empleado menos de un 1 % del cálculo de Arina (200 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 a 1000 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. El 35 % del tiempo usado ha sido con Gaussian, el programa más usado y con más usuarios de Arina, el año anterior también fue el más usado con un porcentaje similar, 37 %. En segundo lugar está Siesta (20 %), debido principalmente al uso del nanoGUNE. El tercer y cuarto programa son GROMACS (14 %) y plasma 12 % (26 % el 2011, es un programa creado por un investigador).

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 10.130 días de cálculo. En el otro extremo los mayores trabajos que consumen más de un mes de cómputo supone un 65 % del tiempo consumido. Un porcentaje muy alto y que refuerza la necesidad de clusters como Arina con muchos nodos y estables que permiten la ejecución de estos trabajos de forma rutinaria y cómoda.

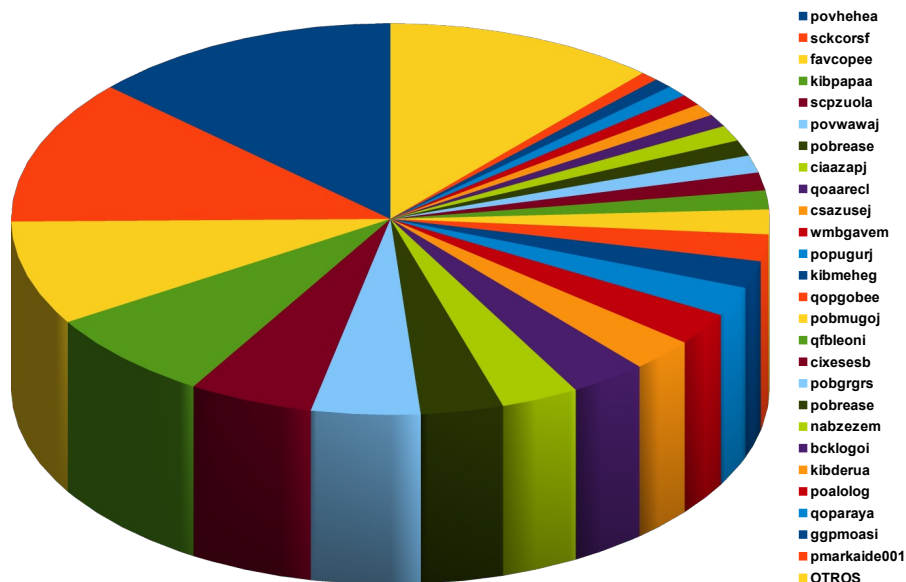


Figura 2: Uso de Arina por investigador. En *otros* están agrupados los investigadores con menos de 500 días calculados.

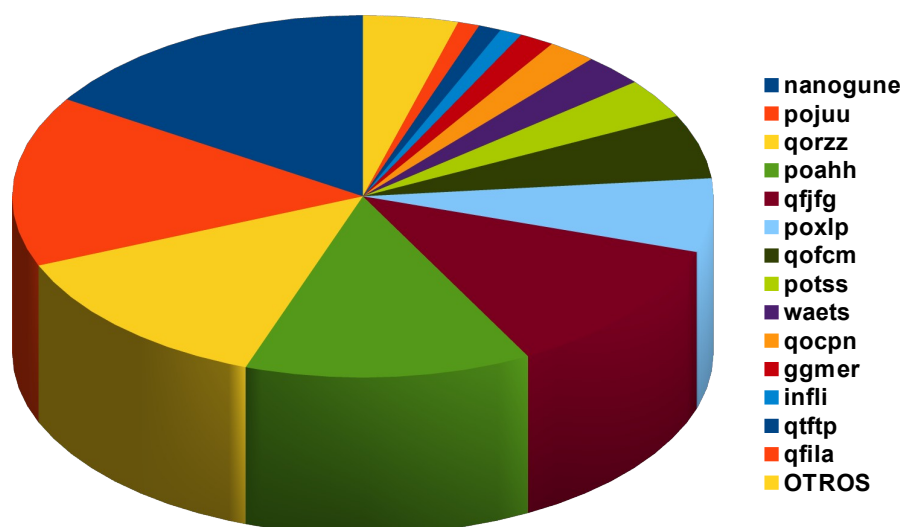


Figura 3: Uso de Arina por grupo. En *otros* están agrupados los grupos con menos de 500 días calculados.

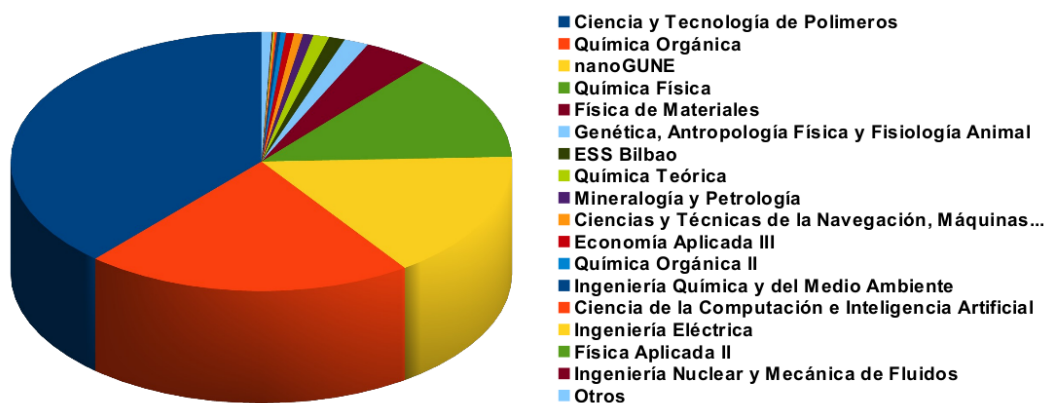


Figura 4: Uso de Arina por departamento.

Si separamos los trabajos en función del número de cores que emplean obtenemos la figura 8. Siempre se recomienda usar 1, 4, 8, 12 cores o un múltiplo de 8 o 12 al ser los nodos de 8 y 12 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. Trás la ampliación del 2011, la incorporación de nodos con 12 cores aumentó las opciones de fragmentación en el cluster, es decir, tener muchos nodos sin completar, típicamente nodos de 12 cores con sólo 8 ocupados. El 42 % de los trabajos corresponden a 5-8 cores. Esto es debido a que podemos considerar la unidad de

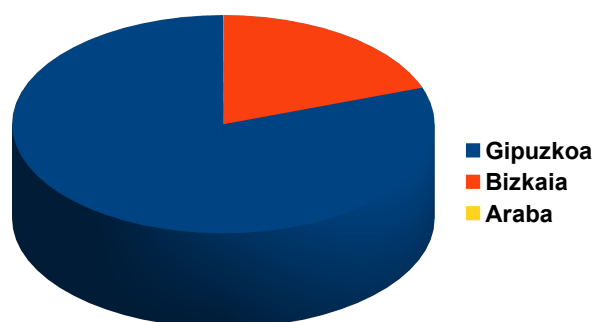


Figura 5: Uso de Arina por campus.

