

Memoria del 2013 del Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico)

Servicios Generales de Investigación (SGIker)

14 de julio de 2014

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

Índice

1. Resumen y agradecimiento	4
2. El IZO-SGI en cifras	5
3. Introducción	6
3.1. Año 2013	8
4. Descripción del equipamiento	10
4.1. Arina	10
4.2. Péndulo	10
4.3. Ikerbasque	10
4.4. Recursos web	11
5. Software	12
6. Acciones y proyectos	13
6.1. Arina	13
6.2. Péndulo	13
6.3. Máquina Ikerbasque	13
6.4. Recursos web	14
6.5. Eventos	14
6.6. Tarifas del Servicio	14
7. Uso de los recursos	16
7.1. Arina	16
7.1.1. Investigadores	17
7.1.2. Trabajos	18
7.2. Péndulo	21
8. Encuesta de satisfacción	23
9. Participación en eventos y formación	24
9.1. Conferencias impartidas por los técnicos	24
9.2. Eventos a los que se ha asistido	24
10. Actividad web	25
10.1. Página web	25
10.2. Blog del Servicio	25
10.3. Lista de distribución	25
10.4. Twitter y Facebook	25
11. Bibliometría	26
11.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio	26
12. Apéndices	29
A. Datos de uso de Arina	30
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	41

1. Resumen y agradecimiento

Un año más el Servicio General de Informática Aplicada a la Investigación (Cálculo Científico) de la UPV/EHU sigue mejorando la mayoría de sus índices o manteniéndolos. Esto lo podemos observar claramente en el rápido examen comparativo de la siguiente sección *El IZO-SGI en cifras*. Entre los aspectos positivos cabe destacar el aumento de publicaciones, el incremento significativo de ocupación de la máquina sin excesivo impacto en los tiempos de espera y el incremento de visitas en el blog. Como elementos negativos podemos mencionar la caída de visitas de la página web del Servicio y la inevitable pérdida de recursos por avería. El Servicio sigue manteniendo una excelente puntuación en la encuesta de satisfacción de los investigadores.

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

2. El IZO-SGI en cifras

	2009	2010	2011	2012	2013
Cores de cálculo	440	872 [§]	1.520 [§]	1.520	1.400
Millones de horas de cálculo consumidas	2,11	2,26	5,76	11,27	10,4
Investigadores activos	101	98	90	89	99
Grupos activos	53	40	39	40	47
Cuentas nuevas	49	33	31	20	34
Satisfacción de los usuarios*	8,9	8,8	8,8	9,3	9,3
Artículos científicos**	48	64	63	74	87
Visitas web	4.925	5.957	8.022	9.899	5.924
Páginas vistas	58.731	40.987	30.042	30.738	20.323
Posts en el blog HPC	-	29	34	27	47
Visitas del blog HPC	-	1.431	3.818	4.741	24.613
Arina					
Cores de cálculo	320	752	1.360	1.360	1320
Millones de horas consumidas	2,07	2,11	5,20	9,6	9,8
Promedio de ocupación	75 %	47 % [†]	74 %	79 %	83 %
Trabajos enviados	38.497	65.179	68.991	98.383	100.214
Trabajos de más de 2 minutos [‡]	28.377	50.624	51.735	78.846	75.406
Horas promedio por trabajo ^{‡‡}	76	44	100	122	130
Horas medio de espera (Arina) ^{‡‡}	5,7	3,8	3,8	5,2	5,5
Péndulo					
Cores de cálculo	120	120	120	80	80
Millones de horas consumidas	0,02	0,15	0,09	0,07	0,04
Ikerbasque					
Cores de cálculo	-	-	208	208	208
Millones de horas consumidas	-	-	0,47	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 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.

‡ La máquina se apagó en Abril.

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

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

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

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

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

3. Introducción

La 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.

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 uso.

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.
- 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 antioxidants.
- Non-Covalent interactions.
- Agua.
- 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 .
- Seguridad en redes de datos.
- Análisis empírico de comportamiento de voto.
- Economía en conflictos bélicos.
- Determinación de isótopos radiactivos en muestras ambientales e industriales.
- etc.

No obstante, a pesar de esta 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,...

3.1. Año 2013

El 2013 comenzó con la tarea de preparar una ampliación para que entrase en producción a finales de año y a ello se ha dedicado el Servicio. Este trabajo ha supuesto la publicación de un concurso público en el Diario Oficial de la Unión Europea el 9 de Octubre para la adquisición de equipamiento. A finales de año se abrieron las ofertas y se procedió a su valoración. El equipamiento solicitado está orientado a satisfacer las necesidades de cálculo observadas y constará de:

- Nodos de cálculo de 16 cores y 64 GB de RAM como mínimo.
- Un nodo de memoria compartida de 32 cores como mínimo y 512 GB de RAM.
- Dos nodos con tarjetas GPGPU Nvidia Fermi.
- Un sistema de archivos paralelo de 40 TB como mínimo y 3 GB/s de ancho de banda en lectura/escritura.
- Interconexión infiniband FDR a 56 GB/s.
- Un servidor de gestión.
- Demás elementos secundarios y servicios de instalación.

Gracias a la estabilidad durante todo el año de la ocupación del cluster Arina ha alcanzado el 83 % de ocupación. Teniendo en cuenta también que el 6 % de las máquinas están obsoletas, esta ocupación se puede considerar como muy alta e indicadora por un lado de un gran aprovechamiento de la infraestructura y por otro de la necesidad de una ampliación que concuerda con las políticas de ampliación del Servicio. Es reseñable que este año ha finalizado el cálculo más largo jamás ejecutado en Arina, que usando 12 cores se ha estado ejecutando ininterrumpidamente 1 año, 4 meses, 16 días y 8 horas, 11335 horas en total.

La máquina de Ikerbasque en la que la UPV/EHU tenía un 20 % de derecho de uso a través del Servicio se apagó en Abril. Hasta entonces el uso de la capacidad ofertada al Servicio fue del 73 % lo cual también es un gran aprovechamiento.

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.

Este año el Servicio ha abierto cuentas en las redes sociales Facebook (<https://www.facebook.com/izosgi>) y Twitter (<https://twitter.com/izosgi>) como medios de comunicación.

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 20.000 € en la compra y/o actualización de varios programas científicos con licencia corporativa.

4. Descripción del equipamiento

4.1. Arina

El IZO-SGI, adscrito a los Servicios Generales de Investigación (SGIker) de la UPV/EHU, dispone de un cluster que dispone de 1320 cores para cálculo, nodos de computación con GPGPUs, 2 sistemas de ficheros de alto rendimiento basados en Lustre y servidores de servicio. Durante el 2013, algunos de los mas viejos han dejado a funcionar. En detalle:

184 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. 96 cores ya se han estropeado, 24 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.

4.2. Péndulo

El grid Péndulo, de diseño completamente propio, hace uso de las salas de ordenadores docentes dispersadas en la UPV/EHU configurándolo como una grid de cálculo científico fuera del horario docente. En estos momentos se compone de una sala, con 60 PC's core2duo de 1 GB de RAM. El Servicio tiene proyectado ampliar y migrar péndulo a una arquitectura de 64 bits durante el 2014 dependiendo de la disponibilidad de los técnicos. Esta migración tampoco se ha podido terminar durante el 2013, por la carga de trabajo existente.

4.3. 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. Se usaron durante los primeros 4 meses del año hasta que a finales de Abril se apagó dicha máquina.

4.4. 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/>

Facebook. En el perfil de Facebook se comparte en la red social lo publicado en el Blog del Servicio y la cuenta Twitter.

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

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

<https://twitter.com/izosgi>

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>

5. 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. También 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. 128 licencias Flotantes y ADF-Gui (4.600 €).

Schrodinger Program Suite. Comprada el 2013 para dos años (9.500 \$). Token Library for Impact, Liaison, Jaguar, Jaguar pKa, MacroModel, Epik, QikProp, SiteMap, Strike, Confgen, Minta, LigPrep, Glide, XP Visualizer, QSite, including 18 interchangeable tokens.

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

Matlab. 2 licencias (217,80 €) y symbolic Math Toolbox (393,25 €).

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

Aparte de intervenciones menores y rutinarias durante el 2013 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.

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.

6.1. Arina

Se ha llevado a cabo buena parte del proceso necesario para la próxima ampliación de Arina. Este proceso consiste en conocer las necesidades computacionales futuras de los investigadores y se han realizado para ellos algunas reuniones. También se han realizado reuniones con proveedores de hardware para preparar conocer más exactamente las características técnicas de los equipos, configuraciones y software que pueda ser necesario o interesante. Tras haber perfilado las necesidades se ha redactado un concurso que fue publicado en el Diario Oficial de la Unión Europea el 9 de Octubre, y supuso el inicio formal del concurso para la adjudicación de la ampliación. En Diciembre se emitió un informe técnico y en Enero de 2014 el segundo informe técnico que resuelve el concurso.

6.2. Péndulo

El aula de Cursos, una de las dos salas que estaban integradas en Péndulo, actualizó los ordenadores el 25 de Septiembre del 2009 sin que nosotros hayamos configurado Péndulo en los nuevos PCs, por lo que en la actualidad sigue sólo habiendo una sala de PCs operativa. Está pendiente por parte de los técnicos incluir nuevamente la segunda sala, se pretende además aprovechar esta circunstancia para actualizar el sistema operativo de Péndulo y pasarlo de arquitectura x86 a x86_64. Este intervención viene reforzada por el hecho de que el servidor que gestiona Péndulo es antiguo. Recordar que este servidor fue cedido por el CIDIR. Por las limitaciones de tiempo de los técnicos, este proyecto de actualización se relanza a finales de 2013 resolviendo ciertos problemas existentes en el nuevo servidor. Se espera que el nuevo Péndulo pueda estar operativo en 2014.

6.3. 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. Esta máquina se apagó a finales de Abril suspendiendo todo su servicio. El Servicio gestionó esta cesión y dio 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.

6.4. Recursos web

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

6.5. Eventos

El Servicio a participado en numerosos eventos y a impartido charlas y cursos. Estos se detallan en la sección 8 de forma más detallada.

