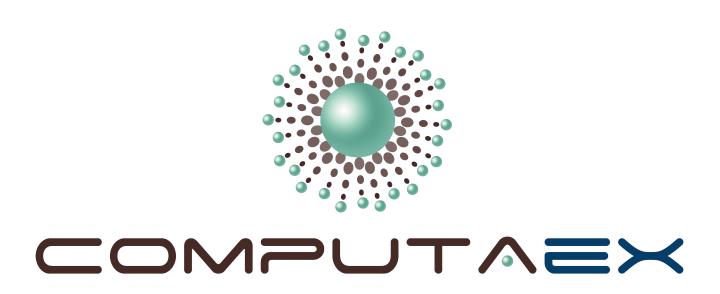
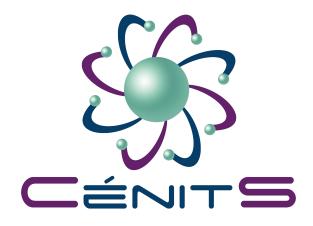


solvente de la computación y Tecnologías es consolvente de la cons

2011



# MEMORIA





# **ÍNDICE**

Caminando hacia la consolidación de un proyecto ilusionante	9
Organización	13
Patronato	13
Equipo CénitS 2011	15
Colaboradores de CénitS	16
Becarios de investigación	16
Agradecimientos	17
Proyectos de investigación	21
Ciencias de la Vida	21
GCYDEX. Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos (PRI07A009)	21
Glicoconjugados a partir de aminopolioles. Estructura, agregación y modificación superficial	23
Simulación de procesos químicos	27
Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico	28
Química computacional	30
Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects	31
Novel Genomic Regions associated to specific complex chromatin marks	33
Ciencias de la Tierra	34
Estudio de la tropopausa extratropical	34
Supercomputing and e-science. Consolider CSD2007-00050-II-PR4/07	36
Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre	39
Cálculos AB-Initio	41
Evaluación de los recursos eólicos y solares en Andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoscala (RENUEVA)	42
ABAQUS	44

	Ciencias Informáticas y de Comunicaciones
	com.info.com: Predictibilidad de infoestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPv6 y FTTx45
	Simulación de dispositivos ópticos integrados
	Evaluación de AzequiaMPI48
	Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal 50
	Nanogather. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología51
	Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio53
	Optimization of the Diffused Matrix Format for Heterogeneous Parallel Computing54
	Supercomputing electromagnetics for plasmonic nanostructures. Application to optical nanoantennas and metamaterials
	Proyectos concluidos
	Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones59
	Medida de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia59
	Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con EUTERPE60
	Cálculo de la corriente de bootstrap en el stellarator TJ-II
	Dinámica fuera del equilibrio del modelo de Heisenberg tridimensional en presencia de un campo magnético61
	Consolider TECNO_FUS61
	IFMIF-EVEDA España62
	Soporte porting a usuarios del CIEMAT en la plataforma LUSITANIA
	Creación de un ecosistema de negocio en Cloud Computing. Gestión automatizada de la infraestructura. (laaS, Infraestructure as a Service)62
Pi	ROYECTOS DE INNOVACIÓN EN COLABORACIÓN CON ORGANISMOS PÚBLICOS Y PRIVADOS67
	Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación67
	CEDIN (Centro extremeño de diseño industrial)
	Colaboración con el Observatorio Tecnológico UEx-HP
	Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (AldeaLab C3)
	SIBE
	Medianell Virtual Press

Future Internet: eficiencia en las redes de altas prestaciones	73
Red española de e-ciencia	75
RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN	79
Congresos	79
Supercomputing applied to Parallel Network Simulation	79
SPARC SOLARIS & HEPPA Intercomparison Activities: Sensitivity of the atmospheric response to idealized spectrally resolved solar forcing in WACCM3.5	80
Aplicabilidad de la supercomputación al modelado de sistemas	80
Revistas	82
Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole	82
Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst	82
Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: Structure and stereodynamics	83
Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage	83
Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarenecarbaldehydes: Structures and Tautomeri Equilibria in the Solid State and in Solution	
Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state	85
Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study	85
Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions	86
Study on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution by using the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics methodology	86
On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks.  A theoretical rationale	87
Solvent Effects on the Radiative and Nonradiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore	88
Casos de éxito/estudio	89
Extremadura, en primera división de supercomputación	89
Computerworld Honors Program Case Study: CénitS	89

Distinciones y reconocimientos	Extremadura democratiza el acceso a la supercomputación	90
CénitS ganador de la categoría "Otros Organismos Públicos" como "Caso de Éxito más valorado por su Innovación y Ejemplaridad" en la convocatoria SITI/asLAN'2011 de casos de éxito TIC	La Supercomputación al Servicio de los Ciudadanos	91
más valorada por su Innovación y Ejemplaridad" en la convocatoria SITI/asLAN'2011 de casos de éxito TIC	Distinciones y reconocimientos	92
Paper" por el "Institute for Scientific Information"	más valorado por su Innovación y Ejemplaridad" en la convocatoria SITI/asLAN'2011	92
del "Computerworld Honors Program"		92
Relación de proyectos presentados por CénitS a convocatorias competitivas		93
Convenios de colaboración	CONVOCATORIAS DE PROYECTOS Y CONVENIOS DE COLABORACIÓN	97
ACCIONES FORMATIVAS       103         Colaboración en la organización de eventos       103         Asistencia a cursos y jornadas       104         Difusión       105         RECURSOS       109         Hardware       109         Servidores del supercomputador LUSITANIA       109         Servidores auxiliares       110         Almacenamiento       112         Red       113         Copias de seguridad       114         Consumos       115         Uso de recursos       115         Uso de cPU       117         Uso de memoria principal       119         Uso de almacenamiento       121	Relación de proyectos presentados por CénitS a convocatorias competitivas	97
Colaboración en la organización de eventos	Convenios de colaboración	98
Asistencia a cursos y jornadas.       104         Difusión.       105         RECURSOS.       109         Hardware.       109         Servidores del supercomputador LUSITANIA.       109         Servidores auxiliares.       110         Almacenamiento.       112         Red.       113         Copias de seguridad.       114         Consumos.       115         Uso de recursos       115         Uso de CPU.       117         Uso de memoria principal.       119         Uso de almacenamiento.       121	Acciones formativas	103
Difusión       105         RECURSOS       109         Hardware       109         Servidores del supercomputador LUSITANIA       109         Servidores auxiliares       110         Almacenamiento       112         Red       113         Copias de seguridad       114         Consumos       115         Uso de recursos       115         Uso de CPU       117         Uso de memoria principal       119         Uso de almacenamiento       121	Colaboración en la organización de eventos	103
RECURSOS	Asistencia a cursos y jornadas	104
Hardware       109         Servidores del supercomputador LUSITANIA       109         Servidores auxiliares       110         Almacenamiento       112         Red       113         Copias de seguridad       114         Consumos       115         Uso de recursos       115         Uso de CPU       117         Uso de memoria principal       119         Uso de almacenamiento       121	Difusión	105
Servidores del supercomputador LUSITANIA.       109         Servidores auxiliares.       110         Almacenamiento.       112         Red.       113         Copias de seguridad.       114         Consumos.       115         Uso de recursos       115         Uso de CPU.       117         Uso de memoria principal.       119         Uso de almacenamiento.       121	Recursos	109
Servidores auxiliares	Hardware	109
Almacenamiento       112         Red       113         Copias de seguridad       114         Consumos       115         Uso de recursos       115         Uso de CPU       117         Uso de memoria principal       119         Uso de almacenamiento       121	Servidores del supercomputador LUSITANIA	109
Red	Servidores auxiliares	110
Copias de seguridad	Almacenamiento	112
Consumos         115           Uso de recursos         115           Uso de CPU         117           Uso de memoria principal         119           Uso de almacenamiento         121	Red	113
Uso de recursos	Copias de seguridad	114
Uso de CPU	Consumos	115
Uso de memoria principal	Uso de recursos	115
Uso de almacenamiento121	Uso de CPU	117
	Uso de memoria principal	119
Relación de recursos por proyecto122	Uso de almacenamiento	121
	Relación de recursos por proyecto	122

Us	uarios	124
	Incidencias	.124
So	ftware	.125
	Listado de herramientas	.125
	Librerías	.126
	Compiladores	128
	Herramientas	.129
WEB.		133
Ec	osistema web	133
	Portal web corporativo	.133
	Datos estadísticos	.136
	Canales complementarios de difusión	140
<b>N</b> ota	S DE PRENSA	145
Cé	nitS-COMPUTAEX en los medios	.145
	Prensa escrita	145
	Prensa digital	. 152
	Televisión	.154
	Padio	15/

# CAMINANDO HACIA LA CONSOLIDACIÓN DE UN PROYECTO ILUSIONANTE

Se han cumplido ya tres años desde que el supercomputador LUSITANIA comenzase su actividad en Extremadura y, desde entonces, ha dado servicio a todos los investigadores e innovadores que han requerido sus servicios y recursos. La Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura) fue creada por la Junta de Extremadura precisamente con carácter de servicio público y, para ello, se la dotó de su principal instrumento que es el Centro CénitS (Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación), encargado de gestionar la singular herramienta tecnológica que es LUSITANIA.



Si durante los dos primeros años del proyecto de la Supercomputación en Extremadura la principal preocupación fue poner a punto toda la infraestructura y darla a conocer a sus potenciales usuarios, en 2011 se ha pretendido obtener todo el potencial de los recursos que CénitS pone a disposición de sus usuarios.

Este año se ha podido constituir una mínima estructura de recursos humanos que ha permitido administrar adecuadamente los potentes recursos informáticos con que cuenta el Centro. Aunque la estructura de personal es aún escasa, comparativamente con centros homólogos extremeños y españoles, con el actual equipo de ocho personas pertenecientes a la Fundación COMPUTAEX se han podido llevar a cabo las actividades recogidas en esta memoria anual.

A pesar de la situación de crisis económica que toda la sociedad ha vivido en 2011, CénitS ha sido capaz de generar casi un 15% de su presupuesto anual en recursos propios en un intento por lograr la mayor sostenibilidad e independencia económica. Estos recursos provienen de contratos, convenios y colaboraciones con organizaciones privadas y públicas que demandan los servicios del Centro.

Además de esos recursos se ha logrado en este ejercicio una importante captación de fondos provenientes de convocatorias competitivas nacionales y europeas, superándose el millón de euros que no hubieran llegado a Extremadura si no existiese la Fundación COMPUTAEX. De forma directa CénitS ha logrado fondos que superan el doble del presupuesto ordinario anual de la Fundación. Pero es también muy destacable el que CénitS haya servido como OPI (Organismo Público de Investigación) a un notable número de grupos de investigación de nuestra región que han logrado también fondos públicos nacionales y europeos para sus respectivos proyectos ejecutados en LUSITANIA.

Para un Centro de investigación e innovación como CénitS, la obtención de resultados de investigación y la publicación de los mismos ha ser uno de sus objetivos principales. Usando los recursos y servicios del Centro se han realizado investigaciones que han permitido superar la treintena de publicaciones entre congresos y revistas, algunas de las cuáles con un nivel de impacto muy notable en sus respectivos campos de investigación. Incluso, una de las publicaciones obtenida con la colaboración de LUSITANIA ha sido reconocida como *Highly Cited Paper* por el *ISI (Institute for Scientific Information)* como uno de los artículos científicos que están teniendo más relevancia en los últimos diez años. CénitS está, por tanto, siendo de gran utilidad para un buen número de investigadores que encuentran en LUSITANIA una herramienta de trabajo fundamental para poder llevar a cabo sus investigaciones y para difundir los

resultados con el máximo nivel de impacto que puede acabar conduciendo a la deseada transferencia tecnológica perseguida en la mayoría de proyectos desarrollados.

Varias organizaciones han encontrado también en el Centro un buen campo de experimentación para sus proyectos de innovación tecnológica y no únicamente en el campo de la supercomputación. Algunas de estas organizaciones estaban usando recursos similares fuera de Extremadura y otras no los hubieran encontrado en nuestra región si CénitS no existiese y les hubiese resultado bastante difícil acceder a ellos fuera de Extremadura.

El reconocimiento nacional e internacional de las actividades llevadas a cabo en el Centro han tenido también continuación este año con la obtención de dos premios de gran relevancia en el sector de las tecnologías informáticas. La visión de futuro y la aplicación de las Tecnologías de la Información como palanca de cambio social, económico y educativo han sido las claves por las que la Fundación fue seleccionada entre los seis finalistas del Economic Opportunity 21st Century Achievement Award del ComputerWorld Honors Program. La prestigiosa revista Computerworld organiza estos premios internacionales desde hace veintiún años a los que, en esta ocasión, se presentaron mil candidaturas en Washington D. C. provenientes de veintitrés países, de entre las cuáles se "laureó" a COMPUTAEX en la categoría Economic Opportunity. Además, @asLAN, la asociación más importante del sector TI español, ha premiado a CénitS como ganador de la categoría Otros Organismos Públicos, como caso de éxito más valorado por su innovación y ejemplaridad de entre un total de 94 casos de éxito de 77 organismos públicos españoles presentados a la convocatoria de Casos de Éxito TIC Innovadores y Ejemplares en Administración y Organismos Públicos.

La colaboración con otros centros tecnológicos y con todo tipo de organizaciones ha continuado con la firma de varios convenios y con la participación coordinada en proyectos con un buen número de organismos y empresas que están dando unos resultados muy destacables.

Con las actividades ya citadas, y con las presentadas en esta memoria, la Fundación ha procurado cumplir con sus fines, promoviendo el desarrollo de las tecnologías de la información, el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas como instrumento para el desarrollo socioeconómico sostenible y promoviendo la cooperación entre los centros tecnológicos de la región y su sector productivo. Se ha intentado así satisfacer una de las misiones fundamentales de la Fundación que es la de dinamizar el sector de la investigación y de la innovación tecnológica en Extremadura.

La planificación estratégica es clave para enfrentarse a nuevos proyectos y continuar con la progresión que el Centro lleva desde su creación. Para el próximo año el principal reto es continuar dando pasos hacia la madurez de este proyecto que sólo conseguirá arraigar si dispone de un edificio donde poder desarrollarse adecuadamente y sin las limitaciones que actualmente le impiden dar respuesta a las oportunidades que surgen con frecuencia.

Seguimos creyendo que estamos en el camino acertado para conseguir la consolidación de este ilusionante proyecto que surgió desde la Junta de Extremadura con un claro convencimiento de la utilidad que ha quedado ya constatada y que continúa adelante con el apoyo de la actual Consejería de Empleo, Empresa e Innovación y de su Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica a quienes agradecemos su confianza.

Director General. José Luis González Sánchez



# **ORGANIZACIÓN**

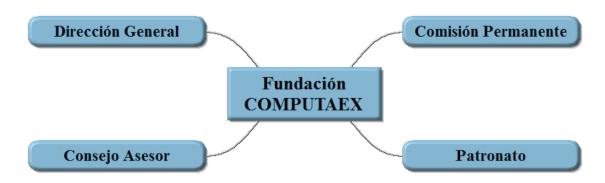


La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX) fue constituida en 2009 por la Junta de Extremadura como organización de naturaleza fundacional sin ánimo de lucro. Tiene personalidad jurídica propia y plena capacidad de obrar, pudiendo realizar, en

consecuencia, todos aquellos actos que sean necesarios para el cumplimiento de la finalidad para la que fue creada.

### **PATRONATO**

Los estatutos de la Fundación pueden ser consultados en http://www.cenits.es/fundacion, siendo sus órganos de gobierno los que se muestran en el siguiente organigrama:



En Julio de 2011 se produjo la reestructuración del Gobierno de la comunidad autónoma de Extremadura, pasando la Fundación COMPUTAEX a depender de la Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica perteneciente a la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación.

El Patronato es el principal órgano de gobierno de la Fundación, siendo sus Patronos la Vicepresidenta, Portavoz y Consejera de Empleo, Empresa e Innovación y los Directores Generales y Secretarios Generales de dicha Consejería.

En el siguiente organigrama se muestra la relación de cargos asociados a cada uno de los órganos de gobierno de la Fundación COMPUTAEX:

# Fundación **COMPUTAEX** Patronato Dña. Cristina Teniente Sánchez Ilma. Sra. Vicepresidenta, Portavoz y Consejera de Empleo, Empresa e Innovación Presidenta de la Fundación COMPUTAEX D. Alejandro Hernández Renner Ilmo. Sr. Director General de Modernización e Innovación Tecnológica Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX Dña. Candelaria Carrera Asturiano Ilma. Sra. Directora General de Empresa y Actividad Emprendedora Patrona del Patronato de la Fundación COMPUTAEX D. Miguel Córdoba Pérez Ilmo. Sr. Director General de Comercio Patrono del Patronato de la Fundación COMPUTAEX D. Fernando Gutiérrez Creus Ilmo. Sr. Secretario General Patrono del Patronato de la Fundación COMPUTAEX D. Sergio Velázquez Vioque Ilmo. Sr. Secretario General de Empleo y Actividad Empresarial Patrono del Patronato de la Fundación COMPUTAEX D. José Luis González Sánchez Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX y Secretario del Patronato Dirección General D. José Luis González Sánchez Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Comisión Permanente D. Alejandro Hernández Renner Ilmo. Sr. Director General de Modernización e Innovación Tecnológica Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX D. Fernando Gutiérrez Creus Ilmo. Sr. Secretario General Patrono del Patronato de la Fundación COMPUTAEX D. Sergio Velázquez Vioque Ilmo. Sr. Secretario General de Empleo y Actividad Empresarial Patrono del Patronato de la Fundación COMPUTAEX Consejo Asesor

# **EQUIPO CÉNITS 2011**

CénitS es el Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación y el principal instrumento de la Fundación COMPUTAEX para llevar a cabo sus fines. En 2011 se han producido nuevas incorporaciones de carácter técnico, investigador y administrativo para ampliar las capacidades de acción y dar respuesta a las necesidades del Centro.



José Luis González Sánchez

Director General





**César Gómez Martín** Jefe técnico

Blanca Pérez Mariño Técnico en gestión laboral, contable, fiscal y jurídica





**Javier Corral García**Analista y paralelización de código

**Ángel Bejarano Borrega** Administrador de Sistemas y paralelización de código





**David Cortés Polo** Administrador de redes y comunicaciones

Felipe Lemus Prieto
Administrador de seguridad y
comunicaciones





Javier Lázaro Jareño Administrador web y paralelización de código

### **C**OLABORADORES

Desde la creación del Centro contamos con la estrecha colaboración de los siguientes técnicos de HP.

Juan Miguel Trejo Fernández





**Emilio Muñoz Fernández** 

Jesús González Pérez



# BECARIOS DE INVESTIGACIÓN

Con motivo del convenio de colaboración firmado entre la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX, se han incorporado dos técnicos para desempeñar tareas de apoyo relacionadas con la investigación en entornos Cloud Computing y Green IT.

Jaime Rivero Ramos
Cloud Computing



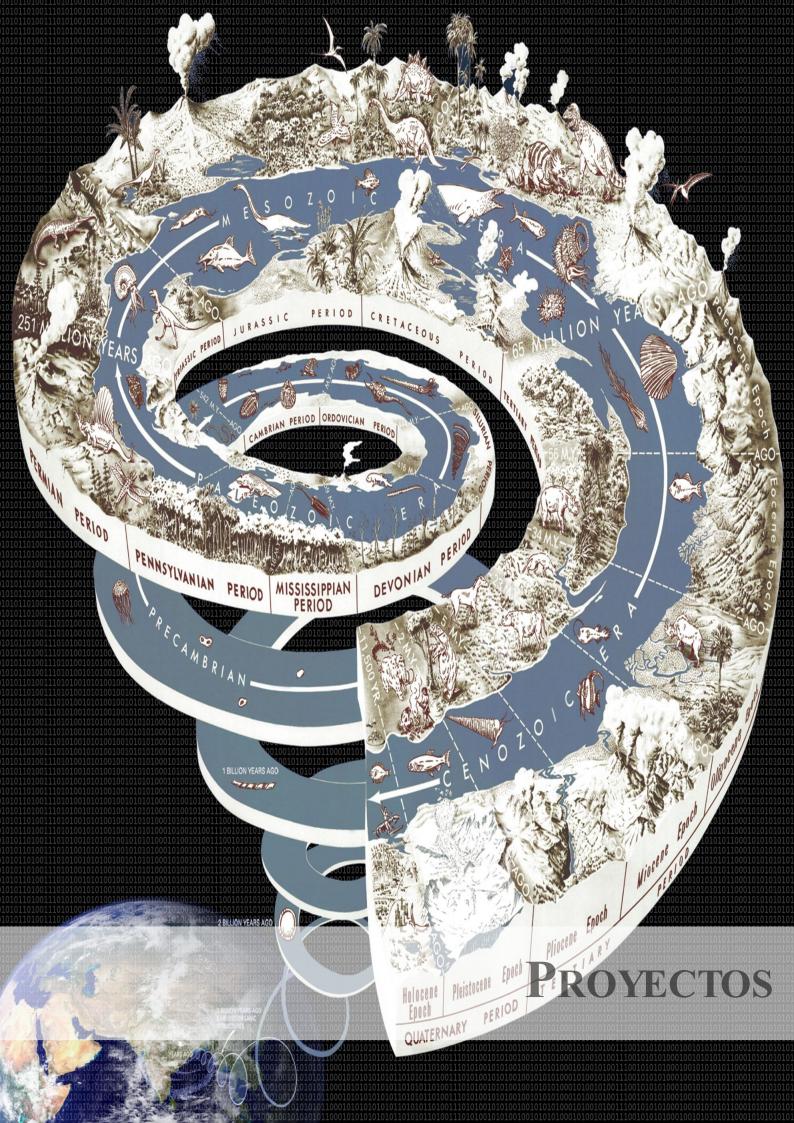


**José Casero Cantos** Green IT

### **AGRADECIMIENTOS**

Durante todo este año se ha contado también con la inestimable colaboración de un gran número de personas sin cuya cooperación no hubiese sido posible llevar a cabo nuestra tarea. Entre ellos queremos destacar:

- El personal del CETA-CIEMAT que nos acoge en su Centro del conventual de San Francisco de Trujillo.
- El personal del CCMI y de INNOVEEX que acoge en su Centro de Cáceres parte de nuestro equipo humano.
- El personal de GPEx (especialmente Miguel González Cuétara, José Antonio Méndez Madrigal, María de Alvarado Álvarez, Ana Beatriz Bueno Martínez y Juan Pérez Peña) que nos ayuda con las labores administrativas.
- El personal de la extinta Dirección General de Ciencia y Tecnología y actual Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica (especialmente a Begoña Aldonza Crespo, Sergio Palma Orantos, Raquel Sánchez Palacios, Francisca Martínez García, Raúl Lorenzo Marcos, Francisco Huertas Méndez, Jesús García Rubio, Manuel López Cáceres, Jesús Rodríguez Jiménez, Mercedes Cortés Larrey, Marisol Monge Terrones, José Fuentes Solano, Constantino Gutiérrez Barbarrusa y José Enrique Cintado Arias) que colabora en múltiples tareas burocráticas.
- El personal de la extinta Consejería de Economía, Comercio e Innovación (especialmente a Paqui Chávez, África Burguillos Macías, David González Gil, Ángel Gomato Esperilla y Teresa Chaparro) y actual Consejería de Empleo e Innovación (especialmente a Ana Benítez Jiménez y Carmen Martínez García) que coopera en tareas de coordinación.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones de Extremadura que colaboran en proyectos y actividades comunes.
- Especialmente a los actuales Patronos por su compromiso con la Fundación y a los fundadores de COMPUTAEX por los servicios prestados (María Dolores Aguilar Seco, Jesús Alonso Sánchez, Carlos González Mateos, Ana María Alejandre Bueno, Trinidad Ruiz Téllez, Jaime Ruiz Peña y Rafael Martín Espada).



# PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2011.

Son proyectos pertenecientes a Universidades, Centros de Investigación y Centros Tecnológicos que consumen gran cantidad de recursos y que utilizan LUSITANIA como herramienta para demostrar sus hipótesis, desarrollar sus tesis, realizar simulaciones y extrapolar resultados, y diseñar sus innovaciones.

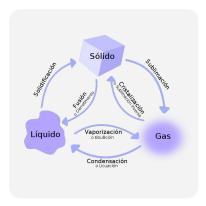
Los proyectos se presentan divididos en tres categorías que son "Ciencias de la vida", "Ciencias de la Tierra" y "Ciencias Informáticas y de Comunicaciones".

# CIENCIAS DE LA VIDA

GCYDEX. Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos (PRIO7A009)

#### **Investigadores**

Joaquín Espinosa García (IP, UEx). José C. Corchado Martín-Romo (UEx). Cipriano Rangel Delgado (UEx). Manuel Monge Palacios (UEx). Juan de la C. García Bernáldez (UEx). Alberto Cabello Sánchez (UEx). José L. Bravo Trinidad (UEx).



#### Descripción

El campo de investigación se centra en el estudio cinético y dinámico

teórico de sistemas poliatómicos en fase gaseosa, basado en el conocimiento de las superficies de energía potencial (SEP). Un reto importante en esta investigación es la evolución desde los bien estudiados sistemas átomo+diátomo a los sistemas poliatómicos. Este proyecto se desarrolla dentro del grupo de investigación GCYDEX (Grupo de Cinética y Dinámica de la Universidad de Extremadura). Las superficies de energía potencial desempeñan un papel central en la completa descripción de un sistema reactivo. Las SEP se construyen como formas funcionales describiendo los modos de tensión, flexión y torsión, y se ajustan a cálculos ab initio de estructura electrónica de alto nivel. Basados sobre estas SEP, la información cinética se obtiene usando la Teoría Variacional del Estado de Transición (VTST) con inclusión del efecto túnel mecanocuántico; mientras que la información dinámica se obtiene usando cálculos de trayectorias cuasi-clásicas (QCT). Las áreas de aplicación incluyen química de combustión y atmosférica, así como catálisis y bioquímica.

#### **Objetivos**

• Construir superficies de energía potencial analíticas en sistemas poliatómicos basados en cálculos ab initio de alto nivel.

• Realizar estudios cinéticos y dinámicos de las reacciones en fase gaseosa.

#### Metodología

Construcción de la superficie mediante programas escritos por el grupo en Fortran. La calibración de estas superficies se basa en cálculos de estructura electrónica de alto nivel.

#### **Objetivos alcanzados**

• Calculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de la Tesis Doctoral de Manuel Monge-Palacios.

#### Publicaciones y congresos

• Congreso Mundial del World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela, Spain, 2011.

#### Financiación

Junta de Extremadura, Proyecto IB10001.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/gcydex

GLICOCONJUGADOS A PARTIR DE AMINOPOLIOLES. ESTRUCTURA, AGREGACIÓN Y MODIFICACIÓN SUPERFICIAL

#### Investigadores

Pedro Cintas Moreno, Martín Ávalos González, Reyes Babiano Caballero, David Cantillo Nieves, José Luis Jiménez Requejo, Rafael Fernando Martínez Vázquez, Juan Carlos Palacios Albarrán

#### Descripción

El grupo de investigación QUOREX de Química Orgánica, catalogado tanto en la Universidad de Extremadura como en la Junta de Extremadura (FQM-007), está integrado por docentes e investigadores cuyas líneas de trabajo se encuentran financiadas a través de proyectos nacionales (Ministerio de Ciencia e Innovación) y regionales (Consejería de Economía, Comercio e Innovación).

El grupo trabaja en las siguientes líneas de investigación, en las cuáles la supercomputación es una importante herramienta:

- Estudio de reactividad química en moléculas orgánicas, a elevado nivel teórico; en particular procesos regio-, enantio- y diastereoselectivos catalizados por complejos metálicos.
- Diseño computacional de cápsulas oligoméricas como medios de reacción organizados, evaluando transformaciones selectivas de inclusión y reconocimiento molecular.
- Simulación del centro activo de enzimas catalíticos. Estudio de la interacción con moléculas orgánicas pequeñas que pueden actuar como agonistas o antagonistas del enzima.
- Modelización de las interacciones de glicolípidos y sustancias anfipáticas derivadas de carbohidratos con superficies metálicas.