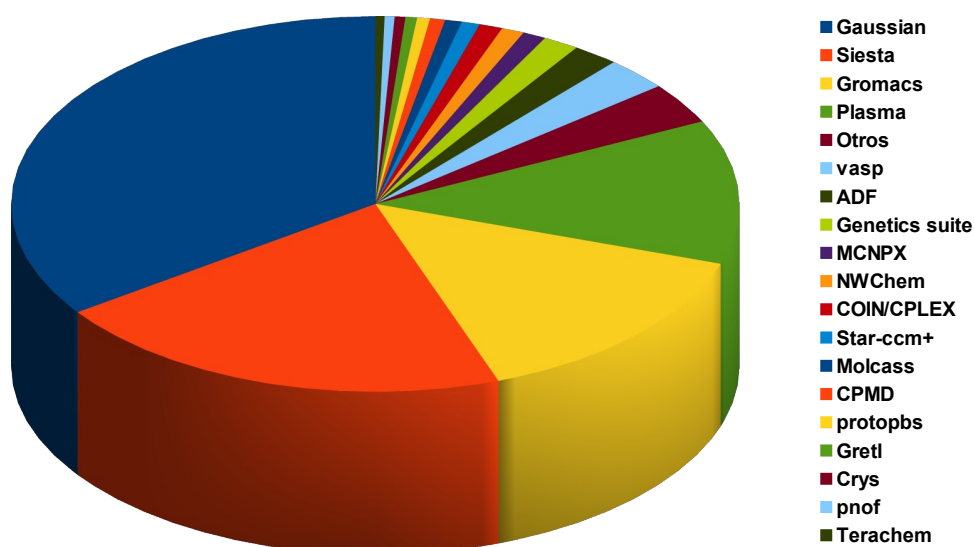


Figura 6: Tiempo consumido por los programas.

cálculo el nodo que posee 8 cores. Los trabajos en 12 cores han rondado el 12 %, no es muy alto ya que los usuarios siguen prefiriendo mandar los trabajos en 8 cores, de este modo, estos podrán ejecutarse tanto en los nodos de 8 como de 12 cores. Buena parte de los trabajos que emplean más de 8 cores corresponde a CPMD y VASP aunque no exclusivamente.

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

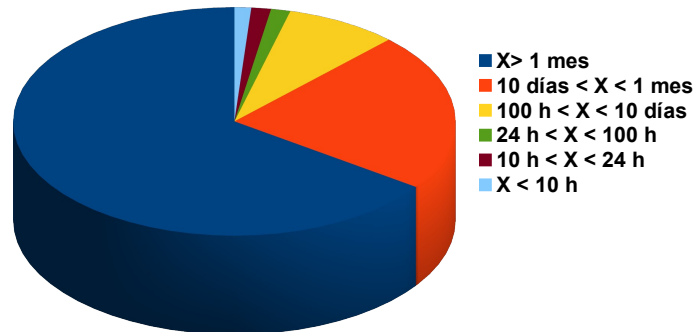


Figura 7: Tiempo consumido por los trabajos en función del tiempo que emplea cada uno.

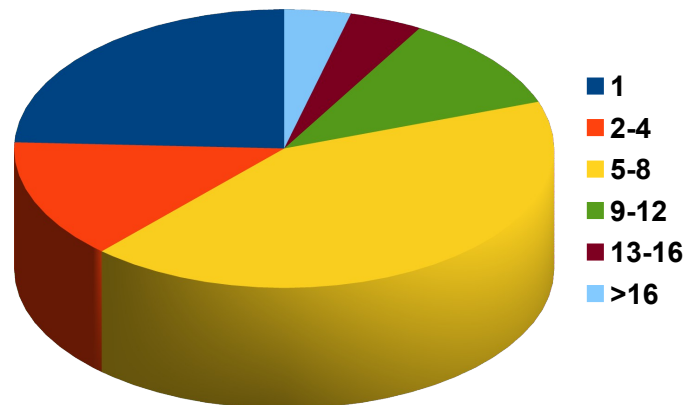


Figura 8: Tiempo consumido por los trabajos en función del número de cores.

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 2.856 días repartidos en 4 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.

En la tabla 2 se muestra el tiempo empleado por cada grupo. Este uso representa aproximadamente un 14 % de todo el tiempo de cálculo disponible en Péndulo, que es más difícil

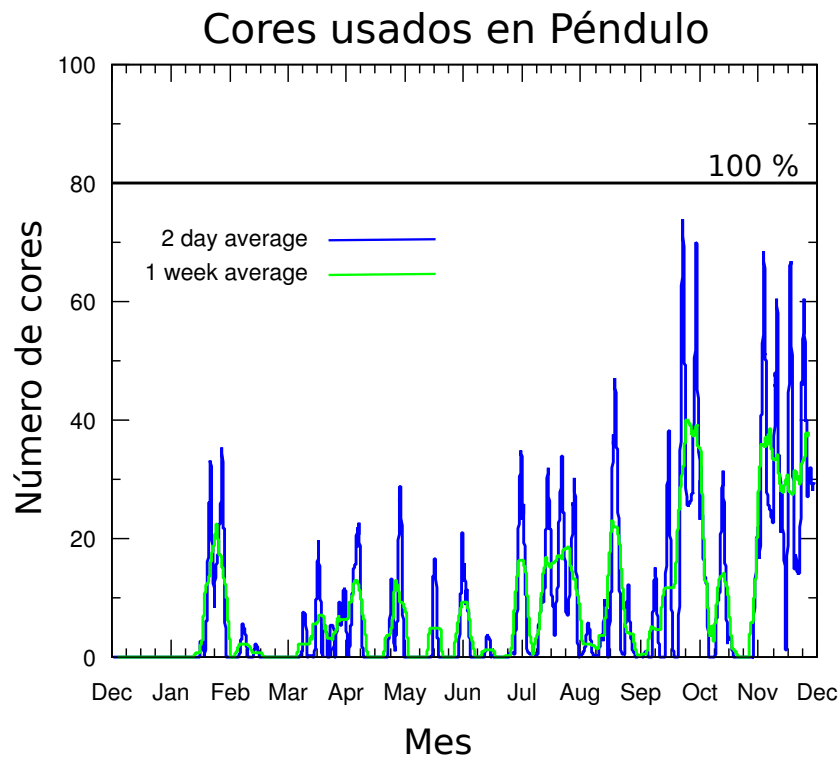


Figura 9: Uso de Péndulo en el año contable. Cada punto se ha promediado sobre 24 horas.

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 2: Uso de los grupos de investigación de Péndulo

Grupo	Días
jtjob	2809.43
arinadm	22.31
mtgfa	12.93
qfila	8.4
ieflm	3.29

7. Encuesta de satisfacción

La Unidad de Calidad e Innovación de los SGIker realiza una encuesta anual de satisfacción sobre el IZO-SGI, los resultados de la misma se muestran en el apéndice C.

Se recibieron 39 respuestas de investigadores del Servicio con una valoración media de 4,66 sobre 5 (9,32 sobre 10). De la encuesta podemos destacar todas las respuestas están entorno a la media de 4,66, excepto la correspondiente a la valoración de las tarifas con la puntuación más baja de 3,5 sobre 5. En realidad 3,5 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 repitió el año pasado.

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

8. Participación en eventos y formación

8.1. Conferencias impartidas por los técnicos

Poster. Scientific Computing Research at the IZO-SGI SGIker UPV/EHU
ESPA 2012. Barcelona. Junio 26-29.

Presentación. Cálculo Científico y Supercomputación.
Tecnalia. Noviembre de 2012.