6.6. 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

7. 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 1-12-2012 al 30-11-2013.

En el 2013 en el IZO-SGI han calculado 44 grupos o proyectos de investigación en las áreas de Física, Química, Mineralogía, Biología, Genética, Informática, Ingeniería, Matemáticas, Antropología, etc. Se han abierto 34 nuevas cuentas de usuario y 89 investigadores realizaron cálculos. En total se han consumido 432.553 días de cálculo, 10,4 millones de horas de cálculo.

7.1. Arina

Arina ha estado funcionando 24 horas 365 días al año y su uso durante el mismo ha sido de 407.880 días de cálculo (9,8 millones de horas) lo que supone un **83 %** de ocupación.

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 5.5 horas, similar al del 2012. Este año se han enviado a Arina 100.214 trabajos de los cuales 75.406 duraron más de 2 minutos. Realizamos la suposición de que la mayoría de los que dura-

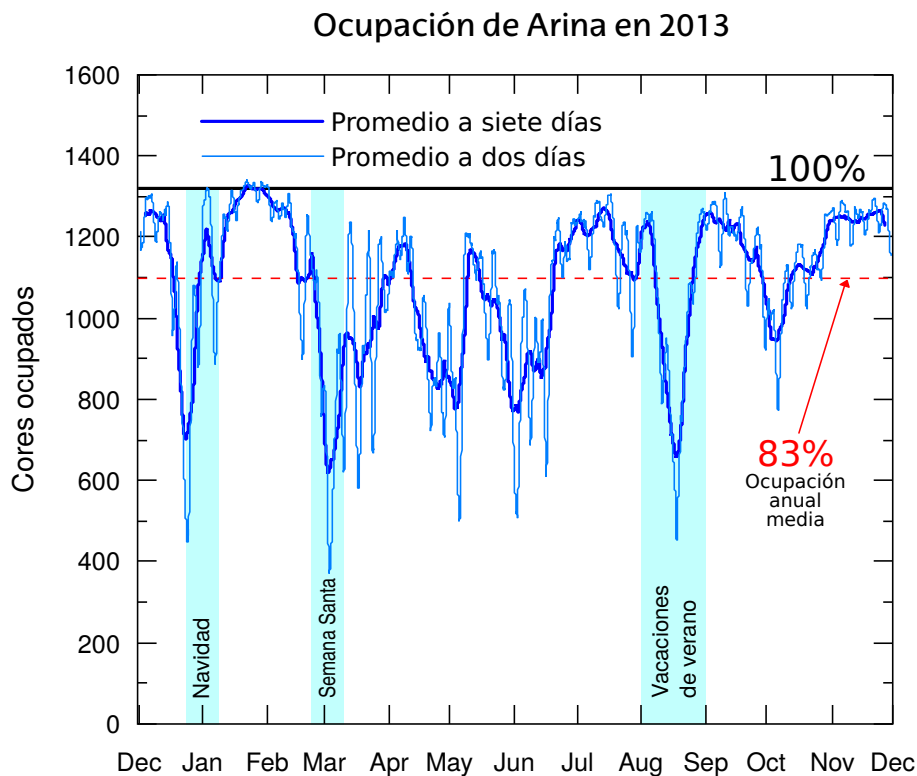


Figura 1: Uso de Arina en el año contable (periodo 12/2012-11/2013) donde se observa el gran uso de la infraestructura. Se toman medidas cada 15 minutos pero para eliminar ruido se ha promediado sobre dos días para eliminar la variación día/noche y cada 7 días para promediar igualmente el efecto del fin de semana.

ron 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 ha ascendido a 130 horas desde las 122 horas del año pasado.

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. Si bien en el 2012 hubo un aumento significativo del tiempo medio de espera por trabajo, aunque se mantuvo en unas razonables 5.2 horas, este año se ha mantenido en un valor similar. Así la ocupación ha crecido un 5 % respecto al 2013, desde el 79 al 83 %, mientras que el tiempo de espera ha crecido un 6 %.

7.1.1. Investigadores

Este año un total de 99 investigadores han calculado en el Arina. 50 han calculado más de 500 días. El mayor usuario empleó 84.344 días de cálculo, es el mismo que el año pasado que también usó un número de días del mismo orden. Por debajo, pero con más de 30 días de cómputo, hay 27 investigadores (igual que el año pasado) y con menos de

Distribución del uso de Arina por investigador

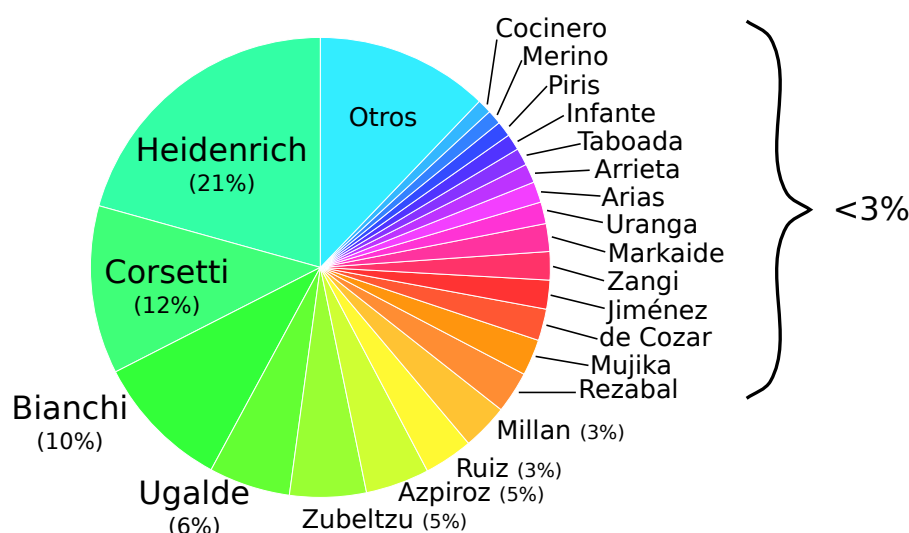


Figura 2: La distribución del tiempo de cálculo empleado en el cluster Arina por investigador muestra su utilidad a un amplio espectro desde grandes usuarios hasta los más puntuales. En otros están agrupados los investigadores con menos de 4000 días calculados.

30 días calculados hay 22 investigadores. En la figura 2 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por investigador y en la tabla 3 del apéndice A se pueden encontrar los datos completos.

47 grupos de investigación han calculado en Arina. 20 grupos han calculado intensivamente (más de 1.000 días de cálculo), el año pasado fueron 21. El grupo que más ha usado Arina ha empleado 84.344 días. 11 han sido los grupos que han calculado más de 100 días y 5 grupos entre 10 y 100 días. Finalmente tenemos 11 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.

Distribución del uso de Arina por grupos

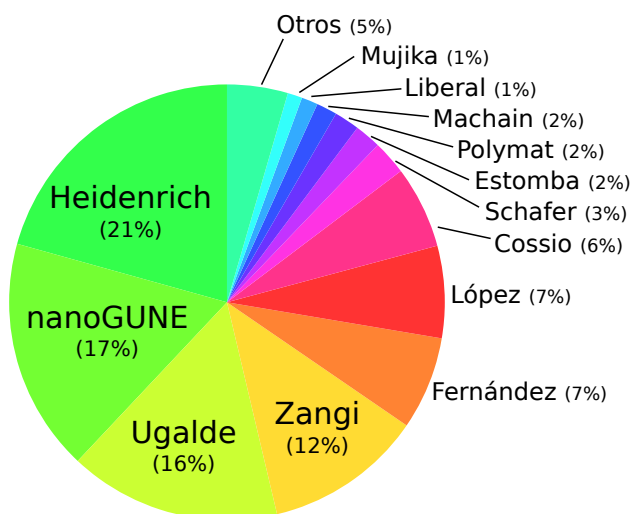


Figura 3: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por grupo. En otros están agrupados los grupos con menos de 4000 días calculados.

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 186.953 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 6 % 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 87 % del tiempo de cálculo usado (el 2012 fue un 80 %), seguido de Bizkaia con un 12 %. Los grupos que usan computación en Gasteiz son 2 y han empleado menos de un 1 % del cálculo de Arina. En la figura 5 se puede ver gráficamente la distribución del uso de Arina por campus.

7.1.2. Trabajos

Hemos analizado también los trabajos enviados a Arina. De estos, en una gran medida, podemos controlar que ejecutaban dado que o bien usaban alguna herramienta especial diseñada por el Servicio que permite identificar el trabajo, o alguna cola especial o porque ciertos programas 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

Distribución del uso de Arina por departamento

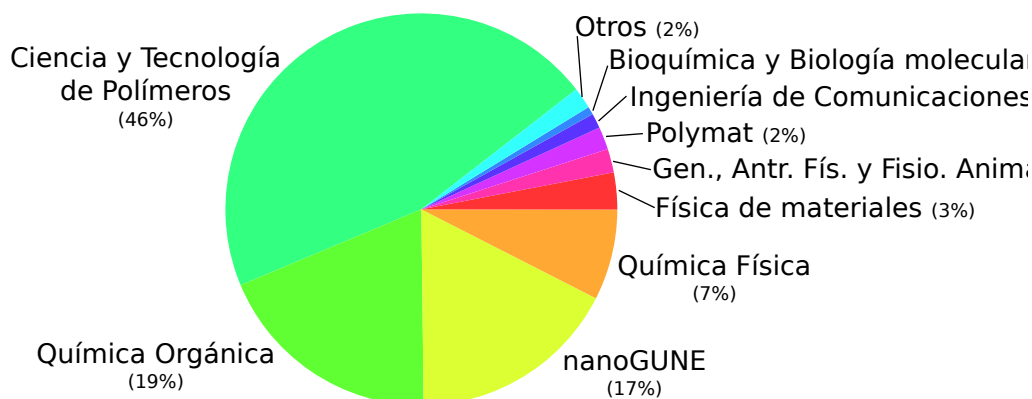


Figura 4: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por departamento.