#### **Objetivos alcanzados**

- Una de las líneas de investigación se ha centrado en la síntesis y estudio estructural de bases de Schiff generadas por condensación de aldehídos aromáticos con aminas de diferente naturaleza (aromáticas, alifáticas, aminopolioles y aminoheterociclos). El estudio estructural, basado en experiencias de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear, se ha completado con estudios teóricos llevados a cabo a nivel DFT, en fase gaseosa y en disolución, que han permitido realizar un completo análisis de los equilibrios imina-enamina en disolución y en estado sólido.
- Se ha realizado el estudio de los equilibrios tautoméricosimina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioltris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G\* y M06-2X/6-311++G\*\* se ha determinado la

estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la tranformaciónimina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación (< 8 kcal.mol<sup>-1</sup>). A través de un complejo y costoso protocolo computacional se ha modelado la estructura cristalina, lo que ha puesto de manifiesto la mayor estabilidad de la forma enamínica en el retículo cristalino, hecho que concuerda totalmente con los datos obtenidos a través de difracción de rayos X de monocristal.

- Se ha estudiado también la tautomería imina-enamina en derivados de anilinas y o-hidroxinaftaldehídos, tanto en estado sólido como en disolución. Se han realizado cálculos DFT (a nivel B3LYP/6-31G\*\* y M06-2X/6-311++G\*\*) que han permitido obtener las energías relativas de las formas imínicas, enamínicas y de los estados de transición implicados en su transformación. En este caso se ha encontrado que las diferencias de energía entre iminas y enaminas es mucho menor, tanto en estado sólido como en disolución. También se ha cuantificado la proporción de imina presente en todos los equilibrios, mostrando una buena concordancia con las proporciones obtenidas experimentalmente mediante resonancia magnética nuclear. La simulación de la estructura cristalina de un derivado delnaftaldehído ha puesto de manifiesto que la estructura imínica es ligeramente más estable que la enamínica, lo cual vuelve a estar de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.
- Se ha estudiado, además de los equilibrios tautoméricos, los perfiles conformacionales de varias hidrazonas derivadas de naftaldehídos y N-aminoheterociclos. Se ha analizado la variación de energía en función del ángulo diedro C-N-N-C a nivel DFT (B3LYP/6-31G\* y M06-2X/6-311++G\*\*) incluyendo el efecto del disolvente mediante el método SMD. Con independencia del disolvente, las formas imínicas son en todos los casos las más estables. Sin embargo, la presencia de dos grupos metilo en posiciones orto en el anillo de anilina implica una menor diferencia de energía entre ambos tautómeros. Además, en todos los casos, ha quedado demostrado que la presencia del par de electrones del nitrógeno adyacente al grupo imino es clave en la estabilización de dicha forma tautomérica.
- Simulación de la reactividad química en el interior de cápsulas moleculares. En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método para catalizar reacciones químicas. Se trata de los denominados "matraces" o "cápsulas" moleculares. Éstos consisten en estructuras moleculares que forman una cavidad en su interior, donde se alojan los reactivos y tienen lugar las transformaciones, de forma similar a lo que ocurre en la naturaleza en el caso de las reacciones biocatalizadas por enzimas. El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. Sin embargo, su estudio a través de métodos computacionales no se había abordado hasta el momento debido al elevado número de átomos que son necesarios para la modelización, lo que hace que el coste computacional sea demasiado elevado. Los cálculos realizados han permitido modelar por primera vez una reacción química en el interior de una de estas macromoléculas. Concretamente, se ha estudiado la cicloadición de alquinos con azidas, que da lugar a triazoles, compuestos muy

valiosos desde el punto de vista biomédico.

- Hidrogenación de amidas mediante catalizadores basados en rutenio. La reacción de hidrogenación es una de las más importantes en química. Se trata de un proceso que requiere elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores específicos. Los catalizadores basados en complejos de rutenio se encuentran entre los más estudiados. Sin embargo, su mecanismo de actuación era desconocido hasta el momento. Los cálculos realizados han permitido conocer todos los pasos a través de los cuales transcurre el proceso, los cambios de energía implicados, así como explicar la formación de los diferentes compuestos químicos a que da lugar la hidrogenación.
- Descubrimiento de un nuevo organocatalizador para la síntesis de tetrazoles por cicloadición de azidas y nitrilos. Los tetrazoles son compuestos de gran importancia ya que intervienen en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La síntesis de estos compuestos es compleja, ya que requiere temperaturas muy elevadas y prolongados tiempos de reacción. Los cálculos realizados han permitido diseñar y preparar, en colaboración con el equipo que dirige el Prof. Oliver Kappe en la Universidad Karl-Franzens de Graz, el primer organocatalizador para esta reacción. Su utilización permite preparar tetrazoles de forma muy rápida, lo que hará posible que su producción a gran escala sea más eficiente y barata de lo que es actualmente.

#### **Publicaciones y congresos**

- David Cantillo, Bernhard Gutmann, and C. Oliver Kappe: Mechanistic Insights on Azide-Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide-Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier-Haack-Type Organocatalyst. The Journal of Organic Chemistry. 7 Marzo, 2011.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, Mark E. Light, José L. Jiménez, Juan C. Palacios, Esther M.S. Pérez, Vicenta Rastrojo: Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: Structure and stereodynamics. Tetrahedron. Marzo de 2011, 67, 2025-2034.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole. Journal of Chemical Theory and Computation, Abril de 2011, 7, 1850–1857.
- David Cantillo: Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides –
   C-N vs. C-O Cleavage. European Journal of Inorganic Chemistry. Mayo de 2011, 3008-3013.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, Juan C. Palacios: Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarenecarbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution. European Journal of Organic Chemistry. Mayo de 2011, 3137-3145.
- Tautomerism in Schiff bases. The cases of salicylaldehydes and hydroxyl naphthaldehydes investigated in solution and the solid state. R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes

Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, and Juan C. Palacios. XVI Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica, Universidad de Burgos, 19-24 junio, 2011.

- David Cantillo, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez and Juan C.
   Palacios: On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks. A theoretical rationale. Organic and Biomolecular Chemistry. Agosto de 2011, 7638–7642.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar: Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study. Journal of Chemical Theory and Computation, Septiembre de 2011, 7, 3694-3701.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state. Organic & Biomolecular Chemistry. Septiembre de 2011, 9, 8268–8275
- M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. Theoretical Chemistry Accounts. Octubre de 2011, 128, 783-793.
- Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín: Study on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution by using the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics methodology. The Journal of Chemical Physics 135, 194502. Noviembre de 2011.
- Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Radiative and Nonradiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore. Journal of Chemical Theory and Computation. Noviembre de 2011.

#### **Financiación**

• Ministerio de Ciencia e Innovación (Proyecto de referencia CTQ2010-18938/BQU).

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/quorex

#### Simulación de procesos químicos

#### Investigadores

Santiago Tolosa Arroyo del Departamento de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura.

#### **Objetivos**

• Se realiza la simulación de sistemas y procesos químicos de interés químico, biológico e industrial haciendo uso de mecánica molecular para su estudio tanto en fase gas como en disolución.

#### Metodología

Utilización de potenciales ab initio y de simulación con dinámica molecular. Construcción de curvas de energía libre.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/simulacion-procesos-quimicos

Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico



#### **Investigadores**

QCAMM (Quantum Chemistry And Molecular Modelling) del Departamento de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura

#### **Objetivos**

- Estudio teórico de la espectroscopia y evolución temporal de estados excitados.
- Desarrollar un tratamiento teórico unificado que permita clarificar el papel que representa el disolvente en la desexcitación de estados excitados.
- Abordar problemas de gran interés como son la explicación y predicción de los espectros de emisión (fluorescencia y fosforescencia) de moléculas en disolución o el efecto del disolvente sobre procesos fotoquímicos en moléculas de interés biológico: retinal, GFP, etc.

#### Metodología

Empleo de cálculos teóricos mecanocuánticos de alto nivel (CASSCF, CASPT2, TD-DFT) en la descripción de estados excitados de moléculas de interés biológico. Para ello se requiere una caracterización de los distintos puntos críticos de las hipersuperficies de energía potencial de los estados excitados que intervengan en la fotofísica y fotoquímica de los cromóforos. En una primera fase el objetivo es describir los cromóforos ya sea en fase gas o en presencia de disolventes polares y en situación de equilibrio, para en fases posteriores incluir el efecto de la proteína en la que se encuentra el cromóforo o estudiar la evolución temporal de los distintos estados electrónicos excitados.

#### Objetivos alcanzados

- Se han realizado estudios teóricos sobre el fenómeno de la doble fluorescencia en disolventes
  polares para dos compuestos afines, como son el 1-fenilpirrol y el fluoraceno. Los resultados
  en ambos casos indican que posiblemente la estructura responsable de la banda de
  fluorescencia de baja energía no presenta un giro importante entre los dos anillos, lo que
  apoyaría el modelo PICT (planar intramolecular charge transfer) frente al TICT (twisted
  intramolecular charge transfer).
- Se ha completado un estudio sobre los estados excitados de una molécula de interés biológico como el 11-cis-retinal. En este caso se sugiere que la complejidad en el espectro de fluorescencia observado experimentalmente procede de la presencia de dos estados electrónicos excitados de distinta naturaleza. Además, se ha demostrado que el la

desexcitación no radiante a través de una intersección cónica (que da lugar a la isomerización) puede transcurrir sin apenas barrera energética, aunque la reorganización del disolvente necesaria hace que el proceso sea mucho más lento en disolución que en vacío.

#### **Publicaciones y congresos**

- M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. Theor. Chem. Acc. 128 (2011) 783-793.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole. J. Chem. Theory Comput. 7 (2011) 1850-1857.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar: Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study. J. Chem. Theory Comput. 7 (2011) 3694-3701.
- Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín: Study on the Conformational Equilibrium of the Alanine Dipeptide in Water Solution by Using the Averaged Solvent Electrostatic Potential from Molecular Dynamics Methodology. J. Chem. Phys. 135 (2011) 194502(1-9).
- Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Raditiave and Non-Radiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore. J. Chem. Theory Comput. (2011)
- WATOC 2011 (Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists). Santiago de Compostela, 17-22 de julio de 2011. Presentación de 5 pósters.

#### **Financiación**

Ministerio de Ciencia e Innovación. Fondos FEDER.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/efecto-del-disolvente-sobre-desexcitacion-radiante-y-no-radiante-estados-excitados-en-mole

#### QUÍMICA COMPUTACIONAL



#### Investigadores

José Carlos Corchado Martín-Romo del departamento de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura.

#### **Objetivos**

• Desarrollar metodologías para la simulación de procesos de reactividad química en fase gaseosa y en disolución.

• Estudio de propiedades fisico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.

#### Metodología

Aplicación al estudio de reacciones de interés atmosférico o biológico en fase gaseosa o condensada mediante la aplicación de metodologías cinéticas (teorías del estado de transición) y dinámicas (cálculos de trayectorias clásicas, cuasiclásicas o cuánticas, cálculos de dinámica molecular).

Para ello será necesario emplear y desarrollar programas principalmente en lenguajes Fortran y C.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/quimica-computacional

#### ELECTROMAGNETIC SCATTERING FROM CANONICAL AND COMPLICATED OBJECTS

#### Investigadores

Levent Gürel. Director, Computational Electromagnetics Research Center (BiLCEM)



#### Descripción

Fast and accurate solutions of electromagnetics problems are extremely important for realistic simulations of electromagnetic interactions between devices and their environments including living and no nliving objects.

Examples to real-life electromagnetics problems are radiation from antennas and their adverse effects on human health, indoor and outdoor propagation, optimizations of wireless systems, visualization via lens systems for microscopy, transmission through photonic crystals and metamaterials, detection with radar systems, light scattering from red blood cells to diagnose various diseases, and electromagnetic compatibility of novel electronic devices, to name a few.

Recently, we developed very efficient parallel implementations of the multilevel fast multipole algorithm (MLFMA) using novel parallelization strategies for high-performance computers. The developed implementations can be employed to a variety of problems in the aforementioned areas involving metallic and dielectric three-dimensional structures discretized with hundreds of millions of unknowns.

#### Objetivos

- Our purpose is to employ this powerful electromagnetics code to analyze large-scale canonical and complicated objects with unprecedented levels of accuracy and detail.
- These problems will have important uses both in real-life and also as a scientific demonstration of the solution of (hopefully) world's largest problems.
- The reason we are hopeful about this goal is the fact that we have already solved extremely large problems in the past.

#### Metodología

We are using state-of-the-art fast solvers for electromagnetics problems, such as the multilevel fast multipole algorithm (MLFMA). These are extremely efficient solvers, however, quite difficult to parallelize.

We have devised original and ultimately useful parallelization schemes (such as the hierarchical parallelization scheme) for the parallelization of these difficult solvers.

#### **Publicaciones y congresos**

- Hierarchical parallelisation strategy for the multilevel fast multipole algorithm in computational electromagnetics.
- Efficient parallelization of the multilevel fast multipole algorithm for the solution of large-scale scattering problems.
- A hierarchical partitioning strategy for an efficient parallelization of the multilevel fast multipole algorithm.
- Parallelization of the multi-level fast multipole method for the solution of large electromagnetic scattering problems.
- Solution of large CEM problems with parallel multi-level fast multipole algorithm (MLFMA).
- Investigations of load balancing, communications, and scalability in parallel MLFMA.

#### Web

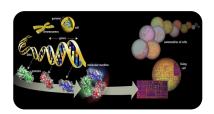
http://www.cem.bilkent.edu.tr

http://www.cenits.es/proyectos/electromagnetic-scattering-canonical-complicated-objects

#### Novel Genomic Regions associated to specific complex chromatin marks

#### Investigadores

Ángel-Carlos Román. Instituto Cajal - CSIC. Departamento Systems Circuits Group.



#### **Objetivos**

- Detección computacional de regiones genómicas con patrones complejos en su cromatina asociada.
- Análisis de su conservación (secuencia y vecindad) intra- e inter-especies.
- Análisis biológico de su función usando modelos transgénicos in vivo.

#### Metodología

Los datos genómicos se descargarán de navegadores genómicos de uso libre como UCSC Genome Browser y Ensembl, en texto plano. Estos datos se parsearán usando un lenguaje de scripts como Perl, y se analizarán globalmente usando un programa estadístico como R o MatLab. Se ejecutarán diversos algoritmos de tipo clustering, PCA, k-fold, bootstrapping, fuzzy logic. La conservación de las secuencias candidatas será analizada usando algoritmos de uso libre como Blast o MEME. Al final, tendremos unos candidatos fiables de regiones genómicas nuevas que serán testeadas experimentalmente.

#### Publicaciones y congresos

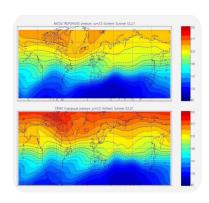
- Roman AC, Benitez DA, Carvajal-Gonzalez JM & Fernandez-Salguero PM (2008) Genome-wide B1 retrotransposon binds the transcription factors dioxin receptor and Slug and regulates gene expression in vivo. Proc Natl Acad Sci USA 105, 1632-7.
- Román AC, González-Rico FJ, Moltó E, Hernando H, Neto A, Vicente C, Ballestar E, Gómez-Skarmeta JL, Vavrova J, White RJ, Montoliú L & Fernández-Salguero PM (2011) Transcription factors Dioxin Receptor and Slug trigger the insulator activity of SINE B1 retrotransposons via RNA Polymerase switch. Genome Res. Feb 3, PMID: 21324874.
- Roman AC, Gonzalez-Rico FJ & Fernández-Salguero PM (2011) B1-SINE retrotransposons: Establishing Genomic Insulatory Networks. Mob Genet Elem 1, 1, 1-5.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/novel-genomic-regions-associated-specific-complex-chromatin-marks

# CIENCIAS DE LA TIERRA

#### ESTUDIO DE LA TROPOPAUSA EXTRATROPICAL



#### Investigador principal

José Agustín García del Departamento de Física de la Universidad de Extremadura.

#### **Investigadores participantes**

Guadalupe Saenz Garcia, Francisco Javier Acero Diaz, Maria Cruz Gallego Herrezuelo.

#### **Objetivos**

- Realizar una serie de integraciones climáticas con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model).
- Este modelo tiene la particularidad de incorporar multitud de especies químicas de interés meteorológico dentro del proceso de integración, muy interesantes desde el punto de vista de la estratosfera. La idea es analizar el papel que juega la estratosfera en el estudio del cambio climático.
- Estudios similares a los que se llevan a cabo en el supercomputador Lusitania del CénitS
   (Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomutación) se están
   realizando en el supercomputador MareNostrum del BSC (Centro de Supercomputación de
   Barcelona) y en el supercomputador Finis Terrae del CESGA (Centro de Supercomputación de
   Galicia). Por ello, otro objetivo fundamental es la coordinación entre los grupos de
   investigación que llevan a cabo estos experimentos.

#### **Objetivos alcanzados**

- Durante el presente año, se ha puesto a punto y se ha realizado una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Así mismo se ha puesto a punto y se está realizando una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Climate Earth System Model).
- La idea de este proyecto es analizar la posibilidad de la realización de simulaciones climáticas mediante el ordenador LUSITANIA. Los modelos anteriores son modelos desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, USA) y están especialmente adaptados para uso en sus ordenadores.
- Resulta del máximo interés el conocer si estos programas, convenientemente compilados, se

pueden ejecutar en otro tipo de máquinas y si los resultados obtenidos en éstas son comparables a los obtenidos en el NCAR.

• Un análisis de los datos obtenidos nos indican que efectivamente, los resultados son comparables a los obtenidos en los ordenadores del NCAR.

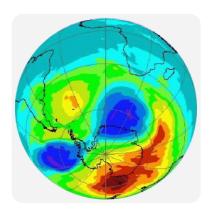
#### Publicaciones y congresos

- A. García, G. Sáenz, M.G. Chamorro, D. Barriopedro, J. Añel y R. García. "A comparison of dynamical tropopause pressure from WACMM and ERA-40". 14th Annual CCSM Workshop, Breckenridge, Colorado, 15-18 Junio de 2009.
- "A comparison of dynamical and thermal tropopause pressure from ERA-40 reanalysis data". The Extra-Tropical UTLS: Observations, concepts and future directions. Community workshop at NCAR, Boulder, CO, October 19-22, 2009.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/waccm-whole-atmosphere-community-climate-model

# SUPERCOMPUTING AND E-SCIENCE. CONSOLIDER CSD2007-00050-II-PR4/07



#### **Investigadores**

Gabriel Chiodo del Departamento de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica 2 de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid.

#### **Investigadores participantes**

Natalia Calvo de la Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García de la Universidad de Extremadura, Katja Matthes de

Helmholtz-Zentrum für Ozeanforschung Kiel - GEOMAR (Kiel, Alemania) y Daniel R. Marsh del National Center for Atmospheric Research, Boulder (CO, EEUU).

# Objetivos

- Realizar integraciones climáticas con el modelo WACCM-3.1.9 (Whole Atmosphere Community Climate Model). El modelo WACCM-3.1.9 es capaz de simular reacciones químicas (como las del ozono estratosférico), y el transporte de una multitud de especies químicas. La capacidad de incluir las interacciones entre la dinámica atmosférica y la química es una característica muy novedosa de este modelo, lo que le convierte en una de las herramientas más válidas con respecto a otros modelos publicados en el informe IPCC. Sin embargo, este modelo tiene un elevado coste computacional que requiere del uso de técnicas de supercomputación.
- Se acometerán modelizaciones climáticas a través de integraciones de modelos de circulación general (WACCM) e integración numérica de ecuaciones diferenciales.

#### **Objetivos alcanzados**

- Se ha investigado la influencia del ciclo de 11 años de la radiación solar sobre el clima a través de simulaciones con el modelo climático Whole Atmosphere Community Climate Model (WACCM). La mayoría de los resultados previos en este tema ha sido resumida en Gray et al. (2010).
- Debido a la limitada duración temporal de las observaciones, como los re-análisis (1960-2005)
   y satélites (1979-2005), la detección de la señal del ciclo de 11 años en la atmósfera es complicada.
- Aparte de la incertidumbre en la detección en la señal en sí, las medidas satélites de la irradiancia solar han demonstrado también hay incertidumbre en la magnitud de la variabilidad de la irradiancia solar en ciertas bandas, como en la ultravioleta (200-300 nm) y ultravioleta cercana (300-400 nm), sobre todo en el último ciclo solar (Lockwood, 2011).

- En este contexto, el uso de modelos climáticos de circulación general resulta provechosos para investigar la señal del ciclo solar, y los mecanismos físicos que dan lugar a ella.
- Estudios previos han demonstrado que el modelo WACCM reproduce la señal en observaciones, y ha confirmado la presencia de mecanismos dinámicos a traves de los cuales la influencia del ciclo de 11 años se propaga desde la alta estratosfera (50 km) hasta las capas más bajas de la atmósfera (Chiodo et al., 2012). Queda por investigar cuál es el efecto de la incertidumbre en el forzamiento solar sobre la respuesta atmósferica, con especial énfasis en las bandas de UV y UV cercano.
- El modelo WACCM es una herramienta adecuada para el desarrollo de la actividad, pero tiene un elevado coste computacional debido a la inclusión en su código de la química estratosférica. Gracias a la ayuda técnica por parte del equipo del CENITS-Lusitania, y a colaboración con científicos de EEUU que han desarrolado el código WACCM, y de varias instituciones en Europa y en España (entre ellas, la UEX), hemos podido aprovechar el supercomputador LUSITANIA para hacer integraciones.
- Se han realizado experimentos de sensibilidad forzando el modelo WACCM con la distribución espectral típica de la irradiancia solar en máximos y mínimos del ciclo de 11 años de la actividad solar. Además, se han realizado experimentos con un aumento artificial de 1% en la UV cercana (300-400 nm), que representa la incertidumbre instrumental en esta banda espectral. El aumento aplicado es pequeño en comparación con la variabilidad en las bandas de la UV, que se ha estimado en 4-8% (siendo % la variación relativa entre minimo y máximo de actividad). En WACCM, la respuesta dinámica a este forzamiento en la circulación estratosférica durante el invierno boreal es distinta al caso típico de máximo y mínimo solar. Esto indica que la sensibilidad del modelo a la incertidumbre instrumental en el forzamiento solar es grande, y que el experimento de sensibilidad da resultados más cercanos a las observaciones en ciertos meses (p.j. Diciembre y enero). Se plantea realizar una serie de experimentos de sensibilidad con la radiación en la UV (200-300 nm), para investigar 1) la sensibilidad del modelo a estas bandas, y 2) la contribución de estas mismas bandas a la respuesta en la atmósfera al ciclo solar de 11 años.

#### **Publicaciones y congresos**

- G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera, and N.Calvo. SPARC SOLARIS & HEPPA Intercomparison Activities: Sensitivity of the atmospheric response to idealized spectrally resolved solar forcing in WACCM3.5. WCRP Open Science Conference 2011
- Ponencia de poster en la WCRP Denver (EEUU) 24/10 28/10 de 2011 entitulado "Impact of idealized spectral solar forcing in the WACCM-3.5 model", y con agradecimientos al CENITS. G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera and N.Calvo
- Exposición oral en el congreso Space Climate 4 en Goa (India) Enero 2011. entitulada "11-yr solar cycle effects in two coupled chemistry-climate models". G.Chiodo, N.Calvo, H.Schmidt and R.Garcia-Herrera

• Exposición oral en el congreso SCOSTEP 2010 en Berlin (Alemania) Julio 2010. entitulada "The 11-y solar cycle in transient WACCM-3.5 simulations". G.Chiodo, N.Calvo and R.Garcia-Herrera

# Financiación

Beca pre-doctoral de Formación de Profesorado Universitario (FPU), ref AP2009-00064. CONSOLIDER 2007 "Supercomputing e-science", ref CSD2007-00050-II- PR4/07. COST action ES1005 "Towards a more complete assessment of the impact of solar variability on the Earth's climate".

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/supercomputing-and-e-science

HYPERCOMF

# Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre

#### Investigadores

Antonio Plaza Miguel de la Universidad de Extremadura.

#### **Objetivos**

- El análisis hiperespectral es una técnica avanzada de observación remota de la tierra caracterizada por la disponibilidad de imágenes con gran resolución en el dominio espectral (cientos o miles de bandas espectrales). Las técnicas de análisis de imágenes hiperespectrales, obtenidas a partir de sensores de observación remota de la tierra operados por organismos internacionales como NASA o la Agencia Europea del Espacio (ESA), han seguido una notoria evolución marcada por los avances en el diseño de sensores y en la disponibilidad creciente de arquitecturas de computación de altas prestaciones. El principal inconveniente de las técnicas de análisis es el excesivo coste computacional de las mismas: en ciertas aplicaciones (seguimiento y monitorización de incendios, desastres naturales, etc.) es indispensable desarrollar técnicas de análisis computacionalmente eficientes y capaces de proporcionar una respuesta en tiempo casi real.
- En este sentido, el principal objetivo de la presente actividad consistirá en implementar de forma eficiente técnicas de análisis hiperespectral desarrolladas por expertos del grupo de investigación "Computación Hiperspectral" (HYPERCOMP) de la Universidad de Extremadura utilizando las infraestructuras del Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación.

#### Metodología

El principal problema que surge a la hora de caracterizar los elementos que aparecen en una imagen hiperespectral se basa en el hecho de que muchos píxels en la escena contienen varias sustancias a nivel sub-píxel, con lo que la firma espectral resultante en dichos píxels no "pura" sino que viene dada por una composición o mezcla de diferentes sustancias que cohabitan a nivel sub-píxel.

La existencia de mezclas a nivel sub-píxel no se debe exclusivamente a la insuficiente resolución espacial del sensor, ya que dicho fenómeno también puede producirse a nivel de partículas (denominado mezcla íntima) independientemente de cuál sea la resolución espacial disponible. La aproximación fundamental en la literatura para caracterizar el fenómeno de la mezcla a nivel sub-píxel consiste en la utilización de un modelo de mezcla capaz de interpretar cada píxel de la imagen como una combinación de cada uno de los componentes que lo constituyen, ponderado por sus correspondientes fracciones de abundancia.

En este sentido, las técnicas que serán implementadas de forma eficiente con motivo de la presente actividad irán enfocadas al desmezclado eficiente de imágenes hiperespectrales de gran dimensionalidad, usando firmas espectrales puras (conocidas como endmembers) junto con sus

 $correspondientes\ contribuciones\ o\ abundancias.$ 

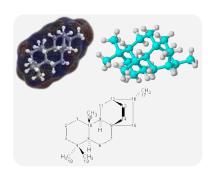
# Web

http://www.cenits.es/proyectos/procesamiento-paralelo-imagenes-hiperespectrales-superficie-terrestre

#### CÁLCULOS AB-INITIO

#### Investigadores

Javier Sánchez Montero. Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja. CSIC. Pedro L. de Andrés. Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja. CSIC.



#### **Objetivos**

- Existe evidencia de la variación de parámetros mecánicos, pero la fragilización por hidrógeno no está explicada teóricamente. Varios modelos tratan de explicar la propagación de la fisura por la presencia en el metal de átomos de hidrógeno.
- Generalmente se asume que el hidrógeno se genera eletroquímicamente en la superficie del material y difunde hasta la zona en proceso de fractura. Para explicar el proceso por el cual el hidrógeno fragiliza el material existen varias teorías:
  - Cambio estructural o de fase producido por el hidrógeno.
  - Plastificación producida por el Hidrógeno o hydrogen-enhanced localizad plasticity.
  - Reducción de la energía cohesiva por el efecto del hidrógeno.

#### Metodología

Los cálculos de Ab-Initio se basan en el formalismo del Funcional de la Densidad, la teoría de pseudo-potenciales y el teorema de Bloch. Se va a definir una base de ondas planas para representar las funciones de onda de Kohm-Sham. En esta aproximación, la precisión de los cálculos viene determinada básicamente por dos parámetros:

- La máxima energía de corte ("cut off").
- El número de puntos usados en espacio recíproco para representar las funciones de onda ("puntos k").

El problema del canje y la correlación electrónica se representa a través de un funcional de canje y correlación aproximado calculado con correcciones de gradientes y se utilizarán pseudopotenciales ultra-suaves. Se empleará el código de ordenador CASTEP, donde se implementará un método iterativo basado en las ideas de Carr y Parrinello.

En una segunda aproximación se pretenden realizar cálculos de Dinámica Molecular Ab-Initio empleando el mismo programa CASTEP. En estos cálculos se considerará la aproximación de Born-Oppenheimer que aplica los principios de la mecánica clásica a los iones. Las funciones de onda de Khon-Sham se desarrollarán en una base de ondas planas.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/calculos-ab-initio

Evaluación de los recursos eólicos y solares en Andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoscala (RENUEVA)



#### **Investigadores**

Antonio David Pozo Vázquez, Prof. Titular de la Universidad de Jaén. Vicente Lara Fanego. Departamento de Física de la Universidad de Jaén

#### Descripción

Las energías renovables van a jugar en las próximas décadas un papel clave en el sistema energético a nivel mundial. Esta revolución

energética tiene en España a uno de sus mayores impulsores, destacando en particular como uno de los líderes en el aprovechamiento de la energía eólica y solar. Dichas fuentes tienen la ventaja de una menor incidencia en el medio ambiente y se han convertido en un factor estratégico para afrontar el actual marco de fuerte crecimiento de la demanda energética en todo el mundo, así como la dependencia de las formas tradicionales basadas en los combustibles fósiles.