Presentación. Cálculo Científico y Supercomputación
Workshop Multinomat 2012
Facultad de Ciencia y Tecnología Leioa, Diciembre 2012.

Clases impartidas en la Asignatura de Simulación y Modelización del máster de Nuevos Materiales.

9. Actividad web

9.1. Página web

La web del Servicio (<http://www.ehu.es/sgi>) sigue cumpliendo su misión de información básica y manual del Servicio. Ésta ha sido visitada 9.899 veces por 4.703 usuarios absolutos que han visitado 30.738 páginas. En el apéndice B hay un resumen de las estadísticas de la web.

9.2. Blog del Servicio

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 27 posts y recibió 4.741 visitas.

9.3. Lista de distribución

Se han enviado 79 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 74 artículos científicos, 6 tesis y 1 tesis de master . 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 en 2012. 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 11 se muestran el número de citas realizadas a artículos, 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.

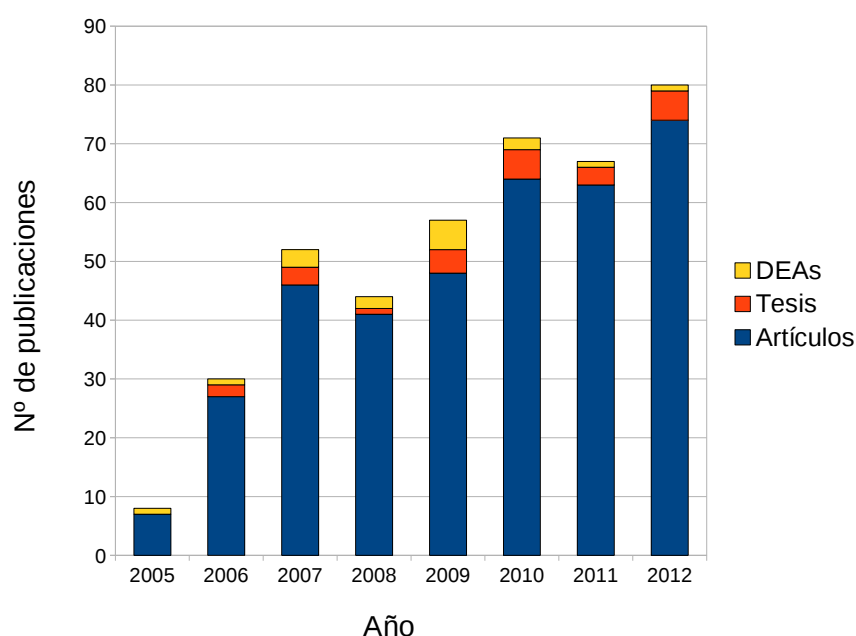


Figura 10: . Evolución del número de publicaciones.

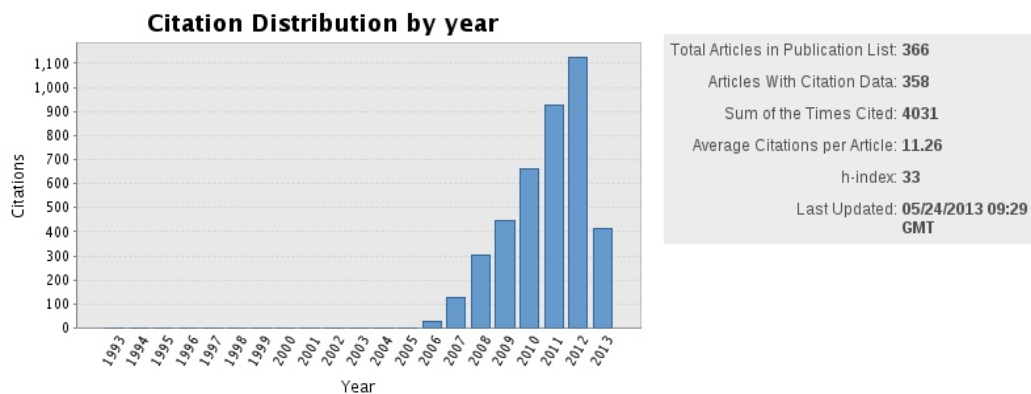


Figura 11: . Número de citas realizadas a artículos que citan al Servicio según la WOK.

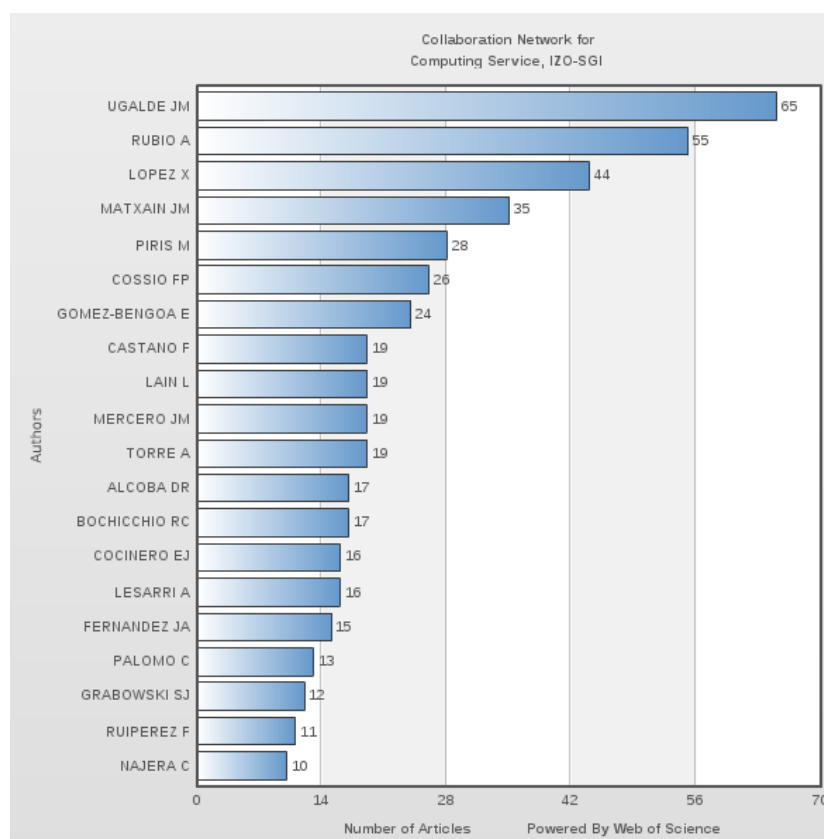


Figura 12: . Autores que más citan el Servicio según la WOK.