Distribución del uso de Arina por provincia

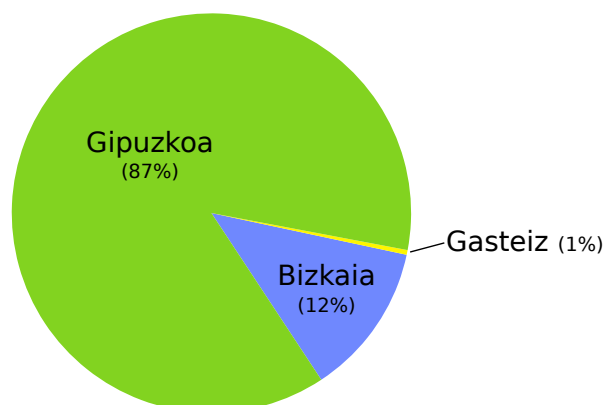


Figura 5: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por campus.

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 30 % 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 algo superior, 35 %. En segundo lugar está Plasma con un 20 %, que un programa creado por un investigador. Siesta baja su uso del 20 % en 2012 al 14 % en 2013. En cuarto lugar se mantiene Gromacs con el mismo uso. En 4º lugar aparece con LAMMPS debido también a su uso intensivo por el nanoGUNE. En la figura también se muestran ADF, Turbomole, CPMD y NWChem y no se muestran aquellos programas con un uso inferior al 1 %.

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 core, como se observa en la Figura 7. Evidentemente, con trabajos pequeños es más difícil acumular

tiempo de cálculo. Este tiempo está calculado como el tiempo que el trabajo ha estado calculando por el número de cores que emplea. Los trabajos que usan entre 1 y 10 días de cálculo suponen un 18 % de los días de cálculo. En el otro extremo los mayores trabajos que consumen más de 10 días de cómputo supone un 79 % 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.

Programas más usados en Arina

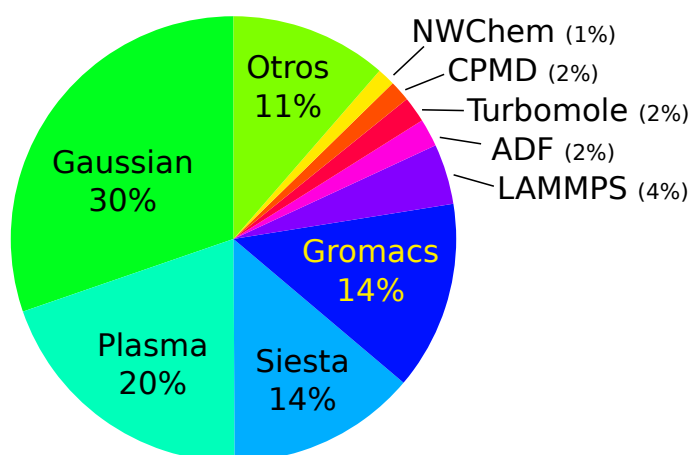


Figura 6: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por los programas.

Distribución del tiempo de cálculo en función del tiempo consumido por los trabajos

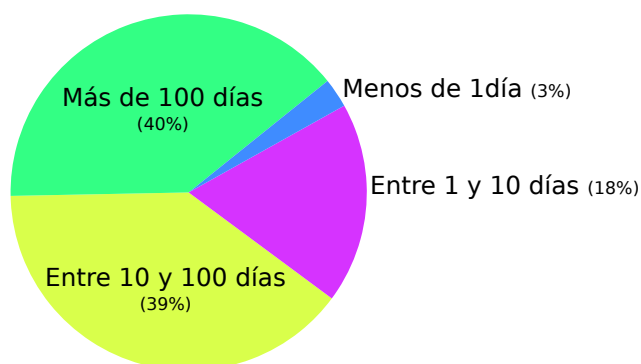


Figura 7: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por los trabajos en función del tiempo que ha usado cada uno.

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 y en la inmensa mayoría de

Distribución del tiempo de cálculo en función del número de cores

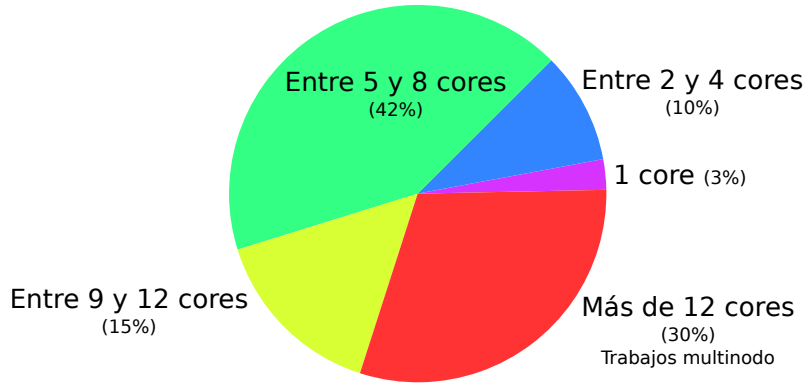


Figura 8: Distribución del tiempo de cálculo empleado en Arina por los trabajos en función del número de cores.

los casos se sigue esta recomendación. Es por ello que en los diferentes rangos mostrados en la figura 8 - entre 2 y 4, 5 y 8, etc. 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 de los investigadores lanza sus cálculos a 8 cores. Los trabajos en 12 cores han rondado el 15 %, 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. El 30 % del tiempo se emplea en trabajos que usan más de 12 cores, es decir, se han ejecutado en paralelo en más de 1 nodo. Nuevamente el que el cerca del 75 % de los trabajos se ejecute en 8 cores o más pone de manifiesto la necesidad ordenadores multiprocesador como Arina.

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

7.2. Péndulo

El uso de Péndulo ha sido mucho más reducido que el de Arina debido a sus características y presentamos unas estadísticas más sencillas. En particular se ha reducido en los dos últimos años debido a la antigüedad del hardware y el sistema operativo. En total se ha calculado en Péndulo 1.564 días repartidos en 4 grupos de investigación y los administradores (pruebas y benchmarks).

En la tabla 2 se muestra el tiempo empleado por cada grupo. Este uso representa aproximadamente un 5 % de todo el tiempo de cálculo disponible en Péndulo, que es más difícil de estimar y de llegar a valores de ocupación altos debido a que entre semana se interrumpe su uso durante el día y hay que acomodar los trabajos en la ventana nocturna.

Tabla 2: Uso de los grupos de investigación de Péndulo

Grupo	Días
jtjob	1.014,42
mrgfa	448,52
qorzz	91,77
qfegp	41,5
ieflm	3.29

8. 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 30 respuestas de investigadores del Servicio con una valoración media de 4,63 sobre 5 (9,26 sobre 10). De la encuesta podemos destacar todas las respuestas están entorno a la media de 4,6 , excepto la correspondiente a la valoración de las tarifas con la puntuación más baja de 3,3 sobre 5. En realidad 3,3 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.

Se recibieron varios comentarios (ver apéndice C), relacionadas con el coste, el tamaño de la infraestructura disponibles y la necesidad de ampliarla.

9. Participación en eventos y formación

9.1. Conferencias impartidas por los técnicos

Presentación Oral Jornada Supercomputación Científica en Euskadi 2013
Campus Ibaeta y por videoconferencia a los demás campuses. Marzo 2013

Presentación Oral From Pascaline to HPC @ UPV/EHU. A Brief Computer History
Second Workshop of the HPC-GA Project
BCAM. Bilbao Marzo 2013

Presentación Oral IZO-SGI SGiker, Scientific Computing at the UPV/EHU
Applied Fluid Mechanics Workshop 2013
23 de Abril 2013 University College of Engineering Vitoria-Gasteiz

Presentación Oral IZO-SGI SGiker HPC en la UPV/EHU
Asignatura de Informática: Sistemas de Cómputo Paralelo.
Facultad de Informática, Mayo de 2013.

Curso impartido a Tecnalía Linux y Paralelización
Marzo del 2013.

9.2. Eventos a los que se ha asistido

- El CPD del futuro disponible hoy. Enero 2013, San Sebastián.
- Jornada de Supercomputación en la UAM. Marzo 2013, Madrid.
- Fujitsu HPC Users Group meeting. Octubre 2013, Tenerife.

10. Actividad web

10.1. 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 5.924 veces por 3.017 usuarios únicos que han visitado 20.323 páginas. Se aprecia un descenso significativo en el número de visitas de la web, 5.924 respecto a las 9.899 del año 2012. En el apéndice B hay un resumen de las estadísticas de la web.

10.2. 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 47 posts y recibieron 24.613 visitas durante el 2013, con un incremento espectacular respecto a las 4.741 visitas del 2012, probablemente debido a la difusión del blog a través de twitter y facebook.

10.3. Lista de distribución

Se han enviado 44 anuncios y notificaciones a la lista de distribución del Servicio.

10.4. Twitter y Facebook

A principios de año se abrieron perfiles del servicio tanto en twitter (@izosgi) como en Facebook IZO-SGI, HPC at UPV/EHU. Contamos con 93 seguidores en twitter, y 35 en Facebook.

11. Bibliometría

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

11.1. Publicaciones obtenidas que citan el Servicio

Este año han agradecido al Servicio en sus publicaciones 87 artículos científicos y 4 tesis. En la gráfica 9 podemos ver la evolución del número de publicaciones desde la creación del IZO-SGI. Los datos concretos se encuentran en el apéndice D donde también se recogen las referencias de los artículos publicados en 2013. Se puede obtener más información en la página de publicaciones del Servicio y en el ResearchID del IZO-SGI (F-3072-2010).

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

Muestra de la multidisciplinaridad del IZO-SGI es la Figura 12, 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.

