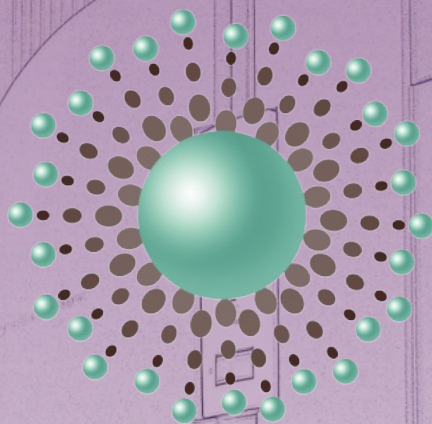
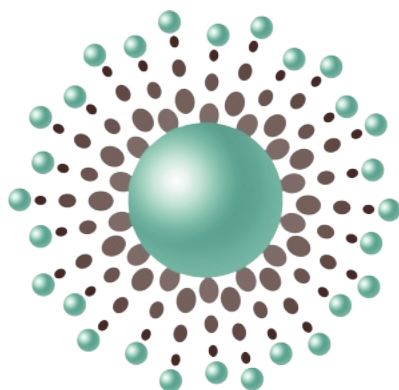




COMPUTAEX

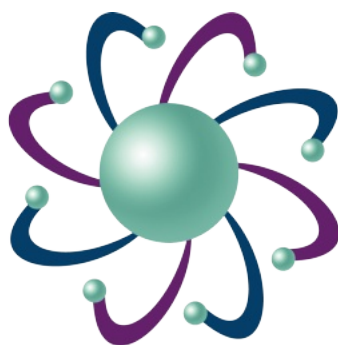
Fundación Computación y Tecnologías
Avanzadas de Extremadura

MEMORIA



COMPUTAEX

MEMORIA



CÉNITS



Unión Europea

Fondo Europeo de Desarrollo Regional



Unión Europea

Fondo Social Europeo

Una manera de hacer Europa

5	+ x -
7	ORGANIZACIÓN
9	Historia
9	Patronato
11	Equipo CénitS 2012
12	Técnicos de investigación
13	Agradecimientos
15	PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN
17	Ciencias de la Vida
32	Ciencias de la Tierra
44	Ciencias Informáticas y de Comunicaciones
61	PROYECTOS DE INNOVACIÓN
79	PROYECTOS CONCLUIDOS
87	RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN
89	Publicaciones y ponencias en congresos y jornadas
100	Publicaciones en revistas
108	Memorias de postgrado y estudios avanzados
111	Casos de éxito/estudio
112	Distinciones y reconocimientos
113	CONVOCATORIAS DE PROYECTOS Y CONVENIOS DE COLABORACIÓN
115	Relación de proyectos presentados a convocatorias competitivas con la participación de COMPUTAEX
118	Convenios de colaboración
121	ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN
123	Memorias de actividades de formación
128	Organización de eventos
130	Colaboración en la organización y participación en eventos
131	Asistencia a cursos y jornadas
132	Difusión
133	RECURSOS
135	Hardware
143	Consumos 2012
153	Usuarios
154	Software
165	WEB
167	Portal Web corporativo
177	NOTAS DE PRENSA
179	CénitS-COMPUTAEX en los medios



Los operadores matemáticos que encabezan este escrito intentan relacionar las dos evidencias en las que a diario se desenvuelve la Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS, donde el cómputo y la economía son la circunstancia en la que hemos estado especialmente inmersos durante el año 2012.



Aun a riesgo de no ser entendidos, o de tropezar en el tópico por citar a Ortega y Gasset, parece razonable tenerle muy presente cuando sentenció aquello tan conocido de *"Yo soy yo y mi circunstancia..."*, que no refleja su verdadero valor hasta que se le añade la segunda parte de la sentencia menos conocida *"...y si no la salvo a ella no me salvo yo"*. Tal vez, si todos nos enfrentásemos a nuestras actuales circunstancias con este planteamiento, nos resultaría más factible salir de la situación en que nos encontramos.

En 2012 la Fundación ha tenido que enfrentarse a una reducción presupuestaria de casi el 23% con respecto al ejercicio de 2011 y teniendo muy presente la premisa indicada en el título de *"hacer más con menos"*. Premisa que esta memoria de actividades intenta demostrar como cumplida, no sin un gran esfuerzo, aunque ya Antoine de Saint-Exupéry adelantó que *"El hombre se descubre cuando se mide contra un obstáculo"*.

Se ha dado cobertura a 25 proyectos de investigación categorizados en ciencias de la vida, ciencias de la tierra y ciencias informáticas y de las comunicaciones que, financiados por diversas vías, han dado lugar a muy destacados resultados y con un notable impacto en el ámbito científico y tecnológico con la publicación de más de 60 trabajos en revistas y congresos especializados. El espíritu de servicio público del equipo de ingenieros con que cuenta la Fundación, unido a la singular infraestructura que constituye el supercomputador LUSITANIA, permiten la prestación de servicios, la provisión de recursos y la investigación y colaboración con un amplio número de investigadores de campos como la física, química, informática, medicina, telecomunicación, arquitectura, economía, ingeniería industrial, biología, ingeniería agraria, etc.

Hemos tenido, además, la oportunidad de colaborar en un total de 10 proyectos multidisciplinares de innovación, donde los ingenieros de CénitS han aportado su experiencia a organizaciones públicas y privadas, estableciendo convenios de colaboración para la provisión de servicios y recursos en proyectos innovadores que, a su vez, son una importante vía de financiación alternativa en la búsqueda de la sostenibilidad económica.

La sostenibilidad económica es, precisamente, uno de los objetivos de la Fundación, y con esta aspiración se procura no depender única y exclusivamente de la subvención nominativa proveniente de los presupuestos de la Comunidad Extremeña al tratarse de una Fundación de carácter público y sin afán de lucro. Con esta orientación, desde la Fundación se han confirmado y presentado propuestas de proyectos a un total de 10 convocatorias competitivas públicas europeas, españolas y extremeñas. Se han obtenido también fondos mediante la firma de contratos y convenios con otros organismos. La financiación se completa con las aportaciones que realizan los grupos de investigación como usuarios de los recursos de CénitS. La captación de fondos propios ha sido este ejercicio un 163% superior a lo recibido en concepto de subvención nominativa.

Los 25 proyectos de investigación ejecutados en el Centro han dado lugar a 13.377 trabajos de cálculo intensivo, destacando que los 10 proyectos que mayor uso han hecho de los principales nodos de cómputo (SuperDome) han consumido un total de 1.144.653,29 horas de CPU. Otros proyectos han utilizado 31 máquinas virtuales que han sido específicamente configuradas para ajustarse a los requisitos concretos de cada problema. Notable es también el uso de 33.225,4 GB de memoria principal en los trabajos de cálculo intensivo y el consumo de 81 TB de memoria secundaria necesaria para almacenar los resultados obtenidos por todos los proyectos.

Ha continuado también este año el reconocimiento de la labor de la Fundación. Si anteriormente se recibieron galardones de ámbito internacional y nacional, en el presente ejercicio hemos tenido el enorme honor de recibir el reconocimiento de la comunidad universitaria de la Escuela Politécnica de Cáceres. Éste, como los anteriores galardones obtenidos, no podemos más que recibirlo con modestia y agradecimiento y como un reconocimiento del pasado, como una satisfacción del presente y como una obligación para el futuro.

Un centro dedicado a la investigación y a la innovación no puede comprenderse si no dedica parte de su actividad a la formación y divulgación de las técnicas que emplea y desarrolla. Por ello, se han emprendido un buen número de actividades formativas y divulgativas como las *V Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología*, la participación en los másteres TIC de la Universidad de Extremadura y la presentación de ponencias en varios eventos especializados. Además, se ha atendido personalmente a más de 300 visitantes que han mostrado interés por conocer nuestras actividades y el supercomputador LUSITANIA.

Ha transcurrido un año más sin que la Fundación disponga de un edificio propio donde poder desarrollarse con la potencialidad que viene demostrando desde hace cuatro años. Somos conscientes de que no son tiempos para la construcción de nuevos edificios públicos, pero existen muchos lugares donde poder alojar a la Fundación y, sobre todo, al Centro de Proceso de Datos (CPD) que acoga a LUSITANIA. Esto permitiría alcanzar la proyección y excelencia deseadas y no dejar pasar las oportunidades que hasta ahora hemos perdido por no disponer de un CPD donde investigar y ofrecer los servicios que se nos demandan. Las sociedades modernas miden su grado de desarrollo en la actualidad incluyendo ya las *infoestructuras* con que cuentan para procesar, almacenar y proteger la información de sus ciudadanos. Por ello, es importante disponer de las adecuadas instalaciones que eviten las dependencias en esta materia tan prioritaria. Mientras alcanzamos este logro, tendremos presente las lecciones aprendidas de Seymour Cray, el más claro precursor de la supercomputación, que enunció "*It's always easy to do the next step and it's always impossible to do two steps at a time*", aunque computacionalmente sabemos que esta limitación está superada.

Consideramos que los logros obtenidos son la resultante de contar con el mejor jugador posible como es disponer de un gran equipo humano. Desconocemos si este año el resultado ha sido fruto de la inercia del ejercicio anterior pero, estando convencidos de la insostenibilidad del modelo productivo basado en la obtención de beneficios anuales de dos dígitos, esperamos que en lo sucesivo podamos trabajar en mejores condiciones que lo hemos hecho en 2012 para alcanzar los objetivos que la Fundación COMPUTAEX tiene encomendados.



José Luis González Sánchez

ORGANIZACIÓN

ORGANIZACIÓN

La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX) es una organización pública de naturaleza fundacional, compuesta por una serie de profesionales que día a día prestan sus servicios para cumplir los fines para los que la fundación fue creada.

También cuenta con apoyo institucional y un gran número de colaboradores de inestimable valor.

HISTORIA



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.

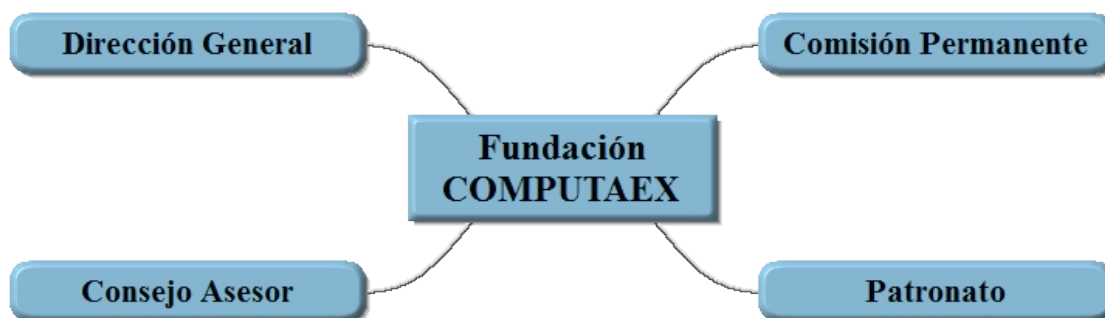
En Julio de 2011 se produjo la reestructuración del Gobierno de la comunidad autónoma de Extremadura, pasando la Fundación COMPUTAEX a depender de la Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica perteneciente a la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación.

En Octubre de 2012, con el fin de coordinar el proceso de constitución y puesta en marcha del Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura (CICYTEX), creado por la Ley 10/2010 de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación de Extremadura, se atribuyen las funciones propias de la Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica a la Secretaría General de Empleo y Actividad Empresarial, que pasa a denominarse Secretaría General de Empleo, Actividad Empresarial e Innovación Tecnológica, dependiendo COMPUTAEX de la misma.