Sin embargo la explotación de estas fuentes primarias no está exentade diversos problemas de primer orden que se han de resolver. Entre ellos se encuentra el de la variabilidad espacio-temporal de los recursos. Dicha variabilidad afecta a la producción y gestión de la electricidad obtenida mediante las diferentes tecnologías de explotación; en definitiva a su integración dentro del sistema energético.

Además, como variables climáticas, la radiación y el viento están sujetos a variaciones naturales en un amplio rango de escalas espaciales y temporales, así como a los efectos del cambio climático.

Conocer con antelación la disponibilidad de estos recursos es pues un factor crucial para el desarrollo y mejor aprovechamiento de estas fuentes renovables, tanto a corto como a largo plazo. Una manera de llevar a cabo esta tarea es mediante el uso de Modelos Meteorológicos de Mesoscala. Estas herramientas son implementaciones de las ecuaciones físicas que describen las interacciones entre los distintos elementos del sistema climático, dando en cada instante de tiempo una descripción completa e integral del estado atmosférico en una determinada región.

- Estudiar la disponibilidad de los recursos solar y eólico mediante el uso de los modelos de predicción numérica.
- Análisis de la viabilidad de dichos modelos como herramientas para la predicción de estas fuentes de energía.

- Estudiar la complementariedad de ambos recursos.
- Estudiar la evolución en las próximas décadas de estos dos recursos en el contexto del cambio climático global.

#### Metodología

El núcleo de la metodología son los modelos meteorológicos de mesoscala. En particular el modelo Weather Research and Forecasting (WRF) es uno de los más usados dentro de la comunidad científica. Posee un conjunto amplio de esquemas físicos que permiten adaptarlo mejor a las características particulares de cada región y es capaz de trabajar con resoluciones espaciales y temporales muy altas.

Por otra parte este tipo de modelos requieren de ejecuciones en máquinas muy potentes ya que desarrollan una tarea de cálculo extremadamente intensiva, la cual a su vez genera una enorme cantidad de información. Estas dos características aumentan además drásticamente al incrementar la resolución espacial y/o temporal.

#### **Financiación**

Proyecto de investigación de excelencia de la Junta de Andalucía (convocatoria 2007). Referencia: P07-RMN 02872

#### Web

http://matras.ujaen.es/es/

http://www.cenits.es/proyectos/evaluacion-recursos-energeticos-andalucia-mediante-modelo-meteorologico-mesoscala-renueva

# **ABAQUS**



#### **Investigadores**

Pedro Miranda González. Departamento de Ingeniería Mecanica, Energética y de los Materiales. Universidad de Extremadura

#### **Objetivos**

• Se pretende optimizar la geometría de andamiajes para ingeniería de tejido óseo, es decir, de estructuras biocerámicas y andamiajes híbridos bioactivos cerámico/polímero fabricados mediante la técnica de moldeo robotizado (robocasting).

#### Metodología

Para alcanzar el objetivo anteriormente mencionado se pretende simular mediante el método de elementos finitos diversos ensayos mecánicos (compresión, tracción, etc.) y de permeabilidad en este tipo de estructuras, variándo los diversos parámetros geométricos que pueden controlarse mediante la técnica de fabricación mencionada (robocasting) y propiedades de los materiales individuales que componen estas estructuras.

#### **Publicaciones y congresos**

• P. Miranda, A. Pajares, F. Guiberteau. Finite Element Modeling as a Tool for Predicting the Fracture Behavior of Robocast Scaffolds. Acta Biomaterialia. 4, 1715-1724 (2008)

#### Web

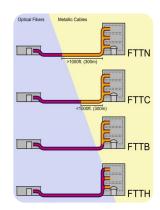
http://www.simulia.com/products/abaqus\_fea.html http://www.cenits.es/proyectos/abaqus

# CIENCIAS INFORMÁTICAS Y DE COMUNICACIONES

COM.INFO.COM: PREDICTIBILIDAD DE INFOESTRUCTURAS DE COMUNICACIONES MEDIANTE SUPERCOMPUTACIÓN Y SU APLICACIÓN AL DESPLIEGUE DE REDES MIPV6 Y FTTX

#### **Investigadores**

Alfonso Gazo Cervero, José Luis González Sánchez, Francisco Javier Rodríguez Pérez y Javier Carmona Murillo del grupo GÍTACA (Grupo de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas) del DISIT (Departamento de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos) de la Universidad de Extremadura, en convenio con la empresa Aplicaciones Integrales e Industriales Grupo G5.



# **Objetivos**

- Realizar una predicción de la evolución de las infoestructuras de comunicaciones actuales, proyectándolas a la próxima década para determinar, mediante técnicas predictivas y con la ayuda de la supercomputación, las necesidades técnicas e inversoras, en cuanto a topologías y tecnologías de redes y comunicaciones se refiere. Se usará la supercomputación para ejecutar los flujos reales de tráfico que se producen en la Intranet extremeña; en la red académica española RedIRIS; en la red europea GEANT; y en la red americana AT&T. Con estas topologías, soportadas sobre el supercomputador LUSITANIA, se simularán y extrapolarán los resultados hacia la predicción de sus evoluciones tecnológicas para poder inferir los requerimientos de necesidades y servicios en los próximos años.
- Aplicar las lecciones aprendidas en la anterior etapa al despliegue de FTTx (Fiber To The x, donde x es Home, Building, etc.) que se presenta en los últimos tiempos como la alternativa a la actual conectividad por medio de ADSL. Se prevén muy importantes inversiones y esfuerzos en los próximos años para el despliegue de la fibra óptica hasta nuestros hogares y empresas. En este subproyecto proponemos desarrollar un producto software que, recurriendo a la supercomputación, sirva para analizar todas las posibilidades de despliegue de infoestructuras en zonas concretas antes de acometerlas para optimizar los recursos y los costes.

#### **Objetivos alcanzados**

• Simulaciones de redes reales mediante supercomputación. Se estudiaron simuladores y se seleccionaron NS2 con PDNS y NS3. Se procedió con la configuración e instalación de los mismos. Utilizando la herramienta gephi para el particionado de grafos se desarrolló una extensión para la generación de escenarios paralelos en ns2, de modo que pudiésemos paralelizar cualquier red la cual estuviese representada como un grafo en formato GML, ésta extensión nos genera los archivos .tcl necesarios para la ejecución de ns2 con el plugin de paralelización PDNS. Se han realizado simulaciones de redes reales mediante ambos simuladores.

- Soporte y despliegue de MIPv6. Se ha llevado a cabo la instalación y configuración de Omnet++ y todas sus librerías en Lusitania y la compilación de XMIPv6, además se añade Mobiwan para NS2.
- Evaluación de resultados y extrapolación para predicción de las necesidades. Se realizaron
  pruebas sobre escenarios reales (Red Iris, Geant y AT&T) utilizando NS2 con el complemento
  PDNS en Lusitania y se analizaron los datos arrojados por el supercomputador en dichas
  simulaciones. Se han realizado pruebas con NS3 en Lusitania y se analizaron los resultados
  obtenidos. Por último se hizo una predicción y extrapolación de resultados.

#### **Publicaciones y congresos**

David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, Alfonso Gazo-Cervero, Juan Antonio Méndez-Barquero, Javier Fernández-Ramos: Supercomputing applied to Parallel Network Simulation.
 1st Workshop "Future Internet: Efficiency in high-speed networks" (W-FIERRO 2011).
 Cartagena. Noviembre 2011.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/cominfocom

#### SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS ÓPTICOS INTEGRADOS

#### Investigadores

Rafael Gómez Alcalá del Departamento de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones de la Universidad de Extremadura.



#### **Objetivos**

- Desarrollo de herramientas computacionales que permitan el diseño y simulación de dispositivos y sistemas de comunicaciones ópticas. El principal problema que surge en este tipo de análisis y diseño es la elevada complejidad computacional, lo que requiere el uso de recursos intensivos de computación.
- Con el proyecto se pretende poner a punto un simulador de dispositivos fotónicos y optoelectrónicos que permita analizar de forma genérica un sistema comercial de comunicaciones ópticas.

#### Metodología

La metodología de investigación asociada al análisis y diseño de dispositivos y sistemas de comunicaciones ópticas requiere la resolución de ecuaciones diferenciales lineales y no lineales. Para dispositivos integrados se utilizan métodos numéricos como el método de elementos finitos y el método de diferencias finitas. Estos algoritmos permiten resolver las ecuaciones diferenciales que rigen el funcionamiento de láseres, fibras ópticas, fotodetectores, moduladores, etc. Es especialmente destacable su aplicabilidad al estudio de la rotación no lineal de la polarización de la luz que, junto con la dispersión en el modo de polarización, constituye un elemento clave en el diseño de los sistemas de comunicaciones ópticas actuales.

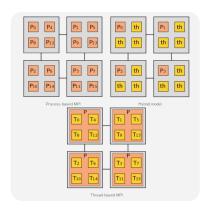
#### **Objetivos alcanzados**

- Como primera aproximación al uso del superordenador LUSITANIA, se ha evaluado la viabilidad del análisis de dispositivos ópticos integrados basados en microresonadores de anillo.
- Realización de un modelo para la simulación de filtros "add-drop" en régimen no lineal.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/diseno-y-simulacion-de-dispositivos-y-sistemas-de-comunicaciones-opticas

# EVALUACIÓN DE AZEQUIAMPI



#### **Investigadores**

Juan Carlos Díaz Martín del grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios) del DISIT (Departamento de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos) y del DACC (Departamento de Arquitectura de Computadores y Comunicaciones) de la Universidad de Extremadura.

#### Descripción

MPI es el estándar de hecho en la programación de supercomputadores. Las implementaciones actuales del estándar no consiguen escalar adecuadamente en arquitecturas basadas en clusters multicore o NUMA. Las aplicaciones deben ser construidas de forma que exploten el paralelismo en dos niveles: memoria distribuida mediante MPI, y memoria compartida mediante hilos (Open MP o Pthreads), en lo que se denomina sistema híbrido.

AzequiaMPI es la primera implementación completa del estándar MPI-1 basada en hilos y explota nativamente este tipo de sistemas. El objetivo fundamental del proyecto es evaluar la implementación actual en cuanto a rendimiento, escalabilidad y soporte para aplicaciones científicas. Para ello se compararán los resultados con otras implementaciones bien conocidas como MPICH2, Intel MPI o HP-MPI, y se mejorará, en lo posible, su comportamiento en grandes supercomputadores de memoria compartida.

#### Metodología

AzequiaMPI puede considerarse como una herramienta orientada a la construcción de aplicaciones distribuidas o paralelas en base a paso de mensajes, cuya evaluación y mejora será realizada en este proyecto. La evaluación consistirá en la ejecución de varias aplicaciones de medida de rendimiento (benchmarks); en el estudio de los resultados ofrecidos por ésta y otras implementaciones de paso de mensajes o PGAs; y en la aplicación de mejoras a la arquitectura objetivo y a otras más genéricas en base a la escalabilidad y los algoritmos internos de la biblioteca como, por ejemplo, las operaciones colectivas.

#### **Objetivos alcanzados**

- Se ha desarrollado una nueva implementación de AzequiaMPI basada en una estructura de datos lock-free para explotar con más eficiencia las arquitecturas de memoria compartida el estándar MPI. Se está en proceso de evaluación de la implementación y contraste con el resto de implementaciones del estándar.
- Se ha iniciado el estudio de disminución de consumo energético de las diferentas implementaciones del estándar MPI. Esperamos que las implementaciones basadas en

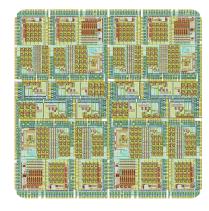
bloqueo como AzequiaMPI mejoren las implemtaciones actuales.

- Se ha conseguido compilar y ejecutar una nueva implementación del estándar MPI-1.3 desarrollada en la Universidad de Extremadura denominada AzequiaMPI. Tiene dos modos de ejecución, una bloqueante (AzequiaMPI-BLK) y otra no bloqueante (AzequiaMPI-LFQ).
- Se ha podido ejecutar benchmarks bien conocidos como HP-Linpack bajo la versión no bloqueante. El interés de ésta es que el procesador puede dedicarse a ejecutar otra aplicación MPI cuando la aplicación en curso está a la espera de recibir un mensaje. Otra posibilidad radica en detener el procesador para ahorrar energía.

#### Web

http://gim.unex.es/azequiampi http://www.cenits.es/proyectos/evaluacion-de-azequiampi

#### Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal



#### **Investigadores**

David Valencia Corrales. Departamento Tecnologías de los computadores y de las comunicaciones de la Universidad de Extremadura.

#### **Objetivos**

- Balanceo de carga eficiente con distribución heterogénea de datos en base a la potencia de cálculo disponible.
- Evaluación de patrones de computación y comunicación heterogéneos y eficientes.
- Evaluación de compiladores y librerías del sistema para mejorar el rendimiento de los algoritmos paralelos con distribución de carga dinámica.

#### Metodología

Utilización de librerías de paso de mensajes estándar y compiladores GNUs y propietarios para evaluar el código generado para cada nodo y su capacidad para escalar acorde al número de elementos de proceso disponibles. Programación en C/C++ sin necesidades de librerías adicionales. Integración con librerías matemáticas existentes en el sistema.

# **Objetivos alcanzados**

- Mejora sustancial de los tiempos de ejecución de los algoritmos paralelos de procesamiento de imágenes multicanal ejecutados.
- Los tiempos obtenidos mejoran en todos los casos (tanto en algoritmos paralelos homogéneos como en los heterogéneos)

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/algoritmos-paralelos-heterogeneos-para-procesamiento-deimagenes-multicanal

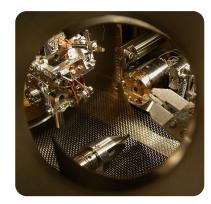
# NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología

#### **Investigadores**

Luis Landesa y José Manuel Taboada del Departamento de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones de la Universidad de Extremadura.

#### Descripción

Los nanosensores basados en nanoantenas permiten superar el límite de difracción de los dispositivos ópticos tradicionales, es decir,



permiten capturar o dirigir la emisión de luz con precisiones inferiores a la longitud de onda. Esto está abriendo un amplio abanico de nuevas aplicaciones, desde la fabricación de nuevos detectores con capacidad de observar objetos con precisiones por debajo de la longitud de onda de la luz hasta nuevos dispositivos de comunicaciones de gran ancho de banda y pasando por nuevos dispositivos de almacenamiento de elevada capacidad. Una de las características esenciales de las nanoantenas es la naturaleza plasmónica del comportamiento electromagnético de los metales. En el proyecto se pretende conseguir nuevos resultados y nuevas estructuras para mejorar las características de las nanoantenas.

#### Objetivos

- Diseño de nanoantenas formadas por nanotubos de oro y optimizadas para incrementar sus prestaciones.
- Análisis de los efectos de las imperfecciones en las nanoantenas.
- Estudio del comportamiento electromagnético de nanomateriales.

#### Metodología

Para el desarrollo de este proyecto se utilizarán herramientas ya testadas con éxito en LUSITANIA. El Grupo de Electromagnetismo Computacional de la Universidad de Extremadura ha desarrollado multitud de herramientas de análisis electromagnético para supercomputadores que se han comportado con éxito y han conseguido diversos logros reconocidos mundialmente. Para adaptarse al estudio de nuevos materiales en nanotecnología el Grupo ha adaptado estas herramientas para incorporar numerosos de los comportamientos extraordinarios de los nuevos nanomateriales, entre los que está el comportamiento plasmónico de los metales a frecuencias ópticas. Se aplicarán, al contrario que lo que se viene utilizando para estudiar el comportamiento electromagnético de los nanomateriales, formulaciones basadas en ecuación integral, puesto que facilitan el análisis de los mismos con mayor precisión.

#### **Publicaciones y congresos**

- J Rivero, JM Taboada, L Landesa et al, "Surface integral equation formulation for the analysis of left-handed metamaterials", Optics Express, 2010.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo and J. M. Bértolo, L. Landesa, F. Obelleiro and J.L. Rodriguez: "MLFMA-FFT Parallel Algorithm for the solution of large-scale problems in electromagnetics".
   ISSN: 1070-4698, E-ISSN: 1559-8985. Progress In Electromagnetics Research, Vol. 105, 15–30, 2010.
- MG Araujo, JM Taboada, F. Obelleiro, JM Bertolo, L Landesa, J Rivero et al, "Supercomputer aware aproach for the solution of challenging problems in electromagnetics", Progress In Electromagnetics Research, 2010.
- JM Taboada, L Landesa et al, "High scalability FMM-FFT electromagnetic solver for supercomputer systems", IEEE Antennas Propagat. Mag., 2009.

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/nanogather-analisis-y-diseno-nuevos-sensores-ennanotecnologi

# SIMULACIÓN DEL CÓMPUTO MASIVO DE LSP EN SISTEMAS INTERDOMINIO

#### Investigadores

Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.

#### Objetivos

- Reducción del coste temporal y de recursos de memoria requeridos por OpenSimRIPCA. OpenSimRIPCA es un simulador de redes MPLS (Multiprotocol Label Switching) con soporte para cómputo de LSP (Label Switched Paths) en entornos interdominio. Como característica adicional, OpenSimRIPCA incorpora avanzados mecanismos de colaboración ente PCE (Path Computation Elements) adyacentes cuyo rendimiento se desea evaluar.
- En este proyecto, OpenSimRIPCA se utilizará para computar más de 30 millones de LSP interdominio sujetos a múltiples restricciones de ingeniería de tráfico sobre una topología de red Pan-Europea formada por 28 dominios MPLS interconectados y siguiendo una arquitectura PCE. Se evaluará la capacidad de los mecanismos avanzados implementados en OpenSimRIPCA para reducir el tiempo de cómputo por LSP así como el volumen global de recursos empleados para ello.

#### Metodología

Se realizarán pruebas de estrés del simulador OpenSimRIPCA para evaluar los mecanismos avanzados de que se ha dotado al simulador.

Con la hipótesis de que dichos mecanismos reducirán los tiempo de cómputo de LSP y el uso de recursos de red, se analizarán los resultados para refinar el simulador así como los mecanismos en un proceso de refinamientos sucesivos hasta llegar a conclusiones favorables.

#### Web

http://www.manolodominguez.com/projects/opensimripca http://www.cenits.es/proyectos/simulacion-del-computo-masivo-lsp-en-sistemas-interdominio

# Optimization of the Diffused Matrix Format for Heterogeneous Parallel Computing



#### **Investigadores**

David Valencia Corrales y Alejandro Cristo García. Departamento de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones. Universidad de Extremadura.

#### **Objetivos**

- Con este proyecto se propone la optimización de la estructura Diffused Matrix Format (DMF), diseñada por el grupo de investigación GRNPS para el almacenamiento de imágenes adquiridas por sensores a bordo de aviones y satélites.
- Debido al gran tamaño de la información recogida por dichos sensores, dicha optimización se centrará en la indexación de la estructura mediante un árbol tipo Quad-Tree, el cual permitirá dividir la imagen en diferentes regiones (nodos DMF) acorde al número de mediciones adquiridas
- Esta modificación de la estructura la convierte en potencial para el procesamiento paralelo heterogéneo, en donde los nodos con mayor número de mediciones pueden ser procesados por las máquinas más potentes, y viceversa.

#### Metodología

La estructura DMF se basa principalmente en la construcción de una matriz cuyas celdas son listas de unidades básicas de medición (DMR).

La idea es indexar dicha matriz, de tal manera que la nueva estructura consistirá en un árbol de tipo Quad-Tree cuyas hojas estarán constituidas por una determinada región de la imagen en formato DMF, según el número de mediciones.

Se pretende realizar algoritmos de procesamiento básicos de imágenes multiespectrales sobre la nueva estructura, de tal manera, que las unidades de procesamiento más rápidas pueden hacerse cargo de las hojas con más mediciones, y las más lentas, de las hojas con menos mediciones.

Es interesante realizar un estudio sobre el balance óptimo que permita minimizar el tiempo de ejecución teniendo en cuentas diversos parámetros, siendo los más importantes el número de nodos del árbol, el tamaño de celda de las matrices DMF, y el tiempo empleado en las comunicaciones entre las diversas unidades de procesamiento.

#### **Objetivos alcanzados**

- Se han conseguido aislar las fluctuaciones de rendimiento que aparecen en los códigos multihilo en sistemas heterogéneos por medio del binding de procesos a núcleos/procesadores.
- Mejora de la planificación por medio de reutilización de huella de memoria caché y el conocimiento explícito.
- Parte de los resultados de la investigación se está incluyendo en la tesis doctoral de D.
   Alejandro Cristo García con el Dr. David Valencia Corrales como codirector de Tesis.

#### Publicaciones y congresos

- Cristo A, Martínez P, Valencia D, Pérez RM, Hernández LM (2011). "Adaptation of the Diffused Matrix Image Format to Store Simulated Data from FLEX / Sentinel-3 Future ESA Missions".
   3rd International Conference on Image Processing & Communications, Bydgoszcz, Polska.
- Hernández LM, Cristo A, Martínez P, Pérez RM (2011). "Diffused Matrix Format (DMF): A Data Structure for Airborne and Spaceborne Image Processing". ESA Advanced Training Course in Land Remote Sensing, Kraków (Polska).

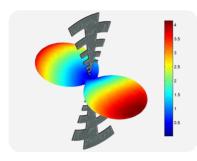
#### **Financiación**

Junta de Extremadura Fondo Social Europeo

#### Web

http://www.cenits.es/proyectos/optimization-diffused-matrix-format-heterogeneous-parallel-computing

Supercomputing electromagnetics for plasmonic nanostructures. Application to optical nanoantennas and metamaterials



#### Investigador principal

José Manuel Taboada del Departamento de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones de la Universidad de Extremadura.

#### Descripción

The unprecedented ability of nano metallic (that is plasmonic) structures to concentrate light into deep-subwavelength volumes has propelled their use in a vast array of nanophotonic technologies and research endeavors. The field of plasmonics has grown dramatically over the past decade and still continues growing towards new directions that are continuously emerging. With the ability to produce highly confined optical fields, the conventional rules for light-matter interactions need to be re-examined, and researchers are venturing into new formulations. We are presenting a project, with the primary objective of extending the scope of applications of exact integral-equation (IE) method of moments (MoM) formulations to the electromagnetic analysis of plasmonic nanostructures and artificial materials (metamaterials) in visible and near-infrared frequency bands.

This new project can be seen as the natural continuation of the previous one in which the most efficient algorithms have been successfully combined with smart parallelizing strategies, resulting in highly efficient and scalable EM codes, having achieved the World Record in computational electromagnetics for several times. Now we confront a new challenge: to extend the use of exact MoM solutions to nanoscience and nanotechnology fields. So we must reformulate the integral equations in order to model plasmonic effects associated with resonant collective oscillations which appear in metals at optical frequencies. This basic objective will enable later application objectives, namely to go deep into the accurate design of optical nanoscale antennas and artificial materials and their applications. Optical antennas will allow the nanoscale control of the direction of photon emission, which will enhance many sensing and detection applications in the optical domain, such as nano-optical microscopy, spectroscopy and light emitting devices, including single-photon sources. Regarding the artificial materials, by removing conventional constraints on realizable properties, attainable in naturally occurring materials, the metamaterial concept enables the possibility of creating artificial media with unusual electromagnetic/optical properties, such as negative index of refraction, plasmonic behavior, etc.; which enables a wide range of applications in the fields of electromagnetic and optical technologies.

We know that the objectives proposed in this project are in the leading edge frontier of science, but the experience in previous projects together with our solid background in electromagnetism constitute the best guarantees for the successful overcoming of the tasks involved in this new challenge, mainly taking into account that they are firmly grounded in classical electrodynamics.

- Supercomputing electromagnetic tools for plasmonic materials and metamaterials: The first
  objective is to extend the scope of applications of the SIE-MoM formulations and latest
  breakthroughs in fast and parallel integral-equation algorithms to the electromagnetic
  analysis of plasmonic nanostructures and artificial materials in visible and near-infrared
  frequency bands. This main objective is divided in the following partial objectives:
- SIE-MoM formulations for plasmonic materials and metamaterials: The basic SIE-MoM formulations will be developed for the solution of problems with multiple plasmonic and metamaterial objects. We will focus on formulations with proved high accuracy and convergence. These formulations will be adapted and further optimized to account for the quite different and non-naturally occurring electromagnetic response of metamaterials and plasmonic media at optical frequencies.
- Fast algorithms and parallelization in HPC computers: Efficient fast solving algorithms will be
  redesigned and adapted to the previous formulations by considering the unusual behavior of
  waves that might appear in these generalized media. The FMM and MLFMA will be chosen for
  shared-memory computers. For distributed and mixed memory configurations, the high
  scalability MLFMA-FFT will be adapted and parallelized, allowing to benefit from the
  availability of massively parallel supercomputers, with thousands of parallel processors and
  large amounts of memory.
- Engineering nanoscience applications: The other main objective is the application of the implemented advanced techniques to the precise electromagnetic analysis of artificial materials and plasmonic nanostructures. Among the vast number of applications we will focus on those that are most promising, in the leading edge of nanoscience and nanotechnology, and where greater benefits can be taken from the proposed simulation tools. This objective is divided in two partial objectives:
- Plasmonic nano-optical antennas: We will address the precise design of optical nanoscale antennas and array antennas for field enhancement and directional light emission. This will lead to important advances in many applications, from nano-optical microscopy and spectroscopy to quantum-computing. For example, we will attempt to demonstrate the feasibility of complete wireless nano-optical links supported by directive array nanoantennas. For the most challenging and computationally intensive tasks in the scope of this objective, we will count on the support provided by CESGA and CénitS supercomputing centers.
- Analysis and design of metamaterials: We will apply the SIE-MoM formulations to the solution of homogenized LHM problems. We will mainly focus on control of light applications, including the accurate design of hyperlenses, as well as on the design of electromagnetic selective frequency panels. At a second stage, we will address the detailed design of the microscopic plasmonic subunits to obtain the desired effective macroscopic parameters for artificial materials. This challenging task will require the resolution of extremely large matrix systems, for which we count on the support provided by CESGA and CénitS.

# Financiación

• Ministerio de Ciencia e Innovación

# Web

• http://www.cenits.es/proyectos/electromagnetismo-y-supercomputacion-parananoestructuras-plasmonicas-aplicacion-nanoanten

# **PROYECTOS CONCLUIDOS**

En este apartado se resumen los proyectos concluidos más relevantes que han sido desarrollados con los recursos de CénitS.

#### Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones

#### Investigadores

Luis Landesa y José Manuel Taboada del Departamento de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones de la Universidad de Extremadura.

#### Objetivos alcanzados

- Análisis de estructuras reales en frecuencias de Terahercios y desarrollo de un nuevo método de computación para el análisis electromagnético de estructuras extremadamente grandes.
- Dos records mundiales en supercomputación.
- Finalistas del Itanium Innovation Award en la categoría de "Computationally Intensive Applications".

#### MEDIDA DE DOSIS NEUTRÓNICAS EN PACIENTES SOMETIDOS A RADIOTERAPIA

#### **Investigadores**

Juan Ignacio Lagares perteneciente a la Unidad de Aplicaciones Médicas del CIEMAT. Francisco Sánchez Doblado y María Teresa Romero Expósito, del Departamento de Fisiología Médica y Biofísica/Servicio de Radiofísica de la Facultad de Medicina de la Universidad de Sevilla.

- Valorar el riesgo radiológico asociado a la presencia de neutrones para realizar una mejor elección de la estrategia terapéutica y disminuir la probabilidad de adquirir una nueva neoplasia por radioinducción.
- Realizar experimentos que cubran la mayoría de las situaciones clínicas comunes en los aceleradores de diversos fabricantes con energías comprendidas entre 15 y 23 MV. También se contempla la geometría de la sala de tratamiento, en términos del tamaño del bunker.
- Realizar el estudio dosimétrico con diferentes detectores y su correlación con las medidas del dispositivo digital: espectros neutrónicos con simulaciones Monte Carlo.

# Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con EUTERPE

#### Investigadores

Edilberto Sánchez González. Francisco Castejón Magaña. Iván Calvo Rubio. Pertenecientes a la Unidad de Teoría del Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT.