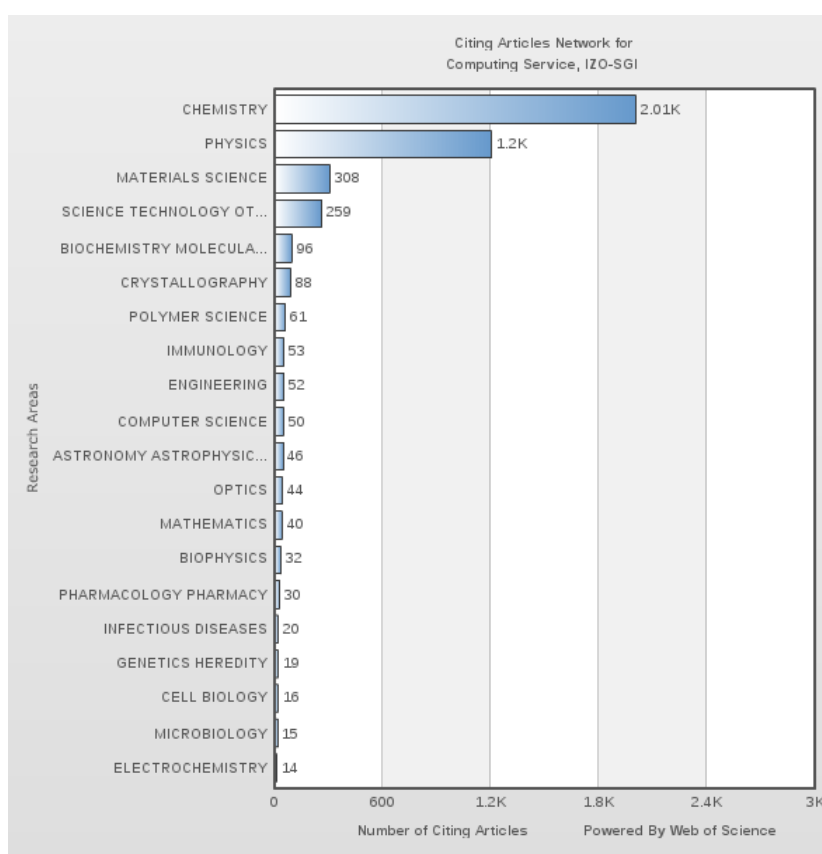


Figura 13: . Áreas de investigación en las que los usuarios han publicado artículos citando al Servicio.

11. Apéndices

A. Datos de uso de Arina

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

Investigador	Días	Investigador	Días
povhehea	52956.01	wapesnuv	1281.06
sckcorsf	47929.18	webogare	1010.62
favcopee	34475.80	iapgarue	929.13
kibpapaa	30002.08	wabeslel	742.93
scpzuola	21272.15	juranga004	703.11
povwawaj	18615.82	qopcomof	640.84
pobrease	14145.84	acblonou	569.50
ciaazapj	13274.83	wabpepaa	568.12
qoaarecl	13131.17	poplopex	519.96
csazusej	10918.12	waptctce	366.63
wmbgavem	10830.93	bcpitaia	317.59
popugurj	9769.56	kixsasal	316.25
kibmeheg	8989.97	qfpesmai	301.70
qopgobee	8917.63	bcpmeale	297.17
pobmugoj	8084.72	meppesag	295.52
qfbleoni	6289.47	poblaire	292.58
cixesesb	5934.86	wmpetali	231.70
pobgrgrs	5705.06	inpbalj	200.03
pobrease	5277.14	qoprualg	191.19
nabzezem	5220.43	waxpoxxy	156.00
bcklogoi	4168.83	kiazuirx	152.27
kibderua	4062.76	qfpbaprj	135.63
poalolog	3794.52	qobmimuj	73.04
qoparaya	3689.22	kixmagre	45.05
ggpmoasi	3302.40	poxmafie	40.65
pmarkaide001	3107.94	webzucaa	40.14
povrucif	2956.64	sgpfemae	38.96
quxlegoa	2748.81	kivremey	34.76

continua en la siguiente página

continua de la página anterior

Investigador	Días	Investigador	Días
bcpfmaa	2692.90	upetralanda001	28.72
bbpbabia	2320.98	wapgoesj	25.71
bckmimoj	2248.26	qfbloala	21.09
pobinini	2187.40	wuppobam	19.39
qovzaxxr	2151.48	sckwankm	16.10
qfploarf	2111.21	qfpgapae	9.40
etpdihei	2070.39	jtpanlod	7.26
mapmemam	1995.19	bcpcacaa	5.81
mapalmau	1861.38	lebtobaa	5.18
favecvep	1646.65	ccpsoeta	4.12
pobmelat	1550.93	ggpzamai	2.85
quxbabai	1498.84	wmpabuf	2.01
pobmabej	1463.67	qfptogaa	0.29
qfpmamoh	1449.78	wabgalaj	0.01
bcpremae	1404.80	bcpripae	0.01
qobconde	1404.37	qfplapel	0.00
jtppragg	0.00		

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

Grupo	Días	Grupo	Días
nanog	64067.72	wakgg	1306.77
pojuu	60929.56	iaegr	929.13
qorzz	53425.72	potmb	703.11
poahh	52956.01	ccjla	569.50
qfjfg	48907.84	bcizb	317.59
poxlp	26298.48	qffbe	297.17
qofcm	22928.36	wdaga	260.42
potss	14186.49	injbi	200.03
waets	11349.83	qofpg	191.19
qocpn	8917.63	lgsgi	73.04
ggmer	6413.20	wenzu	40.14
infli	4168.83	gpucomp	38.96
qtftp	4152.10	qpjag	34.76
qfila	3998.32	qfala	21.09
mimam	2698.70	wuebp	19.39
arina	2561.55	qfegp	9.40
bbabb	2320.98	jtjob	7.26
etjfm	2070.39	leaie	5.18
waars	1483.17	jieab	4.12
bcdbu	1404.80	wmjcd	2.01

B. 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.

http://www.ehu.es/SGI - http://www.ehu.es/SGI
www.ehu.es/SGI

Visión general de público

01/01/2012 - 31/12/2012

Todas las visitas
100,00%

Visión general

● Visitas



4.703 usuarios han visitado este sitio.

Visitas
9.899

Visitantes únicos
4.703

Número de páginas vistas
30.738

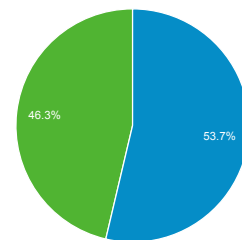
Páginas / Visita
3,11

Duración media de la visita
00:04:58

Porcentaje de rebote
51,91%

% de visitas nuevas
46,26%

■ Returning Visitor ■ New Visitor



Sistema operativo	Visitas	% Visitas
1. Windows	5.855	59,15%
2. Linux	3.186	32,19%
3. Macintosh	537	5,42%
4. Android	222	2,24%
5. iOS	35	0,35%
6. (not set)	20	0,20%
7. iPad	14	0,14%
8. BlackBerry	10	0,10%
9. Windows Phone	6	0,06%
10. iPhone	5	0,05%