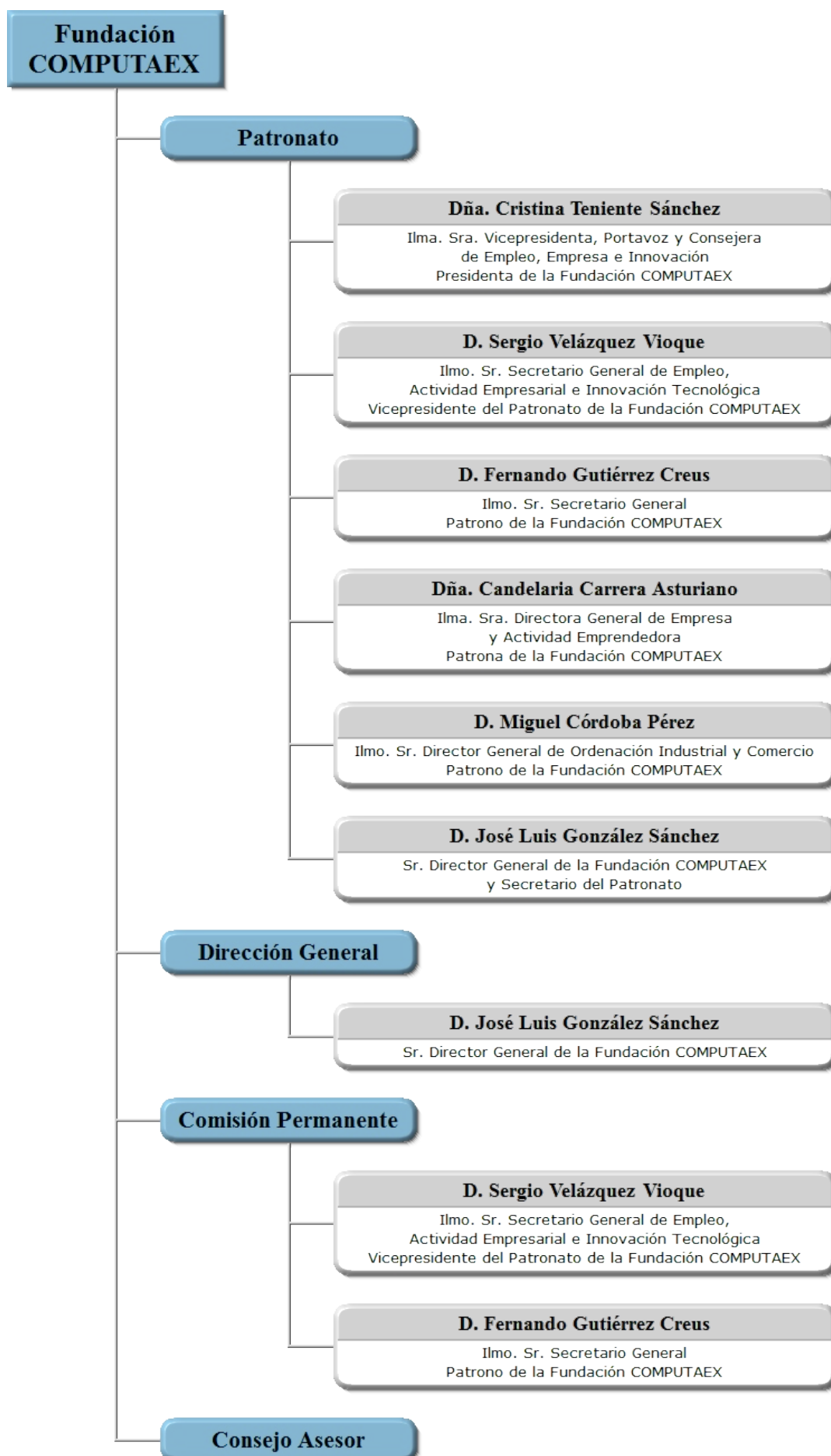
El Patronato es el principal órgano de gobierno de la Fundación, siendo sus Patronos la Vicepresidenta, Portavoz y Consejera de Empleo, Empresa e Innovación y los Directores Generales y Secretarios Generales de dicha Consejería.

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



EQUIPO CÉNITS 2012

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 2012 se han producido nuevas incorporaciones de carácter técnico e investigador para ampliar las capacidades de acción y dar respuesta a las necesidades del Centro y a sus usuarios.



José Luis González Sánchez

Director General
joseluis.gonzalez@cenits.es



César Gómez Martín

Jefe de Equipo de
Supercomputación
cesar.gomez@cenits.es



Ángel Bejarano Borrega
Administrador de Sistemas y
paralelización de código
angel.bejarano@cenits.es



Blanca Clemente Sánchez
Apoyo a la I+D+i
blanca.clemente@cenits.es



Javier Corral García
Analista y paralelización
de código
javier.corral@cenits.es



David Cortés Polo
Administrador de redes y
comunicaciones
david.cortes@cenits.es



Javier Lázaró Jareño
Administrador web y
paralelización de código
javier.lazaro@cenits.es



Felipe Lemus Prieto
Administrador de seguridad y
comunicaciones
felipe.lemus@cenits.es



Blanca Pérez Mariño
Técnico en gestión laboral,
contable, fiscal y jurídica
blanca.perez@cenits.es



TÉCNICOS DE INVESTIGACIÓN

Con motivo de los convenios de colaboración firmados por la Fundación COMPUTAEX, se han incorporado los siguientes técnicos para desempeñar tareas de apoyo a la investigación:

José Casero Cantos
Green IT
jose.casero@cenits.es



Miguel Cerrato Martín
Green IT
miguel.cerrato@cenits.es



Manuel Alfonso López Rourich
Cloud Computing
alfonso.rourich@cenits.es



Jaime Rivero Ramos
Cloud Computing
jaime.rivero@cenits.es



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 Extremadura Avante que acoge en su Centro de Cáceres parte de nuestro equipo humano.
- El personal de GPEx (especialmente Ana Beatriz Bueno Martínez, Esther Morano Gordillo, Celestino Niso Hurtado, Andrés Casallo Mariscal, Cristina Cle Vicente y Juan Pérez Peña) que nos ayuda con las labores administrativas.
- El personal de la extinta Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica (especialmente a Alejandro Hernández Renner, Sergio Palma Orantos, Raúl Lorenzo Marcos, Jesús García Rubio, Manuel López Cáceres, Mercedes Cortés Larrey, Marisol Monge Terrones, José Fuentes Solano, Constantino Gutiérrez Barbarrusa, Andrés Novas Molina y José Enrique Cintado Arias) que colabora en múltiples tareas burocráticas.
- El personal de la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación (especialmente a Ana Benítez Jiménez y Carmen Martínez García) que coopera en tareas de coordinación.
- El personal de la Secretaría General y de la Secretaría General de Empleo, Actividad Empresarial e Innovación Tecnológica (especialmente a Inmaculada Caballero Fernández, Juan Manuel Vitar González, Luis Manuel Alonso Santiago, Eva María Docasar González y Rosa María Cortés Díaz) que nos asesoran.
- 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.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2012.

Son proyectos pertenecientes a Universidades, Centros de Investigación y Centros Tecnológicos que utilizan un importante volumen de recursos de CénitS y que emplean LUSITANIA como herramienta para demostrar sus hipótesis, desarrollar sus tesis, diseñar sus innovaciones, realizar simulaciones y extrapolar resultados.

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

SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL EN SISTEMAS POLIATÓMICOS. ESTUDIOS CINÉTICOS Y DINÁMICOS TEÓRICOS



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) y 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

- Cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de la Tesis Doctoral de Manuel Monge-Palacios.
- Investigaciones sobre el sistema $\text{Cl} + \text{NH}_3$, que presenta una complicada topología en la superficie de energía potencial.

- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH₃, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremanera la construcción de la superficie.

Publicaciones y congresos

- M. Monge-Palacios, C. Rangel, J.C. Corchado and J. Espinosa-García: Analytical potential energy surface for the reaction with intermediate complexes NH₃ + Cl → NH₂ + HCl: application to the kinetics study. International Journal of Quantum Chemistry. 2012, 1887-1903.
- J. Espinosa-García, M. Monge-Palacios and J.C. Corchado: Constructing potential energy surfaces for polyatomic systems: Recent progress and new problems. Advances in Chemical Physics. 2012, 1-19.
- E. Garcia, J.C. Corchado and J. Espinosa-García: A detailed product distribution analysis of some potential energy surfaces describing the OH + CO → H + CO₂ reaction. Computational and Theoretical Chemistry. 2012, 47-52.
- M. Monge-Palacios, M. Yang and J. Espinosa-García: QCT and QM calculations of the Cl(2P) + NH₃ reaction: influence of the reactant well on the dynamics. Physical Chemistry Chemical Physics. 2012, 4824-4834.
- M. Monge-Palacios, J.C. Corchado and J. Espinosa-García: Quasi-classical trajectory study of the role of vibrational and translational energy in the Cl(2P) + NH₃ reaction. Physical Chemistry Chemical Physics. 2012, 7497-7508.
- Congreso Mundial del World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela, Spain, 2011.

Financiación

Junta de Extremadura, Proyecto IB10001.

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 y 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 tautoméricos imina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioletris (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 transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación ($< 8 \text{ kcal.mol}^{-1}$). 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 del naftaldehído 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

- Luciana Dalla-Vechia, Vanessa G. Santos, Marla N. Godoi, David Cantillo, C. Oliver Kappe, Marcos N. Eberlin, Rodrigo O. M. A. de Souza and Leandro S. M. Miranda: On the mechanism of the Dakin–West reaction. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Agosto, 2012. DOI: 10.1039/C2OB26560E.
- Markus Damm, Christoph Nusshold, David Cantillo, Gerald N. Rechberger, Karl Gruber, Wolfgang Sattler, C. Oliver Kappe: Can electromagnetic fields influence the structure and enzymatic digest of proteins? A critical evaluation of microwave-assisted proteomics protocols. *Journal of Proteomics*. 2012. 1874-3919. doi: 10.1016/j.jprot.2012.07.043.
- Noelia Araújo, Sarah F. Jenkinson, R. Fernando Martínez, Andreas F. G. Glawar, Mark R. Wormald, Terry D. Butters, Shinpei Nakagawa, Isao Adachi, Atsushi Kato, Akihide Yoshihara, Kazuya Akimitsu, Ken Izumori, and George W. J. Fleet. Synthesis from d-altrose of (5R,6R,7R,8S)-5,7-dihydroxy-8-hydroxymethylconidine and 2,4-dideoxy-2,4-imino-d-glucitol, azetidine analogues of swainsonine and 1,4-dideoxy-1,4-imino-d-mannitol, *Org. Lett.*, 2012, 14, 4174–4177. doi: 10.1021/ol301844n
- Cantillo, D., Ávalos, M., Babiano, R., Cintas, P., Jiménez, J. L. and Palacios, J. C. (2012): On the Prebiotic Synthesis of D-Sugars Catalyzed by L-Peptides: Assessments from First-Principles Calculations. *Chemistry: A European Journal*. 18: 8795–8799. doi: 10.1002/chem.201200466.
- David Cantillo, Hassan Sheibani, and C. Oliver Kappe. Christian Doppler Laboratory for Microwave Chemistry (CDLMC) and Institute of Chemistry, Karl-Franzens-University Graz, Heinrichstrasse 28, A-8010 Graz, Austria: Flash Flow Pyrolysis: Mimicking Flash Vacuum

Pyrolysis in a High-Temperature/High-Pressure Liquid-Phase Microreactor Environment. *The Journal of Organic Chemistry* 77 (5), pp 2463–2473. Febrero de 2012.

- 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-Hydroxyarene-carbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution. *European Journal of Organic Chemistry*. Mayo de 2011, 3137–3145.
- 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 salicylaldehydes and hydroxyl naphthaldehydes investigated in solution and the solid state. 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).

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.

EFFECTO DEL DISOLVENTE SOBRE LA DESEXCITACIÓN RADIANTE Y NO RADIANTE DE ESTADOS EXCITADOS EN MOLÉCULAS DE INTERÉS BIOLÓGICO



Investigadores

Francisco Javier Olivares del Valle, Manuel Ángel Aguilar Espinosa, José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, María Elena Martín Navarro, Ignacio Fernández Galván, Aurora Muñoz Losa y Francisco Fernández García-Prieto. 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 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 Radiative 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.

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.

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.

QUANTUM CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELING



Investigadores

Francisco J. Olivares del Valle. Grupo de investigación Quantum Chemistry And Molecular Modelling de la Universidad de Extremadura.