#### Objetivos alcanzados

- Se han llevado a cabo simulaciones para estudiar la dependencia de la calidad de las simulaciones no lineales realizadas con EUTERPE con parámetros de entrada como paso de tiempo del integrador, número de marcadores y número de nodos en la malla espacial. Se han estudiado inestabilidades ITG en el stellarator TJ-II a través de simulaciones en régimen lineal en la configuración estándar (100\_44\_64), para plamas con \beta = 0%. Se han caracterizado las tasas de crecimiento de estas inestabilidades en esta configuración.
- Se ha estudiado el confinamiento de impurezas en plasmas turbulentos en simulaciones en geometría cilíndrica usando perfiles de densidad y temperatura similares a los medios experimentales en el stellarator W7AS en modos de alto confinamiento (IC). Se encontraron inestabilidades numéricas que han impedido avanzar en estos regímenes.
- Para el estudio de la topología de flujos turbulentos, se han realizado simulaciones lineales en geometría cilíndrica usando un perfil de transformada rotacional de tipo tokamak. Cambiando los perfiles de densidad y temperatura se han encontrado regímenes con diferentes grados de inestabilidad ITG y diferentes espectros, que posteriormente serán análizados en el régimen no lineal y caracterizados desde el punto de vista topológico.

#### CÁLCULO DE LA CORRIENTE DE BOOTSTRAP EN EL STELLARATOR TJ-II

#### **Investigadores**

José Luis Velasco Garasa del Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

# **Objetivos alcanzados**

• El uso de Lusitania permitió calcular los coeficientes monoenergéticos asociados a la corriente de bootstrap en varias posiciones del plasma y para varios valores de la colisionalidad y el campo eléctrico.

Dinámica fuera del equilibrio del modelo de Heisenberg tridimensional en presencia de un campo magnético

#### Investigadores

Juan Jesús Ruiz Lorenzo del Departamento de Física de la Universidad de Extremadura. Antonio Gordillo Guerrero del departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Automática de la Universidad de Extremadura.

#### Objetivos

- Simular el modelo de Heisenberg spin glass en tres dimensiones en presencia de campo magnético externo.
- Intentar reproducir los importantes resultados experimentales de memoria y rejuvenecimiento (grupo de P. Nordblad et al.).
- Caracterizar mediante métodos de dinámica fuera del equilibrio la existencia de transición de fase en presencia de campo magnético.

# CONSOLIDER TECNO\_FUS

#### Investigadores

José Mª Gómez Ros CIEMAT.

- Lanzar el nuevo Programa de Tecnología de Fusión en España que integra interactivamente áreas clave de la tecnología de fusión. Las actividades se articulan alrededor del desarrollo de un concepto de envoltura regeneradora y sus sistemas auxiliares "de planta".
- Atender a los requisitos funcionales como componente: integridad estructural, blindaje de la radiación, eficiencia en la extracción de potencia y garantías de regeneración de combustible.
   Los sistemas envoltura son clave en reactores de producción de potencia por fusión y sus desarrollos cruciales en el camino de la fusión hacia la producción energética masiva.
- Alcanzar capacidades de diseño de un reactor de potencia (DEMO) en la próxima década.

# IFMIF-EVEDA ESPAÑA

#### Investigadores

Fernando Mota García. Laboratorio Nacional de Fusión. CIEMAT. Ángela García Sanz. Laboratorio Nacional de Fusión. CIEMAT.

#### **Objetivos**

- Diseño y desarrollo del prototipo del acelerador de IFMIF (International Fusion Materials Irradiation Facility) llamado IFMIF-EVEDA (construyéndose en Rokkaso – Japón).
- Desarrollo del diseño de la instalación IFMIF.
- Colaboración en los desarrollos de los módulos del Test Cell (área de irradiación) y en el desarrollo de todo el sistema de Remote Handling.

# SOPORTE PORTING A USUARIOS DEL CIEMAT EN LA PLATAFORMA LUSITANIA

#### **Investigadores**

Antonio Muñoz Roldán perteneciente al Departamento de Informática del CIEMAT.

#### **Objetivos alcanzados**

- Hemos realizado labores de soporte, información, consultoría a usuarios del CIEMAT con el objetivo de portar sus códigos a la plataforma Lusitania.
- Los principales logros han sido el código MCNPX en configuración paralela utilizando la librería de paso de mensajes MPI y el código EUTERPE.

CREACIÓN DE UN ECOSISTEMA DE NEGOCIO EN CLOUD COMPUTING. GESTIÓN AUTOMATIZADA DE LA INFRAESTRUCTURA. (IAAS, INFRAESTRUCTURE AS A SERVICE)

#### Investigadores

Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.

#### **Objetivos alcanzados**

 Investigación exhaustiva sobre el paradigma de cloud computing y sus diferencias con el grid computing.

- Estudio y asistencia a la preparación de la infraestructura de cloud computing montada para la consecución del proyecto.
- Estudio teórico y práctico sobre el manejo de herramientas vanguardistas para la administración de infraestructuras cloud y software ofrecido por HP.
- Adquisición de experiencia en el seguimiento de las fases descritas por un ciclo de vida estructurado.
- Investigación y comparación de las diferentes alternativas para la construcción del portal para el ecosistema de negocio.
- Aprendizaje del manejo de herramientas que asisten el desarrollo de aplicaciones web.
- Adquisición de experiencia en el manejo de sistemas gestores de bases de datos.
- Introducción a conceptos que mejoran el producto final: generación automática de plantillas de servicios.
- Construcción de un portal web que constituye el front-end del ecosistema de negocio cloud.



# PROYECTOS DE INNOVACIÓN EN COLABORACIÓN CON ORGANISMOS PÚBLICOS Y PRIVADOS

En este apartado se resumen las colaboraciones más importantes llevadas a cabo, tanto con organizaciones privadas como con organismos públicos, que utilizan los recursos de CénitS para desarrollar proyectos innovadores.

Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación

#### Descripción

Este proyecto, asistencial y de investigación, está siendo desarrollado por la Unidad de Genética del Infanta Cristina (Servicio Extremeño de Salud), investigadores de la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX.

Las nuevas técnicas de secuenciación masiva de ADN que se están imponiendo actualmente en la Biotecnología permiten secuenciar el genoma de una persona cada vez más rápido, gracias a supercomputadoras como LUSITANIA, que además de procesar la ingente cantidad de datos necesarios, permiten simular rasgos complejos de genes, y estudiar la información contenida en el ADN, estructuras subatómicas y estructura tridimensional y aminoacídica de las proteínas.

- Investigación de enfermedades genéticas y neurodegenerativas.
- Investigación sobre el desarrollo y la predisposición genética a distintos tipos de cáncer y
  posterior mejora en la determinación de estrategias para prevenirlos y tratarlos
  adecuadamente.
- Análisis genético sobre enfermedades hereditarias y predisposición a determinadas enfermedades, y posterior mejora en la determinación de estrategias para prevenirlas adecuadamente.
- Detección prematura de errores de metabolismo y enfermedades raras, minoritarias o huérfanas, de origen genético.

# CEDIN (CENTRO EXTREMEÑO DE DISEÑO INDUSTRIAL)

#### Centro de Investigación

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).

#### Descripción

CEDIN es un proyecto de innovación tecnológica que surge tras observar las carencias de las empresas extremeñas tanto en herramientas de diseño como en medios para desarrollar nuevos productos o procesos.

La principal innovación del proyecto está en la forma en que se utilizan los servicios de diseño ya que, mediante una herramienta colaborativa online, se les permite a las empresas tener un papel fundamental y más participativo en el desarrollo de sus propios diseños.

Las empresas pueden optar por utilizar el software avanzado por horas y recibir formación si lo requieren, contar con los servicios de los técnicos especializados desplazados en sus propias instalaciones o solicitar la gestión del contacto con algún especialista de diseño internacional en la materia que se desee.

#### **Objetivos**

 Aproximar una central de diseño mediante la creación de puestos combinados de diseño remoto y la sustentación de proyectos que impulsen la creatividad y la innovación en la industria extremeña así como su implicación con la sociedad de la información, y por lo tanto, lo que se busca es un planteamiento totalmente virtual de una herramienta de diseño que esté al alcance de cualquier empresario, o profesional que lo desee, con tan sólo una conexión a esta central de diseño.

# COLABORACIÓN CON EL OBSERVATORIO TECNOLÓGICO UEX-HP

#### Investigadores

Universidad de Extremadura y HP

#### Descripción

COMPUTAEX colabora con la multinacional HP a través de un convenio, mediante el cual la Fundación alberga la infraestructura de productos hardware que HP aporta para llevar a cabo un Proyecto de Cloud Computing. De este modo COMPUTAEX y su centro CénitS colaboran en el desarrollo del Observatorio Tecnológico creado por la Universidad de Extremadura y Hewlett Packard para el fomento de la I+D+IT.

- Alojar y dar cobertura a proyectos de Cloud Computing y Calidad de Software.
- Establecer políticas que garanticen la seguridad y restricción de acceso a la información.
- Garantizar el Acceso a las Red Científico Tecnológica de Extremadura, a la red académica y de investigación española (RedIRIS) y a las redes europeas y mundiales.
- Transferir conocimientos y fomentar el I+D en la región.

# ALOJAMIENTO DE PLATAFORMAS VIRTUALES Y WEBTV (ALDEALAB C3)

#### Descripción

El Centro de Conocimiento de Cáceres AldeaLab C³ surge como espacio físico y virtual de innovación especializado en tecnologías y medios de difusión, con el fin de impulsar las iniciativas creativas, culturales y de conocimiento a través de soportes audiovisuales y multimedia.

- Fomentar la formación, la creatividad, la innovación, la participación ciudadana, la cultura y el patrimonio.
- Redefinición de los medios de comunicación locales y la creación de medios públicos.
- Generar dinámicas de trabajo para que emerja el talento.
- Contribuir al nacimiento de una nueva visión que permita articular nuevos nichos de desarrollo económico en la ciudad como polo de atracción cultural e innovador de futuro.
- Promover el aprendizaje de los ciudadanos y de las empresas en nuevas prácticas, de modo transversal e informal, para que aprendan haciendo.

#### SIBE

#### Centro de Investigación

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).

#### Descripción

El proyecto SIBE está orientado a satisfacer una necesidad actual, en España y en muchos países, tanto de Iberoamérica como de otras regiones del mundo. Se trata de establecer rankings de publicaciones científicas, en Economía de la Empresa, en lengua española, basados en indicios de calidad, generalmente aceptados.

Es un proyecto complejo, que maneja varios campos del conocimiento, en el entorno de la Gestión del Conocimiento: bibliométrico, bibliográfico, bases de datos relacionales, trabajo en red, informática, comunicaciones en tiempo real, y otros. El proyecto ha ido evolucionando, desde antes del año 1995 en que comenzó, en la Universidad de Extremadura.

#### **Objetivos**

- Ofrecer a las distintas audiencias del proyecto, información actualizada, de la situación comparada de las revistas científicas en Economía de la Empresa, empleando los Índices internacionales de calidad.
- Ofrecer la información en distintos ámbitos geográficos, partiendo del español.

#### MEDIANELL VIRTUAL PRESS

#### Descripción

Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L. es una empresa de base tecnológica que tiene como objetivo comercializar la mercancía más importante del siglo XXI: "los contenidos".

#### Objetivos

 Crear una central de gestión y generación de contenidos digitales (bases de datos comunes), junto con una red de periódicos digitales que hagan uso de dicha central, y que los contenidos digitales que estos periódicos generan, referentes a su ámbito de actuación, entren a su vez a formar parte de la central de contenidos.

#### FUTURE INTERNET: EFICIENCIA EN LAS REDES DE ALTAS PRESTACIONES

#### Descripción

FIERRO es una red temática patrocinada por el Ministerio de Ciencia e Innovación y formada por 21 Grupos de investigación de Universidades, Centros de Investigación y Empresas españolas cuya finalidad consiste en estudiar las limitaciones actuales de las redes IP de altas prestaciones (redes de alta velocidad, metro y troncal) para diseñar la Internet del Futuro:

- Escalado en volumen de tráfico. La popularización masiva de enlaces de acceso a red desde el usuario final en el orden de 1 Gbps, implica un salto proporcional en el volumen de tráfico que las redes de agregación de altas prestaciones deben soportar. Como ejemplo en el plazo más corto, la introducción de FTTH (Fiber To The Home) de manera masiva implica hoy en día unos accesos de 50-100 Mbps por usuario en el canal descendente, que es alrededor de un orden de magnitud mayor al acceso estándar más popularizado. La experiencia dicta que cuando ese ancho de banda se ofrece al usuario final, éste lo usa.
- Escalado en granularidad de tráfico. La convergencia de servicio multimedia sobre IP en la Internet del Futuro es asumida como un hecho. Esto implica una explosión en el número de flujos sujetos a restricciones de QoS. Los servicios IPTV dentro de los paquetes Triple-Play se consideran las killer-applications en este entorno.
- Escalado en la variabilidad del tráfico y la movilidad. El acceso a través de redes celulares, implica que fuentes móviles pueden ser generadoras de flujos del orden de Mbps/Gbps. En las redes IP de altas prestaciones donde el tráfico es agregado, la movilidad de flujos de ancho de banda relevante redunda en una mayor variabilidad del tráfico.

CénitS es uno de los Centros Tecnológicos participantes que aporta su experiencia y sus recursos tecnológicos y humanos a la Red Temática FIERRO.

#### Objetivos

- Creación de un entorno de trabajo formado por los diferentes grupos de la Red con proyección internacional.
- Búsqueda de sinergias entre los distintos miembros de la Red a fin de crear nuevas relaciones de colaboración.
- Proporcionar un marco estable de colaboración a relaciones ya existentes entre algunos de los miembros de la Red.
- Exposición y divulgación de los trabajos de investigación realizados hasta la actualidad por los distintos miembros de la Red sobre el tema.
- Fomentar la relación universidad-empresa.

- Búsqueda de recursos adicionales para la realización de algunas de las actividades objetivo de esta Red, como pueden ser la realización de reuniones plenarias, reuniones técnicas o workshops, etc.
- Complementar las acciones a realizar en los proyectos de investigación nacionales en los cuales algunos de los miembros de la Red están actualmente participando.
- Preparación de nuevas propuestas para participación en proyectos nacionales.
- Preparación o participación en nuevas propuestas de proyectos europeos.

#### RED ESPAÑOLA DE E-CIENCIA

#### Descripción

La Red Nacional de e-Ciencia persigue coordinar e impulsar el desarrollo de la actividad científica en España mediante el uso colaborativo de recursos geográficamente distribuidos e interconectados mediante Internet. En la red participan usuarios y expertos en aplicaciones de diversas disciplinas científicas (biocomputación, imagen médica, química computacional, fusión, meteorología, etc.), investigadores en el ámbito de las TIC y centros proveedores de recursos, quedando así representados todos los actores de la e-Ciencia.

La necesidad de la e-Ciencia se fundamenta en la creciente exigencia por parte de los científicos de más recursos de procesamiento y almacenamiento de datos, así como de nuevas formas de trabajo colaborativo que conduzcan a la sociedad del conocimiento.

El desarrollo de la e-Ciencia permitirá nuevos modelos de aplicaciones y desplegar middlewares que permitan explotar eficientemente los recursos de la comunidad científica. La integración de recursos y equipos permitirá una coordinación más efectiva de los grupos españoles y facilitará su participación en proyectos europeos e internacionales.

Adicionalmente, la red persigue crear una Iniciativa de Grid Nacional, impulsar la adopción de la Supercomputación y el Grid en la comunidad investigadora española, con el objetivo de mejorar su productividad científica, y gestionar el conocimiento para fomentar las sinergias y evitar duplicidades.

El centro CénitS se incorpora en 2011 a la red de e-Ciencia de España en el área de supercomputación aportando su experiencia y sus recursos tecnológicos y humanos.

#### Objetivos

- Disponer de una Infraestructura de e-Ciencia, coordinada entre diferentes instituciones, que facilite el acceso a usuarios de diferentes áreas de la ciencia a recursos de Supercomputación e Infraestructuras Grid.
- Mejorar la participación española en proyectos europeos de e-Ciencia.
- Mejorar la excelencia científica a través del acceso a las e-Infraestructuras.
- Creación de una cultura de e-Ciencia a través de la formación, difusión y promoción del concepto de e-Ciencia.
- Consolidación de las relaciones científicas con los países europeos, particularmente con Portugal, y con otros países no europeos de interés estratégico para España.



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

### RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

Para un centro de investigación e innovación tecnológica como CénitS es especialmente importante la obtención de resultados de investigación que pongan de relieve la actividad desarrollada.

CénitS ha permitido a un notable número de investigadores e innovadores acometer sus actividades, muchas de las cuales han tenido importante visibilidad en publicaciones que inician la necesaria transferencia tecnológica que la Fundación COMPUTAEX tiene como una de sus prioridades.

Esta sección presenta los resultados más notables que han sido publicados en congresos y revistas. Se han incluido también en esta sección los casos de éxito, distinciones y reconocimientos obtenidos en 2011 por la Fundación COMPUTAEX.

### **C**ONGRESOS

Supercomputing applied to Parallel Network Simulation

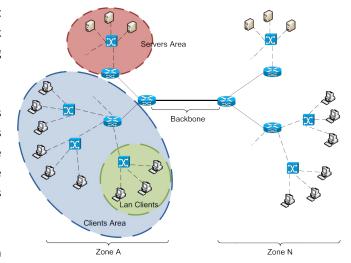
David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, Alfonso Gazo-Cervero, Juan Antonio Méndez-Barquero, Javier Fernández-Ramos

1st Workshop "Future Internet: Efficiency in high-speed networks" (W-FIERRO 2011)

Nowadays, network simulation is one of the most powerful tools to study and develop new network protocols and applications. Not only implementing new protocols but also modifying the current ones.

With this approximation, a range of possibilities is opened on the research and the industry fields. This implies that the scenarios to simulate should be more realistic to study the impact produced by the new protocols and architectures in the current ones which are under production.

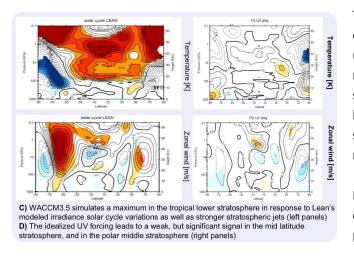
In this paper we present a different approach deployed in Lusitania Supercomputer to simulate



large-scale network scenarios. The complexity of these scenarios compared with the sequential simulation is bigger and the simulation time is improved due to the computing performance of the supercomputer.

# SPARC SOLARIS & HEPPA Intercomparison Activities: Sensitivity of the atmospheric response to idealized spectrally resolved solar forcing in WACCM3.5

# G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera, and N.Calvo WCRP Open Science Conference 2011



To date, most (chemistry) climate modeling studies of 11-year solar cycle effects use the Lean data set (Lean et al., 2005) as input for the spectrally-resolved solar forcing. The variations of the spectral solar irradiance estimated by others point at a higher solar cycle amplitude in the UV part of the spectrum (e.g., Krivova et al., 2006) which is responsible for heating and ozone chemistry.

Recent SORCE/SIM measurements also show a different spectral behaviour of the radiation as previously thought (Harder et al., 2009).

A major limitation of satellite measurements, upon which empirical models of solar variability are based, is that the instrumental uncertainty becomes comparable or higher than the solar cycle variations at wavelengths longer than 250-300nm. We test this sensitivity by increasing the radiation between 300-400nm for solar maximum and minimum conditions by 1%.

All other forcings are kept constant (e.g., SSTs, GHGs), and therefore simulated changes in the model climate can be unambiguously attributed to the imposed changes in the solar forcing.

#### APLICABILIDAD DE LA SUPERCOMPUTACIÓN AL MODELADO DE SISTEMAS

# J. Corral-García, D. Cortés-Polo, C. Gómez-Martín, J.L. González-Sánchez, F. Lemus-Prieto, A. Bejarano-Borrega, J. Lázaro-Jareño

XXIX Congreso Anual de la Sociedad Española de Ingeniería Biomédica (CASEIB 2011)

Hoy en día, el avance de la computación de altas prestaciones permite a los investigadores modelar y simular sistemas complejos en el campo de la biomedicina. Estas investigaciones se benefician de las grandes capacidades de cálculo así como de las posibilidades de almacenamiento para simular/modelar estructuras que, de otra manera, se tardarían varios años en solucionar.

Para obtener los mejores resultados, es importante que los investigadores conozcan las posibilidades que la computación ofrece para resolver sus propuestas y obtener el máximo rendimiento en tiempo consumido y recursos usados. La supercomputación de memoria compartida probablemente sea la forma más simple de explotar el paralelismo y encontrar un equilibrio adecuado entre tiempo y recursos compartidos entre procesos paralelos.

Al ser una tecnología ya madura, los investigadores tienen a su alcance una gran potencia de cálculo que mejora los tiempos de obtención de los resultados así como capacidad de almacenamiento de los datos generados.

En este artículo se presenta la computación de memoria compartida como una posibilidad más ante las necesidades de la comunidad científica en el campo de la bioingeniería así como los proyectos que han sido puestos en marcha sobre la misma plataforma.



### **REVISTAS**

SOLVENT EFFECTS ON THE STRUCTURE AND SPECTROSCOPY OF THE EMITTING STATES OF 1-PHENYLPYRROLE

Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar. Publicación: Journal of Chemical Theory and Computation, Abril de 2011, 7, 1850–1857.

Theoretical calculations of absorption and fluorescence properties of 1-phenylpyrrole have been performed, at the CASPT2//CASSCF level, in the gas phase and in acetonitrile solution, using in the latter case the ASEP/MD method. In addition to a locally excited state, it was also possible to identify a candidate intramolecular charge transfer state that could explain the second red-shifted fluorescence band that appears in polar solvents. In the gas phase, the charge transfer state is found to lie higher in energy than the locally excited state and the FranckàCondon absorption state, making it unlikely to be reached under these conditions. In acetonitrile solution, the charge transfer state is stabilized and lies much closer to the locally excited state, becoming accessible after absorption. The results indicate that the free-energy surface of the charge transfer state is very flat in solution, and several geometries are possible, ranging from almost planar to twisted and bent. Solvent caging and transition probabilities favor emission from structures with a small twist angle between the rings and without a pyramidal atom.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/solvent-effects-structure-and-spectroscopy-emitting-states-1-phenylpyrrole

Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions:

On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst

David Cantillo, Bernhard Gutmann and C. Oliver Kappe.

Publicación: Journal of the American Chemical Society. Marzo de 2011.

$$R = N + NaN_3 \xrightarrow{N_3} N_3$$

$$NMP + NaN_3 \xrightarrow{NMP} N$$

$$NMP = N$$

$$NMP = N$$

$$N = N$$

The mechanism of the azide-nitrile cycloaddition mediated by the known dialkylltin oxide-trimethylsilyl azide catalyst system has been addressed through DFT calculations. The catalytic cycle for this tin/silicon complex-based mechanism has been thoroughly examined, disclosing the most plausible intermediates and the energetics involved in the rate enhancement. In

addition, a new catalyst, 5-azido-1-methyl-3,4-dihydro-2H-pyrrolium azide, is presented for the formation of tetrazoles by cycloaddition of sodium azide with organic nitriles under neutral conditions. The efficiency of this organocatalyst, generated in situ from N-methyl-2-pyrrolidone (NMP), sodium

azide, and trimethylsilyl chloride under reaction conditions, has been examined by preparation of a series of 5-substituted-1H-tetrazoles. The desired target structures were obtained in high yields within 15–25 min employing controlled microwave heating. An in depth computational analysis of the proposed catalytic cycle has also been addressed to understand the nature of the rate acceleration. The computed energy barriers have been compared to the dialkylltin oxide–trimethylsilyl azide metal-based catalyst system. Both the tin/silicon species and the new organocatalyst accelerate the azide–nitrile coupling by activating the nitrile substrate. As compared to the dialkylltin oxide–trimethylsilyl azide method, the organocatalytic system presented herein has the advantage of higher reactivity, in situ generation from inexpensive materials, and low toxicity.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-azide%E2%88%92nitrile-cycloadditions-dialkyltin-oxide%E2%88%92trimethyl

Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: Structure and stereodynamics

R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, Mark E. Light, José L. Jiménez, Juan C. Palacios, Esther M.S. Pérez, Vicenta Rastrojo

Publicación: Tetrahedron. Marzo de 2011, 67, 2025-2034.

Varias bases de Schiff derivadas de N-aminoheterociclos y naftaldehídos se han sintetizado y se ha llevado a cabo un exhaustivo análisis conformacional para justificar la tendencia a adoptar estructuras de imina en todos los casos. Cálculos teóricos de alto nivel realizados con el supercomputador LUSITANIA, incluyendo el efecto del disolvente, han permitido comprobar que la presencia del par de electrones del nitrógeno adyacente a la agrupación imínica es clave en la estabilización de dicha forma tautomérica.

#### Web

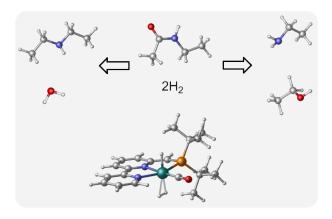
http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/hydrazones-hydroxy-naphthaldehydes-and-naminoheterocycles-structure-and-stere

Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides — C—N vs. C—O Cleavage

#### David Cantillo.

Publicación: European Journal of Inorganic Chemistry. Mayo de 2011, 3008-3013.

La reacción de hidrogenación es una de las más importantes en Química. Se trata de procesos muy complicados que requieren elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores adecuados. Los catalizadores basados en rutenio son uno de los más importantes y estudiados. Sin embargo, el



mecanismo mediante el que transcurre la transformación había sido desconocido hasta el momento.

Cálculos de Química Computacional realizados en el supercomputador LUSITANIA han permitido a investigadores de la Universidad de Extremadura conocer todos los pasos a través de los cuales transcurre el proceso, los cambios de energía implicados, así como explicar la formación de los diferentes compuestos químicos a que da lugar la hidrogenación.

Estos importantes resultados han sido publicados en un artículo en la prestigiosa revista internacional European Journal of Inorganic Chemistry, bajo el título Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/mechanistic-insights-ruthenium-catalyzed-hydrogenation-amides-%E2%80%93-c%E2%80%93n-vs-c%E2%80%93o-cle

SCHIFF BASES FROM TRIS AND ORTHO-HYDROXYARENECARBALDEHYDES:
STRUCTURES AND TAUTOMERIC EQUILIBRIA IN THE SOLID STATE AND IN SOLUTION

Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, Juan C. Palacios.

Publicación: European Journal of Organic Chemistry. Mayo de 2011, 3137-3145.

Tres bases de Schiff han sido sintetizadas por condensación de un aminopoliol sencillo, TRIS, con 5-bromo, 5-yodosalicilaldehído y 2-hidroxi-1-naftaldehído, y caracterizadas por completo tanto en estado sólido como en disolución. En este estudio se ha analizado el equilibrio imina-enamina de todos los derivados preparados con objeto de arrojar luz sobre el mecanismo de la transferencia del hidrógeno.

El supercomputador LUSITANIA ha permitido simular, a través de cálculos DFT a alto nivel, la influencia del empaquetamiento cristalino sobre la estabilidad del tautómero predominante en estado sólido. Así, se ha simulado un cluster supramolecular en torno a una molécula central con estructura de imina y de enamina. Este estudio ha mostrado la mayor estabilidad de las formas enamínicas en el cluster, en total concordancia con la estructura encontrada en estado sólido.

#### Web

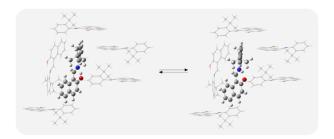
http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/schiff-bases-tris-and-ortho-hydroxyarenecarbaldehydes-structures-and-tautomeri

Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state

## R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light and Juan C. Palacios

Publicación: Organic & Biomolecular Chemistry. Septiembre de 2011, 9, 8268-8275

Schiff bases derived from hydroxyl naphthaldehydes and o-substituted anilines have been prepared and their tautomerism assessed by spectroscopic, crystallographic, and computational methods. Tautomeric equilibria have also been studied and reveal in most cases a slight preference of imine tautomers in solution; a fact supported by DFT calculations in the gas



phase as well as incorporating solvent effects through the SMD model. To simulate the effect exerted by the crystal lattice on tautomer stability, we have developed a computational protocol in the case of 1-tert-butyl-2-(2-hydroxy-1-naphthylmethylene)aminobenzene whose data have been obtained experimentally at 120 K. Although a rapid imine-enamine interconversion may be occurring in the solid state, the imine tautomer becomes the most stable form and the energy difference should be related to the difference in the packing of the molecules.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/tautomerism-schiff-bases-cases-2-hydroxy-1-naphthaldehyde-and-1-hydroxy-2-naph

Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study

Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar. Publicación: Journal of Chemical Theory and Computation, Septiembre de 2011, 7, 3694-3701.