[ver todo el informe](#)

http://www.ehu.es/SGI - http://www.ehu.es/SGI
www.ehu.es/SGI

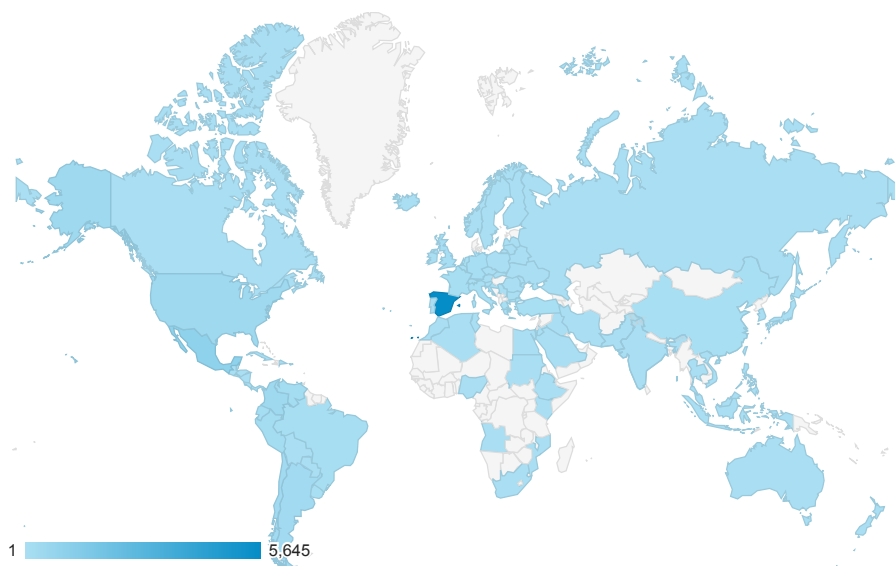
Ubicación

01/01/2012 - 31/12/2012

Todas las visitas
100,00%

Gráfico de visitas por ubicación

Uso del sitio



Pais/territorio	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	% de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
	9.899 % del total: 100,00% (9.899)	3,11 Promedio del sitio: 3,11 (0,00%)	00:04:58 Promedio del sitio: 00:04:58 (0,00%)	46,31% Promedio del sitio: 46,26% (0,11%)	51,91% Promedio del sitio: 51,91% (0,00%)
1. Spain	5.645	4,34	00:05:51	22,46%	33,45%
2. Mexico	920	1,34	00:01:10	88,15%	77,93%
3. Colombia	428	1,38	00:01:01	88,79%	76,64%
4. United States	408	1,47	00:02:43	36,76%	72,30%
5. Argentina	320	1,75	00:01:14	76,25%	72,19%
6. Chile	314	1,41	00:01:17	87,26%	72,29%
7. (not set)	253	2,09	00:45:41	30,04%	56,13%
8. Peru	214	1,20	00:00:46	90,65%	82,71%
9. Venezuela	211	1,13	00:00:37	92,89%	87,20%
10. Ecuador	158	1,23	00:00:34	93,04%	86,08%

Filas 1 - 10 de 88

http://www.ehu.es/SGI - http://www.ehu.es/SGI
www.ehu.es/SGI

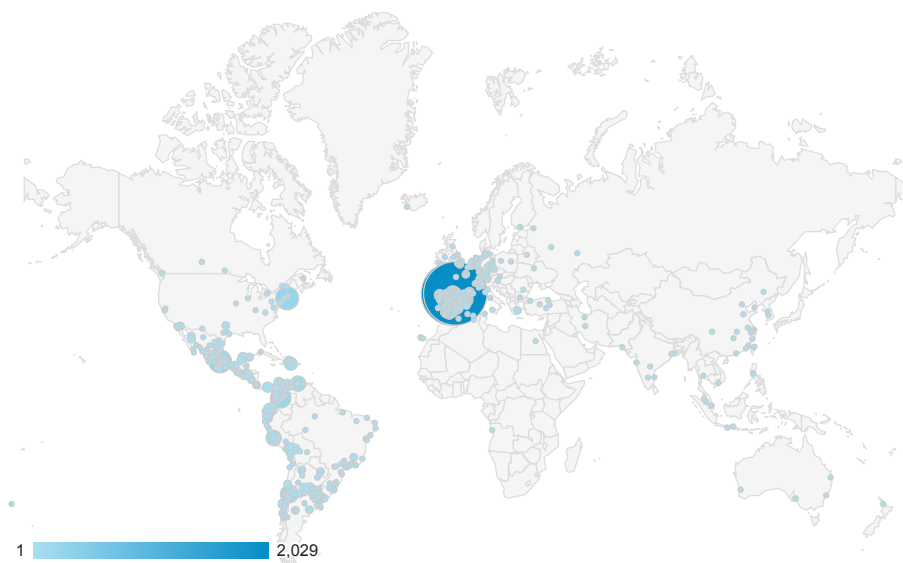
Ubicación

01/01/2012 - 31/12/2012

Todas las visitas
100,00%

Gráfico de visitas por ubicación

Uso del sitio



Ciudad	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	% de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
	9.899 % del total: 100,00% (9.899)	3,11 Promedio del sitio: 3,11 (0,00%)	00:04:58 Promedio del sitio: 00:04:58 (0,00%)	46,31% Promedio del sitio: 46,26% (0,11%)	51,91% Promedio del sitio: 51,91% (0,00%)
1. Bilbao	2.029	5,10	00:06:59	11,88%	26,81%
2. Donostia-San Sebastian	2.006	4,91	00:07:04	9,47%	21,98%
3. Madrid	323	2,23	00:02:25	57,59%	61,92%
4. (not set)	291	1,96	00:39:47	38,14%	59,79%
5. Providence	248	1,49	00:03:39	1,61%	75,00%
6. Mexico City	229	1,32	00:01:40	88,21%	75,11%
7. Bogota	202	1,47	00:01:19	84,16%	77,72%
8. Santiago	164	1,30	00:00:57	86,59%	73,17%
9. Logrono	136	5,69	00:07:48	4,41%	13,24%
10. Barcelona	121	1,29	00:00:28	89,26%	72,73%

Filas 1 - 10 de 745

http://www.ehu.es/SGI - http://www.ehu.es/SGI
www.ehu.es/SGI

Ubicación

01/01/2012 - 31/12/2012

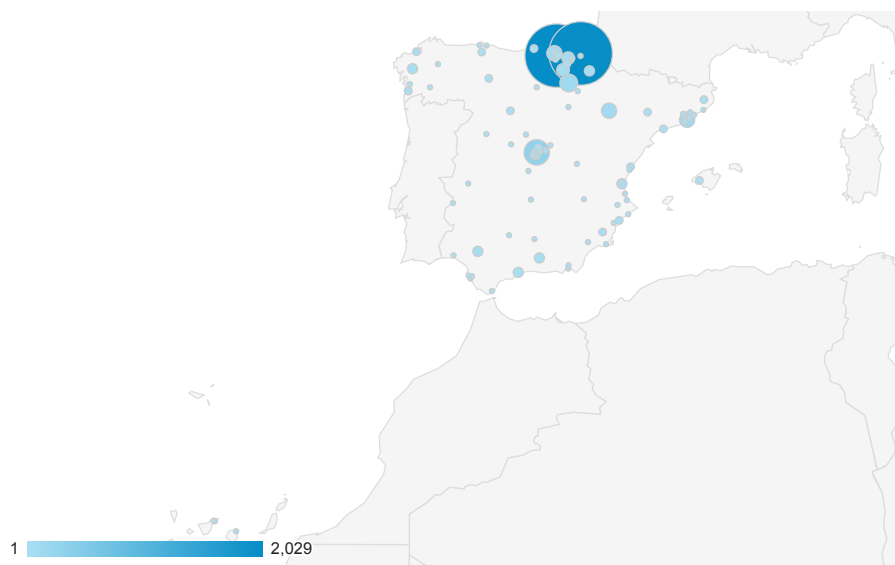
TODAS » PAÍS/TERRITORIO: Spain



Todas las visitas
57,03%

Gráfico de visitas por ubicación

Uso del sitio



Ciudad	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	% de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
	5.645 % del total: 57,03% (9.899)	4,34 Promedio del sitio: 3,11 (39,93%)	00:05:51 Promedio del sitio: 00:04:58 (17,67%)	22,46% Promedio del sitio: 46,26% (-51,44%)	33,45% Promedio del sitio: 51,91% (-35,58%)
1. Bilbao	2.029	5,10	00:06:59	11,88%	26,81%
2. Donostia-San Sebastian	2.006	4,91	00:07:04	9,47%	21,98%
3. Madrid	323	2,23	00:02:25	57,59%	61,92%
4. Logrono	136	5,69	00:07:48	4,41%	13,24%
5. Barcelona	121	1,29	00:00:28	89,26%	72,73%
6. Zaragoza	113	1,88	00:01:33	16,81%	72,57%
7. Las Arenas	101	4,32	00:03:32	14,85%	44,55%
8. Eibar	77	4,19	00:06:38	5,19%	31,17%
9. Vitoria	76	4,92	00:03:18	32,89%	32,89%
10. Seville	51	2,57	00:03:17	68,63%	50,98%