Objetivos

- Estudio cuántico de las interacciones moleculares, fenómenos y procesos reactivos y no reactivos en fase condensada, transitos electrónicos y espectroscopía molecular, procesos de interés biofísico y bioquímico.
- Modelización y simulación molecular.

Metodología

- Metodología y aplicaciones de la Mecánica Cuántica al estudio de procesos moleculares interactivos, sin y con absorción de radiación electromagnética.
- Química Cuántica y Química Computacional.
- Elaboración y desarrollo de códigos y programas computacionales.

Publicaciones y congresos

- Theoretical study of the role of solvent stark effect in electron transitions (Theoretical Chemistry Accounts, 128(4-6), 783-793 (2011)).
- On the absorption properties of the excited states of DMABN (Chemical Physics Letters, 499(1-3), 100-102 (2010)).
- Quantum mechanical approach to solvent effects on the optical properties of metal nanoparticles and their efficiency as excitation energy transfer acceptors (Journal of Physical Chemistry C; 114(3), 1553-1561 (2010))
- Theoretical study of the competition between intramolecular hydrogen bonds and solvation in the CYS-ASN-SER tripeptide (Journal of Physical Chemistry B, 114(27), 8961-8970 (2010)).

Financiación

Ministerio de Educación y Ciencia.
Junta de Extremadura.

NUEVAS SUSTANCIAS GELIFICANTES DERIVADAS DE MONOSACÁRIDOS E HIDRAZIDAS DERIVADAS DE DIÁCIDOS



Investigadores

Pedro Cintas Moreno y Ana María Sánchez León. Grupo de investigación "Química Orgánica" (QUOREX). Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Extremadura.

Descripción

En este proyecto de investigación se pretende sintetizar moléculas anfífilas y bolaanfífilas de distinta geometría, fundamentalmente por reacción de aldosas con moléculas que posean las funcionalidades apropiadas; en este caso, hidrazidas derivadas de diácidos.

De la estructura de las nuevas moléculas y de la naturaleza de los fragmentos que la compongan dependerán las propiedades que van a exhibir. Estas propiedades, además de la capacidad de gelificación (hidrogeles y organogeles), pueden estar relacionadas con la capacidad de generar diversos ensamblajes moleculares a través de puentes de hidrógeno (entre restos polihidroxílicos, etc.), coordinación con iones metálicos o cationes orgánicos (por ejemplo, grupos amonio), relaciones huésped-hospedador, etc., respuesta a diversos estímulos (fotoquímicos, térmicos, electroquímicos, etc.), reconocimiento molecular de moléculas pequeñas y materiales con propiedades especiales, tales como paramagnéticos (portando radicales libres estables), sensores quimioluminiscentes y restos organometálicos.

Además, los aminopolioles de cadena larga pueden ser ligandos potenciales del ARN. También, aunque no es el objeto primordial de este trabajo, muchas de las sustancias que se van a preparar podrían mostrar capacidad como organocatalizadores.

ESTUDIO TEÓRICO DE LA FOTOFÍSICA Y FOTOQUÍMICA DE COMPLEJOS CROMÓFORO-CICLODEXTRINA Y CROMÓFORO-PROTEÍNAS PYP Y GFP



Investigador principal

Manuel Ángel Aguilar Espinosa del departamento de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura.

Investigadores participantes

Francisco Javier Olivares del Valle, José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, María Elena Martín Navarro, Ignacio Fernández Galván, Aurora Muñoz Losa, Francisco Fernández García-Prieto, Rute Maria Barata Morgado y Samuel Frutos Puerto.

Objetivos alcanzados

- Se ha desarrollado un software (ASEP/MD) que permite la combinación de programas de cálculo cuántico como Gaussian o Molcas con programas de dinámica molecular como Moldy o Gromacs.
- Como elementos distintivos, el programa permite, además de aplicar el método del mismo nombre, realizar optimizaciones de geometría en coordenadas internas e incorporar simulaciones con moléculas flexibles.

Publicaciones y congresos

- Solvent and Counterion Effects on the Absorption and Emission Spectra of a Model of the Rhodopsin Chromophore. MSCRS (Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems) 2012. Nagoya (Japón)
- ESPA (Electronic Structure: Principles and Applications) 2012. Barcelona (España)
- Effects of solvent polarity on electron transitions. 7th International Meeting on Photodynamics 2012. São Sebastião (Brasil)

Financiación

Ministerio de Ciencia e Innovación
Gobierno de Extremadura

CIENCIAS DE LA TIERRA

SIMULACIÓN DEL CLIMA MEDIANTE EL MODELO WACCM



Investigador principal

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

Investigadores participantes

Guadalupe Saenz García, Francisco Javier Acero Díaz y María 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 Supercomputación) 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

- A lo largo de este año se han realizado dos simulaciones del clima, una con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y otra con el modelo CESM (Community earth system model). La primera se ha realizado para complementar una realizada el año anterior pero con un forzamiento externo de 8.5 W/m^2 en 2100. La segunda se ha realizado para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional.
- Se está trabajando también en la simulación mediante un modelo regional. Esta segunda integración se espera que será útil entre otros proyectos, al proyecto RITECA, en el que se encuentra involucrado el propio CénitS.
- Durante el pasado año, se puso a punto y se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Así mismo se puso a punto y se realizó 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 supercomputador 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 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.

THE IMPACT OF THE 11 YEAR SOLAR CYCLE IN WACCM SIMULATIONS



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 demostrado también que 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 provechoso para investigar la señal del ciclo solar, y los mecanismos físicos que dan lugar a ella.

- Estudios previos han demostrado que el modelo WACCM reproduce la señal en observaciones, y ha confirmado la presencia de mecanismos dinámicos a través 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). Hay incertidumbre instrumental en las variaciones espectrales del flujo de radiación solar entre máximos y mínimos del ciclo solar de 11 años, sobre todo en bandas como la UV-A [300-400 nm] y la UV-C [240-270 nm]. Por otro lado, también se está debatiendo la posibilidad de que la variabilidad climática a escala decadal en la baja estratosfera tropical no esté forzada por el ciclo solar, sino por otras fuentes como El-Niño y los volcanes.
- 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 de CénitS, y a colaboración con científicos de EEUU que han desarrollado 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 mínimo 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.
- Se ha encontrado que la circulación estratosférica en altas latitudes es sensible a la amplitud del ciclo solar en la UV, y que simulaciones con un aumento idealizado en las bandas de la UV-A y UV-C dan respuestas distintas en el vórtice polar. La sensibilidad se debe a que la altura de máxima absorción de la UV varía según la longitud de onda, y que anomalías térmicas en diferentes alturas estratosféricas afectan a su vez de diferente manera a la propagación de las ondas planetarias. Por otro lado, simulaciones de WACCM con inclusión de todos los forzamientos observados (gases a efecto invernadero, volcanes, ciclo solar) demuestran que parte de la variabilidad decadal que se observa en la baja estratosfera tropical y que hasta ahora se creía estar relacionada con el ciclo solar de 11 años se debe en realidad a dos erupciones volcánicas (El Chichón en 1982 y Pinatubo en 1991). Estas erupciones han tenido lugar durante picos de actividad solar, lo cual dificulta la separación de los efectos del ciclo solar y de los volcanes.

Publicaciones y congresos

- Chiodo G., D.Marsh, N.Calvo, and K.Matthes: The impact of volcanic events and ENSO on the detection of the solar cycle signal in the tropical lower stratosphere. European Geophysical Assembly 2012. Viena (Austria)
- Chiodo G., K. Matthes, K. Kodera, N. Calvo and R. Garcia-Herrera: Sensitivity of the atmospheric response to idealized UV solar-cycle variations in WACCM. 3rd international conference on Earth-System-Modeling. Hamburgo, Alemania.
- G. Chiodo, N.Calvo, D.Marsh and R.Garcia-Herrera (2012): The 11 year solar cycle signal in transient simulations from the Whole Atmosphere Community Climate Model. Journal of Geophysical Research, Volumen 117, D06109, Numero: doi:10.1029/2011JD016393.
- G.Chiodo, D.Marsh, N.Calvo and K.Matthes. The impact of volcanic events and ENSO on the detection of the solar cycle signal in the tropical lower stratosphere. European Geosciences Union General Assembly 2012. Abril de 2012.
- 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.
COST action ES1005 "Towards a more complete assessment of the impact of solar variability on the Earth's climate".

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.

CÁLCULOS AB-INITIO



Investigadores

Javier Sánchez Montero y 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 localized 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 Kohm-Sham se desarrollarán en una base de ondas planas.

EVALUACIÓN DE LOS RECURSOS EÓLICOS Y SOLARES EN ANDALUCÍA MEDIANTE UN MODELO METEOROLÓGICO DE MESOSCALA (RENUOVA)



Investigadores

Antonio David Pozo Vázquez, Prof. Titular de la Universidad de Jaén y 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 exenta de 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.

Objetivos

- 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

ABAQUS



Investigadores

Pedro Miranda González. Departamento de Ingeniería Mecánica, 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, variando 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)

APLICACIÓN DE LA SUPERCOMPUTACIÓN EN EL ÁMBITO DE LOS PROCESOS ENERGÉTICOS Y LAS ENERGÍAS RENOVABLES MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS



Investigadores

Eduardo Sabio Rey. Universidad de Extremadura.

Descripción

El Grupo de Investigación "Aprovechamiento Integral de Residuos Biomásicos. Energías Renovables" (GAIRBER) se creó en 2005. Centra su investigación en el aprovechamiento integral de residuos biomásicos y la aplicabilidad a la producción de energía, así como a la producción de materiales de alto valor añadido como los carbones activados.

Objetivos

- Análisis y optimización de los procesos térmicos aplicados a la biomasa. En este primer objetivo se analizarán los fenómenos de transferencia de energía, momento y materia en los procesos termoquímicos a los que se somete la biomasa (combustión, gasificación, etc.), prestando especial atención a la reducción de la exergía perdida. Esto permitirá aumentar el rendimiento energético de los procesos.
- Desarrollo de modelos de predicción del comportamiento de carbones activados. A partir de la biomasa se pueden obtener carbones activados, que son materiales de alto valor añadido. El conocimiento de su comportamiento permitirá la producción de carbones diseñados para funciones específicas.

Metodología

Se utilizará el Método de los Elementos Finitos para resolver los complejos sistemas de ecuaciones diferenciales que se plantean en los objetivos anteriores. En concreto, se utilizará el programa COMSOL Multiphysics que permite el análisis simultáneo de principales procesos físicos y químicos que tienen lugar en la naturaleza. Esto permitirá conocer la distribución de los valores de las variables estudiadas (temperatura, presión, velocidad, entalpía, entropía, exergía, etc.) dentro del dominio analizado.

La comparación de los datos experimentales y teóricos permitirá crear modelos válidos para mejorar los procesos termoquímicos aplicados a la biomasa y la producción de carbones ad hoc para aplicaciones concretas. La realización de modelos tridimensionales requiere una enorme capacidad computacional, por lo que el supercomputador Lusitania desempeñará un papel fundamental.

Publicaciones y congresos

- F. Zamora. "Utilización del método de elementos finitos para la evaluación y diseño de filtros de carbón activado". Tesis Doctoral. Badajoz 2011

DISTRIBUCIÓN DE NIVELES ELECTROMAGNÉTICOS EN DETERMINADOS ENTORNOS GEOGRÁFICOS



Investigadores

Jesús Manuel Paniagua Sánchez. Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Extremadura.

Objetivos

- Se plantea el objetivo de cálculo de la propagación electromagnética en entornos reales en cierta banda de frecuencias, analizando la afección de diferentes obstáculos y accidentes geográficos en los niveles de campo detectados a distintas distancias de los transmisores.
- Asimismo, las iniciales simulaciones en 2D servirán para ajustar parámetros de la aplicación que permitan su extrapolación a posibles ejecuciones de entornos reales de grandes dimensiones en 3D.