The fluorazene molecule presents dual fluorescence in polar solvents. Its absorption and emission properties in gas phase and in acetonitrile solution have been studied theoretically using the complete active space second-order perturbation // complete active space self-consistent field quantum methodology and average solvent electrostatic potential from molecular dynamics for the solvent effects. In gas phase, two optimized excited-state geometries were obtained, one of them corresponds to a local excitation (LE), and the other is an intramolecular charge transfer (ICT) and lies higher in energy. In acetonitrile solution, a second ICT structure where the molecule remains planar is found, and the energy differences are reduced. Fluorescence energies from LE and the planar ICT have a good agreement with the experimental bands, but emission from the bent ICT has too low an energy.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/dual-fluorescence-fluorazene-solution-computational-study

THEORETICAL STUDY OF THE ROLE OF SOLVENT STARK EFFECT IN ELECTRON TRANSITIONS

M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar.

Publicación: Theoretical Chemistry Accounts. Octubre de 2011, 128, 783-793.

The possible influence of the solvent Stark effect (SSE) on the solvatochromic shift in electron transitions has been analyzed by using the ASEP/MD (averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics) method. With this purpose, four molecules, two polar (acrolein and formaldehyde) and two non-polar (p-difluorobenzene and trans-difluoroethene) have been studied in solvents of diverse polarity. Independently of the nature of the system we found that the contribution of SSE on the average value of the solvent shift or on the multipole moment values is negligible. In the case of centro-symmetric molecules, our results permit to discard the SSE as cause of the solvent shift found, which must be assigned to the electrostatic interaction of the solute quadrupole and higher multipoles with the solvent. As the SSE values provide also a measure of the errors introduced by the mean field approximation (MFA), these results indicate that MFA permits a very accurate determination of the solvent shift at the same time that it reduces drastically the computational cost. Finally, a new procedure suited to the ASEP/MD method has been presented that permits to estimate the inhomogeneous broadening of spectral bands, complementing the information provided by mean field theories. This procedure does not need additional quantum calculations and its computational cost is minimal.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/theoretical-study-role-solvent-stark-effect-electron-transitions

Study on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution by using the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics methodology

Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín. Publicación: The Journal of Chemical Physics 135, 194502. Noviembre de 2011.

The ASEP/MD method has been employed for studying the solvent effect on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution. MP2 and density functional theory (DFT) levels of theory were used and results were compared. While in gas phase cyclic structures showing intramolecular hydrogen bonds were found to be the most stable, the stability order is reversed in water solution. Intermolecular interaction with the solvent causes the predominance of extended structures as the stabilizing contacts dipeptide-water are favoured. Free-energy differences in solution were calculated and PPII,  $\alpha^R$ , and C5 conformers were identified as the most stable at MP2 level. Experimental data from Raman and IR techniques show discrepancies about the relative abundance of  $\alpha^R$  y C5, our results support the Raman data. The DFT level of theory agrees with MP2 in the location

and stability of PPII and  $\alpha$  R forms but fails in the location of C5. MP2 results suggest the possibility of finding traces of C7eq conformer in water solution, in agreement with recent experiments.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/study-conformational-equilibrium-alanine-dipeptide-water-solution-using-averag

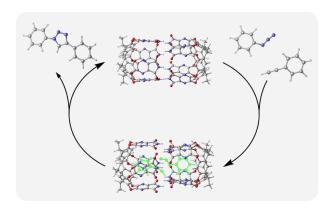
On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks. A theoretical rationale

David Cantillo, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez and Juan C. Palacios Publicación: Organic and Biomolecular Chemistry. Noviembre de 2011, 7638–7642.

En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método para catalizar reacciones químicas. Se trata de los denominados "matraces" o "cápsulas" moleculares. Éstos consisten en estructuras moleculares que forman una cavidad en su interior, donde se alojan los reactivos y tienen lugar las transformaciones, de forma similar a lo que ocurre en la naturaleza en el caso de las reacciones biocatalizadas por enzimas.

El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. Sin embargo, su estudio a través de métodos computacionales no se había abordado hasta el momento debido al elevado número de átomos que son necesarios para la modelización, lo que hace que el coste computacional sea demasiado elevado.

Cálculos de Química Computacional realizados en el supercomputador LUSITANIA por investigadores del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la



Universidad de Extremadura han permitido modelar por primera vez una reacción química en el interior de una de estas macromoléculas. Concretamente, se ha estudiado la cicloadición de alquinos con azidas, que da lugar a triazoles, compuestos muy valiosos desde el punto de vista biomédico.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/enhanced-reactivity-and-selectivity-triazole-formation-molecular-flasks-theore

Solvent Effects on the Radiative and Nonradiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore

Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar. Publicación: Journal of Chemical Theory and Computation. Noviembre de 2011.

The radiative and nonradiative decay of a model with five double bonds of the 11-cis-retinal protonated Schiff base was studied both in vacuum and in methanol solution using an extended version of the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics data (ASEP/MD) method that allows the location of crossing points between free energy surfaces both in equilibrium and in frozen solvent conditions. The multireference quantum method CASSCF was used for the description of the states of interest, while the solvent structure was obtained from molecular dynamics simulations. Electron dynamic correlation corrections to the energy were included at CASPT2 level. Unlike in gas phase, where only two states seem to be implicated, in methanol solution, three states are necessary to describe the photoisomerization process. At the Franck-Condon point the  $\mathrm{S}_1$  and  $\mathrm{S}_2$  states are almost degenerate; consequently, the S1 surface has a region with an ionic character ( ${}^1B_u$ -like) and another one with a covalent character ( ${}^2A_g$ -like). Emission from the ionic minima is responsible for the low-frequency part of the fluorescence band, while emission from the covalent minima originates the high-frequency part. The ionic minimum is separated from the conical intersection yielding the all-trans isomer by an energy barrier that was estimated in 0.7 kcal/mol. The geometry of the optimized conical intersection was found at a torsion angle of the central double bond close to 90° both in vacuum and in methanol solution. This large torsion in addition to the accompanying charge displacements forces a strong solvent reorganization during the deexcitation process which slows down the photoisomerization kinetics in methanol with respect to the gas phase. Solvent fluctuations modulate the minima depth and the barrier height and could explain the multiexponential relaxation time observed in the experiments.

#### Web

http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/solvent-effects-radiative-and-nonradiative-decay-model-rhodopsin-chromophore

### CASOS DE ÉXITO / ESTUDIO

Extremadura, en primera división de supercomputación

Publicación: COMPUTERWORLD. Marzo 2011

CénitS (Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación) se ha convertido en uno de los centros de referencia en España en investigación. Forma parte de la Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura), organización sin ánimo de lucro cuyo principal objetivo es gestionar el CénitS y, más concretamente, el supercomputador que alberga en sus entrañas: LUSITANIA - nombre que recibía Extremadura en la época del Imperio Romano-.

El proyecto se concretó a finales de 2008 arrancando en producción a principios de 2009. En realidad, José Luis González, director general del centro, asegura que "la puesta en marcha fue inmediata", "a primeros del mes de enero ya estábamos en marcha y durante los meses posteriores tan sólo tuvimos que ir afinando configuraciones". Desde entonces, el desarrollo de proyectos en LUSITANIA ha sido constante.

El directivo recuerda "en el proceso de selección valoramos a otros fabricantes, pero al final nos decidimos por HP". Explica que "los servicios profesionales de HP tuvieron mucho peso en la decisión final" porque, puntualiza "se buscaban características muy singulares". A lo determinante de los servicios se sumó la gran capacidad de los sistemas de almacenamiento y backup de HP, fácilmente configurables con el soporte técnico de sus profesionales.

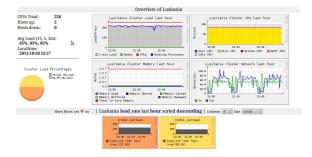
#### COMPUTERWORLD HONORS PROGRAM CASE STUDY: CÉNITS

Web: http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/computerworld-honors-program-case-study-cenits

CénitS is a R&D&TI Supercomputing center located in Extremadura aiming to promote, disseminate and offer services on intensive computation and advanced communications to research groups, companies or institutions requesting them. Through technology improvement and innovation, we make businesses more competitive. The COMPUTAEX Foundation (Extremadura Computation and Advanced Technologies Foundation) intends to develop several fundamental activities such as the following:

- Encourage, implement and manage the Extremadura Supercomputing Center (CénitS).
- Promote research and technology development projects.
- Provide processing power, communications and technical support to users through equipments available at the Foundation.
- Collaborate to the exchange of processing-based research results between public centres and companies.
- Operate and transfer technologies developed by the Foundation.
- Promote and provide cooperation among companies and institutions.
- Promote and collaborate in the organization of courses, seminars and meetings.

- Develop and publish books, journals, audiovisual and multimedia material related to the Foundation's aims.
- Search and find resources to develop activities.
- Contribute to the development and strengthening of competitive abilities by the research groups and the business sector in Extremadura.
- Consider supercomputing-based technology requirements of entities and companies asking for support.



The traditional way in which researchers solve problems with a computer is based on the execution of serial operations. Those calculations were usually executed on single processor computers; their instructions were processed in a sequential way, i.e. one after another and only one instruction at the same time. With our Itanium-based solution the greatest challenge was to teach them how to parallelize their source codes in order to achieve better performance.

Another challenge was to port already parallelized distributed applications to a shared-memory approach to exploit the memory management benefits of this architecture. Distributed and parallel programming consists of using several resources simultaneously to solve specific problems. Instructions are executed on multi-core computers, the problem is divided into independent parts which are executed in parallel on each processing unit. Parallel programming is frequently mistaken with distributed programming because they have similar philosophies. Despite that they both are based on the simultaneous use of several resources, parallel programming is distinct from distributed programming in the sense that the problem is solved in the same computer. In a distributed environment, it is not necessary to use the same hardware with the same architecture or even the same programming language. One of the most important advantages of our shared memory Itanium-based computer is that it is easier to program than distributed memory computers. It is also very quick when sharing data between processes or threads and researchers have been taught to exploit all the benefits of our Itanium-based computer (work-load balancing, data locality, memory footprint and quick communications). We overcame those challenges by instructing researchers in the use of big sharedmemory nodes, they were taught how to combine OpenMP code with MPI to get the maximum from the Itanium processors. MPI for internode process communications and OpenMP for loop and thread parallelization. Thus, we nominate the Supercomputing Center project (CénitS) for this valuable award.

#### Extremadura democratiza el acceso a la supercomputación

Publicación: COMPUTERWORLD. Octubre 2011

La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX), fundada por la Junta de Extremadura, creó hace dos años CénitS, el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación, con una inversión inicial de 7'7 millones de euros. El objetivo de este centro es fomentar, difundir y prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a las

comunidades investigadoras extremeñas o a las empresas o instituciones que lo soliciten.

Según José Luis González Sánchez, director del centro, "CénitS nació para dotar al sector productivo e investigador de nuestra región de recursos que le hiceran más competitivo e impulsaran el despliegue de las tecnologías más avanzadas. La accesibilidad a este tipo de tecnologías era bastante limitada en España donde sólo existían hace dos añor el Centro Nacional de Supercomputación y dos Centros regionales". Como dice el director del Centro, "son muchas las misiones de la Fundación COMPUTAEX, el Centro CénitS y el



supercomputador LUSITANIA que alberga el anterior, pero tal vez el mayor beneficio que se ha podido obtener ha sido la dinamización del sector tecnológico en nuestro entorno, aportando recursos que no son accesibles".

#### LA SUPERCOMPUTACIÓN AL SERVICIO DE LOS CIUDADANOS.

Web: http://www.cenits.es/noticias/catedra-telefonica-universidad-extremadura-promueve-cuaderno-supercomputacion-al-servicio-c



Las ciencias informáticas y de las comunicaciones están ayudando a mejorar y avanzar en todos los campos del saber y áreas de conocimiento, permitiendo innovar en prácticamente todos los sectores productivos. Del mismo modo, los supercomputadores son una de las herramientas más poderosas para el progreso científico en nuestros tiempos, ya que permite ampliar el campo de acción de los recursos informáticos y de comunicación a todos los ámbitos de la ciencia, la investigación, la innovación y la eficiencia energética.

En este cuaderno promovido por la Cátedra Telefónica de la Universidad de Extremadura se tratan las posibilidades de la supercomputación, su situación en España y a nivel mundial, describiendo además la labor realizada por la Fundación COMPUTAEX en Extremadura y su centro CénitS con el supercomputador LUSITANIA.

### **DISTINCIONES Y RECONOCIMIENTOS**

CÉNITS GANADOR DE LA CATEGORÍA "OTROS ORGANISMOS PÚBLICOS" COMO "CASO DE ÉXITO MÁS VALORADO POR SU INNOVACIÓN Y EJEMPLARIDAD" EN LA CONVOCATORIA SITI/ASLAN'2011 DE CASOS DE ÉXITO TIC



La Asociación de proveedores de sistemas de red, internet y telecomunicaciones, desde su constitución en el año 1989, ha tenido como misión la promoción y difusión de las tecnologías de redes y telecomunicaciones en España en el ámbito empresarial. Actualmente la Asociación @asLAN, agrupa más de 100 empresas, entre las que se encuentran los principales fabricantes de red, integradores, distribuidores y operadores de telecomunicaciones.

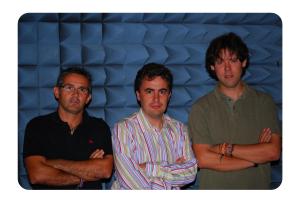
El proyecto CénitS (Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación) de la Fundación

COMPUTAEX ha resultado ganador de la categoría Otros Organismos Públicos en la convocatoria de Casos de Éxito TIC Innovadores y Ejemplares en Administración y Organismos Públicos organizada por la Asociación @asLAN. Esta iniciativa tiene como objetivo principal facilitar el intercambio de conocimientos y reconocer públicamente el esfuerzo y dedicación de los Responsables TIC de las Administraciones Públicas que los han liderado.

En esta edición de 2011 han concursado un total de 94 Casos de Éxito de 77 Organismos Públicos, superando notablemente los resultados de la pasada edición, entre los que fueron seleccionados 3 finalistas de cada una de las categorías a través de un proceso abierto y transparente en el que han participado con sus votaciones 1.315 profesionales para elegir finalmente al ganador en cada una de las 9 categorías concursantes.



# El trabajo MLFMA-FFT desarrollado en CESGA y CénitS mencionado como "Highly Cited Paper" por el "Institute for Scientific Information"



Los "Highly Cited Papers" son una clasificación del Institute for Scientific Information (ISI) en la que se incluyen los artículos científicos que están teniendo más relevancia en los últimos 10 años. Esta base de datos de citaciones (Science Citation Index) permite a los investigadores identificar los artículos citados de manera más frecuentemente y quienes los ha citado, pudiendo determinar además el impacto del artículo por el número de trabajos que lo citan.

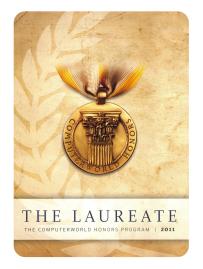
El artículo desarrollado por el equipo de Luis Landesa y José Manuel Taboada del Departamento de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones de la Universidad de Extremadura, versa sobre el método MLFMA-FFT y el intento de éxito que dió lugar a la resolución de un problema de 620 millones de incógnitas con el supercomputador LUSITANIA.

# LA FUNDACIÓN COMPUTAEX PREMIADA EN LA "21ST CENTURY ACHIEVEMENT AWARD" DEL "COMPUTERWORLD HONORS PROGRAM"

El *Computerworld Honors Program* ha reconocido durante más de 2 décadas la labor de organizaciones e individuos que han usado las tecnologías de la información para fomentar y mejorar el bienestar público, beneficiar a la sociedad y cambiar el mundo para mejor.

John Amato, editor de Computerworld indicó "The number and quality of nominations this year were very inspiring and demonstrate how valuable IT is to community change. Computerworld is very proud to name the 2011 class of Laureates and showcase their initiatives benefiting society through innovative uses of IT."





La visión de futuro y la aplicación de las Tecnologías de la Información como palanca de cambio social, económico y educativo han sido las claves para que la Fundación COMPUTAEX fuera seleccionada entre los 6 finalistas del Economic Opportunity 21st Century Achievement Award.

La Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS fueron inicialmente elegidos como *Laureates* entre más de 1.000 candidaturas de 23 países en un año especialmente competitivo y, posteriormente, de entre 254 casos premiados entre los que se escogieron 6 finalistas en cada categoría, siendo la Fundación COMPUTAEX finalista en la categoría *Economic Opportunity*.

El *ComputerWorld Honors Program* también hizo extensible este reconocimiento a cada uno de los integrantes del equipo humano de CénitS.



## **CONVOCATORIAS DE PROYECTOS** Y CONVENIOS DE COLABORACIÓN

### Relación de proyectos presentados por CénitS A CONVOCATORIAS COMPETITIVAS

Durante el año 2011, CénitS ha participado en convocatorias competitivas regionales, nacionales y europeas presentando proyectos realizados en colaboración con otros centros tecnológicos y cooperando con instituciones y empresas.

Los proyectos más importantes para los que se ha conseguido financiación son los siguientes:

#### Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP)

Dentro del proyecto RITECA-II CénitS lidera el subproyecto SIATDECO (Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones en el ámbito de las Energías Ecológicas), en el que participan FUNDECYT, IPROCOR, CETIEX y la Universidad de Évora.

Importe financiado: 195.000,00 €

#### Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS

Este proyecto ha sido presentado a la Convocatoria de Infraestructura Científico-Tecnológica (2010-2011) del Ministerio de Ciencia e Innovación.

Importe financiado: 517.253,99 €

#### Adecuación Red de Comunicaciones para CénitS

Este proyecto ha sido presentado a la Convocatoria de Infraestructura Científico-Tecnológica (2010-2011) del Ministerio de Ciencia e Innovación.

Importe financiado: 306.800,00 €

#### Electromagnetismo y supercomputación para nanoestructuras plasmónicas. Aplicación a nanoantenas ópticas y metamateriales

Este proyecto liderado por el equipo de Electromagnetismo Computacional de la Universidad de Extremadura en el que CénitS participa como OPI (Organismo Público de Investigación) ha sido presentado a la convocatoria del subprograma de Proyectos de Investigación Fundamental no MEMORIA ANUAL 2011

Orientada, dentro del Programa Nacional de Proyectos de Investigación Fundamental, en el marco del VI Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica 2008-

2011.

Importe financiado: 96.400,00 €

Red Temática FIERRO (FUTURE INTERNET: eficiencia en las redes de altas prestaciones)

FIERRO es una red temática patrocinada por el Ministerio de Ciencia e Innovación y formada por

21 Grupos de investigación de Universidades, Centros de Investigación y Empresas españolas

cuya finalidad consiste en estudiar las limitaciones actuales de las redes IP de altas prestaciones

(redes de alta velocidad, metro y troncal) para diseñar la Internet del Futuro. Los retos principales surgen en todas las capas de red ante la esperada demanda de tráfico en cuestiones

de volumen, granularidad, variabilidad y movilidad, y la necesidad de construir un sistema

escalable que soporte dicha demanda.

CénitS es uno de los Centros Tecnológicos participantes que aportará su experiencia y sus

recursos tecnológicos y humanos a la Red Temática FIERRO.

Importe financiado: 10.000,00 €

CONVENIOS DE COLABORACIÓN

Desde la creación de la Fundación COMPUTAEX se han establecido colaboraciones, contactos y

cooperaciones con un numeroso grupo de organizaciones públicas y privadas, fruto de las cuales se han

obtenido los resultados mostrados en esta memoria anual.

De entre todas esas instituciones, la siguiente relación destaca convenios de colaboración que

permanecen vigentes desde 2010 y los oficializados a lo largo de 2011.

Universidad de Extremadura

Los Másteres TIC impartidos por la Universidad de Extremadura surgen para dar respuesta a la

demanda de empresas y organizaciones del sector de profesionales especializados en el sector

TIC. La Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS colaboran ofreciendo su experiencia y sus

recursos con el fin de dinamizar y fomentar el sector tecnológico de nuestra región.

Este convenio también ha permitido convocar dos becas ligadas a tareas de apoyo relacionadas

con la investigación en entornos de cloud computing (desarrollo, implantación y provisión de servicios cloud) e investigación en GreenIT (optimización energética y sustentabilidad en centros

de procesamiento de datos).

98

HP

Hewlett-Packard es socio tecnológico de CénitS siendo el fabricante del supercomputador LUSITANIA y de la mayor parte de su tecnología. HP colabora a diario con el Centro, pero además se ha establecido un acuerdo de cooperación puntual en el proyecto del Observatorio Tecnológico establecido entre HP, la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX.

#### Red de e-Ciencia de España

La Red Nacional de e-Ciencia persigue coordinar e impulsar el desarrollo de la actividad científica en España mediante el uso colaborativo de recursos geográficamente distribuidos e interconectados mediante Internet. En la red participan usuarios y expertos en aplicaciones de diversas disciplinas científicas (biocomputación, imagen médica, química computacional, fusión, meteorología, etc.), investigadores en el ámbito de las TIC y centros proveedores de recursos, quedando así representados todos los actores de la e-Ciencia.

El centro CénitS se incorpora a la red de e-Ciencia de España y se suma a la iniciativa fijada en la 2ª Reunión Plenaria de la Red Española de e-Ciencia.

#### Potenciación y Desarrollo

Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L. es una empresa de base tecnológica que tiene como objetivo comercializar la mercancía más importante del siglo XXI: "los contenidos". Este convenio se centrará en la creación de un gabinete de prensa digital específico para la Fundación COMPUTAEX que asesore en la redacción de noticias y la difusión de la actividad realizada a través de los distintos medios digitales propios y ajenos.

Por otro lado, CénitS aporta recursos para el proyecto *Medianell Virtual Press* de Potenciación y Desarollo.

#### **CESJE**

La Fundación COMPUTAEX está colaborando con el Centro de Excelencia de Software Libre José de Espronceda (CESJE) en la distribución de la última versión del sistema operativo GNU/LinEX.



# **ACCIONES FORMATIVAS**

### COLABORACIÓN EN LA ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

Fecha	Lugar	Nombre	Participación
31/03/11	Centro Universitario de Mérida	Gestión de servicios TI: una vía al éxito y a la excelencia (itSMF)	Asistentes y ponentes
13/05/11 14/05/11	Complejo Cultural San Francisco Cáceres	TheEvnt 2011	Asistentes y patrocinadores
21/06/11	Centro de Convenciones Norte IFEMA - Madrid	Congreso DatacenterDynamics Madrid 2011	Asistentes y ponentes
07/07/11 08/07/11	Cartagena	1st Workshop "Future Internet: Efficiency in high-speed networks" (W-FIERRO 2011)	Ponentes
29/09/11	Badajoz	CYTEX. Plan dinamizador tecnológico- científico de Extremadura	Asistentes y ponentes
04/10/11 05/10/11	Málaga	4º Encuentro de usuarios de HP-CAST	Colaboradores

### **A**SISTENCIA A CURSOS Y JORNADAS

Fecha	Lugar	Nombre	Participación
10/01/11	Cáceres	Presentación del "Libro Verde: Modelo de Innovación, Creatividad y Sostenibilidad Urbana" de Cáceres Creativa	Asistentes
11/01/11	Madrid	Compartición de recursos y Cloud Computing	Asistentes
18/01/11	Escuela Politécnica de Cáceres	Conferencia "Introducción al Diseño de Infraestructuras Cloud"	Asistentes
20/01/11	Palacio de Congresos y Exposiciones, Mérida	Financiación de Proyectos de I+D+i 2011: Ayudas CDTI y Decreto 137/2010	Asistentes
24/01/11 26/01/11	Data Center Dynamics, Madrid	Curso DC110: Data Center Design & Best Practices	Asistentes
07/02/11 09/02/11	Escuela Politécnica, Cáceres	Curso ITIL Foundation v3	Ponentes y asistentes
10/02/11	IFEMA, Madrid	Congreso HP Cloud Summit	Ponentes
10/02/11	Palacio de Congresos y Exposiciones, Mérida	Jornada sobre la Alianza para la Internacionalización de Extremadura	Asistentes
15/02/11 16/02/11	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	Congreso Nacional de agrupaciones empresariales innovadoras y clústeres	Asistentes
02/03/11	Los Santos de Maimona	Inauguración Centro CETIEX	Asistentes
02/03/11	Hotel Ágora, Cáceres	Presentación de AldeaLabC <sup>3</sup>	Asistentes
09/03/11	Mérida	Presentación de Avante	Asistentes
11/03/11	CénitS, Trujillo	Convenio para investigación en ultrasecuenciación genética	Ponentes
14/03/11 18/03/11	CénitS, Trujillo	Curso HP Service Guard	Asistentes
15/03/11	Centro de Cirugía de Mínima Invasión, Cáceres	Mesa de trabajo convocada por el Ayto. De Cáceres	Asistentes
17/03/11	FEVAL, Don Benito	Presentación de los Centros Públicos Demostradores TIC y Software Libre de Extremadura	Asistentes
23/03/11	Madrid	Planes de Seguridad Informática II	Asistentes
05/04/11	IFEMA, Madrid	Feria SITI @asLAN	Ponentes
12/04/11	Cáceres	Presentación del informe GEM	Asistentes

14/04/11	Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, Cáceres	III Encuentro de la Red de Centros Innoveex: Cooperación empresarial	Asistentes
14/04/11	Badajoz	Cena Zona Empresa	Asistentes
28/04/11	Embarcadero, Cáceres	Ecosistemas digitales y mediadores profesionales (FUNDECYT)	Asistentes
11/05/11	Cénits, Trujillo	Recepción de Delegación panameña	Ponentes
13/05/11 14/05/11	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	TheEvnt 2011	Patrocinadores y asistentes
06/06/11 07/06/11	Santander	Reunión plenaria de la Red de e-Ciencia	Asistentes
10/06/11 11/06/11	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	Jornadas de LOPD y Seguridad Informática (ISO 27001)	Asistentes
21/06/11	Centro de Convenciones Norte - IFEMA, Madrid	Congreso Datacenter Dynamics Madrid 2011	Ponentes y asistentes
07/07/11 08/07/11	Cartagena	1st Workshop "Future Internet: Efficiency in high-speed networks" (W-FIERRO 2011)	Ponentes
28/09/11	Las Palmas de Gran Canaria	Reunión de la RES (Red Española de Supercomputación)	Asistentes
04/10/11 05/10/11	Málaga	4º Encuentro de usuarios de HP-CAST	Colaboradores
07/10/11	Escuela Politécnica, Cáceres	Optimización Multiobjetivo: Metodologías Informáticas para la Resolución de Problemas Complejos del Mundo Real	Asistentes
25/10/11	Fundación Xavier de Salas, Trujillo	X Seminario sobre Creación Empresas Y Business Angels	Asistentes
07/11/11	Escuela Politécnica, Cáceres	Jornadas Teórico-Prácticas de IPv6	Asistentes
23/11/11 24/11/11	Madrid	Data Center Evolution 2011	Asistentes
30/11/11	Cáceres	Reunión de la Asociación de Fundaciones extremeñas	Asistentes
02/12/11	Badajoz	Presentación de la Carta de oferta tecnológica de la Universidad de Extremadura	Asistentes

### **D**IFUSIÓN

A lo largo del año se han recibido en el Centro más de 200 visitantes. La mayor parte de las visitas recibidas provienen de empresas, investigadores, innovadores, centros tecnológicos, políticos, medios de comunicación, universitarios y estudiantes de educación secundaria.

Gran parte de los visitantes se ven atraídos por las vías de colaboración que pueden establecer con CénitS, por los servicios que pueden ofrecer y/o recibir y por el conocimiento del Centro y del supercomputador LUSITANIA.



# **RECURSOS**

# **HARDWARE**



El núcleo principal del supercomputador LUSITANIA está compuesto de dos servidores HP Integrity SuperDome SX2000, equipados cada uno con 64 procesadores de doble núcleo y 1 TB de memoria RAM. Además de estos dos nodos, los servidores auxiliares soportan el resto de funcionalidades destinadas principalmente a proporcionar el entorno de trabajo óptimo para que los usuarios desarrollen su trabajo diario.

En este apartado se realizará un repaso de los componentes del supercomputador LUSITANIA en base a las capacidades que proveen a la infraestructura general:

- Servidores del supercomputador.
- Servidores auxiliares.
- Infraestructura de almacenamiento.
- Infraestructura de red.
- Sistema de copias de seguridad.