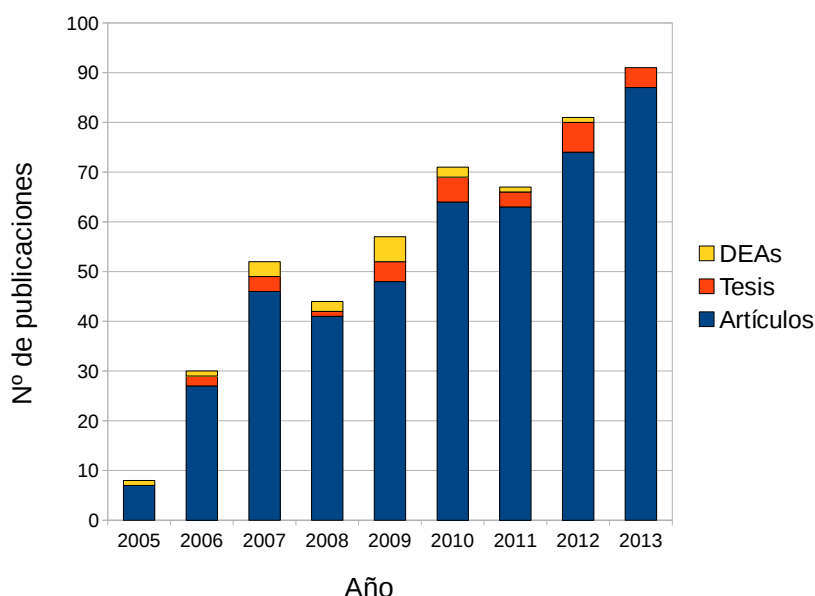


Figura 9: . Evolución del número de publicaciones.

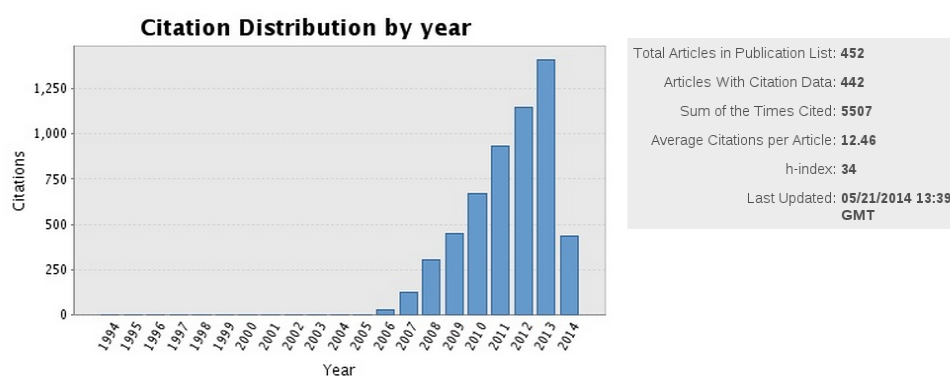


Figura 10: . Número de citas realizadas a artículos que citan al Servicio según la WOK.

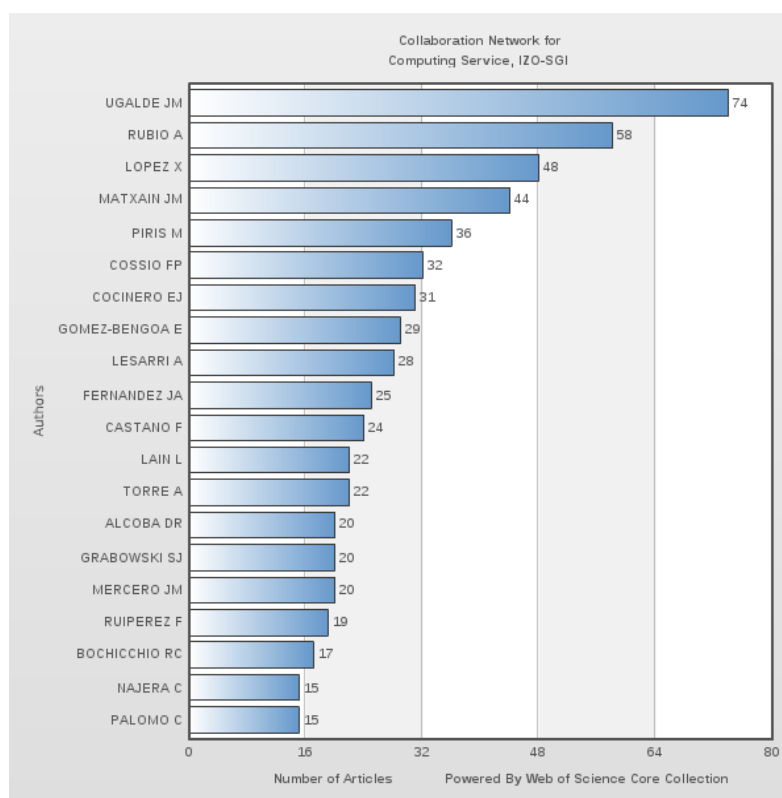


Figura 11: . Autores que más citan el Servicio según la WOK.

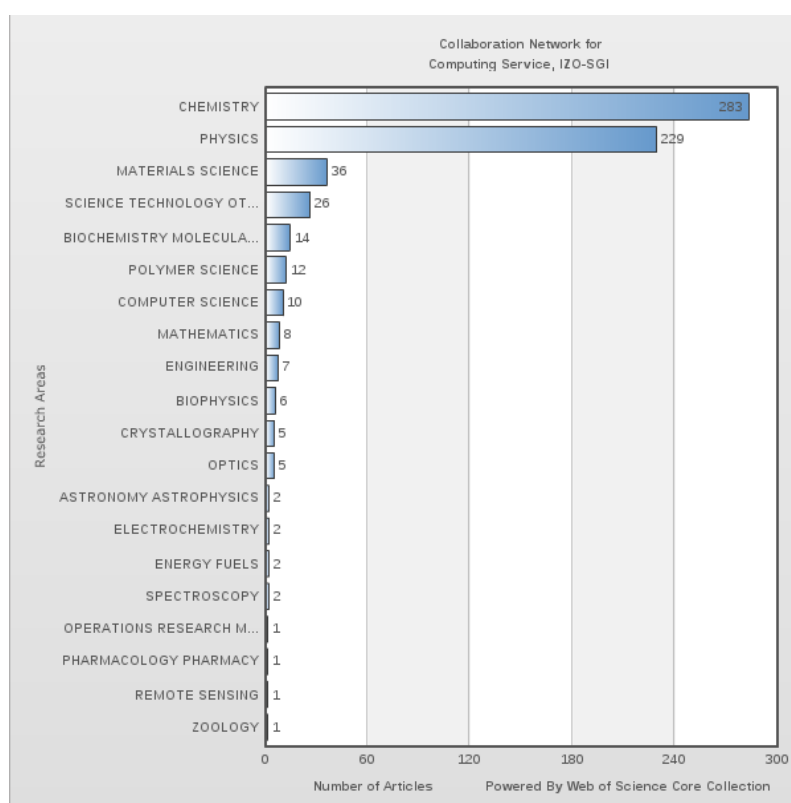


Figura 12: . Áreas de investigación en las que los usuarios han publicado artículos citando al Servicio.

12. Apéndices

A. Datos de uso de Arina

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

Investigador	Días	Investigador	Días
povhehea	84344.22	bcpremae	560.37
sckcorsf	48256.23	gaazareg	497.79
scpzuola	39194.69	poalolog	384.57
popugurj	23358.91	qoprualg	373.26
csazusej	21933.40	bcpfima	299.38
ciaazapj	18289.98	inpleibf	249.09
bckmimoj	13238.94	nanululr	241.25
pobmugoj	11935.52	ekpvebaa	187.65
pobrease	10387.71	qopcomof	171.18
kibderua	9081.88	nabzezem	165.30
povwawaj	8279.24	bcklogoi	165.27
govzaxxr	8108.43	qobmimuj	140.72
pmarkaide001	7970.40	quaduree	137.83
povrucif	7629.33	sckwankm	128.03
povrucif	6380.47	bavfepem	110.49
juranga004	6231.61	inpfegau	107.31
qoaarecl	5957.85	mapmemam	100.96
qoparaya	5461.87	qfpesmai	90.82
ieptapuj	4969.14	kiaurbao	87.21
pobinini	4649.38	mtpmafel	81.41
povpisim	4413.10	wmpetali	78.69
kibmeheg	4147.36	qfbloala	67.42
favcopee	4099.48	qfbbapj	66.16
qopgobee	3655.56	acblonou	57.97
quxbabai	3508.54	bcpcacaa	44.58
fabusgui	3161.22	wuppobam	40.01
qobconde	3067.86	etpmamap	36.96
cixesesb	2728.06	upetralanda001	33.97
pobrease	2717.66	qobfifib	19.03
bixcobum	2709.96	ccpyumej	15.52
sgkluqun	2544.52	eavmaloj	8.20
pobgrgrs	2165.72	qfbleoni	7.00
quxlegoa	2156.83	bcpitaia	6.60
favecvep	2021.11	baxrarat	5.93

continua en la siguiente página

continua de la página anterior

Investigador	Días	Investigador	Días
poplopex	1794.91	baxakake	5.73
pobcacad	1443.85	inpesalg	5.08
etpdihei	1198.94	kixbebej	3.71
qobsalae	1148.41	wabpepaa	3.67
wmbgavem	1147.46	poblaire	3.54
mapalmai	1085.55	ggplaarj	3.53
webogare	943.93	naamamap	3.05
kixsasal	932.16	gbpaljod	2.18
qfploarf	806.72	qfpgapae	1.43
iapgarue	773.10	mapgazug	0.96
waxpoxxy	747.76	weaasetm	0.88
bcpmeale	596.87	pobmabej	0.71
qfpmamoh	570.20	oipbibij	0.58
kibpapaa	569.09	qfxaldad	0.55
pobmelat	561.00	wapgoesj	0.37

Tabla 4: Días de cálculo empleados en Arina por los grupos de investigación.

Grupo	Días	Grupo	Días
poahh	84344.22	qffbe	596.87
nanogune	70599.24	bcdbu	560.37
pojui	64080.46	infi	414.36
qorzz	47872.21	qofpg	373.26
qfjfg	28193.11	mimam	343.96
poxlp	27883.39	ekjgm	187.65
qofcm	24889.06	lgsgi	140.72
potss	10387.71	wdaga	112.66
ggmer	7973.93	mtgfa	81.41
polymat	7629.33	qfala	67.42
potmb	6231.61	ccjla	57.97
ieflm	4969.14	wuebp	40.01
pomps	4413.10	ccbsa	15.52
qocpn	3674.58	eaizo	8.20
gbdga	2709.96	bcizb	6.60
qfila	1671.74	baeaa	5.93
arinadm	1504.93	injbi	5.08
etjfm	1235.91	gbmgi	2.18
qtftp	1186.51	qfegp	1.43
waets	1147.46	maegv	0.96
waars	879.46	weaga	0.88
iaegr	773.10	bull	0.58
injss	605.10	qfilp	0.55

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.