Metodología

Se implementan algoritmos basados en FDTD (Finite-difference time-domain) para el cálculo de niveles de campo electromagnético en determinadas bandas de frecuencias y la obtención de resultados fiables de cara a computar la afección de radiaciones en el cuerpo humano.

Su aplicabilidad es clara en el cálculo de valores de campo en entornos no ideales con grandes oscilaciones de niveles y donde las aproximaciones de algoritmos basados en óptica geométrica y aproximaciones numéricas no proporcionan información completa ni fidedigna en determinadas circunstancias.

La posibilidad de sistematizar estos algoritmos para su extrapolación en la aplicabilidad a entornos de grandes dimensiones, en conjunción con información derivada de Sistemas de Información Geográficos (SIG), hace que sea prometedor el uso de supercomputadores en esta materia. Por tanto, este tipo de simulaciones teóricas, que cada vez más incorporan un modelado del entorno más detallado, permiten la obtención de resultados precisos, sirviendo como base de cara a planificaciones radio o estudios de puntos o áreas críticas de especial interés.

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.

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.

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 diferentes 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.

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)

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 de 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. Bertolo, 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.

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

ELECTROMAGNETISMO Y SUPERCOMPUTACIÓN PARA NANOESTRUCTURAS PLASMÓNICAS. APLICACIÓN A NANOANTENAS ÓPTICAS Y METAMATERIALES



Investigador principal

Luis Landesa Porras, José Manuel Taboada Varela, Francisco Javier Rivero Campos, Luis Bote Curiel y Mario Fernández Manzano. Departamento de 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.

Objetivos

- 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.

Objetivos alcanzados

- Se ha extendido el método de los momentos basado en formulación integral superficial al análisis exacto de todo tipo de objetos penetrables arbitrarios en el contexto de las aplicaciones en nanociencia y nanotecnología.
- Se han aplicado los últimos avances en aceleración espectral a la resolución rápida, precisa y eficiente (bajo coste computacional) de este tipo de problemas.
- Utilizando las herramientas de simulación anteriores y las capacidades de cálculo del supercomputador LUSITANIA, del CénitS, se está acometiendo con gran éxito el diseño de distintas aplicaciones con gran impacto científico/tecnológico en el ámbito de la nanociencia y la nanotecnología:
 - Diseño de nanoantennas plasmónicas directivas a frecuencias ópticas.
 - Diseño de nanoenlaces directivos para comunicaciones intra/intercircuitales de gran interés para los futuros circuitos integrados ópticos en escalas nanométricas.
 - Diseño de capas de invisibilidad para la ocultación de estructuras arbitrarias compuestas por materiales arbitrarios (PECs, dieléctricos, plasmónicos, metamateriales).
 - Diseño de pócimas de invisibilidad para la ocultación de estructuras penetrables arbitrarias (dieléctricos, plasmónicos, metamateriales).
- Todos los avances anteriores están en la frontera de la investigación en electromagnetismo computacional y presentan un gran interés en el contexto de las actuales y futuras aplicaciones nanotecnológicas. Estos avances se están plasmando en diferentes publicaciones en revistas con gran impacto del SCI y congresos nacionales e internacionales. Gran parte de estas contribuciones son por invitación. A continuación se enumeran las contribuciones a revistas y congresos con agradecimiento al CénitS.

Publicaciones y congresos

- J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Surface Integral Equation Solvers for Large-Scale Conductors, Metamaterials and Plasmonic Nanostructures," Appl. Comput. Electrom. (ACES) Journal, vol. 27, no. 2, pp. 189-197, 2012. Paper invitado.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, L. Landesa, "MLFMA-FFT parallel algorithm for the solution of extremely large problems in electromagnetics," to appear in Proceedings of the IEEE, Special issue on Large Scale Electromagnetic Computation for Modeling and Applications, Jan. 2013. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2194269. Paper invitado.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Supercomputing solution of large electromagnetic problems with parallel MLFMA-FFT," 28th International Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics (2012 ACES Conference), Columbus, Ohio (USA), 10-14 de abril de 2012. Ponencia invitada.

- J. M. Taboada, J. Rivero, L. Landesa, M. G. Araújo, and F. Obelleiro, "Optimization of invisibility cloaks by surface integral equation method", International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012. Ponencia invitada.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Fast Surface Integral Equation Formulations for Large-Scale Conductors, Metamaterials, and Plasmonic Problems", International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012. Ponencia invitada.
- J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, "Optimization of invisibility cloaks by surface integral equation method", XXVII Simposium Nacional de la Unión Científica Internacional de Radio (URSI 2012), Elche (Alicante), 12-14 de septiembre de 2012.
- J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, "Design of Invisibility Cloaks using Surface Integral Equation Method", Sixth International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials 2012), St. Petersburg, Russia, 17-22 September 2012.
- J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, F. Obelleiro, "Optimized design of multilayer invisibility cloaks for arbitrary geometries, " 7th European Conference on Antennas and Propagation – EUCAP 2012, Gonthenburg, 8-12 april 2013.
- J. M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, J. Rivero, D. M. Solís, L. Bote, F. Obelleiro, and J. L. Rodríguez, "Fast Surface Integral Equation Methods for Electromagnetic solution of Large-Scale Conductors, Metamaterials and Optical Nano-antennas," VI LEMA-EPFL Workshop on Integral Techniques for Electromagnetics (INTELECT'2012), Sevilla, 19 octubre 2012. Ponencia invitada.

Financiación

Gobierno de España y Fondos Europeos de desarrollo regional (FEDER), proyectos TEC2011-28784-C02-01, TEC2011-28784-C02-02, CONSOLIDER INGENIO 2010 CSD2008-00068. Gobierno de Extremadura, ayuda a grupos de investigación GR10126.

SIATDECO**SISTEMA DE INFORMACIÓN PARA LA AYUDA A LA TOMA DE DECISIONES EN ENERGÍAS ECOLÓGICAS****Centros de investigación**

ICMC, CETIEX, FUNDECYT y CénitS (coordinador del proyecto).

Descripción

Quizás las fuentes de energía ecológicas más representativas son la hidráulica, la solar, la eólica y la biomasa. Todas ellas están ofreciendo muy buenos resultados en cuanto a su productividad y, aunque algunas encuentran una cierta contestación popular en relación a su impacto medioambiental y estético, representan, sin lugar a dudas, la mejor alternativa a las energías tradicionales.

Las energías ecológicas tienen en común una característica fundamental que es su dependencia directa de las condiciones climáticas. Por ello es importante analizar con mucho detalle los puntos de ubicación de las plantas productoras de cada una de estas energías. Sin embargo, nos enfrentamos en los últimos años a otra realidad que es el denominado cambio climático que parece que es reconocido como el causante de las variaciones que se producen en las previsiones climáticas que estamos experimentando.

Se obtendrán una serie de modelos climáticos y su correlación con las energías renovables que serán procesados en el supercomputador LUSITANIA. Esto permitirá disponer de un sistema de información para la toma de decisiones donde se consideren las predicciones a corto, medio y largo plazo, no sólo para analizar y predecir productividades, sino para poder detectar carencias, necesidades y otros factores que puedan ser útiles para la planificación de inversiones, de infraestructuras y de actividades logísticas.

La implementación del proyecto será de interés y utilidad para el sector productivo y también para los responsables de la toma de decisiones de administraciones públicas que necesitan un buen número de indicadores que SIATDECO les puede aportar.

Objetivos

- Realizar simulaciones de diversos modelos climáticos a 2, 5, 10, 20 y 30 años vista, y estudiar las correlaciones existentes entre los diversos factores climáticos (sol, viento y lluvias, principalmente) y la productividad energética ecológica en la Euroregión EUROACE, correlacionando variables que permitan la toma de decisiones en diversos ámbitos.
 - Inventariar las plantas y fuentes de energía ecológica existentes en la actualidad en la Euroregión EUROACE.
 - Definir y detectar las variables a analizar en el modelo climático.
 - Obtención de un modelo climático piloto en la zona transfronteriza de La Raya. Se recurrirá a datos climáticos de carácter histórico y se captarán nuevos datos durante el ciclo de vida del proyecto, en diferentes estaciones meteorológicas de la zona (principalmente de La Raya) donde se propone aplicar el proyecto.

- Captación de datos climatológicos en la zona de la Raya durante el ciclo de vida del proyecto y contrastarlos con datos históricos de clima y de calas de corcho para poder correlacionar variables que puedan resultar de interés para la toma de decisiones en función de las previsiones proporcionadas por el modelo climático.
- Implementar un SIATD (Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones) para ser usado en el contexto de las energías ecológicas.

Metodología

En primer lugar, se recaba toda la información relativa a los distintos tipos de energía y aspectos a tener en cuenta a la hora de determinar la ubicación de la instalación de una planta de energías renovables. Una vez que el sistema disponga de toda la información, se procede a realizar una evaluación en etapas mediante la superposición de mapas sobre un Sistema de Información Geográfica. Cada uno de estos mapas representa la información relativa a un dato: clima, altitud, pendiente, recursos hídricos, núcleos de población, etc.

Tras valorar toda esta información, SIATDECO proporciona la información resultante sobre la idoneidad de la zona de estudio. Si la zona elegida no fuera viable, SIATDECO aporta alternativas, incluyendo la solución óptima.

Objetivos alcanzados

- Inventario de plantas y fuentes de energía ecológica existentes en la actualidad en la Eurorregión EUROACE. El objeto del inventario es localizar geográficamente y caracterizar las plantas generadoras de energía eléctrica, conectadas ya a la red o en construcción, existentes en la regiones Centro y Alentejo en Portugal, y en la región de Extremadura en España. El inventario servirá de apoyo al sistema de ayuda a la toma de decisiones para determinar el potencial de generación eléctrica de plantas productoras de energía renovable en función de su ubicación. Según el trabajo realizado, las 242 plantas de este tipo que funcionan en Extremadura disponen de una potencia total instalada de 3.110,8 megavatios.
- Definición de las variables a analizar en el modelo climático. Entre las variables analizadas se encuentran la temperatura media mensual, la precipitación media mensual, la velocidad media del viento, etc. Se ha elaborado un informe donde se recogen todas estas variables. Recopilación de datos climáticos históricos de las estaciones meteorológicas de la AEMET de Extremadura y de datos de calas de corcho para proceder a su correlación.

Financiación

El proyecto está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.

PROYECTOS DE INNOVACIÓN

PROYECTOS DE INNOVACIÓN

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

ULTRASECUENCIACIÓN GENÉTICA MEDIANTE TÉCNICAS DE SUPERCOMPUTACIÓN

Descripción

Este proyecto, asistencial y de investigación, está siendo desarrollado por la Unidad Genética del Centro Hospitalario Universitario de Badajoz en el Hospital Infanta Cristina (Servicio Extremeño de Salud) en colaboración con investigadores de la Fundación COMPUTAEX.

Las nuevas técnicas de secuenciación masiva de ADN que se están imponiendo como tendencia en el ámbito de la bioinformática permiten secuenciar el genoma de un ser humano, cada vez a mayor velocidad, gracias a supercomputadores como LUSITANIA, que además de procesar esta cantidad ingente de datos, permiten simular rasgos complejos de genes y estudiar la información contenida en el ADN, estructuras subatómicas y estructura tridimensional y aminoácido de las proteínas.

Objetivos

- 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.

Objetivos alcanzados

- Se ha dispuesto de la infraestructura necesaria mediante un modelo de Cloud Computing para llevar a cabo las diferentes tareas de procesamiento de la información relacionadas con el flujo de trabajo para la secuenciación completa del genoma de cualquier paciente.
- Se ha colaborado de forma directa en el procesamiento de diversas muestras de ADN como ejemplos del modelo de procesamiento que estos sistemas ejecutan, a modo de entrenamiento y preparación técnica del personal de la Fundación COMPUTAEX.
- Se ha completado la secuencia del genoma de dos pacientes anónimos de forma autónoma e independiente por primera vez en Extremadura, obteniéndose unos valores comparativos del 99,99% de similitud con respecto a los resultados obtenidos por el centro encargado de realizar esta tarea de forma final.

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.

Objetivos

- 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.

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 redundante 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.