### SERVIDORES DEL SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA

La base del supercomputador LUSITANIA está formada por dos servidores idénticos HP Integrity SuperDome SX2000. Estos dos servidores, cn001 y cn002 constan, cada uno, de 64 procesadores Intel Itanium 9140M Dual-Core a 1.6GHz, disponiendo, pues, de 128 procesadores lógicos por servidor. Asimismo, cada servidor va equipado con 1 TB de memoria RAM principal (1 TB = 1024 GB) distribuído de manera uniforme entre las dieciseis celdas que conforman el servidor SuperDome.

En términos de conectividad para la infraestructura de almacenamiento y de comunicaciones, los servidores

SuperDome disponen de cuatro módulos de conexión PCI-X cada uno, donde cada servidor aloja los siguientes elementos:

- 4 tarjetas de red Intel 82546 con dos puertos a 1Gbps.
- 2 tarjetas de red S2io Xframe II a 10Gbps.
- 4 tarjetas HBA Fibre Channel Qlogic 2422 a 4Gbps.
- 4 tarjetas controladoras SCSI LSI Logic 53c1030 Dual Ultra320 SCSI.

Con todos estos elementos, los SuperDomes son capaces de interconectarse gracias a las tarjetas a 10GbE formando una red de cómputo de altas prestaciones. Además interactúan con los servidores de almacenamiento en red y las cabinas de almacenamiento a través de una red de fibra óptica. También se interconecta a las redes de servicio, usuarios y los dispositivos de entrada/salida donde residen los sistemas operativos y las particiones de scratch que almacenan los resultados parciales de los proyectos.

Cada servidor SuperDome utiliza como almacenamiento cuatro unidades HP StorageWorks MSA50 para el sistema operativo y para la partición de scratch. El sistema operativo tiene asignada una unidad de 146GB configurada con protección RAID1. El resto del espacio consta de cuatro unidades en RAID5 que conforman una única unidad de 4,5TB configurada en modo RAID0 para el espacio scratch. De esta forma se consigue una alta protección para los ficheros del sistema



operativo y acceso de gran velocidad para los datos temporales de ejecución de los proyectos.

La unión de todos estos elementos permite la utilización de los dos servidores SuperDome como una sóla máquina de memoria compartida de alto rendimiento y posibilita la ejecución de tareas con grandes demandas de almacenamiento, utilización de memoria RAM y capacidad de cómputo, conformando el núcleo principal de la potencia de cálculo del supercomputador LUSITANIA.

### **SERVIDORES AUXILIARES**



Como se ha explicado en el punto anterior, los servidores del supercomputador LUSITANIA cuentan con la potencia, memoria y capacidad de almacenamiento temporal suficientes para llevar a cabo tareas de investigación de gran calado y análisis de grandes conjuntos de datos.

La necesidad de uso de los servidores auxiliares surge para facilitar el acceso a la infraestructura general del supercomputador y para realizar una serie de tareas de apoyo, que brindan una experiencia mucho más cómoda y satisfactoria a los usuarios.

A continuación, se presentan las características técnicas de los servidores auxiliares del supercomputador LUSITANIA, clasificados en función de sus tareas:

Servidores de Login

Dos servidores HP Integrity rx2660 equipados con dos procesadores Intel Itanium 9140M Dual Core, 16 GB de memoria RAM y 400 GB de discos de sistema con protección por RAID1 configurados como un cluster activo con los servicios de acceso remoto SSH y de autenticación a través de LDAP.

#### Servidores de Desarrollo

Dos servidores HP Integrity rx2660 con dos procesadores Intel Itanium 9140M Dual Core y 16 GB de memoria RAM, con el mismo juego de herramientas, compiladores y librerías que tienen instalados los servidores del supercomputador LUSITANIA. La función principal consiste en servir como plataforma de desarrollo y compilación para los usuarios finales de LUSITANIA.

### Servidores de Gestión y Administración

Dos servidores HP ProLiant DL380 G5 y un servidor HP ProLiant ML350 G5 con procesadores Intel Xeon Quad-Core E5450, 8 GB de memoria RAM y 2 discos SAS de 146 GB, que permiten administrar la electrónica de red, las incidencias hardware de los nodos del supercomputador, el software del sistema de copias de seguridad y el de las cabinas de almacenamiento.



### Servidor de Correo Electrónico

Un servidor IBM xSeries 345 equipado con dos procesadores Intel Xeon Dual Core y 2,5 GB de memoria RAM, soportando la infraestructura de correo electrónico de la organización.



### Servidores del Sistema de Almacenamiento

Dos servidores HP ProLiant DL380 G5 configurados como cluster de alta disponibilidad con el software HP Polyserve Matrix Server, encargados de servir por red de datos el almacenamiento Fibre Channel y que veremos en la sección de Almacenamiento.

### Servidores del Sistema de Cloud Computing

Dos servidores HP ProLiant DL380 G7 con 2 procesadores Intel Xeon Quad Core E5630, 32 GB y 64 GB de memoria RAM y 2 discos SAS de 146 gigabytes en configuración RAID 1. Un servidor HP ProLiant DL380 G5 con procesador Intel Xeon Quad-Core E5450, 16 GB de memoria RAM y 2 discos SAS de 146 GB en RAID 1. La función de estos servidores es la de

proporcionar un sistema flexible que permita crear y gestionar servicios independientes, optimizando el uso de los recursos existentes en LUSITANIA.

### Servidor de Licencias

Un servidor HP ProLiant DL380 G5 con procesador Intel Xeon Quad-Core E5450, 16 GB de memoria RAM y 2 discos SAS de 146 GB en RAID 1. Su única función es la de distribuir licencias a los usuarios a través de la infraestructura de red.

### **A**LMACENAMIENTO

El apartado de almacenamiento en la infraestructura está cubierto de forma solvente gracias a dos equipos HP StorageWorks 8100 Enterprise Virtual Array que proporcionan casi 300 TB de almacenamiento a través de una red de fibra óptica de alta velocidad a 4 Gbps.

Esta red tiene como elementos de comunicación centrales dos switches HP StorageWorks 8/40 SAN Switch con 40 puertos cada uno y capacidad para operar de 8 Gbps.

Cada unidad de almacenamiento está equipada con dos controladoras HSV210-B, cuatro Loop Switches FC de alta velocidad y 12 bandejas de discos M5314C con capacidad para



14 discos cada una, permitiendo un total por cabina de 168 discos, es decir, un total en la infraestructura de 336 discos.

El desglose de los 336 discos se realiza de la siguiente manera:

- 128 discos Fibre Channel de 450 GB a 15000 rpm.
- 208 discos FATA de 1TB a 7200 rpm.

Esta distribución de discos nos permite disponer de la suficiente flexibilidad para afrontar tareas que requieren un alto rendimiento de entrada/salida (utilización de los discos de tecnología Fibre Channel que aportan accesos a altas velocidades) y gran capacidad de almacenamiento con un rendimiento aceptable y un coste ajustado (utilización de los discos de tecnología FATA de elevada capacidad).



Por lo tanto, la capacidad total en crudo que permiten los sistemas de almacenamiento de LUSITANIA es de 265 TB para el almacenamiento online.

Esta alta capacidad de almacenamiento se distribuye a los servidores del supercomputador a través de un cluster de almacenamiento HP Polyserve Matrix Server, capaz de dar acceso a las unidades de almacenamiento EVA8100 mediante el sistemas de ficheros en red NFS, permitiendo el uso

simultáneo de todos los servidores pertenecientes a la red de cómputo.

Este cluster HP StorageWorks Polyserve Clustered Filesystem Gateway está formado por dos servidores idénticos HP ProLiant DL380 G5 equipados con dos procesadores Intel Xeon QuadCore y 16 GB de memoria RAM, 6 tarjetas de red Gigabit Ethernet y 2 tarjetas Fibre Channel Qlogic 2432 para acceso al almacenamiento FVA8100.

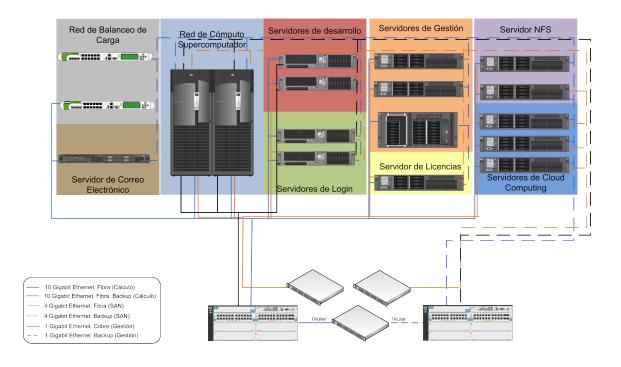
### RED

Una infraestructura de las características del supercomputador LUSITANIA requiere, para su máximo aprovechamiento, una conectividad de red al nivel del resto de instalaciones. La conectividad externa está resuelta con la conexión del Centro a la Red Científico Tecnológica de la Junta de Extremadura.

Internamente, el supercomputador LUSITANIA cuenta con elementos de electrónica de red, gestión de ancho de banda y protección contra accesos no deseados, todos ellos redundados que garantizan la conectividad entre todos los elementos de la instalación y con el mundo exterior, incluyendo una fuerte tolerancia a fallos.

Los elementos de red presentes en el Centro de Datos del supercomputador son los siguientes:

- Dos firewalls Fortinet FortiGate 3810A con conexiones a 10Gbps, con capacidades de firewall, VPN, antivirus, detección de intrusiones y gestión de ancho de banda por conexión, configurados como un cluster redundante activo-pasivo de alto rendimiento y gran capacidad de procesamiento.
- Dos balanceadores de carga Radware AppDirector integrados en la red de 10Gbps, con capacidades de balanceo de carga en aplicaciones y capacidades de gestión remota, en configuración de cluster redundante activo-pasivo.
- Dos switches de core HP ProCurve 5406ZL con capacidad de conmutación a 10Gbps para la red de cómputo e interfaces a 1Gbps para las redes de administración y usuarios.
- Dos switches de interconexión para la red de usuarios y servidores, un HP ProCurve 2626 y un HP ProCurve 2810-24G, para permitir al resto de servidores y a los usuarios la conexión a las redes de servicio del supercomputador LUSITANIA.



### COPIAS DE SEGURIDAD



A pesar de que la infraestructura de almacenamiento en el supercomputador LUSITANIA proporciona la suficiente capacidad de prevención de errores y de protección frente a fallos de hardware, es necesario disponer de un sistema centralizado de copias de seguridad para mantener un archivo histórico de datos con el fin de poder recuperar datos pasados, eliminados por error o datos de estudios previos que se desecharon y ahora son necesarios para volver a analizarlos.

Para acometer esta función, se dispone de un servidor de copias de seguridad basado en el software HP OpenView Storage Data Protector ejecutandose sobre un servidor HP ProLiant DL380 G5 con 2 procesadores Intel Xeon QuadCore de 64 bits y 8 GB de memoria RAM.

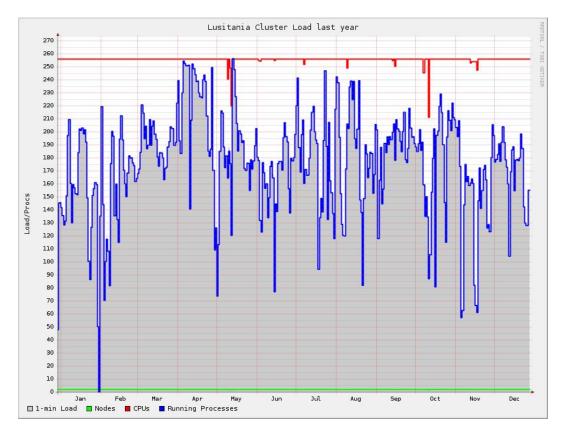
Este software centraliza las copias de seguridad de los servidores del supercomputador y de los servidores auxiliares en un robot de cintas HP StorageWorks EML 245e con 8 unidades de cinta HP LTO-4 Ultrium 1840 y capacidad para hasta 245 cintas LTO-4.

De esta forma, se realizan las copias de seguridad pertinentes diariamente de todos los servidores y de los datos almacenados por los usuarios del supercomputador LUSITANIA.

# **C**onsumos

### Uso de recursos

Durante el año 2011, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura hardware de LUSITANIA. La gráfica que se presenta a continuación muestra la evolución de la carga anual del cluster LUSITANIA en base a todos los procesos que se han ejecutado en él.

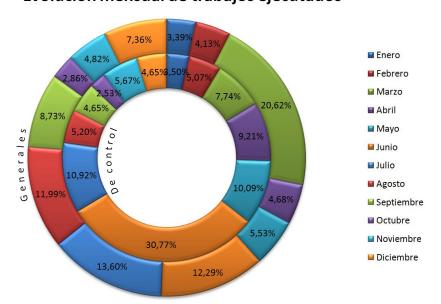


La variación de los valores de la carga del sistema se debe a la forma en que el software de gestión organiza el orden de ejecución de los procesos de usuario y a la adaptación del contexto de ejecución mediante la aplicación de tareas de preprocesamiento y postprocesamiento de los procesos ejecutados.

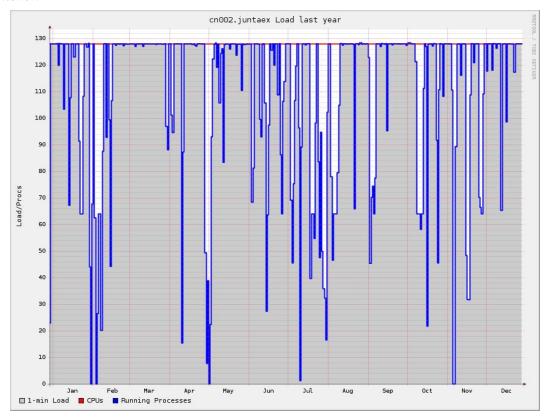
Las bajadas observadas en los meses de enero, mayo y noviembre, se deben a tareas de mantenimientos programadas por el equipo técnico de CénitS para garantizar el correcto funcionamiento del cluster LUSITANIA.

Durante el ejercicio de 2011 se han ejecutado un total de 9.333 trabajos de usuario. La gráfica presenta el reparto mensual de los trabajos ejecutados en dos categorías:

- Generales: 7.162. Estos trabajos están destinados a producir datos para su posterior análisis.
- De control: 2.171. Estos trabajos son ejecutados por los usuarios para poner a punto su entorno.
   Evolución mensual de trabajos ejecutados

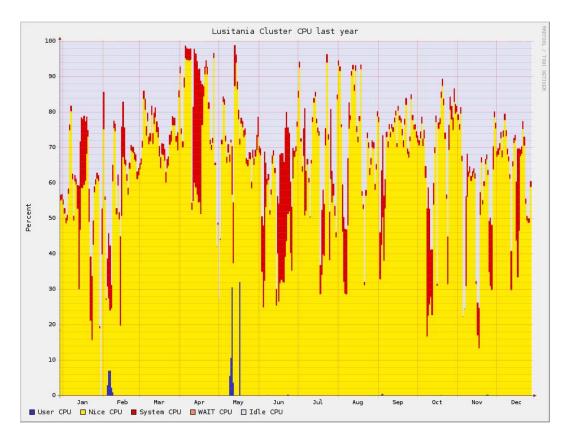


En la siguiente figura es destacable la carga en el nodo 2 del cluster. En la gráfica se puede apreciar el intenso uso de recursos existente en dicho nodo debido a que aloja las tareas de usuario que más recursos demandan. Las variaciones de los valores se deben nuevamente a las tareas realizadas por el software de gestión y a las tareas de mantenimiento como ya se explicó en la gráfica de la página anterior.



## Uso de CPU

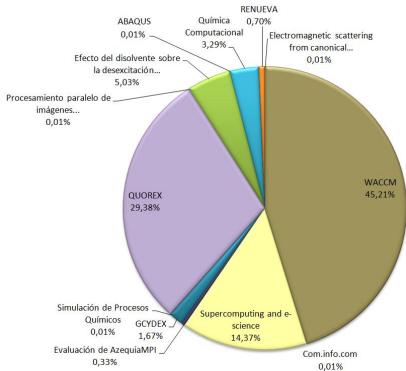
La gráfica que se presenta a continuación indica la evolución del consumo anual de la CPU de LUSITANIA. La evolución mensual refleja un uso intensivo constante de los recursos.



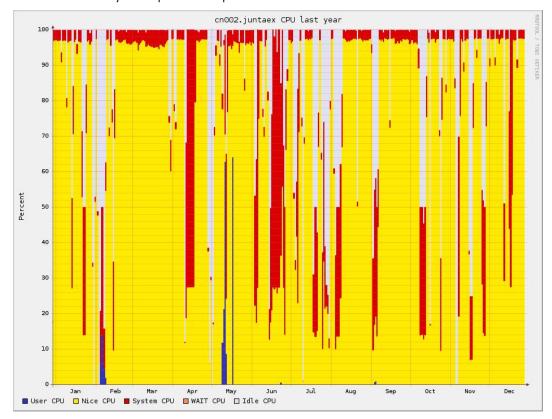
Como ya se ha podido observar en las figuras del apartado anterior, el motivo de la aparición de oscilaciones en las gráficas, coincide con los inicios y fin de ejecución de los distintos trabajos y las tareas de adaptación del entorno, periodo en el que se realizan tareas de preprocesamiento y postprocesamiento, cuyo consumo de recursos es notablemente menor.

A continuación se presenta la gráfica con los datos del consumo de CPU por proyecto de investigación (en este apartado sólo se recogen los proyectos que han hecho uso de los nodos principales).

## CPU (horas)



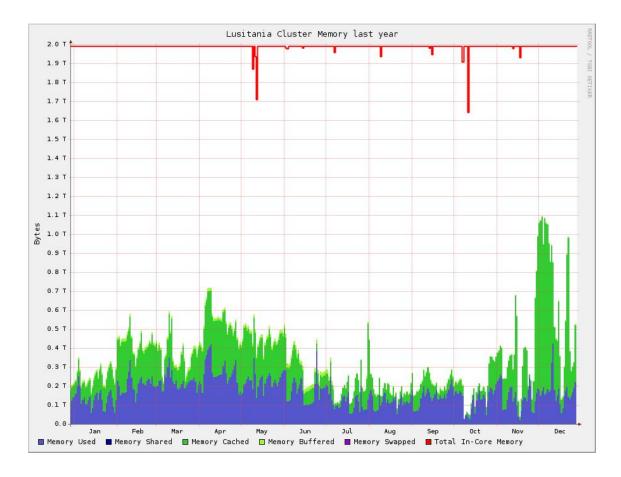
En este apartado vuelve a ponerse de manifiesto el uso intensivo de recursos existente en el nodo 2 del cluster, debido a la ejecución de las tareas de usuario que más recursos demandan. Las variaciones de los valores se deben nuevamente a las tareas realizadas por el software de gestión y a la tareas de mantenimiento como ya se explicó en el apartado anterior.



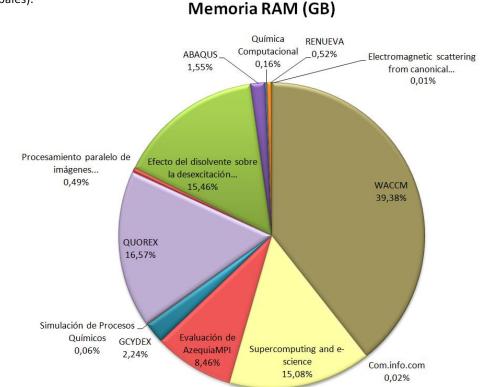
## Uso de Memoria Principal

La gráfica que se presenta a continuación muestra la evolución del consumo anual de la memoria RAM de LUSITANIA.

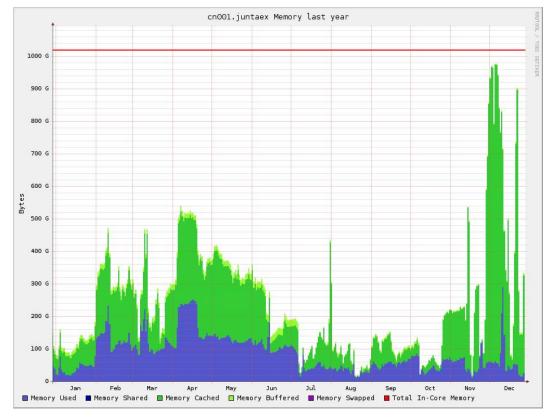
Como se puede observar no se alcanzan los límites físicos exitentes en el cluster pese a su consumo bastante elevado. Este hecho se debe a que en el ejercicio 2011, los proyectos que han sido ejecutados en el cluster no han requerido un uso intensivo de memoria RAM en relación con otros recursos de la infraestructura.



A continuación se presenta la gráfica con los datos del consumo de memoria RAM por proyecto de investigación (en este apartado sólo se recogen los proyectos que han hecho uso de los nodos principales).

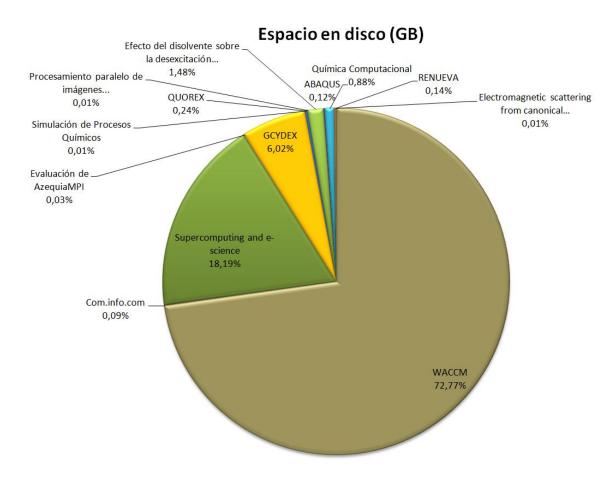


En este apartado, a diferencia de los dos anteriores, hay que destacar el uso de la memoria RAM en el nodo 1 del cluster LUSITANIA. En la gráfica se puede apreciar una gran oscilación en el consumo de los recursos, debido a la naturaleza multidisciplinar de las tareas que se ejecutan en él.



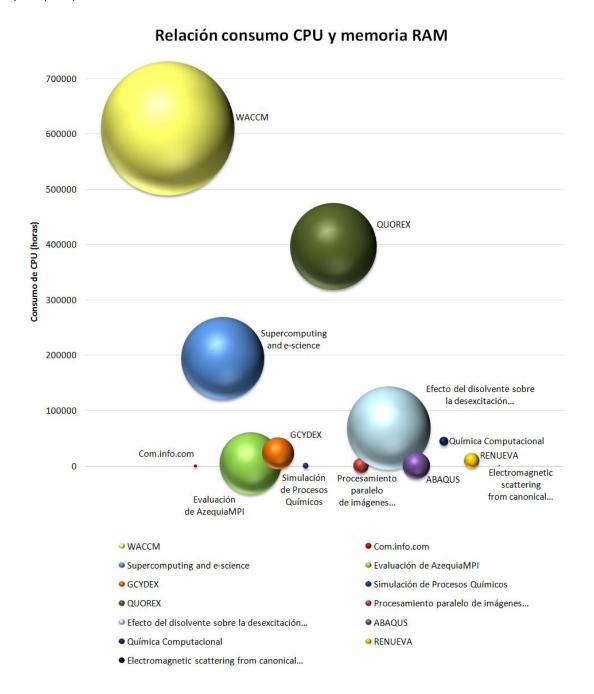
### Uso de almacenamiento

La gráfica que se presenta a continuación muestra el volumen en disco por proyecto de investigación (en este apartado sólo se recogen los proyectos que han hecho uso de los nodos principales).



## Relación de recursos por proyecto

A continuación se muestran las gráficas que relacionan los distintos consumos, agrupados por proyecto de investigación (en este apartado sólo se recogen los proyectos que han hecho uso de los nodos principales).



El centro de cada esfera representa el consumo anual de CPU medido en horas de procesamiento para el proyecto en cuestión.

El volumen de las esferas indica el total de memoria RAM utilizada por cada proyecto durante todo el tiempo en que ha estado consumiendo CPU.

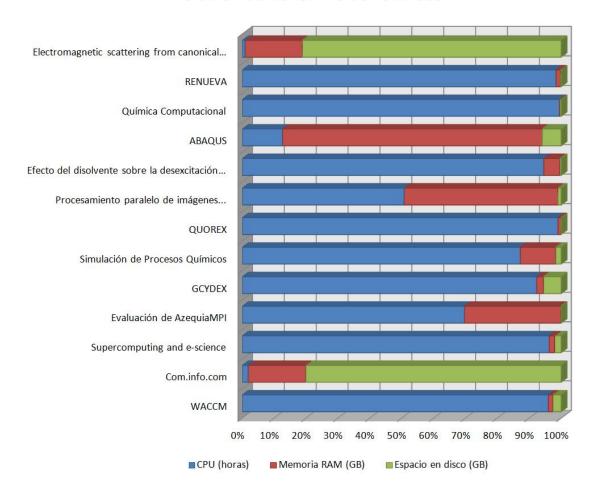
Claramente se pueden visualizar los proyectos que han hecho uso intensivo de los recursos de la infraestructura.

También es interesante destacar el amplio abanico de tipo de proyectos que el supercomputador LUSITANIA puede albergar debido a su singular infraestructura.

En la siguiente gráfica se puede apreciar la relación existente entre el consumo de memoria RAM, las horas de CPU y el volumen en disco utilizado, medidas agrupadas por proyecto.

En ella vuelve a quedar de manifiesto la versatilidad, tanto de los proyectos que se ejecutan en el supercomputador LUSITANIA, como de la propia infraestructura hardware.

## Relación de consumo de recursos



# **U**SUARIOS

Durante el año 2011, técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en el supercomputador LUSITANIA. Un total de 27 proyectos y varias decenas de usuarios han podido beneficiarse de la infraestructura de CénitS durante el presente año.

### INCIDENCIAS

Las incidencias y peticiones que realizan los usuarios se resuelven mediante un servicio de atención indivualizado basado en la herramienta de gestión de tickets osTicket. Con esta herramienta se logra gestionar y controlar todas las incidencias y peticiones de una manera ordenada. osTicket permite categorizar cada incidencia y gestionarla según su prioridad. Toda solicitud es asignada a un técnico del equipo CénitS mediante un identificador único para poder realizar un seguimiento exhaustivo en todo momento. Además se proporciona un archivo y un histórico de todos los tickets para que los propios usuarios conozcan el estado de sus peticiones.

Aunque este sistema proporciona la flexibilidad y control suficiente para solventar cualquier incidencia, muchos usuarios han seguido utilizando el correo electrónico y el teléfono para ponerse en contacto con el equipo CénitS y así agilizar las incidencias que exigen una respuesta más rápida. En estos casos, el técnico recoge y categoriza la información trasmitida por estas vías alternativas en el sistema de gestión de tickets para poder remitir al usuario el estado y la evolución de su incidencia a continuación.

El número de incidencias de usuario se ha reducido notablemente este año, resolviéndose un total de 43 incidencias.

# **S**OFTWARE

## LISTADO DE HERRAMIENTAS

La siguiente tabla contiene las herramientas instaladas en la plataforma del Supercomputador LUSITANIA.

Aplicación	Servidores	Versión			
Librerías					
HP MPI	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	2.3.1			
111 1411 1	login1, login2, dev1, dev2	2.2.7			
Platform MPI	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	8.0			
Intel MPI Library	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	3.2			
Intel Math Kernel Library	login1, login2, dev1, dev2, cn002	10.1.0.015, 10.1.1.019,			
(MKL)	cn001	10.1.1.019, 10.2.5.035, 10.2.6.038			
NetCDF	dev1, dev2	3.6.2			
PETSc	login1, login2, dev1, dev2, cn002	3.0.0			
Меер	login1, login2, dev1, dev2, cn002	1.1.1			
GSL	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	1.13			
Octave	login1, login2, dev1, dev2	3.2.4			
IDL	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	8.0			
Moldy	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	2.16e			
Molden	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	4.8			
Gamess	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	20101001			
	Compiladores				
Intel C++ Compiler	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	11.1.064, 11.1.073			
	login1, login2, dev1	10.1.025, 11.0.074,			
Intel Fortran Compiler	dev2	11.0.074, 11.1.064			
	cn001, cn002	10.1.025, 11.0.074			
GNU GCC	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	4.1.2			
Python	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	2.6.6			
JDK	login1, login2, dev1, dev2	1.6.0_21			
Herramientas					
Intel Debugger	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	10.1-35			
Intel Trace Analyzer and Collector	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	7.2.0.011			
Intel Vtune	dev1, dev2, cn001, cn002	9.1			
Platform LSF	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	7.0.4			
Matlab	Virtualizado	7.13			
Gaussian	dev1	9 Rev.C01			

MEMORIA ANUAL 2011

Librerías

HP-MPI

HP-MPI para Linux es una implementación del estándar Message-Passing Interface (MPI) de alto

rendimiento para servidores y estaciones de trabajo HP.