Filas 1 - 10 de 91

http://www.ehu.es/SGI - http://www.ehu.es/SGI
www.ehu.es/SGI

Visión general

01/01/2012 - 31/12/2012

Hemos cambiado este informe. ?



Todas las visitas
100,00%

Explorador

Uso del sitio

● Visitas

400

200

abril de 2012

julio de 2012

octubre de 2012

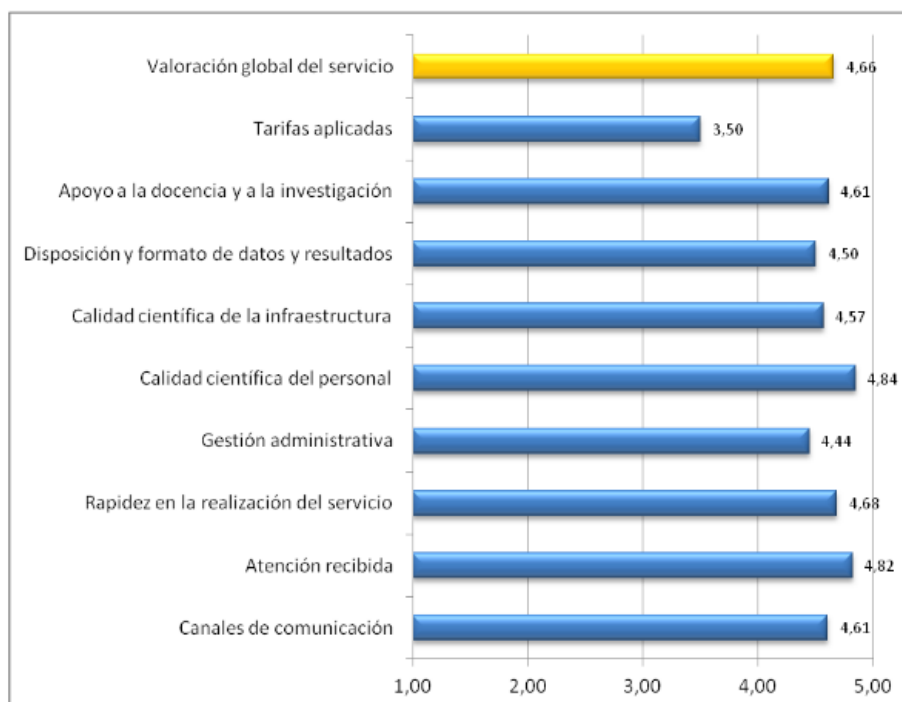
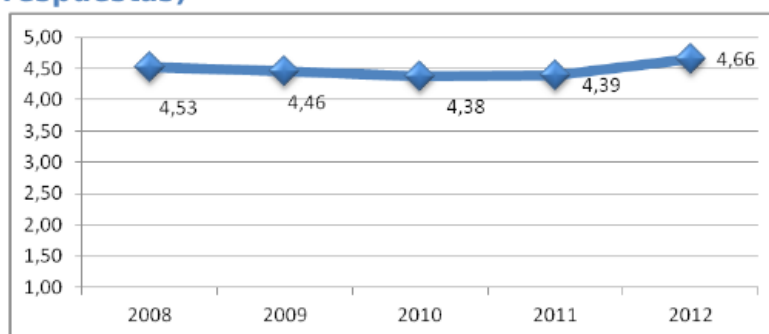
Categoría de dispositivo	Visitas	Páginas / Visita	Duración media de la visita	% de visitas nuevas	Porcentaje de rebote
	9.899 % del total: 100,00% (9.899)	3,11 Promedio del sitio: 3,11 (0,00%)	00:04:58 Promedio del sitio: 00:04:58 (0,00%)	46,31% Promedio del sitio: 46,26% (0,11%)	51,91% Promedio del sitio: 51,91% (0,00%)
1. desktop	9.600	3,14	00:03:55	46,56%	51,67%
2. mobile	260	2,06	00:44:17	32,31%	57,69%
3. tablet	39	1,95	00:01:03	76,92%	74,36%

Filas 1 - 3 de 3

C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI

La puntuación está en una escala de 0 a 5.

Informática Aplicada a la Investigación - Cálculo Científico (39 respuestas)



Observaciones realizadas:

- Algunos días la conexión con el servidor Arina es un poco lenta.
(Investigador postdoctoral, usuario habitual, una vez al mes).

- Arina clusterrekin konektatzeko prozesua erraztu. (**Profesor, usuario por primera vez, de una a seis veces al año**).
- El servicio del personal de soporte (Txema y Edu) es excelente. Solo espero que puedan abaratar las tarifas de computación. (**Investigador postdoctoral, usuario habitual, una vez al mes**).
- En épocas de crisis como éstas, deberían plantearse bajar las tarifas. De todas formas, el servicio proporcionado es excelente y los técnicos al cargo son muy competentes y dan un trato muy amable. [REDACTED], **usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Incrementar el número de nodos y disponibilidad en Péndulo. (**Profesor, usuario habitual, de una a seis veces al año**).
- Motelak diren nodoak merkeago izan beharko zuten. Lan prezioak ez zuen aldatu behar zer nodoan dagoen arabera. Zer, nire esperientziak erakutsi dit, lan asko joan direla garestiago diren nodoetara (garestiagoak dira zeren lanak, nodo horietan bukatzeko, denbora bikoitza hartu baitu). Orokorrean, garestia iruditzen zait. Eta iruditzen zait teknikoak oso lanpetuta dabilatzala. Eta horrexegatik, oso zaila da atentzio gehiago ematea. Horretaz aparte, webgunean, nodoen erabilera informazioa (kolak) ez dago guztiz eguneratuta eta zaia suertatzen da nodoa aukeratzea. [REDACTED], **usuario por primera vez, de una a seis veces al año**).
- Oso pozik nago eskeinitako zerbitzuarekin. Orohar, etzait okurritzen hobetzeko gauzarik. (**Profesor, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Since the summer the computational workload on Arina has been very heavy. I therefore would be very happy, if Arina is upgraded by more processors. Also, it would be very nice if one could run parallel jobs on 16 processors. I suppose, the question "Disposición y formato de los datos y resultados" includes also the amount of available disk space. I therefore gave only mark 3, because disk space is quite limited. [REDACTED], **Ikerbasque, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- The service is very good. My only suggestion is to increase the capacity of the computer center, thus, more nodes. [REDACTED], **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 5: Artículos científicos en los que se menciona el uso del IZO-SGI.