Publicaciones y congresos

- David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, Cesar Gómez-Martín, Javier Corral-García. Network Simulations with Supercomputing using NS-2. Proceedings of the 2nd Workshop - Future Internet: Efficiency in High-Speed Networks, W-FIERRO 2012. Cartagena, España. 19-20 julio 2012. ISBN: 978-84-96997-90-5. pp 19-25.

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.

PROYECTO SEDE

Descripción

La vigilancia estratégica en las empresas es una herramienta de gestión que proporciona, mediante el análisis temprano de la información, la capacidad de toma decisiones en un ecosistema empresarial global, teniendo en cuenta sus posibles futuros cambios de escenario.

El uso de la supercomputación para la aplicación en la Vigilancia Estratégica, la Inteligencia Competitiva y la Inteligencia de Negocio, añade las opciones de predictibilidad y permite la anticipación en escenarios de variables muy numerosas y complejas, aportando ventajas competitivas de gran valor empresarial.

CénitS pone a disposición del proyecto SEDE sus recursos para desarrollar un sistema informático automatizado y autoconfigurable, basado en la aplicación de redes neuronales y lógica difusa, capaz de medir y representar gráficamente la evolución de los escenarios empresariales en los diversos entornos estratégicos.

La herramienta es desarrollada por la empresa SET Informática, Comunicación e Ingeniería ubicada en Extremadura e INFOCENTER.

Objetivos

- Dar respuesta a las necesidades de Vigilancia Estratégica de las empresas, aportando un sistema que proporciona ventaja competitiva, calidad de la información y usabilidad.

ENGAGE

BANDA ANCHA DE ALTA VELOCIDAD EN ZONAS RURALES

Descripción

La Estrategia Europa 2020 resaltó el objetivo de llevar banda ancha básica a todos los europeos para el año 2013 y pretende garantizar que, en 2020, todos los europeos tengan acceso a Internet a mucha mayor velocidad, por encima de 30 Mbps y que el 50% o más de los hogares europeos tenga una suscripción a conexiones de Internet por encima de 100 Mbps. Construir una red de banda ancha de alta velocidad, optimizando costes en las zonas rurales es sin duda una actividad compleja:

- Las tecnologías evolucionan muy rápidamente y regiones de toda Europa a menudo carecen de conocimientos técnicos para comprender estas evoluciones y tomar las decisiones oportunas.
- Las inversiones que se deben realizar son realmente importantes y muchos de los Estados Miembros y sus Regiones se enfrentan ahora mismo al problema de despliegues de la infraestructura digital de alta velocidad para los próximos 50 años.

Algunas soluciones para financiar estas inversiones pueden encontrarse precisamente en las zonas urbanas a través de los operadores del mercado. Es más difícil en las zonas rurales, donde la baja densidad de población disminuye las tasas de rentabilidad de estas inversiones. La situación es aún más compleja en el contexto actual de crisis económica con presupuestos de inversión pública muchos más bajos. Ahora más que nunca, debe existir una mayor cooperación entre las regiones para compartir conocimientos, ideas, innovación y creatividad.

El proyecto Engage es un Interreg IVC en el que participan 12 socios de 10 países de la Europa de los 27, entre ellos Francia, Alemania, Irlanda, Reino Unido, Rumanía, Eslovenia, Finlandia, Polonia, España y Portugal.

Objetivos

- Ayudar a las regiones rurales en toda Europa a comprender mejor y abordar la cuestión de "cómo construir una red de banda ancha de alta velocidad (HSB) a coste eficiente en las zonas rurales" con el fin de asegurar que se cumplen los requisitos para el mantenimiento o incluso fortalecimiento de las poblaciones locales y las actividades económicas.
- Compartir conocimientos y desarrollar políticas públicas de carácter regional/local más activas para infraestructuras HSB y servicios añadidos y promover la auténtica cooperación interregional.
- Adaptar y optimizar las políticas públicas locales a corto y medio plazo con las soluciones técnicas y económicas pertinentes en términos de HSB.
- Involucrar a todo aquel que participe en la toma de decisiones, así como a promotores de proyectos potenciales en la definición de un plan de implementación considerando como un plan consensuado y un mapa de ruta realista para los próximos 2 a 5 años.

- Difundir ampliamente los resultados en el territorio de cada socio y a la comunidad de potenciales usuarios de los resultados, ofreciendo particularmente una red sostenible de expertos en HSB.

Metodología

Identificación inicial de buenas prácticas. Mejorar el conocimiento de las buenas prácticas a través de talleres temáticos interregionales, visitas de estudio e intercambios de personal. Compromiso de los responsables políticos regionales para aplicar las recomendaciones del proyecto. Difusión de los resultados a través de una red sostenible de expertos en HSB.

COLABORACIÓN PROYECTO SysGobEx

Antecedentes

En este año 2012 el Gobierno Extremeño, a través de la Consejería de Administración Pública, y más concretamente de su Dirección General de Administración Electrónica y Tecnologías de la Información, ha puesto en marcha el Plan RETO (Plan de Reorganización del Entorno Tecnológico Operativo) con el objetivo de optimizar los recursos técnicos de que dispone. La eficacia y eficiencia en el uso de esos recursos es una de las mayores preocupaciones del Plan RETO que, con la premisa de la sostenibilidad económica y de la optimización de costes, se ha marcado un Plan estratégico de sistemas a ocho años vista.

El plan RETO se ha planteado también con la idea de unificar en una única autoridad toda la política tecnológica de la administración regional, por lo que se ha estructurado en un conjunto de diez proyectos corporativos que incumben transversalmente a todos los Organismos y Departamentos del Gobierno de Extremadura (GobEx). Es objetivo del plan cambiar y orientar el modelo tecnológico que existía antes de RETO.

En el contexto del Plan RETO el Gobierno de Extremadura solicitó la colaboración de las tres fundaciones regionales con competencias en materias de tecnologías de la información; más concretamente la colaboración de Fundecyt (La Fundación para el Desarrollo de la Ciencia y la Tecnología en Extremadura), Cenatic (Centro Nacional de Referencia de Aplicación de las TIC basadas en fuentes abiertas) y COMPUTAEX (La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura). De este modo el Gobierno de Extremadura podría contar con los recursos humanos y tecnológicos de dichas fundaciones con el fin de garantizar el éxito del Plan RETO.

COMPUTAEX a través de su centro CénitS colaboró en el proyecto realizando el Plan Estratégico de Sistemas de Información y, en ese sentido, como resultado de una intensa tarea, se presentó un documento que resumía las actividades llevadas a cabo bajo el título de *Plan Estratégico de Sistemas de Información y de Consolidación de Tecnologías Informáticas y de las Comunicaciones para la Junta de Extremadura*.

Aunque el informe elaborado pudiera concernir a varios de los proyectos del Plan RETO anteriormente expuestos, posee una relación más estrecha y directa con el proyecto CloudGobEx y en especial con el proyecto SysGobEx. El trabajo realizado supone un análisis de la situación actual de los sistemas informáticos y de los sistemas de información de la administración regional donde se relacionan los aspectos que serán más importantes en el ámbito de la administración electrónica en los próximos años.

El trabajo fue encargado con una temporalidad de doce semanas, periodo en el que debía realizarse el inventario de hardware de los Centros de Proceso de Datos que se indicaran como prioritarios para acometer el Plan. Además del inventario hardware era necesario conocer todos los aspectos relacionados con el software, como sistemas de información, licencias, sistemas operativos, sistemas gestores de bases de datos, etc. Para tener el adecuado conocimiento de la situación actual era necesario conocer la opinión de los usuarios y responsables de cada uno de

los CPDs, por lo que se elaboraron sendos cuestionarios para la recogida de datos de utilidad en la elaboración del Plan Estratégico de Sistemas. Para acometer estas tareas se dispuso de la colaboración de los responsables técnicos y usuarios de los servicios de la Junta, sin cuya participación hubiera sido muy difícil alcanzar los resultados esperados.

Colaboración

Tras llegar a un consenso con la Dirección General de Administración Electrónica y Tecnologías de la Información se acordó inventariar el hardware y las aplicaciones que se ejecutan en los siguientes CPDs pertenecientes al Gobierno de Extremadura:

- CPD de la Calle de la Morería (común para algunas Consejerías).
- CPD de la Consejería de Agricultura, Desarrollo Rural, Medio Ambiente y Energía.
- CPD de la Consejería de Salud y Política Social.
- CPD de la Consejería de Fomento, Vivienda, Ordenación del Territorio y Turismo.

Para ello un grupo de hasta 5 técnicos de CénitS se desplazó a Mérida y apoyó a los técnicos del Gobierno de Extremadura en el inventariado del hardware. El trabajo realizado puede resumirse en la siguiente tabla:

BASTIDORES	SERVIDORES FÍSICOS	SISTEMAS ALMACENAMIENTO	SISTEMAS DE RED
86	733	152	245

Más concretamente, el número de bastidores por CPD inventariado:

AGRICULTURA	FOMENTO	MORERÍAS	SANIDAD
11	13	52	9

A continuación los técnicos de CénitS colaboraron activamente en la consolidación y compleción de los datos obtenidos en la anterior fase (especificaciones técnicas de los modelos de servidores inventariados). Completando la información con el consumo de los servidores, el microprocesador (o microprocesadores) del que disponen, el número de cores por procesador, la memoria RAM y de disco instalada, etc. También se completaron los datos de especificaciones técnicas de los elementos de red y de los elementos de almacenamiento presentes en los CPDs anteriores. Analizando la tabla anterior y teniendo en cuenta el número de servidores, elementos de almacenamiento y elementos de red envueltos en el proyecto es posible hacerse una idea del esfuerzo que fue necesario para realizar dicha tarea.

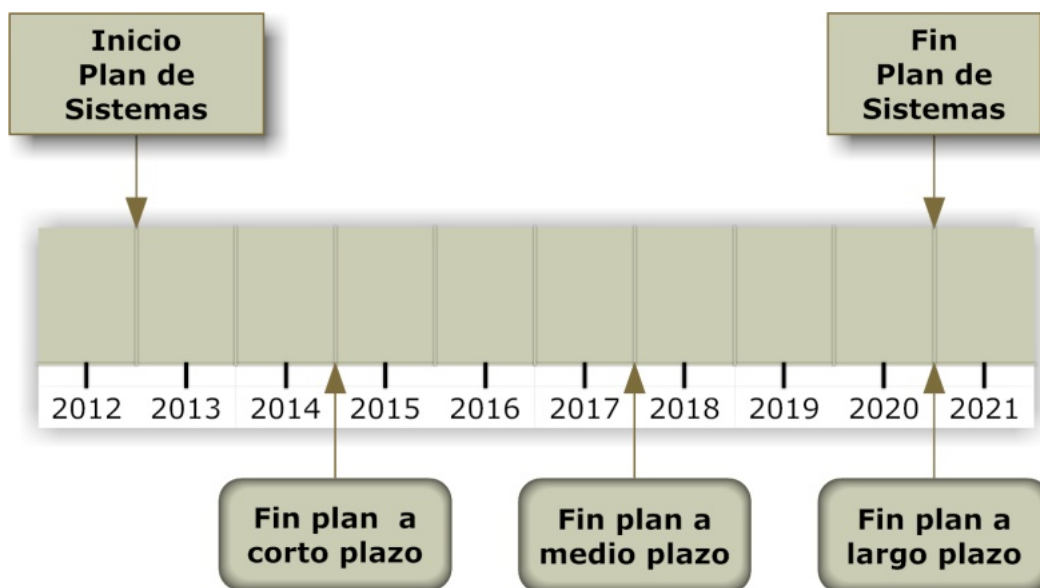
El siguiente paso en el proyecto consistía en la realización de un inventariado de aplicaciones y licencias de software. Para ello se colaboró estrechamente con los empleados de la administración, quienes proporcionaron toda la información de la que disponían al respecto. La misión en este caso era consolidar dicha información y buscar un formato común para posteriormente analizar la información de forma conjunta y encontrar posibles soluciones o mejoras. Esta consolidación permitió realizar clasificaciones de las aplicaciones disponibles como pueden ser el tipo de aplicación (web, Access, Clipper, etc) o su criticidad. Estas clasificaciones servirían como referencia de la disponibilidad necesaria y de las formas de acceso que deberían soportar los nuevos sistemas de información a diseñar.