Visión general de público

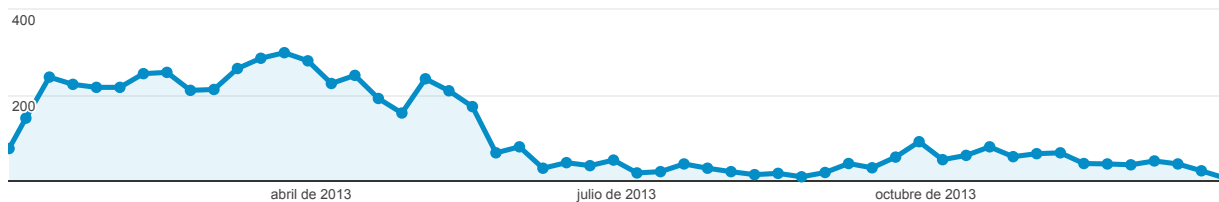
1/1/2013 - 31/12/2013



Todas las visitas
100,00%

Visión general

● Visitas



Visitas

5.924



Visitantes únicos

3.017



Número de páginas vistas

20.323



Páginas / Visita

3,43



Duración media de la visita

00:04:00



Porcentaje de rebote

48,80%

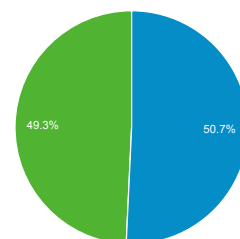


% de visitas nuevas

49,22%



■ Returning Visitor ■ New Visitor



Sistema operativo

	Visitas	% Visitas
1. Windows	3.421	57,75%
2. Linux	1.871	31,58%
3. Macintosh	326	5,50%
4. Android	184	3,11%
5. iOS	90	1,52%
6. (not set)	24	0,41%
7. BlackBerry	6	0,10%
8. Series40	1	0,02%
9. SymbianOS	1	0,02%

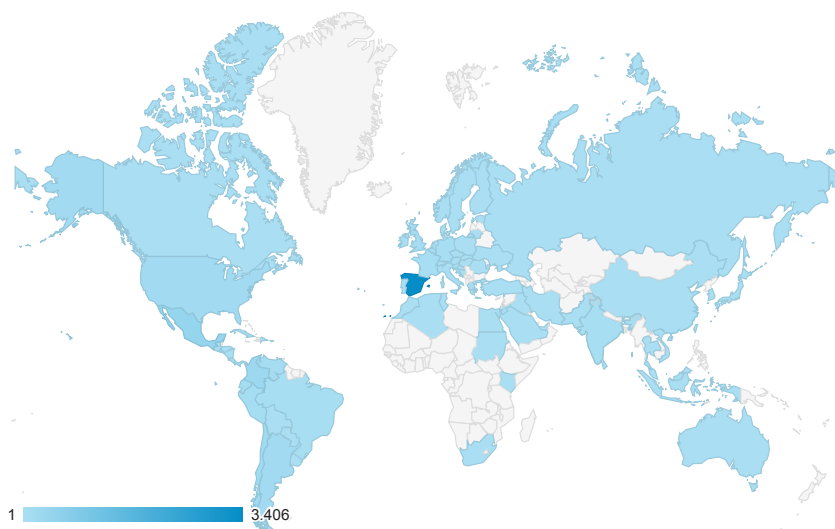
Ubicación

1/1/2013 - 31/12/2013

Todas las visitas
100,00%

Gráfico de visitas por ubicación

Resumen



País/territorio	Adquisición			Comportamiento			Conversiones		
	Visitas	% de visitas nuevas	Nuevas visitas	Porcentaje de rebote	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de conversiones del objetivo	Consecuciones de objetivos	Valor del objetivo
	5.924 % del total: 100,00% (5.924)	49,26% Promedio del sitio: 49,22% (0,07%)	2.918 % del total: 100,07% (2.916)	48,80% Promedio del sitio: 48,80% (0,00%)	3,43 Promedio del sitio: 3,43 (0,00%)	00:04:00 Promedio del sitio: 00:04:00 (0,00%)	0,00% Promedio del sitio: 0,00% (0,00%)	0 % del total: 0,00% (0)	0,00 \$ % del total: 0,00% (0,00 \$)
1. Spain	3.406 (57,49%)	23,61%	804 (27,55%)	29,86%	4,81	00:06:01	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
2. Mexico	437 (7,38%)	85,81%	375 (12,85%)	77,35%	1,48	00:01:00	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
3. Colombia	297 (5,01%)	90,57%	269 (9,22%)	82,49%	1,26	00:00:34	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
4. Chile	180 (3,04%)	93,33%	168 (5,76%)	73,89%	1,43	00:01:20	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
5. Argentina	173 (2,92%)	78,03%	135 (4,63%)	56,07%	2,76	00:02:54	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
6. United States	159 (2,68%)	86,79%	138 (4,73%)	79,25%	1,54	00:00:20	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
7. (not set)	138 (2,33%)	47,10%	65 (2,23%)	36,96%	2,30	00:01:09	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
8. Ecuador	126 (2,13%)	86,51%	109 (3,74%)	83,33%	1,28	00:01:51	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
9. Venezuela	113 (1,91%)	91,15%	103 (3,53%)	84,96%	1,15	00:00:46	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
10. Peru	103 (1,74%)	89,32%	92 (3,15%)	81,55%	1,15	00:00:49	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)

Ubicación

1/1/2013 - 31/12/2013

Todas las visitas
100,00%

Gráfico de visitas por ubicación

Resumen



Ciudad	Adquisición			Comportamiento			Conversiones		
	Visitas	% de visitas nuevas	Nuevas visitas	Porcentaje de rebote	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de conversiones del objetivo	Consecuciones de objetivos	Valor del objetivo
	5.924 % del total: 100,00% (5.924)	49,26% Promedio del sitio: 49,22% (0,07%)	2.918 % del total: 100,07% (2.916)	48,80% Promedio del sitio: 48,80% (0,00%)	3,43 Promedio del sitio: 3,43 (0,00%)	00:04:00 Promedio del sitio: 00:04:00 (0,00%)	0,00% Promedio del sitio: 0,00% (0,00%)	0 % del total: 0,00% (0)	0,00 \$ % del total: 0,00% (0,00 \$)
1. San Sebastian	1.211 (20,44%)	13,05%	158 (5,41%)	19,49%	4,96	00:05:05	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
2. Bilbao	993 (16,76%)	14,60%	145 (4,97%)	23,06%	6,05	00:08:18	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
3. (not set)	402 (6,79%)	41,79%	168 (5,76%)	47,51%	3,55	00:02:11	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
4. Vitoria-Gasteiz	210 (3,54%)	15,71%	33 (1,13%)	39,05%	3,65	00:07:37	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
5. Logrono	189 (3,19%)	2,65%	5 (0,17%)	6,88%	6,39	00:15:31	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
6. Madrid	144 (2,43%)	59,03%	85 (2,91%)	53,47%	2,36	00:01:31	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
7. Santiago	118 (1,99%)	92,37%	109 (3,74%)	72,88%	1,50	00:01:21	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
8. Bogota	116 (1,96%)	87,93%	102 (3,50%)	81,03%	1,28	00:00:14	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
9. Mexico City	107 (1,81%)	89,72%	96 (3,29%)	75,70%	1,37	00:00:48	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
10. Bahia Blanca	63 (1,06%)	53,97%	34 (1,17%)	26,98%	4,78	00:05:46	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)

Ubicación

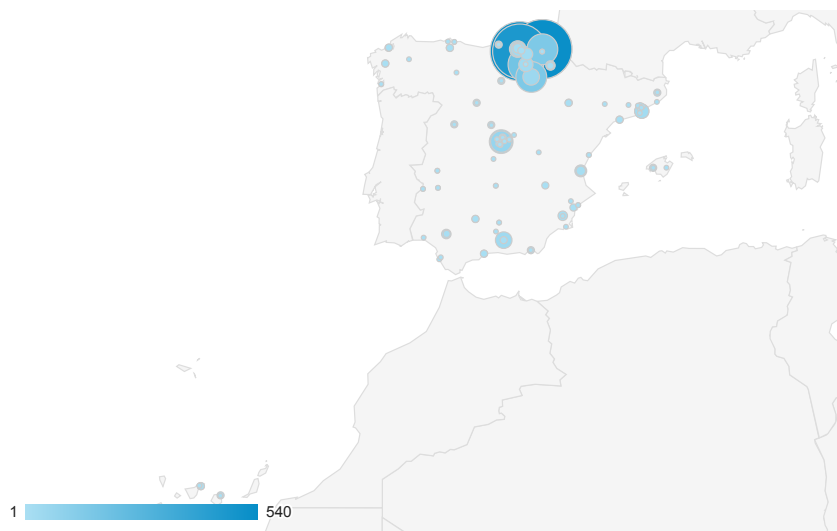
1/1/2013 - 31/12/2013

TODAS » PAÍS/TERRITORIO: Spain

Todas las visitas
57,49%

Gráfico de visitas por ubicación

Resumen



Ciudad	Adquisición			Comportamiento			Conversiones		
	Visitas	% de visitas nuevas	Nuevas visitas	Porcentaje de rebote	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de conversiones del objetivo	Consecuciones de objetivos	Valor del objetivo
	3.406 % del total: 57,49% (5.924)	23,61% Promedio del sitio: 49,22% (-52,04%)	804 % del total: 27,57% (2.916)	29,86% Promedio del sitio: 48,80% (-38,82%)	4,81 Promedio del sitio: 3,43 (40,27%)	00:06:01 Promedio del sitio: 00:04:00 (50,26%)	0,00% Promedio del sitio: 0,00% (0,00%)	0 % del total: 0,00% (0)	0,00 \$ % del total: 0,00% (0,00 \$)
1. San Sebastian	1.211 (35,55%)	13,05%	158 (19,65%)	19,49%	4,96	00:05:05	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
2. Bilbao	993 (29,15%)	14,60%	145 (18,03%)	23,06%	6,05	00:08:18	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
3. Vitoria-Gasteiz	210 (6,17%)	15,71%	33 (4,10%)	39,05%	3,65	00:07:37	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
4. Logrono	189 (5,55%)	2,65%	5 (0,62%)	6,88%	6,39	00:15:31	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
5. (not set)	186 (5,46%)	17,20%	32 (3,98%)	40,32%	5,41	00:03:36	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
6. Madrid	144 (4,23%)	59,03%	85 (10,57%)	53,47%	2,36	00:01:31	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
7. Barcelona	54 (1,59%)	85,19%	46 (5,72%)	66,67%	1,65	00:00:41	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
8. Granada	42 (1,23%)	73,81%	31 (3,86%)	66,67%	2,21	00:01:24	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
9. Las Arenas	37 (1,09%)	43,24%	16 (1,99%)	48,65%	3,38	00:02:41	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
10. Leioa	29 (0,85%)	13,79%	4 (0,50%)	27,59%	5,45	00:03:00	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)