Año	Publicaciones
2005	7
2006	27
2007	46
2008	41
2009	48
2010	64
2011	63
2012	74

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

Año	Tesis
2006	2
2007	3
2008	1
2009	3
2010	5
2011	3
2012	6

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

Año	DEAs
2005	1
2006	1
2007	3
2008	1
2009	5
2010	2
2011	1
2012	1

D.2. Publicaciones recogidas

-
- [1] Alcoba, D. R.; Lain, L.; Torre, A.; Ona, O. B.; Tiznado, W. *Chemical Physics Letters* **2012**, *549*, 103–107.
- [2] Alcoba, D. R.; Tiznado, W.; Ona, O. B.; Torre, A.; Lain, L. *Chemical Physics Letters* **2012**, *533*, 114–117.
- [3] Alonso, J. L.; Castro, A.; Clemente-Gallardo, J.; Echenique, P.; Mazo, J. J.; Polo, V.; Rubio, A.; Zueco, D. *Journal of Chemical Physics* **2012**, *137*.
- [4] Araluze, A.; Kovacs, I.; Kutnar, K.; Martinez, L.; Marusic, D. *Journal of Combinatorial Theory Series A* **2012**, *119*.
- [5] Arias, L.; Vara, Y.; Cossio, F. P. *Journal of Organic Chemistry* **2012**, *77*.
- [6] Asensio, N.; Schaffner, C. M.; Aureli, F. *Primates* **2012**, *53*, 147–156.
- [7] Azpiroz, J. M.; Infante, I.; Lopez, X.; Ugalde, J. M.; De Angelis, F. *Journal of Materials Chemistry* **2012**, *22*, 21453–21465.
- [8] Azpiroz, J. M.; Lopez, X.; Ugalde, J. M.; Infante, I. *Journal of Physical Chemistry C* **2012**, *116*.
- [9] Bianchi, C.; Zangi, R. *Journal of molecular biology* **2012**, *424*.
- [10] Campillo-Robles, J. M.; Ogando, E.; Plazaola, F. *Solid State Sciences* **2012**, *14*.
- [11] Cano, I.; Gomez-Bengoa, E.; Landa, A.; Maestro, M.; Mielgo, A.; Olaizola, I.; Oiarbide, M.; Palomo, C. *Angewandte Chemie-International Edition* **2012**, *51*, 10856–10860.
- [12] Carolina Castro, A.; Audiffred, M.; Mercero, J. M.; Ugalde, J. M.; Mendez-Rojas, M. A.; Merino, G. *Chemical Physics Letters* **2012**, *519–20*.
- [13] Castro, A. C.; Martinez-Guajardo, G.; Johnson, T.; Ugalde, J. M.; Wu, Y.-B.; Mercero, J. M.; Heine, T.; Donald, K. J.; Merino, G. *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2012**, *14*.
- [14] Cerdan, L.; Costela, A.; Garcia-Moreno, I.; Nuelos, J. B.; Lopez-Arbeloa, I. *Laser Physics Letters* **2012**, *9*, 426–433.
- [15] Chahboun, G.; Brito, J. A.; Royo, B.; El Amrani, M. A.; Gomez-Bengoa, E.; Mosquera, M. E. G.; Cuenca, T.; Royo, E. *European Journal of Inorganic Chemistry* **2012**, 2940–2949.
- [16] Chiodo, L.; Massaro, A.; Laricchia, S.; Della Sala, F.; Cingolani, R.; Salazar, M.; Romero, A. H.; Rubio, A. *Optical and Quantum Electronics* **2012**, *44*.
- [17] Cocinero, E. J.; Lesarri, A.; Ecija, P.; Basterretxea, F. J.; Grabow, J.-U.; Fernandez, J. A.; Castano, F. *Angewandte Chemie-International Edition* **2012**, *51*.
- [18] Conde, E.; Bello, D.; de Cozar, A.; Sanchez, M.; Vazquez, M. A.; Cossio, F. P. *Chemical Science* **2012**, *3*, 1486–1491.

- [19] de Cerio, O. D.; Rojo-Bartolome, I.; Bizarro, C.; Ortiz-Zarragoitia, M.; Cancio, I. *Environmental Science & Technology* **2012**, *46*, 7763–7771.
- [20] de Haro, T.; Gomez-Bengoa, E.; Cribiu, R.; Huang, X. G.; Nevado, C. *Chemistry-a European Journal* **2012**, *18*, 6811–6824.
- [21] Duran-Sampedro, G.; Agarrabeitia, A. R.; Garcia-Moreno, I.; Costela, A.; Banuelos, J.; Arbeloa, T.; Arbeloa, I. L.; Chiara, J. L.; Ortiz, M. J. *European Journal of Organic Chemistry* **2012**, 6335–6350.
- [22] Ecija, P.; Basterretxea, F. J.; Lesarri, A.; Millan, J.; Castano, F.; Cocinero, E. J. *Journal of Physical Chemistry A* **2012**, *116*, 10099–10106.
- [23] Eremeev, S. V.; Vergniory, M. G.; Menshchikova, T. V.; Shaposhnikov, A. A.; Chulkov, E. V. *New Journal of Physics* **2012**, *14*.
- [24] Evangelisti, L.; Ecija, P.; Cocinero, E. J.; Castano, F.; Lesarri, A.; Caminati, W.; Meyer, R. *Journal of Physical Chemistry Letters* **2012**, *3*, 3770–3775.
- [25] Garcia, E.; Lagana, A.; Skouteris, D. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*, 1589–1595.
- [26] Garcia-Moreno, I.; Wang, L.; Costela, A.; Banuelos, J.; Arbeloa, I. L.; Xiao, Y. *Chemphyschem* **2012**, *13*, 3923–3931.
- [27] Gartzia-Rivero, L.; Banuelos-Prieto, J.; Martinez-Martinez, V.; Arbeloa, I. L. *Chemphyschem* **2012**, *13*, 61–70.
- [28] Geethalakshmi, K. R.; Ruiperez, F.; Knecht, S.; Ugalde, J. M.; Morse, M. D.; Infante, I. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*.
- [29] Goikoetxea, M.; Reyes, Y.; Alarcon, C. M. D.; Minari, R. J.; Beristain, I.; Paulis, M.; Barandiaran, M. J.; Keddie, J. L.; Asua, J. M. *Polymer* **2012**, *53*, 1098–1108.
- [30] Gomez-Bengoa, E.; Jimenez, J.; Lapuerta, I.; Mielgo, A.; Oiarbide, M.; Otazo, I.; Velilla, I.; Vera, S.; Palomo, C. *Chemical Science* **2012**, *3*, 2949–2957.
- [31] Gonzalez, S.; Perez-Mato, J. M.; Elcoro, L.; Garcia, A.; Withers, R. L.; Bourgeois, L. *Journal of Physics-Condensed Matter* **2012**, *24*.
- [32] Grabowski, S. J. *Computational and Theoretical Chemistry* **2012**, *992*.
- [33] Grabowski, S. J. *Journal of Physical Chemistry A* **2012**, *116*.
- [34] Grabowski, S. J.; Hoffmann, R. *Chemphyschem* **2012**, *13*.
- [35] Heidenreich, A.; Infante, I.; Ugalde, J. M. *New Journal of Physics* **2012**, *14*.
- [36] Huber, S. M.; Jimenez-Izal, E.; Ugalde, J. M.; Infante, I. *Chemical Communications* **2012**, *48*.
- [37] Jimenez-Izal, E.; Matxain, J. M.; Piris, M.; Ugalde, J. M. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*.