Una vez realizados el inventariado del hardware y de las aplicaciones se procedió a realizar una valoración de los mismos desde el punto de vista de los técnicos de CénitS. Para ello se elaboró un análisis por CPD para valorar su situación individual y posteriormente se realizó un análisis global estableciendo un diagnóstico de la situación. Basándose en dicho diagnóstico se realizó un nuevo análisis haciendo hincapié en las carencias detectadas y en las potenciales mejoras.

Con el análisis ya finalizado, CénitS continuó su colaboración aportando su visión particular sobre los modelos tecnológicos y tendencias más actuales en el mundo de las TIC, exponiendo las ventajas y desventajas asociadas a su aplicación. Caben destacar entre ellos:

- Paradigma Cloud Computing. Con sus tres vertientes (IaaS, PaaS y SaaS).
- ITIL. Como referencia organizativa.
- Outsourcing de elementos y personal de TI.
- Agencia única transversal.

Finalmente, CénitS participó en el diseño del nuevo modelo para los sistemas de información teniendo siempre en cuenta el Esquema Nacional de Seguridad (ENS) y la seguridad en entornos de cloud computing. Además, colaboró activamente en la elaboración del calendario de actuación asociado al despliegue del plan de sistemas de información diseñado. Dicho calendario se dividió en tres fases diferenciadas y se establecieron acciones y resultados esperados para cada una de dichas fases. El calendario en cuestión puede observarse en la siguiente figura:



Como punto final del trabajo se realizó una memoria de todas las actividades llevadas a cabo durante el presente proyecto y se recogió en un documento. El documento en cuestión se denominó *Plan Estratégico de Sistemas de Información y de Consolidación de Tecnologías Informáticas y de las Comunicaciones para la Junta de Extremadura*. Fue entregado al Gobierno de Extremadura con el fin de que sirviera de apoyo para la consecución del plan de sistemas de información contemplado en el proyecto SysGobEx dentro del marco del plan RETO.

ANÁLISIS CLÍNICO, INMUNOLÓGICO Y GENÉTICO DEL DÉFICIT SELECTIVO DE IgA. ESTUDIO LONGITUDINAL DE LOS PACIENTES ACUMULADOS EN UN CENTRO DE REFERENCIA DURANTE LOS ÚLTIMOS 18 AÑOS

Centros de investigación

Fundesalud, Hospital San Pedro de Alcántara, Universidad de Extremadura y CénitS

Descripción

El déficit selectivo de IgA es la inmunodeficiencia primaria más frecuente en nuestro medio. Su etiopatogenia es muy compleja y poco comprendida. Aunque presenta agregación familiar y un modelo de herencia mendeliano, sus causas genéticas todavía no se han encontrado. Hasta la fecha no se han utilizado plataformas de secuenciación masiva que analicen el exoma completo o arrays de CGH de alta resolución (de 1 millón de sondas) para el estudio de las variantes en el número de copias genéticas. Nuestra hipótesis es que estos análisis pueden desentrañar las alteraciones genéticas implicadas en la enfermedad.

A nivel clínico presenta múltiples complicaciones autoinmunes y alérgicas y paradójicamente muy pocas infecciosas. Aunque hay múltiples publicaciones sobre ellas, muy pocas las abordan de un modo integral describiendo su prevalencia en una serie amplia. No hay ninguna en nuestro país y con un periodo de seguimiento de hasta 18 años. En concreto no se ha estudiado si las complicaciones infecciosas de vía aérea se deben a la co-morbilidad alérgica, como pensamos. Tampoco está estudiada la prevalencia de la infección por *Helicobacter Pylori* que por nuestras observaciones consideramos debe ser alta. Así mismo el estudio sobre factores genéticos puede aportar detalles sobre si aquellos enfermos que presentan enfermedades autoinmunes comparten alteraciones genéticas específicas.

En cuanto a su evolución en la actualidad no disponemos de herramientas para saber qué niños presentan un déficit transitorio o qué adultos pueden evolucionar a CVID. Creemos que en el primer caso la ausencia de hipergammaglobulinemia puede ser clave y en el segundo el estudio de las poblaciones B memoria podrían resultar predictivas. Ninguno de estos estudios se ha realizado hasta la fecha.

Por último, para evitar futuras reacciones anafilácticas postransfusionales sería muy útil establecer un registro de afectos asintomáticos dispuestos a donar sangre. Constituiría un “banco de sangre virtual” que facilitaría el manejo del paciente en caso de necesidad de productos sanguíneos.

Objetivos

- Estudio de Exoma completo en 3 pacientes seleccionados:
 - sIgAD esporádico.
 - Asociado a autoinmunidad.
 - Con asociación familiar.

- Valoración de las Variantes en el nº de copias génicas (CNVs) en los tres grupos de pacientes anteriores.
- Estudio integral de la prevalencia de enfermedades autoinmunes, alérgicas e infecciosas de toda la serie.
- Valoración de la infección por *Helicobacter Pylori* de los pacientes adultos mediante test de la ureasa.
- Estudio de los niveles de Inmunoglobulinas, subclases de IgG, autoanticuerpos y poblaciones B memoria como marcadores predictivos de evolución.
- Constituir un registro de pacientes asintomáticos dispuestos a donar sangre en caso de necesidad (Banco de Sangre "virtual").
- Creación de una genoteca y seroteca de pacientes.

PROYECTOS CONCLUIDOS

PROYECTOS CONCLUIDOS

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

Son proyectos pertenecientes a Universidades, Centros de Investigación, Centros Tecnológicos y empresas que se sirven de los recursos de LUSITANIA como herramienta para demostrar sus hipótesis, desarrollar sus tesis, realizar simulaciones, extrapolar resultados y diseñar sus innovaciones.

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.

Objetivos

- 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 plasmas 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 analizados 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 M^a Gómez Ros CIEMAT.

Objetivos

- 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.

ELECTROMAGNETIC SCATTERING FROM CANONICAL AND COMPLICATED OBJECTS

Investigadores

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

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.

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.

Objetivos

- 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.

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.

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, y los casos de éxito, distinciones y reconocimientos obtenidos en 2012 por la Fundación COMPUTAEX. También se han incluido las memorias de postgrado y estudios avanzados realizados por los trabajadores de CénitS.

PUBLICACIONES Y PONENCIAS EN CONGRESOS Y JORNADAS

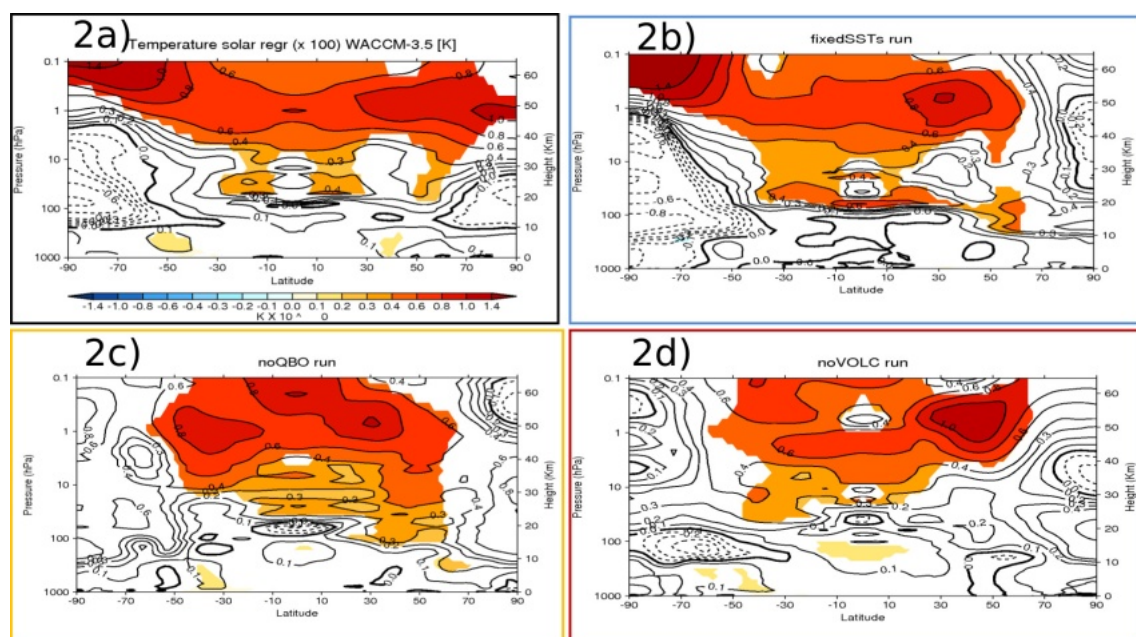
THE IMPACT OF VOLCANIC EVENTS AND ENSO ON THE DETECTION OF THE SOLAR CYCLE SIGNAL IN THE TROPICAL LOWER STRATOSPHERE

G.Chiodo, D.Marsh, N.Calvo and K.Matthes.

European Geosciences Union General Assembly 2012. Abril de 2012.

Previous studies using a multiple linear regression model to fit both observations and reanalysis data pointed to a significant 11 year solar cycle response in the tropical stratosphere. Temperature and ozone increase during solar maximum, with the largest relative response near 20 and 45 km altitude. However, continuous satellite data has only been available since 1978, which means that the analysis period covers at most three solar cycles. This hinders a clean separation of a solar signal from other natural sources of variability. In particular, in the tropical lower stratosphere part of the decadal variability in this region is due to ENSO and major volcanic events (e.g., El Chichon in 1982 and Pinatubo in 1991 occurred during the peak of solar activity).

We investigate the relative contribution of volcanic eruptions and ENSO in the quasi-decadal signal commonly attributed to the 11 year solar cycle. For this purpose, we present results from transient simulations with the Whole Atmosphere Community Climate Model, which were carried out with observed forcings, including the 11 year solar cycle in irradiance. In one simulation, we exclude the ENSO variability by prescribing climatologically varying sea surface temperatures. In the second simulation, we exclude volcanic aerosol forcing. We compare the solar signal in both simulations, with a focus on the tropical lower stratosphere, to the signal in simulations run with all natural and anthropogenic forcings. Differences in the derived solar response quantify the impact ENSO and volcanic events have in correctly attributing decadal changes to the solar cycle in the relatively short observational record.

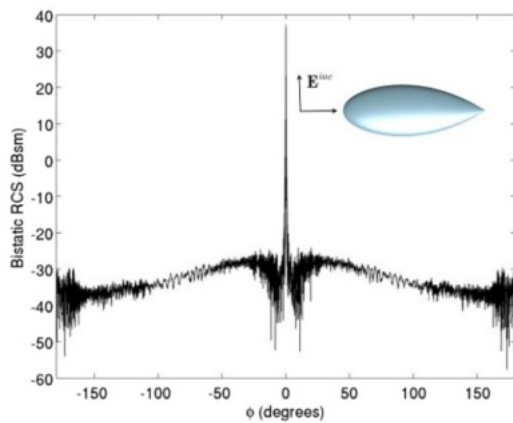


SUPERCOMPUTING SOLUTION OF LARGE ELECTROMAGNETIC PROBLEMS WITH PARALLEL MLFMA-FFT

José M. Taboada, M. G. Araújo, L. Landesa, and F. Obelleiro.

28th International Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics. Abril. 2012. Columbus, Ohio.

An efficient MPI/OpenMP parallel implementation of the MLFMA-FFT algorithm is presented for the solution of large-scale conducting bodies. By combining the high scalability of the FMM-FFT with the high efficiency of the MLFMA, challenging problems up to one billion unknowns were solved using parallel supercomputers.