Visión general

1/1/2013 - 31/12/2013

Todas las visitas
100,00%

Explorador

Resumen

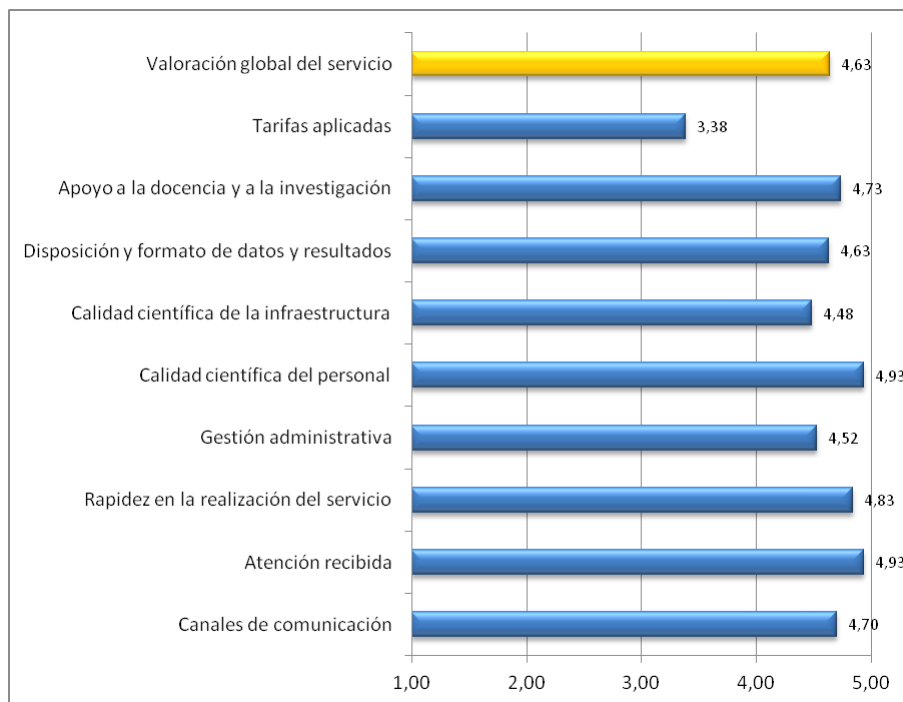
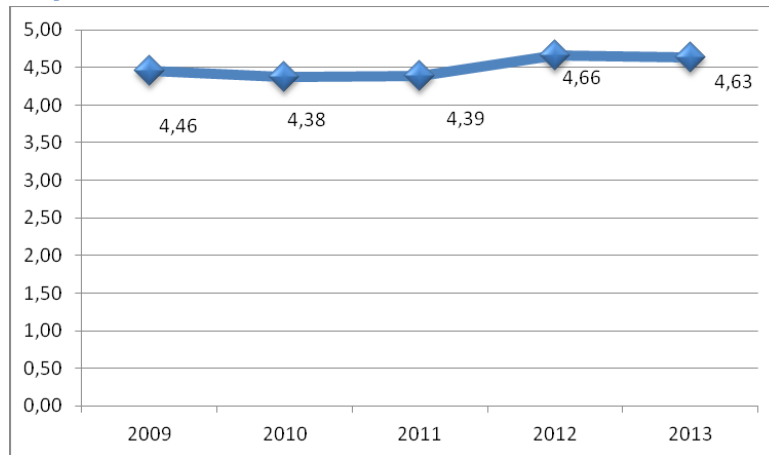


Categoría de dispositivo	Adquisición			Comportamiento			Conversiones		
	Visitas	% de visitas nuevas	Nuevas visitas	Porcentaje de rebote	Páginas / Visita	Duración media de la visita	Porcentaje de conversiones del objetivo	Consecuciones de objetivos	Valor del objetivo
	5.924 % del total: 100,00% (5.924)	49,26% Promedio del sitio: 49,22% (0,07%)	2.918 % del total: 100,07% (2.916)	48,80% Promedio del sitio: 48,80% (0,00%)	3,43 Promedio del sitio: 3,43 (0,00%)	00:04:00 Promedio del sitio: 00:04:00 (0,00%)	0,00% Promedio del sitio: 0,00% (0,00%)	0 % del total: 0,00% (0)	0,00 \$ % del total: 0,00% (0,00 \$)
1. desktop	5.642 (95,24%)	49,79%	2.809 (96,26%)	49,26%	3,47	00:04:08	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
2. mobile	219 (3,70%)	35,62%	78 (2,67%)	35,16%	2,68	00:01:44	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)
3. tablet	63 (1,06%)	49,21%	31 (1,06%)	55,56%	2,10	00:01:04	0,00%	0 (0,00%)	0,00 \$ (0,00%)

C. Encuesta de satisfacción del IZO-SGI

La puntuación está en una escala de 0 a 5.

Informática Aplicada a la Investigación - Cálculo Científico (30 respuestas)



Observaciones realizadas:

- Beste unibertsitateekin konparatuta, oso garestia da. (**Responsable de proyecto, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Eutsi oraingokoari. (**Catedrático de Universidad, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Las tarifas han mejorado pero aun así, en estos tiempos de crisis, suponen un gasto considerable. (**Profesor, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- los dos técnicos con los que trato (Edu y Txema) son muy amables y eficientes, siempre dispuestos a ayudar. Para mí, lo mejor de este servicio. (**Profesor, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- Tarifas más económicas. En determinados momentos la espera es larga. (**Profesor, usuario habitual, más de una vez al mes**).
- To enlarge the cluster - there are many users. (**Ronen Zangi, 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	Año	Publicaciones
2013	87	2008	41
2012	74	2007	46
2011	63	2006	27
2010	64	2005	7
2009	48		

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

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

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

Año	DEAs	Año	DEAs
2013	0	2009	5
2012	1	2008	1
2011	1	2007	3
2010	2	2006	1

D.2. Publicaciones recogidas

-
- [1] E. Aguado, I. Leon, J. Millan, E. J. Cocinero, S. Jaqx, A. M. Rijs, A. Lesarri, and J. A. Fernandez. Unraveling the benzocaine-receptor interaction at molecular level using mass-resolved spectroscopy. *Journal of Physical Chemistry B*, 117(43):13472--13480, 2013.
- [2] M. Aguirre, M. Paulis, and J. R. Leiza. Uv screening clear coats based on encapsulated ceo2 hybrid latexes. *Journal of Materials Chemistry A*, 1(9):3155--3162, 2013.
- [3] D. R. Alcoba, L. Lain, A. Torre, O. B. Ona, and E. Chamorro. Fukui and dual-descriptor matrices within the framework of spin-polarized density functional theory. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(24):9594--9604, 2013.
- [4] D. R. Alcoba, A. Torre, L. Lain, G. E. Massaccesi, and O. B. Ona. Seniority number in spin-adapted spaces and compactness of configuration interaction wave functions. *Journal of Chemical Physics*, 139(8):6, 2013.
- [5] U. Aldasoro, L. F. Escudero, M. Merino, and G. Perez. An algorithmic framework for solving large-scale multistage stochastic mixed 0-1 problems with nonsymmetric scenario trees. part ii: Parallelization. *Computers & Operations Research*, 40(12):2950--2960, 2013.
- [6] Concepcion Alonso, Maria Gonzalez, Maria Fuertes, Gloria Rubiales, Jose Maria Ezpeleta, and Francisco Palacios. Synthesis of fluorinated beta-aminophosphonates and gamma-lactams. *Journal of Organic Chemistry*, 78(8):3858--3866, 2013.
- [7] A. Arrieta, M. C. de la Torre, A. de Cozar, M. A. Sierra, and F. P. Cossio. Computational chemistry; a useful tool for the chemical synthesis of complex molecules, heterocycles and catalysts. *Synlett*, (5):535--549, 2013.
- [8] Bertol Arrieta and Iñaki Alegria. Euskararako koma-zuzentzaile baterantz. *Ekaia*, 26, 2013.
- [9] A. Avila, R. Chinchilla, E. Gomez-Bengoa, and C. Najera. Enantioselective michael addition of aldehydes to maleimides organocatalysed by chiral 1,2-diamines: an experimental and theoretical study. *Tetrahedron-Asymmetry*, 24(23):1531--1535, 2013.
- [10] A. Avila, R. Chinchilla, E. Gomez-Bengoa, and C. Najera. Enantioselective synthesis of succinimides by michael addition of aldehydes to maleimides organocatalyzed by chiral primary amine-guanidines. *European Journal of Organic Chemistry*, 2013(23):5085--5092, 2013.
- [11] M. R. Azani, A. P. Paz, C. Hermosa, G. Givaja, J. Gomez-Herrero, R. Mas-Balleste, F. Zamora, and A. Rubio. The isolation of single mmx chains from solution: Unravelling the assembly-disassembly process. *Chemistry-a European Journal*, 19(46):15518--15529, 2013.
- [12] J. M. Azpiroz, J. M. Matxain, I. Infante, X. Lopez, and J. M. Ugalde. A dft/tddft study on the optoelectronic properties of the amine-capped magic (cdse)(13) nanocluster. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(26):10996--11005, 2013.
- [13] J. M. Azpiroz, D. Moreno, A. Ramirez-Manzanares, J. M. Ugalde, M. A. Mendez-Rojas, and G. Merino. Heavy periodane. *Journal of Molecular Modeling*, 19(5):1953--1958, 2013.