HP-MPI usa mejoras cuando es posible para proporcionar baja latencia y gran ancho de banda en

las rutinas de comunicación punto a punto y colectivas. Soporta ejecución multiprotocolo de

aplicaciones MPI sobre clusters y servidores de memoria compartida de manera que las aplicaciones puedan obtener las ventajas de la memoria compartida para las comunicaciones

intra-nodo.

Licencia: Propietaria de HP.

Platform MPI

HP-MPI para Linux es una implementación del estándar Message-Passing Interface (MPI) de alto

rendimiento para sistemas Linux y Micorsoft Windows.

Licencia: Propietaria de Platform.

Intel MPI

La librería Intel MPI implementa MPI-2 de alto rendimiento sobre múltiples tipos de redes. La

librería Intel MPI permite obtener un rendimiento máximo al usuario final, incluso, si se cambia

la red de interconexión del cluster, sin requerir grandes cambios en el software o en el sistema

operativo. Intel también distribuye el kit gratuito del entorno de "runtime" necesario para la

ejecución de los productos desarrollados con la librería Intel MPI.

Licencia: Propietaria de Intel.

Intel Math Kernel Library (MKL)

MKL contiene versiones robustas y optimizadas para Itanium2 de los siguientes conjuntos de

funciones: BLAS, Sparse BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, Sparse Solver routines, Vector Mathematical

Library functions, Vector, Statistical Library functions, Fourier Transform functions (FFT), Cluster

FFT, Interval Solver routines, Trigonometric Transform routines, Poisson, Laplace, and Helmholtz

Solver routines, Optimization (Trust-Region) Solver routines.

Licencia: Propietaria de Intel.

NetCDF

Es un conjunto de interfaces de acceso a datos en matriz y una colección de librerías de acceso a

**COMPUTAEX - CénitS** 

datos para C, Fortran, C++, Java y otros lenguajes. Las librerías NetCDF soportan un formato

independiente de la máquina para representar datos científicos. Las interfaces, librerías y

formatos soportan la creación, acceso y distribución de datos científicos.

Licencia: http://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/copyright.html

**PETSc** 

PETSc Es un conjunto de estructura de datos y rutinas para la solución escalable (paralela) de

aplicaciones científicas modeladas por ecuaciones en derivadas parciales.

Licencia: Propia compatible con GPL (versión 2).

Meep

Meep es un paquete de software de simulación libre de diferencias finitas en el dominio del

tiempo (FDTD) desarrollado por el MIT para modelado de sistemas electromagnéticos.

Licencia: GNU GPL.

**GSL** 

GNU Scientific Library (GSL) es una biblioteca escrita en C, destinada a cálculos numéricos en

matemáticas y ciencia, distribuida bajo la licencia GNU GPL.

Licencia: GNU GPL.

Octave

GNU Octave es un lenguaje de alto nivel, principalmente para cálculos numéricos. Proporciona

una interfaz de línea de comandos para resolver problemas matemáticos lineales y no lineales, y para realizar otros experimentos numéricos, utilizando para ello un lenguaje que es, en su mayor

parte, compatible con Matlab. También puede utilizarse como un lenguaje orientado a colas

batch.

Octave tiene una serie de herramientas para resolver problemas matemáticos de álgebra lineal,

encontrar soluciones a ecuaciones no lineales, integrar funciones ordinarias, manipular

polinomios e integrar ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones diferenciales algebraicas.

Octave es altamente ampliable y personalizable mediante funciones definidas por el usuario y que están escritas en el lenguaje propio de Octave, o utilizando módulos que se cargan

dinámicamente y que están escritos en C++, C, Fortran, u otros lenguajes.

Licencia: GNU GPL.

MEMORIA ANUAL 2011

**IDL** 

IDL es el lenguaje científico de programación de confianza utilizados en múltiples disciplinas para crear visualizaciones de complejos datos numéricos. Desde análisis de programas de pequeña

escala hasta aplicaciones ampliamente desplegadas, IDL proporciona el entorno informático

integral se necesita para obtener eficazmente la información de los datos.

Licencia: ITT.

COMPILADORES

Intel C++ Compiler

El compilador de C++ de Intel ofrece el mejor soporte para la creación de aplicaciones "multithreaded". Proporciona optimización avanzada, "multi-threading", y soporte del procesador que

incluye optimización automática del tipo de procesador, vectorización, auto-paralelización, OpenMP\*, "data prefetching", y "loop unrolling", junto con plantillas altamente optimizadas C++

para paralelismo, procesado matemático y librerías multimedia.

Licencia: Propietaria de Intel.

**Intel Fortran Compiler** 

El compilador de Fortran de Intel proporciona un rápido desarrollo y un gran rendimiento para

todas las plataformas basadas en los procesadores de Intel. Es un compilador de Fortran 95

completo con muchas opciones del estándar Fortran 2003, más una amplia variedad de las extensiones más populares. Automáticamente optimiza y paraleliza software para conseguir el

rendimiento más óptimo de los procesadores de Intel multi-core.

Licencia: Propietaria de Intel.

**GNU GCC** 

GCC es una distribución integrada de variosde los grandes lenguajes de programación (C, C++,

Objective-C, Objective-C++, Java, Fortran, y Ada). El lenguaje de componente independiente de GCC incluye la mayoría de los optimizadores, así como el "front end" que generan código

máquina para diferentes procesadores.

Licencia: GPL, LGPL.

**Python** 

Python es un lenguaje de programación dinámica orientado a objetos que puede ser utilizado de

**COMPUTAEX - CénitS** 

todo tipo de formas en el desarrollo de software. Ofrece un fuerte soporte para la integración

con otros lenguajes y herramientas, se distribuye con una biblioteca de funciones extensa y

estándar que pueden ser aprendidas en unos días. Muchos programadores de Python informan de un incremento sustancial de productividad y sienten que el lenguaje fomenta un desarrollo de

mayor calidad y código más "mantenible".

Licencia: Python Software Foundation License.

JDK

JDK (Java Development Kit) es un software que provee herramientas de desarrollo para la

creación de programas en java. Java se utiliza en un amplio número de plataformas de

computación, desde dispositivos embebidos y teléfonos móviles, hasta servidores de

multinacionales y supercomputadoras.

Licencia: Oracle License.

**H**ERRAMIENTAS

**Intel Debugger** 

Es un depurador de código con todas las características que permite a los programadores a

localizar errores en tiempo de ejecución (por ejemplo, código incorrecto, pérdidas de memoria,

desbordamiento de pilas, etc.) en su código. Se pueden depurar aplicaciones de uno o múltiples

hilos. Proporciona ventanas para OpenMP con información de las tareas actuales, equipos, las

tareas en espera, barreras, la tarea de generar los árboles y bloqueos, etc.

Licencia: Propietaria de Intel.

**Intel Trace Analyzer and Collector** 

Intel Trace Analyzer es una herramienta gráfica que muestra y analiza eventos de traza de datos

generados por Intel Trace Collector. Ayuda a detectar problemas de rendimiento, errores de

programación o para conocer el comportamiento de la aplicación.

Licencia: Propietaria de Intel.

Intel Vtune

Intel Vtune Performance Analyzer evalua aplicaciones de todos los tamaños de sistemas en

procesadores Intel, de sistemas embebidos a través de supercomputadores, para ayudar a

mejorar el rendimiento de las aplicaciones.

MEMORIA ANUAL 2011

Licencia: Propietaria de Intel.

**Platform LSF** 

Permite gestionar y acelerar la carga de trabajo de procesamiento por lotes para computación de misión crítica o carga de trabajo de aplicaciones de datos intensivos. Permite planificar de

manera inteligente y garantizar la finalización de la carga de trabajo por lotes a través de

entornos distribuidos, virtualizados y HPC.

Licencia: Propietaria de Platform.

Matlab

MATLAB es un lenguaje de computación técnica de alto nivel y un entorno interactivo para desarrollo de algoritmos, visualización de datos, análisis de datos y cálculo numérico. Con

MATLAB, podrá resolver problemas de cálculo técnico más rápidamente que con lenguajes de

programación tradicionales, tales como C, C++ y FORTRAN.

Licencia: Propietaria de Matlab.

Gaussian

Es un software comercial de uso en química teórica, resuelve la ecuación de Schrödinger

molecular basándose en la Teoría de orbitales moleculares (TOM), en el cual a partir de unos

parámetros iniciales, como el tipo de método abinitio (Hartree-Fock, Möller-Plesset, etc.),

Funcional de la Densidad (DFT) o semiempírico, (AM1, PM3, CNDO...), funciones base (STO-3G, 6-

31G, 6-311+G\*...), coordenadas iniciales de la molécula, bien en coordenadas cartesianas

(indicando la posición x, y, z de los átomos de la molécula) o en internas (matriz-z) (distancias,

ángulos y diedros), y la carga y multiplicidad, calcula la función de onda molécular y a partir de

ahí se obtienen una serie de propiedades atómicas y moleculares (energía de la molécula,

optimización de las coordenadas, densidad electrónica, momentos dipolares, cuadrupolares, etc)

muy útiles para trabajos posteriores.

Licencia: Gaussian.



# **WEB**

# **ECOSISTEMA WEB**

### PORTAL WEB CORPORATIVO

El Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación y la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura cuentan con un portal web corporativo, basado en software libre (Drupal), accesible y conforme con los estándares de la W3C.

### **Funciones del Portal Web corporativo**

- Proporcionar información referente a la identidad corporativa, actividades y servicios del centro y de la Fundación.
- Difundir cuestiones de interés y eventos relacionados con la supercomputación, investigación e innovación tecnológica.
- Difundir los resultados de las investigaciones de los usuarios que hacen uso de los recursos del centro.

### Contenidos de la web

- Identidad corporativa: información referente a CénitS y a la Fundación COMPUTAEX.
- Actualidad: canal de noticias relacionadas con la supercomputación, investigación e innovación, difusión de convenios y colaboraciones del centro y la fundación con otras entidades.
- Zona de proyectos: información sobre los proyectos que hacen uso de los recursos de CénitS, los investigadores responsables de dichos proyectos y las publicaciones relacionadas.
- Zona de eventos: agenda informativa de los eventos que se realizan, colabora, participa o se consideran de interés.
- Zona multimedia: contenido digital de tipo texto, audio, gráfico y vídeo, enlaces a centros I+D+IT y de interés.
- Documentación: información relacionada con cuestiones generales y manuales de usuario (uso y acceso a los sistemas, resolución de los problemas comunes, etc).



### Evolución del portal web

El portal web ha evolucionado debido a la aparición de nuevas necesidades, planteamientos y mejoras del servicio existente. Los primeros pasos se realizaron a lo largo del año 2010 en dos grandes etapas:

- **Primera etapa**: rediseño estrictamente visual. Mientras se estudiaba cómo satisfacer los nuevos requerimientos y afrontar las posibles mejoras que se podían aplicar, se decidió realizar pequeños cambios para ofrecer al usuario una interfaz más agradable: se ajustaron los tamaños de letra, colores, imágenes, iconos y la cabecera.
- Segunda etapa: rediseño estructural y visual. Las limitaciones impuestas por el software utilizado hasta el momento, conllevó un replanteamiento sobre el uso actual y futuro del portal web. Para afrontar nuevas funcionalidades, se decidió optar por una solución open source más versátil, en base al estudio y desarrollo de disciplinas que abarcaban la arquitectura de la información, accesibilidad, usabilidad y SEO. Además de la aplicación de las disciplinas anteriores, se elaboró un plan estratégico que comprendía la migración de los datos de la web existente a la nueva plataforma y el análisis y reajuste de las configuraciones previas de los servidores web y de base de datos.

Durante el año 2011, gracias a la adquisición de nuevos servidores para el centro, se optó por dar un paso más en la evolución y plantear una estrategia basada en el paradigma del *cloud computing* para dar soporte al ecosistema web.

### Servicio basado en Cloud Computing

El objetivo que se persigue utilizando el modelo basado en *cloud computing* es tener la capacidad de proporcionar recursos adaptados a las necesidades de los servicios que se planteen, de manera flexible, segura e independiente de la estructura hardware que los soporte.

La adaptación de este nuevo paradigma se ha realizado de manera progresiva y todos los servicios ofrecidos y gestionados de manera tradicional, se han reorganizado para optimizar los recursos utilizados.

El proceso de migración constó de tres fases bien diferenciadas:

- Fase de virtualización de sistemas: entre todos los sistemas existentes que cumplen este propósito se ha elegido *XenServer* de *Citrix Solutions*, en su versión libre, que cumple los requisitos para la puesta en marcha. Además ofrece capacidad de ampliación a versiones comerciales con características más avanzadas.
- Fase de pruebas: todos los datos de los sistemas tradicionales se han migrado a las máquinas virtuales y durante un periodo de dos semanas se han realizado múltiples pruebas para verificar que los sistemas funcionaban correctamente para poder consolidar la infraestructura de virtualización.

• Fase de implantación: en este punto se realizaron los ajustes en la infraestructura de red para que los servicios nuevos y los tradicionales coexistieran temporalmente hasta el momento de desactivar los servicios tradicionales.

### Mejoras del portal web

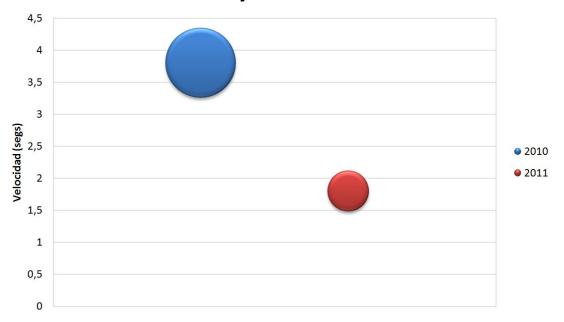
La adopción del paradigma de *cloud computing* en el ecosistema web ha permitido realizar mejoras técnicas muy importantes y ajustadas a distintos niveles, permitiendo ofrecer un servicio mucho más eficiente con la mitad de recursos utilizados por el modelo tradicional. Los ajustes técnicos corresponden principalmente a:

- Servidor web: se han reajustado las políticas de cacheo y compresión de contenido, redireccionamiento a canales seguros según la necesidad, se han ampliado los rangos de caducidad de las sesiones de usuarios anónimos y reducido la de los usuarios autenticados.
- **Servidor de base de datos**: se han reajustado las políticas de uso de la memoria de consultas y de cacheo para acelerar las consultas complejas.

Estos ajustes se han traducido principalmente en una importante mejora de la velocidad media de carga de las páginas web y en una reducción del ancho de banda utilizado para servir las páginas web. El número total de visitas por año permite también reafirmar las mejoras ante el incremento de accesos al ecosistema web.

	Velocidad media (segs.)	Tráfico (MB)	Visitas
2010	3,8	42.055,68	7.033
2011	1,8	14.470,32	11.048

## Relación mejora ecosistema web



El centro de cada esfera indica la velocidad media de carga de página y el volumen de cada esfera indica la cantidad de tráfico generado para servir el ecosistema web.

### **D**ATOS ESTADÍSTICOS

A continuación se muestran los datos que se han estimado más relevantes para el año 2011.

### **Datos generales**

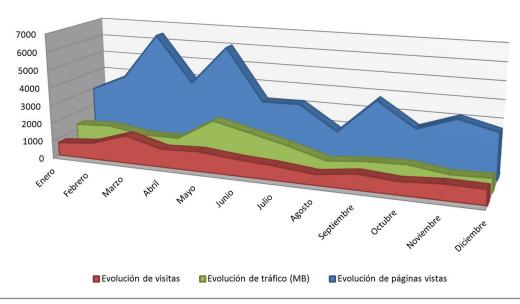
Páginas vistas	Visitas	Visitas nuevas (%)	Visitas habituales (%)	Tráfico (MB)
42.943	11.048	60,63	39,37	14.470,32

### Evolución mensual

La migración del ecosistema web al paradigma de *cloud computing* se realizó en los meses de Junio y Julio. Como se puede apreciar en los datos que se muestran a continuación, el tráfico generado por las páginas se reduce notablemente a partir de Agosto, mientras el número de visitas y páginas vistas se mantienen estables.

	Páginas vistas	Visitas	Tráfico (MB)
Enero	2.975	738	1.300,48
Febrero	3.876	925	1.402,88
Marzo	6.427	1.572	1.085,44
Abril	3.829	1.026	1.095,68
Mayo	6.010	1.123	2.304
Junio	3.089	928	1.822,72
Julio	3.145	809	1.331,2
Agosto	1.795	599	728,61
Septiembre	3.732	878	921,88
Octubre	2.368	730	999,24
Noviembre	3.110	872	711,89
Diciembre	2.587	848	766,3
	42.943	11.048	14.470,32

## Evolución ecosistema web

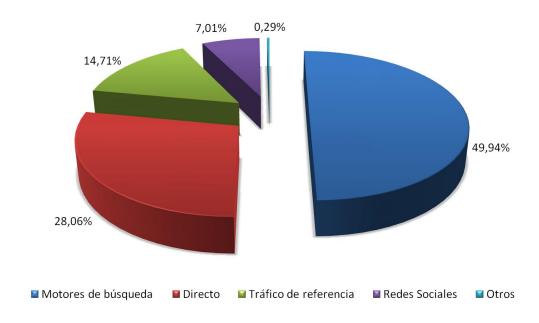


### Fuente de tráfico

A continuación se muestra cómo acceden los usuarios al ecosistema web. Hay que destacar la aparición de las redes sociales como una fuente de tráfico en notable crecimiento debido al esfuerzo de difusión de la actividad de la Fundación COMPUTAEX y CénitS a través de estos nuevos canales.

Fuente de tráfico	Visitas
Motores de búsqueda	5.517
Directo	3.100
Tráfico de referencia	1.625
Redes sociales	774
Otros	32

## Fuentes de tráfico



### **Eventos destacados**

A continuación se muestra el listado de los eventos más destacados difundidos a través del ecosistema web.

Evento	Páginas vistas
Presentación memoria anual 2010	1.503
Extremadura, en primera división de supercomputación	896
Premio SITI/@asLAN 2011	2.515
Proyecto e-Ciencia	1.304
Proyecto red temática FIERRO	2.470
Premio Computerworld Honors Program	2.819
Extremadura democratiza el acceso a la supercomputación	605



La gráfica muestra los eventos ordenados secuencialmente según la fecha de ocurrencia de izquierda a derecha. El centro de la esfera representa el número total de páginas vistas y el volumen indica la relación de páginas vistas.

## Ubicación geográfica

Países: se ha accedido al web desde 62 países distintos.

País	Visitas	Porcentaje
España	8.973	81,22
México	374	3,39
Colombia	269	2,43
Venezuela	131	1,19
Perú	126	1,14
Argentina	108	0,98
Rusia	98	0,89
Reino Unido	95	0,86
Brasil	94	0,85
EEUU	87	0,85
Resto	693	6,27



Ciudades españolas: se ha accedido al web desde 100 ciudades distintas.

Ciudad	Visitas	Porcentaje
Cáceres	3.406	37,96
Madrid	2.202	24,54
Badajoz	967	10,78
Mérida	776	8,65
Barcelona	246	2,74
Sevilla	217	2,42
Valencia	71	0,79
Málaga	59	0,66
Salamanca	47	0,52
La Coruña	45	0,50
Resto	937	10,44



### Canales complementarios de difusión

Conociendo la importancia de las redes sociales en cuestiones de difunsión de información, hemos seguido trabajando en la presencia en las distintas redes sociales más populares con el fin de dar a conocer las noticias más relevantes entorno al centro CénitS y los investigadores que hacen uso de los recursos del supercomputador LUSITANIA:

- Facebook: página sobre el supercomputador LUSITANIA. Este canal permite difundir las noticias que publicamos en la web, permitiendo que los usuarios participen aportando opiniones y compartiendo la información con otros usuarios.
- **Twitter**: este canal nos permite notificar sobre todo tipo de eventos de interés y mantener una relación con los usuarios rápida y flexible.
- Linkedin: página del centro CénitS orientada a publicitar los servicios que ofrece la Fundación a una audiencia más especializada que en las anteriores redes.
- Youtube: canal para centralizar los vídeos relacionados con la actividad realizada en el centro emitidos en los distintos medios visuales.
- Vimeo: canal para centralizar los vídeos grabados durante los eventos organizados por el centro.
- **Issuu**: espacio destinado a la compartición de las publicaciones digitales que se realizan en el centro o que lo implican.

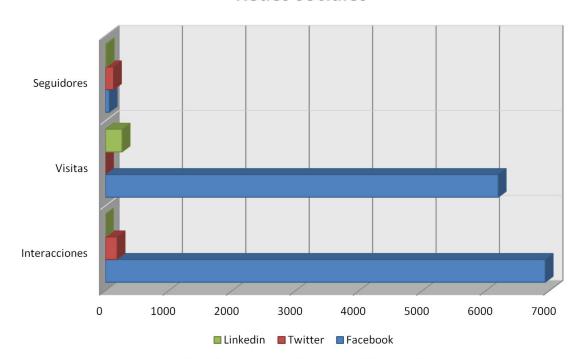
A continuación se muestran los datos más significativos de las distintas redes sociales, agrupadas éstas por similitud.

NOTA: los datos omitidos en algunos campos de la tabla se debe a la diferencia intrínseca de las redes sociales mencionadas anteriormente.

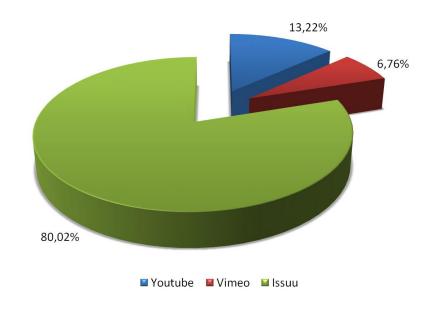
### **Datos estadísticos**

	Linkedin	Facebook	Twitter	Youtube	Vimeo	Issuu
Seguidores	14	59	126			
Visitas	262	6194				
Interacciones		6934	183			
Reproducciones				350	179	2119

# **Redes sociales**



## Redes sociales multimedia



# El Diario de CénitS-COMPUTAEX



Publicado por CénitS

TITULARES AGENDA PROYECTOS CONVENIOS RECONOCIMIENTOS CANALES MULTIMEDIA SERVICIOS

La Fundación COMPUTAEX premiada en la edición de 2011 del "Computerworld Honors Program"

El Computerworld Honors Program ha reconocido durante más de 2 décadas la labor de organizaciones e individuos que han usado las tecnologías de la información para fomentar y mejorar el bienestar público, beneficiar a la sociedad y cambiar el mundo para mejor.

Leer más...

# La revista COMPUTERWORLD destaca el Centro CénitS en materia de supercomputación

La prestigiosa revista internacional COMPUTERWORLD se hace eco de la labor de la Fundación COMPUTAEX en materia de supercomputación con su Centro CénitS. El artículo analiza la evolución del proyecto desde sus inicios, las características técnicas de las instalaciones, el uso de herramientas open source y la diversidad de los grupos de investigación que utilizan los recursos.

Leer más...

## Ciencia

# Convenio de colaboración sobre investigación en ultrasecuenciación genética

En la reunión celebrada a fecha 11/03/11 se ha acordado establecer un convenio de colaboración entre la Unidad de Genética del Infanta Cristina, investigadores de la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX para iniciar un proyecto asistencial y de investigación denominado "Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación con LUSITANIA". Leer más...

# Cálculos realizados en el

supercomputador LUSITANIA han permitido descubrir el primer organocatalizador para la

## síntesis de tetrazoles

Los tetrazoles son compuestos de una gran importancia hoy en día, sobre todo en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La preparación de estos compuestos es muy complicada, ya que se requieren temperaturas muy elevadas y muchísimas horas de reacción.

Leer más...

El mecanismo de hidrogenación de amidas mediante catalizadores basados en rutenio ha sido esclarecido mediante cálculos realizados en el supercomputador LUSITANIA

## La reacción de

hidrogenación es una de las más importantes en Química. Se trata de procesos muy complicados que requieren elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores adecuados.

Leer más...

# LUSITANIA permite a investigadores de la Universidad de Extremadura publicar en revista internacional de Química Orgánica

"Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: structure and stereodynamics" es el título de la nueva publicación del grupo de investigación de Química Orgánica de la Universidad de Extremadura, QUOREX. Leer más...

# (i)









## Destacado

- CénitS ganador de la categoría "Otros Organismos Públicos" y finalista como "Caso de Éxito más valorado por su Innovación y Ejemplaridad"
- La Fundación COMPUTAEX participa en la primera jornada extremeña de itSMF
- La Fundación COMPUTAEX continúa su colaboración con los Másteres TIC de la Universidad de Extremadura
- La Cátedra Telefónica de la Universidad de Extremadura promueve el cuaderno "La Supercomputación al Servicio de los Cuidadanos"
- El trabajo MLFMA-FFT desarrollado en CESGA y CénitS (LUSITANIA) mencionado como Highly Cited Paper por el ISI
- Investigadores de la Universidad de Extremadura publican en revista internacional de Química Orgánica
- CénitS se incorpora como miembro a red de e-Ciencia de España

## Multimedia



Supercomputador LUSITANIA en +De:
Computaex 8 vídeos S Suscribirse



NOTAS DE PRENSA

Servicios: Elevada capacidad de cómputo (HPC) | Gran capacidad de almacenamiento (alta capacidad, aplicaciones críticas y copias dinfraestructuras y servicios (Definición de requerimientos, diseño e implementación, parámetros de calidad y políticas de seguridad Consul

Formación | Cooperación / Convenios | Apoyo a la investigación, desarrollo e innovación tecnológica

ción de niento |

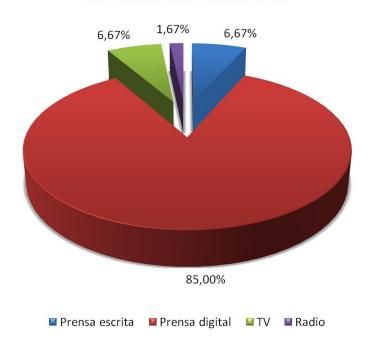
# **NOTAS DE PRENSA**

# **CÉNITS-COMPUTAEX EN LOS MEDIOS**

La repercusión alcanzada en los medios informativos, prensa escrita, prensa digital, televisión y radio, deja constancia del esfuerzo que se ha realizado a la hora de difundir las distintas labores acometidas por el centro y la Fundación a lo largo del presente año.

Prensa escrita	Prensa digital	Televisión	Radio
4	51	4	1

# **Medios informativos**



# PRENSA ESCRITA

Fecha	Titular	Fuente
01/03/11	Extremadura, en primera división de supercomputación	Computerworld
25/03/11	CénitS presentará en la feria Siti/asLan' 2011 la singularidad del computador Lusitania	Empresa y Finanzas
25/08 /11	Un nuevo premio para el Supercomputador LUSITANIA	Diario HOY
14/10 /11	Extremadura democratiza el acceso a la supercomputación	Computerworld

# Extremadura, en primera división de supercomputación

El CénitS cuenta con el superordenador Lusitania gracias a dos HP Superdome

## David Bollero.-

El CénitS (Centro Extremeño de Investigación, Innovación, Innovación Tecnológica y Supercomputación) se ha convertido en uno de los centros de referencia en España en investigación. Forma parte de la Fundación COMPUTAEx (Computación y Tecnología Avanzada de Extremadura), organización sin ánimo de lucro cuyo principal objetivo es gestionar el CénitS y, más concretamente, el superordenador que alberga en sus entrañas: Lusitania -nombre que recibía Extremadura en la época del Imperio Romano-.

El proyecto se concretó a finales de 2008 arrancado en producción a principios de 2009. En realidad, José Luis González, director general del centro, asegura que "la puesta en marcha fue inmediata", "a primeros del mes de enero ya estábamos en marcha y durante los meses posteriores tan sólo tuvimos que ir afinan-



Panorámica del CPD del CénitS

do configuraciones". Desde entonces, el desarrollo de proyectos en Lusitania ha sido constante.

El directivo recuerda que "en el proceso de selección valoramos a otros fabricantes, pero al final nos decidimos por HP". Explica que "los servicios profesionales de HP tuvieron mucho peso en la decisión final" porque, puntualiza, "se buscaban características muy singulares". A lo determinante de los servicios se sumó la gran capacidad de los sistemas de almacenamiento *y backup* de HP, fácilmente configurables con el soporte técnico de sus profesionales.