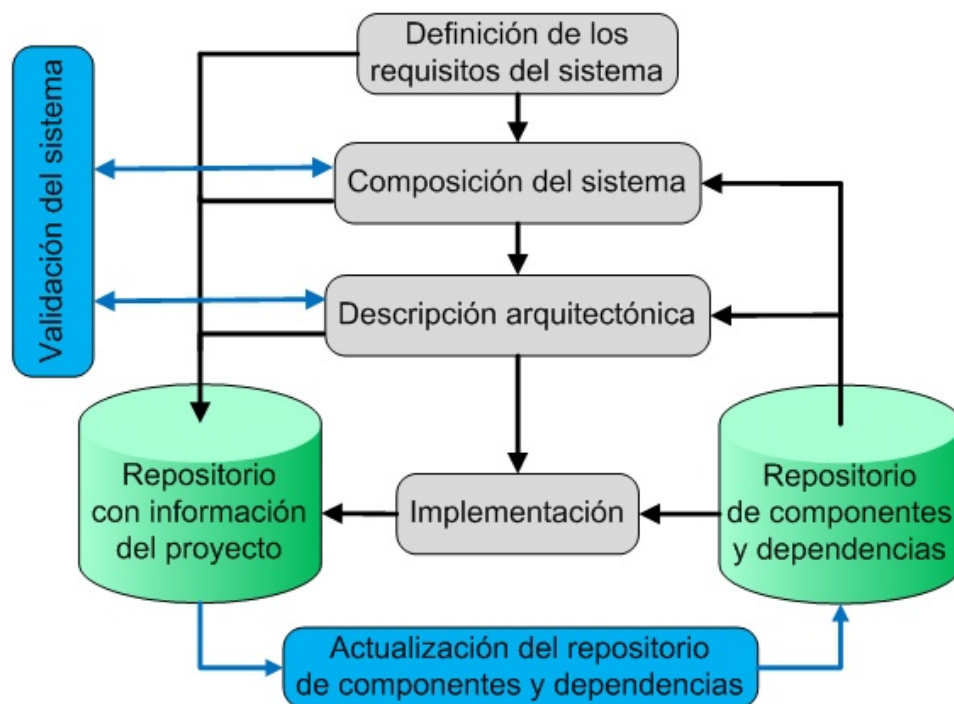
METHODOLOGY AND FRAMEWORK FOR THE DEVELOPMENT OF SCIENTIFIC APPLICATIONS WITH HIGH-PERFORMANCE COMPUTING THROUGH WEB SERVICES

Javier Corral-García, David Cortés-Polo, César Gómez-Martín y José-Luis González-Sánchez.

EATIS 2012. Valencia, España. 23-25 Mayo 2012. ISBN: 978-1-4503-1012-3. pp 173-180. DOI: 10.1145/2261605.2261631

One of the biggest problems in the development of high-performance scientific applications is the need for programming environments that allow source code development in an efficient way. However, there is a clear lack of approaches with specific methodologies or optimal working environments to develop high-performance computing software systems. Additionally, existing frameworks are focused on the design and implementation phases, forgetting software component reuse from the earliest stages of the development process.

An aspect-oriented and component-based approach is proposed for the development of complex parallel applications from existing functional components and new component definitions, according to business rules established by the users, through a web service entry of the platform. The proposed approach includes a specific methodology to develop high-performance scientific applications through the reuse of components from the earliest stages. Finally, an additional supercomputing-oriented framework aims to facilitate the development of these systems and to make creation, cataloguing, validation and reuse of each application and its components easier.



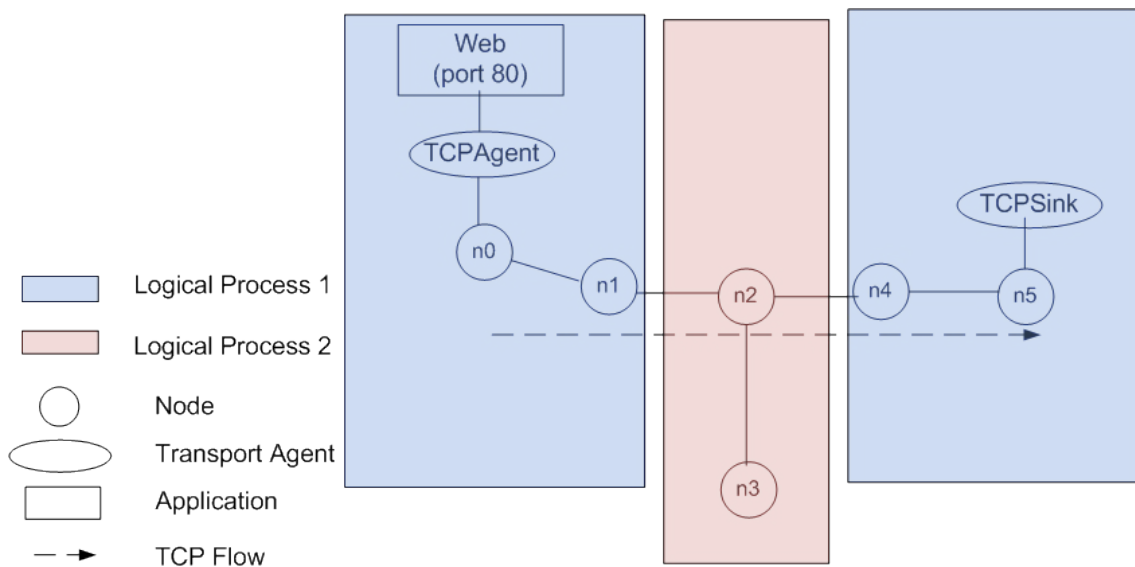
NETWORK SIMULATIONS WITH SUPERCOMPUTING USING NS-2

David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, Cesar Gómez-Martín, Javier Corral-García.

2nd Workshop - Future Internet: Efficiency in High-Speed Networks, W-FIERRO 2012. Cartagena, España. 19-20 julio 2012. ISBN: 978-84-96997-90-5. pp 19-25.

Network simulation is nowadays one of the most powerful tools to study and develop new network protocols and applications. Not only implementing new protocols, but also modifying the existing ones. With this approach, a range of possibilities are opened on the research and the industry fields. This implies that the network scenarios should be more realistic in order to study the impact that is produced on current protocols and architectures by the developed ones in a production environment.

This paper presents an overview of NS-2, one of the most important simulators in the networking area; an example of a simulation using NS-2; how to extend it to include new functionalities, the PDNS add-on for parallel and distributed processing; and finally, the evolution of the simulator named NS-3.



DEVELOPMENT OF PATTERN-BASED SCIENTIFIC APPLICATIONS FOR HIGH-PERFORMANCE COMPUTING

Javier Corral-García, David Cortés-Polo, César Gómez-Martín y José-Luis González-Sánchez.
IBERGRID 2012. 7-9 noviembre 2012. Lisboa, Portugal.

Computational scientific research is faced with critical challenges such as the rigorous post-processing of the data, which requires an increased role for high-performance computing. Experience has shown that it would be very useful for researchers to follow a specific methodology and use a framework to make the development of their scientific codes and applications easier. Otherwise, they have to deal with exploit aspects of clusters and supercomputers.

Nowadays, one of the biggest problems in the development of high-performance scientific applications is the need for programming environments that allow source code development in an efficient way. There is a clear lack of approaches with specific methodologies or optimal working environments. An aspect-oriented and component-based approach is proposed for the development of complex pattern-based scientific applications from existing and new functional components.

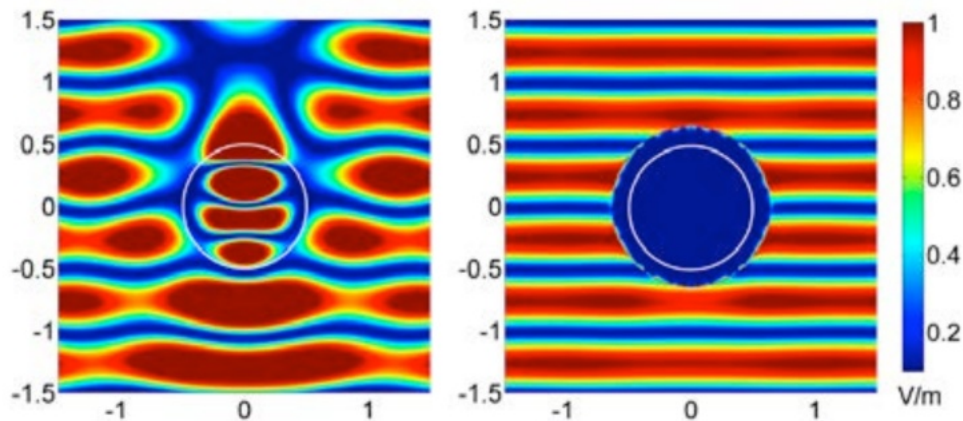
OPTIMIZATION OF INVISIBILITY CLOAKS BY SURFACE INTEGRAL EQUATION METHOD

J. M. Taboada, J. Rivero, L. Landesa, M. G. Araújo, and F. Obelleiro.

International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012.

The surface integral equation (SIE) and the method of moments (MoM) are combined with a genetic algorithm (GA) for the design of multilayer invisibility shells. Thickness and material composition of the layers are simultaneously optimized to minimize the scattering cross section (SCS).

The proposed procedure brings the possibility of easily including different shape and/or material constraints on the cloak design, which indeed is of great interest for manufacturing purposes.



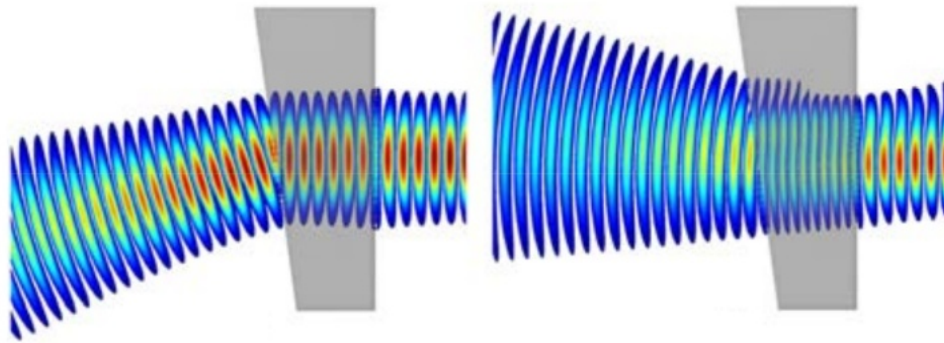
FAST SURFACE INTEGRAL EQUATION FORMULATIONS FOR LARGE-SCALE CONDUCTORS, METAMATERIALS, AND PLASMONIC PROBLEMS

J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro.

International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012.

Surface-integral-equation (SIE) approaches are presented for the accurate solution of different problems in computational electromagnetics. First, an efficient message passing interface (MPI)/OpenMP parallel implementation of the multilevel fast multipole algorithm-fast Fourier transform (MLFMA-FFT) is presented for the solution of large-scale conducting bodies.

Second, looking for the extension of these rigorous approaches to new demanded areas, the SIE method is successfully applied to the solution of left-handed metamaterials and plasmonic nanostructures.



OPTIMIZATION OF INVISIBILITY CLOAKS BY SURFACE INTEGRAL EQUATION METHOD

J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa.

XXVII Simposium Nacional de la Unión Científica Internacional de Radio (URSI 2012), Elche (Alicante), 12-14 de septiembre de 2012.

The possibility of using plasmonic and metamaterial covers to reduce the total scattering cross section of an object is widely discussed in [1]-[3]. This minimization can be achieved covering the main scattering object by single or multiple layers of plasmonic materials or metamaterials (which can be homogeneous and isotropic). This cover must be designed properly to achieve this effect.

There are analytical solutions to design these layers but this limit the object to be cloaked to canonical geometries or even for the case of small objects. In this work, we propose a novel cloaking optimization technique based on the application of surface integral equation (SIE) formulations and optimization techniques in order to minimize the total scattering cross section of an arbitrary object.