-
- [14] C. S. Barry, E. J. Cocinero, P. Carcabal, D. P. Gamblin, E. C. Stanca-Kaposta, S. M. Remmert, M. C. Fernandez-Alonso, S. Rudic, J. P. Simons, and B. G. Davis. 'naked' and hydrated conformers of the conserved core pentasaccharide of n-linked glycoproteins and its building blocks. *Journal of the American Chemical Society*, 135(45):16895--16903, 2013.
- [15] C. Bianchi and R. Zangi. Base-flipping propensities of unmethylated, hemimethylated, and fully methylated cpg sites. *Journal of Physical Chemistry B*, 117(8):2348--2358, 2013.
- [16] C. Bianchi and R. Zangi. Uhrf1 discriminates against binding to fully-methylated cpg-sites by steric repulsion. *Biophysical Chemistry*, 171:38--45, 2013.
- [17] A. Bonnefond, M. Micusik, M. Paulis, J. R. Leiza, R. F. A. Teixeira, and S. A. F. Bon. Morphology and properties of waterborne adhesives made from hybrid polyacrylic/montmorillonite clay colloidal dispersions showing improved tack and shear resistance. *Colloid and Polymer Science*, 291(1):167--180, 2013.
- [18] A. Bonnefond, M. Paulis, S. A. F. Bon, and J. R. Leiza. Surfactant-free miniemulsion polymerization of n-ba/s stabilized by nammt: Films with improved water resistance. *Langmuir*, 29(7):2397--2405, 2013.
- [19] P. Carcabal, E. J. Cocinero, and J. P. Simons. Binding energies of micro-hydrated carbohydrates: measurements and interpretation. *Chemical Science*, 4(4):1830--1836, 2013.
- [20] L. M. Castello, C. Najera, J. M. Sansano, O. Larranaga, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Phosphoramidite-cu(otf)(2) complexes as chiral catalysts for 1,3-dipolar cycloaddition of lminoesters and nitroalkenes. *Organic Letters*, 15(12):2902--2905, 2013.
- [21] E. J. Cocinero, A. Lesarri, P. Ecija, A. Cimas, B. G. Davis, F. J. Basterretxea, J. A. Fernandez, and F. Castano. Free fructose is conformationally locked. *Journal of the American Chemical Society*, 135(7):2845--2852, 2013.
- [22] J. Cornella, E. Gomez-Bengoa, and R. Martin. Combined experimental and theoretical study on the reductive cleavage of inert c-o bonds with silanes: Ruling out a classical ni(0)/ni(ii) catalytic couple and evidence for ni(i) intermediates. *Journal of the American Chemical Society*, 135(5):1997--2009, 2013.
- [23] F. Corsetti, E. Artacho, J. M. Soler, S. S. Alexandre, and M. V. Fernandez-Serra. Room temperature compressibility and diffusivity of liquid water from first principles. *Journal of Chemical Physics*, 139(19):10, 2013.
- [24] F. Corsetti, M. V. Fernandez-Serra, J. M. Soler, and E. Artacho. Optimal finite-range atomic basis sets for liquid water and ice. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 25(43):10, 2013.
- [25] E. Degrandi-Contraires, A. Lopez, Y. Reyes, J. M. Asua, and C. Creton. High-shear-strength waterborne polyurethane/acrylic soft adhesives. *Macromolecular Materials and Engineering*, 298(6):612--623, 2013.
- [26] J. Demaison, M. K. Jahn, E. J. Cocinero, A. Lesarri, J. U. Grabow, J. C. Guillemin, and H. D. Rudolph. Accurate semiexperimental structure of 1,3,4-oxadiazole by the mixed estimation method. *Journal of Physical Chemistry A*, 117(10):2278--2284, 2013.
- [27] S. Diosdado, J. Etxabe, J. Izquierdo, A. Landa, A. Mielgo, I. Olaizola, R. Lopez, and C. Palomo. Catalytic enantioselective synthesis of tertiary thiols from 5h-thiazol-4-ones and nitroolefins: Bifunctional ureidopeptide-based bronsted base catalysis. *Angewandte Chemie-International Edition*, 52(45):11846--11851, 2013.

- [28] P. Ecija, E. J. Cocinero, A. Lesarri, F. J. Basterretxea, J. A. Fernandez, and F. Castano. The distorted tropane of scopoline. *Chemphyschem*, 14(9):1830--1835, 2013.
- [29] P. Ecija, E. J. Cocinero, A. Lesarri, J. A. Fernandez, W. Caminati, and F. Castano. Rotational spectroscopy of antipyretics: Conformation, structure, and internal dynamics of phenazone. *Journal of Chemical Physics*, 138(11), 2013.
- [30] B. Escribano, E. Akhmatskaya, and J. I. Mujika. Combining stochastic and deterministic approaches within high efficiency molecular simulations. *Central European Journal of Mathematics*, 11(4):787--799, 2013.
- [31] V. Estevez and K. V. Gusliencko. Angular dependence of the magnetoresistance in nanoparticle arrays. *Nanoscale*, 5(22):11066--11070, 2013.
- [32] M. A. Garcia, C. Vietz, F. Ruiperez, M. D. Morse, and I. Infante. Electronic spectroscopy and electronic structure of diatomic irsi. *Journal of Chemical Physics*, 138(15):9, 2013.
- [33] Enrique Gomez-Bengoa, Jesus M. Garcia, Sandra Jimenez, Irati Lapuerta, Antonia Mielgo, Jose M. Odriozola, Itziar Otazo, Jesus Razkin, Inaki Urruzuno, Silvia Vera, Mikel Oiarbide, and Claudio Palomo. Asymmetric synthesis of propargylic alcohols via aldol reaction of aldehydes with ynals promoted by prolinol ether-transition metal-bronsted acid cooperative catalysis. *Chemical Science*, 4(8):3198--3204, 2013.
- [34] E. Gomez-Torres, D. A. Alonso, E. Gomez-Bengoa, and C. Najera. Enantioselective synthesis of succinimides by michael addition of 1,3-dicarbonyl compounds to maleimides catalyzed by a chiral bis(2-aminobenzimidazole) organocatalyst. *European Journal of Organic Chemistry*, (8):1434--1440, 2013.
- [35] P. Gonzalez-Navarrete, M. Calatayud, J. Andres, F. Ruiperez, and D. Roca-Sanjuan. Toward an understanding of the hydrogenation reaction of mo₂ gas-phase clusters (m = ti, zr, and hf). *Journal of Physical Chemistry A*, 117(25):5354--5364, 2013.
- [36] R. W. Gora, M. Maj, and S. J. Grabowski. Resonance-assisted hydrogen bonds revisited. resonance stabilization vs. charge delocalization. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(7):2514--2522, 2013.
- [37] Q. Gou, G. Feng, L. Evangelisti, M. Vallejo-Lopez, A. Lesarri, E. J. Cocinero, and W. Caminati. Non-bonding interactions and internal dynamics in ch₂f₂ center dot center dot center dot h₂co: a rotational and model calculations study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(18):6714--6718, 2013.
- [38] S. J. Grabowski. Cooperativity of hydrogen and halogen bond interactions. *Theoretical Chemistry Accounts*, 132(4), 2013.
- [39] S. J. Grabowski. Dihydrogen bond and x-h center dot center dot center dot sigma interaction as sub-classes of hydrogen bond. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 26(6):452--459, 2013.
- [40] S. J. Grabowski. Hydrogen and halogen bonds are ruled by the same mechanisms. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(19):7249--7259, 2013.
- [41] S. J. Grabowski. Non-covalent interactions - q taim and nbo analysis. *Journal of Molecular Modeling*, 19(11):4713--4721, 2013.
- [42] S. J. Grabowski. sigma-hole bond versus hydrogen bond: From tetravalent to pentavalent n, p, and as atoms. *Chemistry-a European Journal*, 19(43):14600--14611, 2013.
- [43] S. J. Grabowski, I. Alkorta, and J. Elguero. Complexes between dihydrogen and amine, phosphine, and arsine derivatives. hydrogen bond versus pnictogen interaction. *Journal of Physical Chemistry A*, 117(15):3243--3251, 2013.