-
- [38] Kakazei, G. N.; Aranda, G. R.; Bunyaev, S. A.; Golub, V. O.; Tartakovskaya, E. V.; Chumak, A. V.; Serga, A. A.; Hillebrands, B.; Gusliencko, K. Y. *Physical Review B* **2012**, *86*.
- [39] Kuroda, K.; et al. *Physical Review Letters* **2012**, *108*.
- [40] Lakuntza, O.; Matxain, J. M.; Ruiperez, F.; Besora, M.; Maseras, F.; Ugalde, J. M.; Schlangen, M.; Schwarz, H. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*.
- [41] Leon, I.; Millan, J.; Castano, F.; Fernandez, J. A. *Chemphyschem* **2012**, *13*, 3819–3826.
- [42] Leon, I.; Millan, J.; Cocinero, E. J.; Lesarri, A.; Castano, F.; Fernandez, J. A. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*, 8956–8963.
- [43] Leon, I.; Cocinero, E. J.; Lesarri, A.; Castano, F.; Fernandez, J. A. *Journal of Physical Chemistry A* **2012**, *116*.
- [44] Leon, I.; Cocinero, E. J.; Millan, J.; Jaqx, S.; Rijs, A. M.; Lesarri, A.; Castano, F.; Fernandez, J. A. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*.
- [45] Leon, I.; Cocinero, E. J.; Millan, J.; Rijs, A. M.; Usabiaga, I.; Lesarri, A.; Castano, F.; Fernandez, J. A. *Journal of Chemical Physics* **2012**, *137*.
- [46] Leon, I.; Montero, R.; Castano, F.; Longarte, A.; Fernandez, J. A. *Journal of Physical Chemistry A* **2012**, *116*.
- [47] Lopez, X.; Ruiperez, F.; Piris, M.; Matxain, J. M.; Matito, E.; Ugalde, J. M. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2012**, *8*.
- [48] Mallocci, G.; Chiodo, L.; Rubio, A.; Mattoni, A. *Journal of Physical Chemistry C* **2012**, *116*.
- [49] Manzano, H.; Ayuela, A.; Telesca, A.; Monteiro, P. J. M.; Dolado, J. S. *Journal of Physical Chemistry C* **2012**, *116*, 16138–16143.
- [50] Manzano, H.; Enyashin, A. N.; Dolado, J. S.; Ayuela, A.; Frenzel, J.; Seifert, G. *Advanced Materials* **2012**, *24*, 3239–3245.
- [51] Matxain, J. M.; Piris, M.; Mercero, J. M.; Lopez, X.; Ugalde, J. M. *Chemical Physics Letters* **2012**, *531*.
- [52] Matxain, J. M.; Piris, M.; Uranga, J.; Lopez, X.; Merino, G.; Ugalde, J. M. *Chemphyschem* **2012**, *13*.
- [53] Montero, R.; Conde, A. P.; Ovejas, V.; Fernandez-Fernandez, M.; Castano, F.; de Aldana, J. R. V.; Longarte, A. *Journal of Chemical Physics* **2012**, *137*.
- [54] Moreno, M.; Goikoetxea, M.; Barandiaran, M. J. *Journal of Polymer Science Part a-Polymer Chemistry* **2012**, *50*, 4628–4637.
- [55] Mujika, J. I.; Escribano, B.; Akhmatskaya, E.; Ugalde, J. M.; Lopez, X. *Biochemistry* **2012**, *51*.

- [56] Mujika, J. I.; Ugalde, J. M.; Lopez, X. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*.
- [57] Nuansing, W.; Rebollo, A.; Mercero, J. M.; Zuniga, J.; Bittner, A. M. *Journal of Raman Spectroscopy* **2012**, *43*, 1397–1406.
- [58] Osorio-Martinez, C. A.; Urias-Benavides, A.; Gomez-Duran, C. F. A.; Banuelos, J.; Esnal, I.; Arbeloa, I. L.; Pena-Cabrera, E. *Journal of Organic Chemistry* **2012**, *77*, 5434–5438.
- [59] Palummo, M.; Giorgi, G.; Chiodo, L.; Rubio, A.; Yamashita, K. *Journal of Physical Chemistry C* **2012**, *116*.
- [60] Paz, A. P.; Espinosa Leal, L. A.; Azani, M. R.; Guijarro, A.; Miguel, P. J. S.; Givaja, G.; Castillo, O.; Mas-Balleste, R.; Zamora, F.; Rubio, A. *Chemistry-a European Journal* **2012**, *18*, 13787–13799.
- [61] Piris, M.; Matxain, J. M.; Lopez, X.; Ugalde, J. M. *Journal of Chemical Physics* **2012**, *136*.
- [62] Reboredo, S.; Reyes, E.; Vicario, J. L.; Badia, D.; Carrillo, L.; de Cozar, A.; Cossio, F. P. *Chemistry-a European Journal* **2012**, *18*.
- [63] Ruiperez, F.; Mujika, J. J.; Ugalde, J. M.; Exley, C.; Lopez, X. *Journal of Inorganic Biochemistry* **2012**, *117*, 118–123.
- [64] Sukhostavets, O. V.; Aranda, G. R.; Guslienko, K. Y. *Journal of Applied Physics* **2012**, *111*.
- [65] Varea, T.; Alcalde, A.; Lopez de Dicastillo, C.; Ramirez de Arellano, C.; Cossio, F. P.; Asensio, G. *Journal of Organic Chemistry* **2012**, *77*.
- [66] Vergniory, M. G.; Menshchikova, T. V.; Ereemeev, S. V.; Chulkov, E. V. *Jetp Letters* **2012**, *95*, 213–218.
- [67] Viozquez, S. F.; Banon-Caballero, A.; Guillena, G.; Najera, C.; Gomez-Bengo, E. *Organic & Biomolecular Chemistry* **2012**, *10*, 4029–4035.
- [68] Wang, J.; Wang, Y.; Ugalde, J. M. *Journal of Computational Chemistry* **2012**, *33*.
- [69] Wanko, M.; Garcia-Risueno, P.; Rubio, A. *Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics* **2012**, *249*.
- [70] Wanko, M.; Houmoller, J.; Stochkel, K.; Kirketerp, M.-B. S.; Petersen, M. A.; Nielsen, M. B.; Nielsen, S. B.; Rubio, A. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2012**, *14*.
- [71] Zangi, R. *Journal of Chemical Physics* **2012**, *136*.
- [72] Zhang, H.; Miyamoto, Y.; Rubio, A. *Physical Review Letters* **2012**, *109*.
- [73] Zhang, H.; Miyamoto, Y.; Rubio, A. *Physical Review B* **2012**, *85*, 4.
- [74] Zugarramurdi, A.; Zabala, N.; Silkin, V. M.; Chulkov, E. V.; Borisov, A. G. *Physical Review B* **2012**, *86*.