Durante el proceso de selección, el equipo técnico del CénitS viajó a otros centros de supercomputación en los que HP ha desplegado su tecnología, como el Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) o el de la Universidad de Málaga (SCBI), teniendo así la oportunidad de conocer de primera mano el potencial y las capacidades de la tecnología de HP. González señala: "Todos los proyectos de supercomputación están muy relacionados en España y existe una organización denominada HP-Cast mediante la cual se coordinan reuniones entre centros de supercomputación con equipamiento HP". En ese sentido, el centro extremeño recibió recientemente la visita de sus colegas asturianos.

Así fue como dos HP Integrity SX2000 Superdome se convirtieron en la espina dorsal del centro de supercomputación. Con 2TB de memoria compartida entre ambos sistemas y sus 256 procesadores, éstos son capaces de arrojar picos de procesamiento de hasta 1,6 Tflops, lo que le ha valido al centro, incluso, un récord mundial de supercomputación al haber resuelto problemas complejos con 620 millones de incógnitas en menos de 20 horas, explica González. Aquel logro fue galardonado con el Premio Itanium de Impacto de la Innovación en Soluciones Humanitarias.



El CénitS se ha

convertido en

uno de los centros

de referencia en

España en cuanto a

investigación se refiere

José Luis González.

HP Integrity SX2000 Superdome.

Profundizando en los aspectos más técnicos, los dos equipos Superdome disponen de conectividad de 10 GB soportada por cuatro servidores HP Integrity rx2660 v cuatro servidores HP ProLiant DL380 montados en rack. En cuanto al almacenamiento, Lusitania se apoya en dos HP StorageWorks 8100 EVA (Enterprise Virtual Arrays), ocho HP StorageWorks Modular Smart Array (MSA) 50 y una librería de cinta HP StorageWorks Enterprise Modular Library (EML) E-series 245e. Como resultado, el CénitS disfruta de una potente infraestructura tanto para su almacenamiento primario como para sus copias de respaldo y recuperación. No en vano, cada una de las EVA ofrece una capacidad de 132TB, mientras que los dispositivos MSA y la librería de cintas hacen lo propio con 146TB y 392TB, respectivamente.

En cuanto a la plataforma operativa, González indica que "aquí hace ya mucho tiempo que trabajamos con open source y nunca ha sido un problema, porque todos los fabricantes permiten sistemas operativos de software libre, sobre todo Red Hat o SUSE Linux". Éste último es el sistema operativo que domina el centro de supercomputación: SUSE

Los HP Integrity SX2000 Superdome son la espina dorsal del centro de supercomputación

Linux Enterprise Server (SLES), en sus versiones 9 y 10. Tan sólo los dos HP ProLiant corren aplicaciones Microsoft Windows Server 2003.

De cara a la labores de mantenimiento, HP ha puesto a disposición del centro un especialista técnico en Linux y un ingeniero de soporte, contando, además, con el apoyo del centro de Informática de Alto Rendimiento de HP.

## Experiencias 'cloud'

El centro ha sido pionero en poner en marcha iniciativas cloud computing. González admite que "no hay tantas experiencias prácticas para ello" y, en este campo, también se ha recurrido a las herramientas open source para personalizar los diferentes entornos cloud. Más de una treintena de grupos de investigación de toda España acceden a la supercomputación del centro, desde la Universidad de Extremadura, el CIE-MAT (Centro de Investiga-

# **Proyectos de TIC**

Entre los muchos proyectos de investigación que se llevan a cabo en el CénitS se encuentran los del ámbito de las TIC, donde destacan:

Proyecto CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial). Nace con el objetivo de aproximar una central de diseño virtual mediante la creación de puestos combinados de diseño remoto y la sustentación de proyectos que impulsen la creatividad y la innovación en la industria extremeña.

NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología que busca la creación de nanoantenas formadas por nanotubos de oro y optimizadas para incrementar sus prestaciones. Se analizan los efectos de las imperfecciones en las nanoantenas y el comportamiento electromagnético de nanomateriales.

Supercomputación y desarrollo 'grid'. Ofrece soporte a los investigadores del CIEMAT para la parelización y portabilidad de sus códigos fuente para aplicar técnicas de supercomputación. También se realizan investigaciones en Reconstrucción de Imágenes por Tomografía Axial en PET y Simulaciones Monte Carlo de Trasporte de electrones.

ción de la Energía, Medio Ambiente y Tecnología), la Universidad Complutense de Madrid o la de Sevilla, entre otras, tocando diferentes disciplinas. El responsable indica que "se abordan proyectos relacionados con las Ciencias de la Tierra, de la Vida o de Informática y Comunicaciones". El CénitS se ha convertido en un punto de encuentro entre entidades y organizaciones públicas y privadas de los más diversos sectores, lo que ha favorecido la activación económica y la creación de empleo directo e indirecto.

Dados los diferentes accesos remotos que se hacen a esta particular nube –se encuentra conectado a la Red Científico-Tecnológica de

Extremadura-, la seguridad ha sido uno de los puntos en los que los responsables del centro han puesto especial cuidado. Se ha apostado por las soluciones FortiGate-3810A de Fortinet, en configuración de alta disponibilidad, blindando los accesos con unos resultados que se concretan en ninguna incidencia destacable. Ello ha sido también posible gracias a la redundancia de todos los elementos del sistema, desde los balanceadores de carga, al cortafuegos, el cableado de conexión y los switches. La configuración presenta dos nodos de firewall -Lusi y Tania- en la que uno actúa como dispositivo primario, ejecutando todo el tráfico de red; y un secundario que en-

tra en funcionamiento si el primario falla. Desde que arrancaran los dos HP Superdome, "la única parada técnica que hemos tenido que efectuar ha sido de hora y tres cuartos, por el cambio de un cuadro eléctrico".

## Alumnos por la nube

Paralelamente, el CénitS realiza funciones de host y almacenamiento y presta sus sistemas de comunicaciones de alto rendimiento para el sistema de la Universidad de Extremadura (UEx) desarrollado por HP y Microsoft. Es una iniciativa concebida para acercar cloud computing a los alumnos que desarrollan sus provectos de fin de carrera. Tanto HP como la Escuela Politécnica de Cáceres, junto a la Fundación COM-PUTAEx y Microsoft, han puesto a su disposición la infraestructura necesaria. Los dos proveedores han dotado a la UEx de dos chasis C7000 HP BladeSystem Matrix y las herramientas Insight Dynamics; así como la plataforma de virtualización Microsoft Hyper V que forma parte del sistema operativo Windows Server 2088 R2.



Cableado de Lusitania bajo el suelo.



Cortafuegos y balanceadores.

# JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ, DIRECTOR DE LA FUNDACIÓN CÉNITS

# CénitS presentará en la feria Siti/asLan' 2011 la singularidad del computador Lusitania

El Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación tiene como objetivo fundamental fomentar, difundir y prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a las comunidades investigadoras extremeñas, o a aquella empresa o institución que lo solicite y de esta forma contribuir mediante el perfeccionamiento tecnológico y la innovación, a la mejora de la competitividad de las empresas.

Texto: Isabel Ma Bernal.

¿Cuándo se creó CénitS? ¿Cuáles son sus principales actividades y/o servicios?

El Centro fue creado en Agosto de 2009, para cumplir con una de las misiones principales de la Fundación pública COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura), constituida por la Consejería de Economía, Comercio e Innovación de la Junta de Extremadura.



Las actividades primordiales de CénitS son todas aquéllas relacionadas con el apoyo a la investigación y al sector productivo para lograr dinamizar la economía, la investigación y la innovación tecnológica en nuestra región.

¿En qué medida colabora CénitS tanto con investigadores particulares como con empreEn la actualidad tenemos ya varios proyectos propios en marcha, pero hasta ahora, hemos dado respuesta a un notable número de investigadores y empresas que han necesitado de nuestros recursos tanto técnicos como humanos para resolver necesidades concretas y/o para enfrentarse a nuevos retos.

¿Qué relación tiene el Centro con la Universidad y grupos de investigación de la misma?

La Universidad de Extremadura y todos sus grupos de investigación son nuestro principal objetivo. Gran parte de los recursos del Centro son utilizados por los científicos e investigadores extremeños. No obstante, también son usuarios de CénitS los investigadores de varios de los Centros tecnológicos existentes en la región. Nuestro principal objetivo es rentabilizar los recursos que la Fundación COMPUTAEX pone a nuestra disposición.

¿En qué proyectos está inmerso CénitS en la actualidad?

Pues ahora estamos iniciando junto al Hospital Infanta Cristina para llevar a cabo un proyecto de ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación. Este proyecto permitirá a los genetistas extremeños contar con una rápida herramienta para realizar análisis genético y poder enfrentarse en las

mejores condiciones a enfermedades hereditarias como el cáncer familiar, muerte súbita, sordera, etc.

La prestigiosa revista COMPUTERWORLD ha destacado recientemente al centro CénitS en materia de Supercomputación, ¿de qué se trata? ¿qué supone para el Centro?

Desde Computerworld se pusieron en contacto con nosotros hace unas semanas, atraídos por la actividad del Centro y mostrando interés por presentar CénitS a sus lectores como un caso de estudio.

CénitS ha sido premiada hace unos días en la categoría Otros Organismo Públicos en la Convocatoria de Casos de Éxito TIC, ¿qué supone para el Centro recibir este premio?

Es una gran satisfacción, pero, sobre todo, el mejor modo de reafirmarnos en que las cosas se están haciendo bien.

¿Puede adelantarnos cómo se presentará CénitS en la Feria SITI/asLAN'2011 que tendrá lugar del 5 al 7 de Abril en Madrid?

Nuestra intención es destacar las capacidades de nuestro Centro empezando por la singularidad de nuestro supercomputador LUSI-TANIA y concluyendo con el magnífico equipo de personas y técnicos que constituyen el Centro.



Fiestas en Truiillo 25.08.11 HOY 26 El reportaje



JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ Detalla lo que suponen los reconocimientos

# Un nuevo premio para el Supercomputador Lusitania



Mari Carmen Moreno. El Director General de la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPU-TAEX), José Luis González Sánchez, doctor ingeniero en Informática, habla para HOY sobre el nuevo premio que han concedido recientemente al Lusitania. José Luis González Sánchez,

doctor en Ingeniería Informática, investigador, profesor en la Universidad de Extremadura, y director general de Computaex, quien coordina a los ingenieros que trabaian en Truiillo con el Supercomputador Lusitania, ubicado en el conventual de San Francisco, próximo a la Plaza Mayor, nos explica el nuevo Premio conseguido para los ingenieros del Supercomputador Lusitania.

Tenemos que recordar que la ciudad de Trujillo acogió 'dulcemente' al Supercomputador Lusitania (el ordenador más potente de Extremadura) y se acomodó impredeciblemente en el Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas, con sede en el conventual de San Francisco cuvo director es Raúl Ramos Pollán, quienes les acogieron en las dependencias cedidas por el Ayuntamiento de Truiillo, al Centro ExtremeCETA CIEMAT hace unos años, y su presencia inesperada da pasos agigantados para proyectarse al mundo entero.

Decir también que en el edifi-cio del Conventual de San Francisco, (que acogió al Supercomputador Lusitania), sigue ubicado el Centro Extremeño de Tec-nologías Avanzadas, que es un Centro de Cálculo Público que pertenece al Ministerio de Ciencia e Innovación, donde también trabajan ingenieros con muchos ordenadores, dedicados a diferentes investigaciones científicas, poniéndolos al servicio de diferentes grupos de investigación que necesitan la capacidad de cálculo v almacenamiento de sus ordenadores para realizar sus investigaciones, según nos comentaba su director Raúl Ramos Pollán. El Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas también acoge a Ingenieros de diferentes países americanos, quienes vienen a investigar y complementar sus traba-

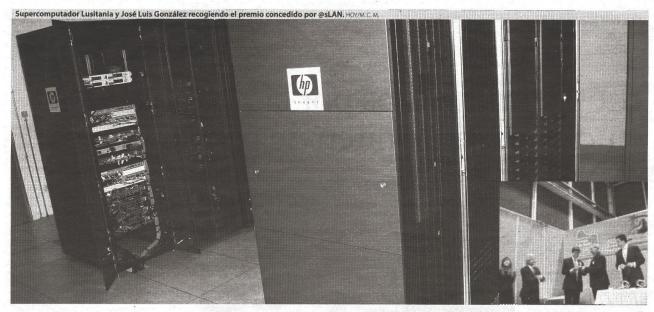
# **OTRO GALARDÓN**

Es el director José Luis Gonzá-lez Sánchez quien nos explica que hay varios equipos como éste en Europa, pero que es el de Extre-

madura el mejor dotado, asegura el profesor.

Considera que "el Supercomputador extremeño Lusitaniacontinúa dando a conocer Extrema-dura en todo el mundo; pocos meses después de su instalación en el conventual de San Francisco de Trujillo, logró establecer en di-ciembre de 2009 un récord mundial de cómputo, siendo capaz de procesar, hasta entonces, el mayor objeto en electromagnetismo, al resolver un sistema de ecuaciones con 620 millones de incóg-

Fue en septiembre del 2010 cuando se recibió en la ciudad nor-teamericana de San Francisco la máxima distinción anual que la Itanium Solutions Alliance (Asociación que reúne a más de 240 multinacionales de hardware y software) concede cada año en la categoría de Humanitarian Impact en reconocimiento al uso innovador de sistemas con tecnología basada en procesadores Itanium para obtener resultados que bene-fician a la humanidad mediante la Investigación, las mejoras sociales u otros esfuerzos humanitarios. En realidad se estaba reconociendo la veintena larga de proyectos acometidos en menos de un año en el Centro CénitS (Centro ExtremeHOY 25.08.11 Fiestas en Trujillo



ño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación), que es el encargado de gestionar este recurso computacional que está al alcance de todos los extremeños. El Director General de CénitS, José Luis González Sánchez, se trajo consigo el prestigioso galardón que reconoce la actividad del Centro y además un talón de 25.000 dólares, para potenciar las actividades del Lusitania. También recogió el diploma que acreditaba el haber sido uno de los tres finalistas en la categoría Computationally Intensive Applications compitiendo con e-Bay, el mayor portal de subastas en Internet con más de 100 millones de clientes y con la presencia de la Universidad de

Pero la actividad de los 9 ingenieros que gestionan el supercomputador es frenética, dice su director José Luis González, dando soporte a un buen número de investigadores, innovadores y empresas, y era cuestión de tiempo que llegara también el reconocimiento nacional que se ha producido en el mes de abril de 2011 habiendo recibido el galardón de ganador de la categoría de Organismos Públicos que cada año la asociación @sl.AN entrega en el congreso SITI celebrado en Madrid, premiando a los casos de éxito más sobresalientes. En esta edición con-

cursaron un total de 94 casos de éxito, de 77 organismos públicos a través de un proceso abierto y transparente en el que participaron con sus votaciones 1.315 profesionales para elegir finalmente al ganador en cada una de las nueve categorías concursantes. En la convocatoria de Casos de Éxito TIC Innovadores y Ejemplares en Administración y Organismos Públicos de 2011, la iniciativa tuvo como objetivo principal facilitar el intercambio de conocimientos y reconocer públicamente el esfuerzo y dedicación de los Responsables TIC de AAPP que los han liderado.

nos dice el profesor José Luis González, ya que el pasado mes de junio en la ciudad norteamericana de Washington, D.C., la revista más importante del sector, Computerworld, se fijó también en la actividad de la Fundación COMPUTAEX que es la máxima responsable de CénitS y del LUSITANIA, y la distinguió entre más de 1,000 candidatos procedentes de más de 23 países del mundo. COMPUTAEX fue propuesta como laureada en The Computerworld Honors Program por la sobresaliente actividad de su Centro CénitS como uno de los 254 laureados. La revista Computerworld lleva desde 1988 haciendo entre-

ga de estos premios que reconocen la labor de organizaciones e individuos que han usado las tecnologías de la información para fomentar y mejorar el bienestar público, beneficiar a la sociedad y cambiar el mundo para mejor. COMPUTAEX quedó englobada en la categoría Economic Opportunity, compitiendo con otras 16 organizaciones entre las que destacan Hewlett-Packard, Cisco Systems o Airtel, Pues bien, en el acto que tuvo lugar en Washington el 20 de junio, la Fundación Extremeña COMPUTAEX fue propuesta como una de las seis finalistas de su categoría y recibió un diploma y la medalla, que la acredita como una de las 50 organizaciones mundiales más destacables en esta edición de los premios Computerworld Honors Program 2011.

La visión de futuro y la aplicación de las Tecnologías de la Información como palanca de cambio social, económico y educativo han sido las claves por las que la Fundación COMPUTAEX fue seleccionada como finalista del Economic Opportunity 21st Century Achievement Award. En esta ocasión no se viajó a Washington,D.C., a recoger el reconocimiento, en un intento por amortiguar la situación de crisis actual, pero los trofeos están ya en las vitrinas de la Fundación, comenta José Luis González, profésor de la UFX

Para el director general de la Fundación, José Luis González, sin quitarle valor a los premios que se han logrado, lo más importante que ha conseguido el Centro hasta ahora ha sido el ser capaz de dar respuesta a las necesidades de más de una treintena de provectos multidisciplinares englobados en tres categorías (Ciencias de la Vida, Ciencias de la Tierra y Ciencias Informáticas y de Comunicaciones). Los notables recursos de cómputo de Lusitania están permitiendo a un buen número de investigadores (físicos, matemáticos, químicos, ingenieros, médicos, tecnólogos, economistas, arquitectos etc.) lograr publicaciones de primer nivel y elevado impacto cien-tífico y también a varias empresas innovadoras conseguir proyectos y acometer retos que sin este recurso no podrían haber alcanzado. El propio Centro CénitS está logrando atraer fondos procedentes de Europa y de España para acometer sus propios proyectos, fondos que de otro modo no habrían llegado a Extremadura y se hubieran ido a otras Comunida-

Finalmente, el director general José Luis González, responsable de cuanto acontece en Trujillo con la Supercomputadora Lusitania, nos dice que "ya han venido a la localidad grupos de estudiantes de la Escuela Politécnica, y también hemos recibido a varios investigadores interesados en visitar el centro, así como a estudiantes de Universidades de los Estados Unidos. Tenemos previsto que sea un Centro Publico y esté al servicio de toda la Comunidad, por lo que cualquiera que tenga una inquietud por conocer lo que hay actualmente aquí en Trujillo, debe tener la oportunidad de conocerlo

la oportunidad de conocerlo. El profesor José Luis González Sánchez, doctor ingeniero en In-formática, creador e investigador responsable del grupo de investi-gación GÍTACA (Grupo de Ingeniería Telemática Aplicada y Co-municaciones Avanzadas) de la Universidad de Extremadura, es autor de múltiples libros, artículos, trabajos y proyectos de investigación relacionados con la informática y las comunicaciones. Colabora con varios grupos de inves-tigación nacionales e internacionales, siendo sus principales líneas de investigación: Computación y Comunicaciones Avanzadas en Red; Seguridad de la Información y Comunicaciones; Software Li-bre y Código Abierto, Tecnologías de la Informática y las Comunica-ciones Aplicadas al Teletrabajo y a la Innovación Docente.







# Extremadura democratiza el acceso a la supercomputación

CenitS se unió hace dos años al panorama de supercomputación español. Hoy es un dinamizador clave del sector tecnológico de la región.

a Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (ComputaEx), fundada por la Junta de Extremadura, creó hace dos años CénitS, el Centro Extremeño de investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación, con una inversión inicial de 7,7 millones de euros. El objetivo de este cetro es fomentar, difundir v prestar servicios de cálculo intensivo v comunicaciones avanzadas a las comunidades investigadoras extremeñas o a las empresas o instituciones que lo soliciten. Según José Luis González Sánchez, director del centro, "CénitS nació para dotar al sector productivo e investigador de nuestra región de recursos que le hicieran más competitivo e impulsaran el despliegue de las tecnologías más avanzadas. La accesibilidad a este tipo de tecnologías era bastante limitada en España donde sólo existían hace dos años el Centro Nacional de Supercomputación y dos Centros regionales". Como dice el director del Centro, "son muchas las misiones de

la Fundación ComputaEx, el Centro CénitS y el supercomputador Lusitania que alberga el anterior, pero tal vez el mayor beneficio que se ha podido obtener ha sido la dinamización del sector tecnológico en nuestro entorno, aportando recursos que no son

accesibles".

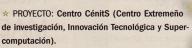
# Radiografía tecnológica

En un Centro como CénitS intervienen muchas y variadas tecnologías, pero González destaca "la tecnología Superdome de HP, usada en nuestro supercomputador Lusitania, el sistema operativo SuSe empleado en nuestros equipos, los mecanismos de seguridad de Fortinet, el software Gaussian empleado por algunos de nuestros más activos investigadores y una gran librería de software libre empleado en el Centro".

El director de CénitS resalta el papel de HP en el proyecto: "Nuestro principal socio tecnológico ha sido HP que ha jugado un importante papel colaborando en la implantación de sus tecnologías y en la consolidación del Centro".

## **Proyectos**

El Centro está trabajando actualmente en múltiples y diversas áreas. Desarrolla soluciones para elaborar previsiones de impacto medioambiental (para industrias farmacéuticas, refinerías, etc.); para las áreas de biología y medicina (estudios sobre cáncer, genoma, diversas enfermedades, biodiversidad, etc.);



- ★ IMPLANTACIÓN: Fundación ComputaEx.
- \* PRESENTA EL PROYECTO: ComputaEx.
- $\star$  RETO: Dotar al sector productivo e investigador extremeño de recursos que le hicieran más competitivo.
- ☆ SOLUCIÓN: Los equipos Superdome de HP, usados en el supercomputador Lusitania, el sistema operativo SuSe, la seguridad de Fortinet, el software Gaussian y una gran librería de software libre.

ciencias de la Tierra (estudios geológicos, predicciones de incendios...); agricultura (nuevas técnicas de reproducción, simulaciones de productos, etc.); diseño industrial (estructuras, puentes, aviones, coches); predicción climática (calentamiento

global, etc.).

Algunos de los proyectos que actualmente está ejecutando son Siatdeco, un sistema de información para ayudar a la toma de decisiones en el área de energía verde; otro proyecto encaminado a desvelar los pormenores del mecanismo de la importante reacción de Morita-Baylis-Hillman, una de las transformaciones químicas más importantes en la producción de compuestos de alto valor añadido; y la realización de una serie de integraciones climáticas con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model), entre muchos otros.

# Prensa digital

# Enero

Fecha	Titular	Fuente
30/01/11	Los clusters de la energía y las TIC de Extremadura celebran un	regiondigital.com
	encuentro para el fomento de proyectos en ambos sectores	

# Marzo

Fecha	Titular	Fuente
		Europapress.es
	Computaex alcanza la fase final de los premios de la Asociación	20minutos.es
	de Fabricantes de Equipos para Telecomunicaciones	elEconomista.es
07/02/11		Yahoo España
07/03/11	Computaex, a final de premios de fabricantes de equipos de	ABC
	telecomunicaciones	HOY.es
	COMPUTAEX y su centro CÉNITS alcanzan la fase final del los	regiondigital.com
	Premios convocados por la Asociación de Fabricantes de Equipos para Telecomunicaciones en España	juntaladia.es
08/03/11	La fundación del superordenador Lusitania, finalista de unos	HOY.es
	premios nacionales	lainformacion.com
11/03/11	Extremadura despunta en supercomputación	ComputerWorld
12/03/11	La fundación COMPUTAEX logra el premio que conceden los	juntaaldia.es
14/03/11	fabricantes de sistemas de red, internet y telecomunicaciones al	economiadehoy.com
14/03/11	caso de éxito más relevante en organismos públicos	regiondigital.com
	asLAN premia a la Administración Pública	Network World
15/03/11	Empresas e instituciones abordan en una reunión su apoyo al sello de Cáceres como Ciudad de Ciencia e Innovación	Extremaduraaldí@
10, 00, 11	asLAN escoge los Casos de Exito TIC 2011	Channel Insider
	Los nueve premios @asLAN a los Casos de Éxito TIC, ya tienen ganador	techWEEK.es
18/03/11	INSA-IBM y el superordenador regional estarán en el campus	el Periódico Extremadura
22/03/11	Meru Networks patrocina la III Convocatoria de Casos de Éxito de SITI/asLAN 2011	NetworkWorld
24/03/11	El Centro de Excelencia de Software Libre José de Espronceda participa en la Jornada "Gestión de servicios TI: una vía al éxito y la excelencia"	PUNTO TIC
	El director general de Ciencia y Tecnología inaugurará esta	ECI - JuntaEx
25/03/11	semana una jornada destinada a debatir casos de éxito en la implantación de las TIC	Juntaaldia.es
27/03/11	El Director General de Ciencia y Tecnología inaugura una jornada destinada a debatir casos de éxito en la implantación de las TIC	RegiónDigital.com
28/03/11	El Director General de Ciencia y Tecnología de Extremadura inaugura una jornada destinada a debatir casos de éxito en la implantación de las TIC	economiadehoy.com

# Abril

Fecha	Titular	Fuente
05/04/11	La Junta presenta en Vigo el proyecto Red de Investigación Transfronteriza de Extremadura	europapress.es
	La Fundación Computaex, premiada por '@asLAN' por su apoyo al intercambio de conocimientos en el sector tic	elEconomista.es
		HOY.es
08/04/11	COMPUTAEX, premiada por "@asLAN" por fomentar el conocimiento TIC	ABC.es
		finanzas.com
		Yahoo Noticias
	La Fundación Computaex, premiada por '@asLAN' por su apoyo al intercambio de conocimientos en el sector tic	Noticias.com
09/04/11	ar intercanisis de consermentos en el sector de	Diario Badajoz
16/04/11	La red de fibra óptica conectará cuatro nuevos centros	ABC.es
18/04/11	tecnológicos en junio	Cenatic

# Mayo

Fecha	Titular	Fuente
10/05/11	TheEvnt regresa a Cáceres con lo último en negocios y tecnologías en Internet	europapress.es

# Octubre

Fecha	Titular	Fuente
04/10/11	Una delegación de Cénits participa en Málaga en el IV encuentro de usuarios HP-Cast Ibérica	BadajozDirecto
05/10/11	Una delegación del Cénits participa en el IV Encuentro de Usuarios HP-Cast Ibérica en Málaga	RegiónDigital.com

# Noviembre

Fecha	Titular	Fuente
15/11/11	COMPUTAEX presenta al "CASEIB2011" una ponencia sobre la contribución de los supercomputadores a la investigación en biomedicina	Juntaaldia.es
	Computaex presenta en 'Caseib2011' una ponencia sobre la aplicaciación de la supercomputación al modelado de sistemas	extremaduraaldi@
	COMPUTAEX presenta una ponencia sobre la contribución de los Supercomputadores a la Investigación en Biomedicina al "CASEIB2011"	Región Digital.com

# Diciembre

Fecha	Titular	Fuente
		Qué.es
16/12/11	La Fundación Computaex y la Universidad de Extremadura convocan dos becas de formación TIC	europapress.es
		Noticias.com

	La Fundación Computaex junto a la UEx convocan a Becas de formación TIC	ibecas.com
16/12/11	La Fundación Computaex y la Universidad de Extremadura convocan dos becas de formación TIC	lainformacion.com RegiónDigital.com GenteDigital.es

# TELEVISIÓN

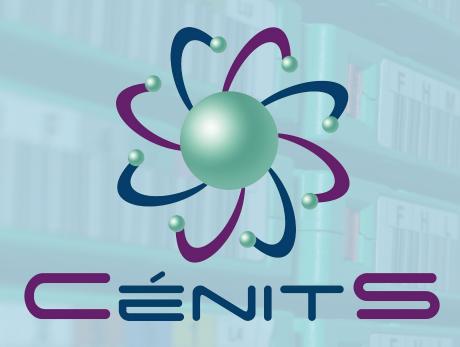
Fecha	Titular	Fuente
30/01/11	Supercomputador Lusitania	Hecho en Extremadura
07/02/11	LUSITANIA y CénitS-COMPUTAEX en Retriex	Retriex
27/03/11	Tecnofor entrevista al director de la Fundación COMPUTAEX	GlobbTV
06/05/11	Entrevista a José María Vergeles sobre el convenio de colaboración sobre investigación en ultrasecuenciación genética	ComarcaliaTV

# Radio

Fecha	Titular	Fuente
23/06/11	Entrevista al Director General de la Fundación COMPUTAEX	Principio de Incertidumbre

© Fundación COMPUTAEX

DEPÓSITO LEGAL: BA-595-2011



Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación

http://www.cenits.es

C/ Sola, 1. Conventual de San Francisco Trujillo, España

Tel.: +34 927 659 317 Fax: +34 927 323 237