-
- [44] A. Hassan, T. C. Dinadayalane, S. J. Grabowski, and J. Leszczynski. Structural, energetic, spectroscopic and qtaim analyses of cation- π interactions involving mono- and bi-cyclic ring fused benzene systems. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(48):20839--20856, 2013.
- [45] I. Haykal, L. Margules, T. R. Huet, R. A. Motyienko, P. Ecija, E. J. Cocinero, F. Basterretxea, J. A. Fernandez, F. Castano, A. Lesarri, J. C. Guillemin, B. Tercero, and J. Cernicharo. The cm-, mm-, and sub-mm-wave spectrum of allyl isocyanide and radioastromical observations in orion kl and the sgrb2 line surveys. *Astrophysical Journal*, 777(2):8, 2013.
- [46] A. Heidenreich, I. Last, S. Ron, and J. Jortner. Conversion of laser energy to nuclear energy driven by coulomb explosion of nanostructures. *Molecular Physics*, 111(14-15):2108--2117, 2013.
- [47] C. Hogan, M. Palummo, J. Gierschner, and A. Rubio. Correlation effects in the optical spectra of porphyrin oligomer chains: Exciton confinement and length dependence. *Journal of Chemical Physics*, 138(2), 2013.
- [48] S. M. Huber, J. D. Scanlon, E. Jimenez-Izal, J. M. Ugalde, and I. Infante. On the directionality of halogen bonding. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(25):10350--10357, 2013.
- [49] Klavdija Kutnar, Aleksander Malnic, Luis Martinez, and Dragan Marusic. Quasi m-cayley strongly regular graphs. *Journal of the Korean Mathematical Society*, 50(6):1199--1211, 2013.
- [50] O. Lakuntza, J. M. Matxain, F. Ruiperez, J. M. Ugalde, and P. B. Armentrout. Quantum chemical study of the reactions between pd^+/pt^+ and $\text{h}_2\text{o}/\text{h}_2\text{s}$. *Chemistry-a European Journal*, 19(27):8832--8838, 2013.
- [51] O. Larranaga, A. de Cozar, F. M. Bickelhaupt, R. Zangi, and F. P. Cossio. Aggregation and cooperative effects in the aldol reactions of lithium enolates. *Chemistry-a European Journal*, 19(41):13761--13773, 2013.
- [52] Isidore Lasta, Shlomo Rona, Andreas Heidenreich, and Joshua Jortner. High power laser science and engineering. *High Power Laser Science and Engineering* /, 1(02), 2013.
- [53] I. Leon, E. J. Cocinero, A. M. Rijs, J. Millan, E. Alonso, A. Lesarri, and J. A. Fernandez. Formation of water polyhedrons in propofol-water clusters. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(2):568--575, 2013.
- [54] I. Leon, J. Millan, E. J. Cocinero, A. Lesarri, and J. A. Fernandez. Magic numbers in the solvation of the propofol dimer. *Chemphyschem*, 14(8):1558--1562, 2013.
- [55] I. Leon, J. Millan, E. J. Cocinero, A. Lesarri, and J. A. Fernandez. Shaping micelles: The interplay between hydrogen bonds and dispersive interactions. *Angewandte Chemie-International Edition*, 52(30):7772--7775, 2013.
- [56] I. Leon, J. Millan, E. J. Cocinero, A. Lesarri, and J. A. Fernandez. Transition from planar to nonplanar hydrogen bond networks in the solvation of aromatic dimers: Propofol(2)-(h₂o)(2-4). *Journal of Physical Chemistry A*, 117(16):3396--3404, 2013.
- [57] I. Leon, R. Montero, A. Longarte, and J. A. Fernandez. Ir mass-resolved spectroscopy of complexes without chromophore: Cyclohexanol center dot (h₂o)(n), n=1-3 and cyclohexanol dimer. *Journal of Chemical Physics*, 139(17):10, 2013.

- [58] A. Lopez, Y. Reyes, E. Degrandi-Contraire, E. Canetta, C. Creton, and J. M. Asua. Waterborne hybrid polymer particles: Tuning of the adhesive performance by controlling the hybrid microstructure. *European Polymer Journal*, 49(6):1541--1552, 2013.
- [59] A. Lopez, Y. Reyes, E. Degrandi-Contraire, E. Canetta, C. Creton, J. L. Keddie, and J. M. Asua. Simultaneous free-radical and addition miniemulsion polymerization: Effect of the chain transfer agent on the microstructure of polyurethane-acrylic pressure-sensitive adhesives. *Macromolecular Materials and Engineering*, 298(1):53--66, 2013.
- [60] M. Martin-Rodriguez, L. M. Castello, C. Najera, J. M. Sansano, O. Larranaga, A. de Cozar, and F. P. Cossio. Synthetic scope and dft analysis of the chiral binap-gold(i) complex-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition of azlactones with alkenes. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, 9:2422--2433, 2013.
- [61] J. M. Matxain, F. Ruiperez, I. Infante, X. Lopez, J. M. Ugalde, G. Merino, and M. Piris. Communication: Chemical bonding in carbon dimer isovalent series from the natural orbital functional theory perspective. *Journal of Chemical Physics*, 138(15):4, 2013.
- [62] J. M. Matxain, F. Ruiperez, and M. Piris. Computational study of be-2 using piris natural orbital functionals. *Journal of Molecular Modeling*, 19(5):1967--1972, 2013.
- [63] D. Moreno, G. Martinez-Guajardo, A. Diaz-Celaya, J. M. Mercero, R. de Coss, N. Perez-Peralta, and G. Merino. Re-examination of the c6li6 structure: To be, or not to be symmetric. *Chemistry-a European Journal*, 19(38):12668--12672, 2013.
- [64] J. I. Mujika and J. M. Matxain. Theoretical study of the ph-dependent antioxidant properties of vitamin c. *Journal of Molecular Modeling*, 19(5):1945--1952, 2013.
- [65] J. I. Mujika, J. Uranga, and J. M. Matxain. Computational study on the attack of (oh)-o-center dot radicals on aromatic amino acids. *Chemistry-a European Journal*, 19(21):6862--6873, 2013.
- [66] J. M. Oliva, D. R. Alcoba, L. Lain, and A. Torre. Electronic structure studies of diradicals derived from closo-carboranes. *Theoretical Chemistry Accounts*, 132(3), 2013.
- [67] A. Paladino and R. Zangi. Propensities for loop structures of rna & dna backbones. *Biophysical Chemistry*, 180:110--118, 2013.
- [68] Antonella Paladino and Ronen Zangi. Ribose 2'-hydroxyl groups stabilize rna hairpin structures containing gcuua pentaloop. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 9(2):1214--1221, 2013.
- [69] E. Palao, A. R. Agarrabeitia, J. Banuelos-Prieto, T. A. Lopez, I. Lopez-Arbeloa, D. Armesto, and M. J. Ortiz. 8-functionalization of alkyl-substituted-3,8-dimethyl bodipys by knoevenagel condensation. *Organic Letters*, 15(17):4454--4457, 2013.
- [70] I. Pena, E. J. Cocinero, C. Cabezas, A. Lesarri, S. Mata, P. Ecija, A. M. Daly, A. Cimas, C. Bermudez, F. J. Basterretxea, S. Blanco, J. A. Fernandez, J. C. Lopez, F. Castano, and J. L. Alonso. Six pyranoside forms of free 2-deoxy-d-ribose. *Angewandte Chemie-International Edition*, 52(45):11840--11845, 2013.
- [71] M. Piris. Bounds on the pnof5 natural geminal occupation numbers. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1003:123--126, 2013.
- [72] M. Piris. Interpair electron correlation by second-order perturbative corrections to pnof5. *Journal of Chemical Physics*, 139(6):7, 2013.

-
- [73] M. Piris, J. M. Matxain, and X. Lopez. The intrapair electron correlation in natural orbital functional theory. *Journal of Chemical Physics*, 139(23):9, 2013.
- [74] M. Piris, J. M. Matxain, X. Lopez, and J. M. Ugalde. The one-electron picture in the piris natural orbital functional 5 (pnof5). *Theoretical Chemistry Accounts*, 132(2), 2013.
- [75] Mario Piris. A natural orbital functional based on an explicit approach of the two-electron cumulant. *International Journal of Quantum Chemistry*, 113(5):620--630, 2013.
- [76] Y. Reyes, P. J. Peruzzo, M. Fernandez, M. Paulis, and J. R. Leiza. Encapsulation of clay within polymer particles in a high-solids content aqueous dispersion. *Langmuir*, 29(31):9849--9856, 2013.
- [77] E. Rezabal, F. Ruiperez, and J. M. Ugalde. Quantum chemical study of the catalytic activation of methane by copper oxide and copper hydroxide cations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(4):1148--1153, 2013.
- [78] E. Rezabal and T. Schafer. First principle approach to solvation by methylimidazolium-based ionic liquids. *Journal of Physical Chemistry B*, 117(2):553--562, 2013.
- [79] F. Ruiperez, G. Merino, J. M. Ugalde, and I. Infante. Molecules with high bond orders and ultrashort bond lengths: Cru, mou, and wu. *Inorganic Chemistry*, 52(6):2838--2843, 2013.
- [80] F. Ruiperez, M. Piris, J. M. Ugalde, and J. M. Matxain. The natural orbital functional theory of the bonding in cr-2, mo-2 and w-2. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(6):2055--2062, 2013.
- [81] Rosario Maria San Millan, Ilargi Martinez-Ballesteros, Aitor Rementeria, Javier Garraizar, and Joseba Bikandi. Online exercise for the design and simulation of pcr and pcr-rflp experiments. *BMC research notes*, 6(-):513, 2013.
- [82] E. S. Sebastian, T. Zimmerman, A. Zubia, Y. Vara, E. Martin, F. Sirockin, A. Dejaegere, R. H. Stote, X. Lo, D. Pantoja-Uceda, M. Valcarcel, L. Mendoza, F. Vidal-Vanaclocha, F. P. Cossio, and F. J. Blanco. Design, synthesis, and functional evaluation of leukocyte function associated antigen-1 antagonists in early and late stages of cancer development. *Journal of Medicinal Chemistry*, 56(3):735--747, 2013.
- [83] L. F. Seivane, H. Barron, S. Botti, M. A. L. Marques, A. Rubio, and X. Lopez-Lozano. Atomic and electronic properties of quasi-one-dimensional mos2 nanowires. *Journal of Materials Research*, 28(2):240--249, 2013.
- [84] E. C. Stanca-Kaposta, P. Carcabal, E. J. Cocinero, P. Hurtado, and J. P. Simons. Carbohydrate-aromatic interactions: Vibrational spectroscopy and structural assignment of isolated monosaccharide complexes with p-hydroxy toluene and n-acetyl l-tyrosine methylamide. *Journal of Physical Chemistry B*, 117(27):8135--8142, 2013.
- [85] M. G. Vergniory, T. V. Menshchikova, S. V. Ereameev, and E. V. Chulkov. Bulk and surface electronic structure of snbi4te7 topological insulator. *Applied Surface Science*, 267:146--149, 2013.
- [86] P. Vins, M. Vermachova, P. Drasar, M. del Barrio, C. Jarne, V. L. Cebolla, A. de Cozar, R. Zangi, and F. P. Cossio. Size and branching effects on the fluorescence of benzylic dendrimers possessing one apigenin fluorophore at the core. *Tetrahedron*, 69(48):10361--10368, 2013.

- [87] J. Zubeltzu, A. Chuvilin, F. Corsetti, A. Zurutuza, and E. Artacho. Knock-on damage in bilayer graphene: Indications for a catalytic pathway. *Physical Review B*, 88(24):11, 2013.