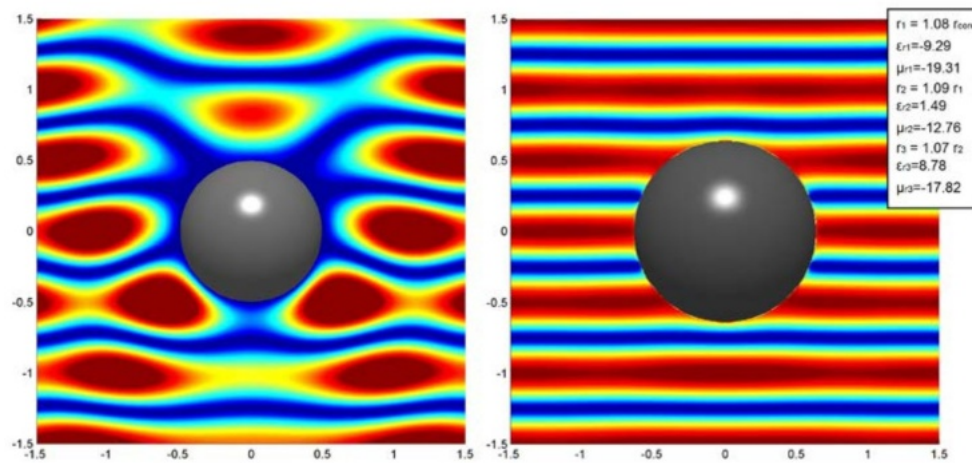
DESIGN OF INVISIBILITY CLOAKS USING SURFACE INTEGRAL EQUATION METHOD

J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa.

6th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials 2012), St. Petersburg, Russia, 17-22 September 2012.

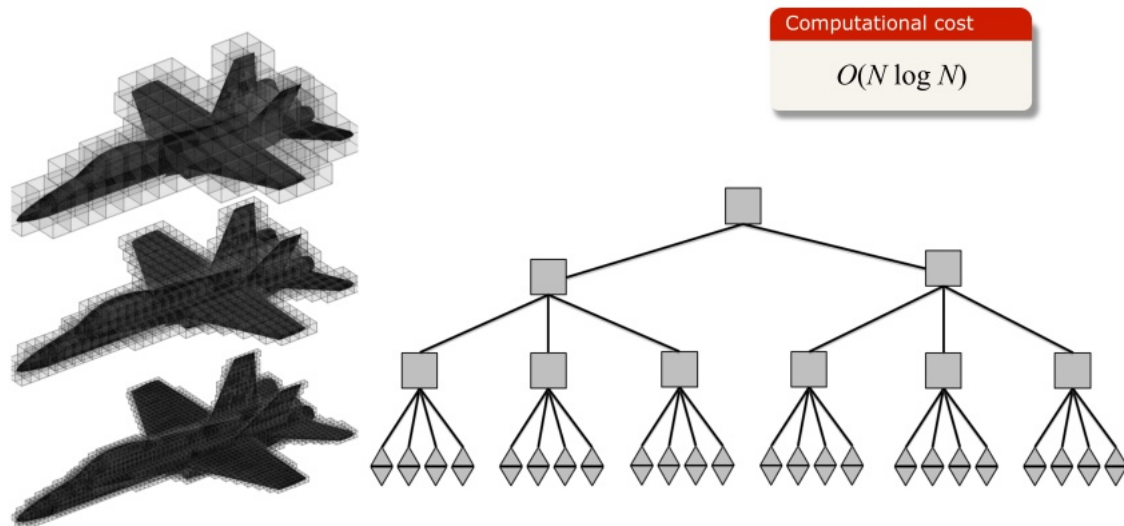
Plasmonic and metamaterial cloaking is a scattering cancellation technique consisting of covering the scatterer by an invisibility cloak made up of single or multiple layers of homogeneous plasmonic, metamaterial, and/or dielectric materials.

A suitable selection of the cloak geometry and materials allows dramatically reducing the overall scattered field from the cloaked object. In this work, we propose a novel cloaking optimization technique based on the application of surface integral equation (SIE) formulations and optimization techniques.



FAST SURFACE INTEGRAL EQUATION METHODS FOR ELECTROMAGNETIC SOLUTION OF LARGE-SCALE CONDUCTORS, METAMATERIALS AND OPTICAL NANO-ANTENNAS

J. M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, J. Rivero, D. M. Solís, L. Bote, F. Obelleiro, and J. L. Rodríguez.
VI LEMA-EPFL Workshop on Integral Techniques for Electromagnetics (INTELECT'2012), Sevilla, 19 octubre 2012



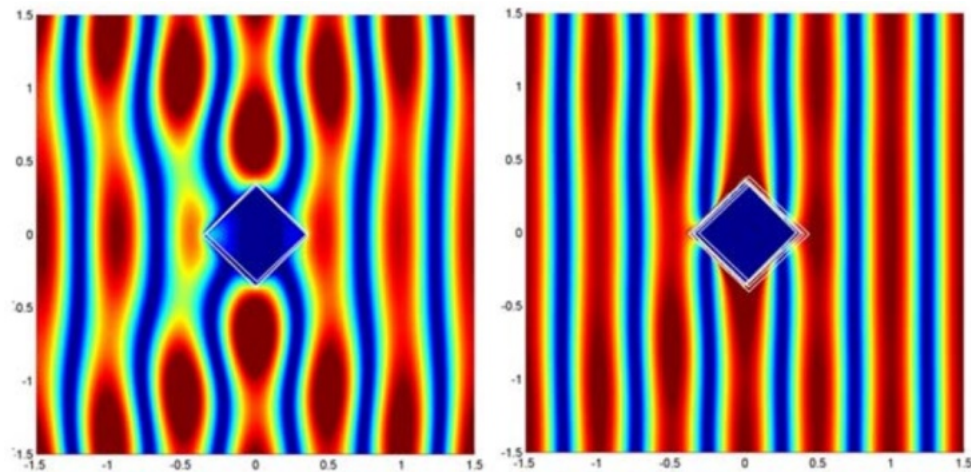
OPTIMIZED DESIGN OF MULTILAYER INVISIBILITY CLOAKS FOR ARBITRARY GEOMETRIES

J. Rivero, J.M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, F. Obelleiro.

7th European Conference on Antennas and Propagation – EUCAP 2012, Gonthenbourg, 8-12 april 2013.

The possibility of using plasmonic and metamaterial covers to reduce the total scattering cross section of an object is widely discussed in several works. This minimization can be achieved covering the main scattering object by single or multiple layers of plasmonic materials or metamaterials (which can be homogeneous and isotropic). This cover must be designed properly to achieve this effect.

There are analytical solutions to design these layers but this limit the object to be cloaked to canonical geometries or even for the case of small objects. In this work, we propose a novel cloaking optimization technique based on the application of surface integral equation (SIE) formulations and optimization techniques in order to minimize the total scattering cross section of an arbitrary object.



PUBLICACIONES EN REVISTAS

FLASH FLOW PYROLYSIS: MIMICKING FLASH VACUUM PYROLYSIS IN A HIGH-TEMPERATURE/HIGH-PRESSURE LIQUID-PHASE MICROREACTOR ENVIRONMENT

David Cantillo, Hassan Sheibani, and C. Oliver Kappe.

Christian Doppler Laboratory for Microwave Chemistry (CDLMC) and Institute of Chemistry, Karl-Franzens-University Graz, Heinrichstrasse 28, A-8010 Graz, Austria.

The Journal of Organic Chemistry 77 (5), pp 2463–2473. Febrero de 2012.

Flash vacuum pyrolysis (FVP) is a gas-phase continuous-flow technique where a substrate is sublimed through a hot quartz tube under high vacuum at temperatures of 400–1100 °C. Thermal activation occurs mainly by molecule–wall collisions with contact times in the region of milliseconds. As a preparative method, FVP is used mainly to induce intramolecular high-temperature transformations leading to products that cannot easily be obtained by other methods. It is demonstrated herein that liquid-phase high-temperature/high-pressure (high-T/p) microreactor conditions (160–350 °C, 90–180 bar) employing near- or supercritical fluids as reaction media can mimic the results obtained using preparative gas-phase FVP protocols. The high-T/p liquid-phase “flash flow pyrolysis” (FFP) technique was applied to the thermolysis of Meldrum’s acid derivatives, pyrrole-2,3-diones, and pyrrole-2-carboxylic esters, producing the expected target heterocycles in high yields with residence times between 10 s and 10 min.

The exact control over flow rate (and thus residence time) using the liquid-phase FFP method allows a tuning of reaction selectivities not easily achievable using FVP. Since the solution-phase FFP method does not require the substrate to be volatile any more —a major limitation in classical FVP—the transformations become readily scalable, allowing higher productivities and space–time yields compared with gas-phase protocols. Differential scanning calorimetry measurements and extensive DFT calculations provided essential information on pyrolysis energy barriers and the involved reaction mechanisms. A correlation between computed activation energies and experimental gas-phase FVP (molecule–wall collisions) and liquid-phase FFP (molecule–molecule collisions) pyrolysis temperatures was derived.

SURFACE INTEGRAL EQUATION SOLVERS FOR LARGE-SCALE CONDUCTORS, METAMATERIALS AND PLASMONIC NANOSTRUCTURES

José M. Taboada, Marta G. Araújo, Javier Rivero, Luis Landesa, Fernando Obelleiro.

Aces Journal, Vol 27, Nº 2. Febrero 2012.

Surface integral equation (SIE) approaches for the accurate solution of different problems in computational electromagnetics are addressed. First, an efficient message passing interface (MPI)/OpenMP parallel implementation of the multilevel fast multipole algorithm-fast Fourier transform (MLFMA-FFT) is presented for the solution of large-scale conducting bodies. By combining the high scalability of the fast multipole method-FFT (FMM-FFT) with the high efficiency of MLFMA, challenging problems up to one billion unknowns are solved using a parallel supercomputer.

Second, looking for the extension of these rigorous approaches to new demanded areas, the SIE method is successfully applied to the solution of left-handed metamaterials and plasmonic nanostructures. Numerical examples are presented to confirm the validity and versatility of this approach for the accurate resolution of problems in the context of leading-edge nanoscience and nanotechnology applications.

ON THE PREBIOTIC SYNTHESIS OF D-SUGARS CATALYZED BY L-PEPTIDES: ASSESSMENTS FROM FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

Cantillo, D., Ávalos, M., Babiano, R., Cintas, P., Jiménez, J. L. and Palacios, J. C. (2012).
The Chemistry European Journal. 18: 8795–8799. doi: 10.1002/chem.201200466

What accounts for a particular chiral selection in the case of a few sugars of prebiotic relevance, thereby mirroring the asymmetry observed in nature? By using first-principles calculations, the generation of pentoses from glycolaldehyde (the initial product of the autocatalytic formose reaction), which has been detected in outer space), has been modeled by using L-Val-L-Val as a primeval catalyst.

Our theoretical study provides insight into the mechanism of this reaction and satisfactorily explains a few key molecular events. Our rationale agrees with the reported experimental data and shows that the D-configuration is only favored for ribose. L-pentoses are usually favored in the presence of L-configured dipeptides, as observed experimentally, although no chiral selection could be observed in the case of xylose. These results confirm that a prebiotic sugar soup could be fine-tuned in the presence of shorter peptides as catalysts and that D-ribose would have also resulted in an advantageous imbalance for further amplification and chemical evolution.

SYNTHESIS FROM D-ALTROSE OF (5R,6R,7R,8S)-5,7-DIHYDROXY-8-HYDROXYMETHYLCONIDINE AND 2,4-DIDEOXY-2,4-IMINO-D-GLUCITOL, AZETIDINE ANALOGUES OF SWAINSONINE AND 1,4-DIDEOXY-1,4-IMINO-D-MANNITOL

Noelia Araújo, Sarah F. Jenkinson, R. Fernando Martínez, Andreas F. G. Glawar, Mark R. Wormald, Terry D. Butters, Shinpei Nakagawa, Isao Adachi, Atsushi Kato, Akihida Yoshihara, Kazuya Akimitsu, Ken Izumori, and George W. J. Fleet.

Organic Letters. 2012, 14, 4174–4177. doi: 10.1021/ol301844n

Ring closure of a 3,5-di-O-triflate derived from D-altrose with benzylamine allowed the formation of both monocyclic and bicyclic azetidine analogues of swainsonine.

CAN ELECTROMAGNETIC FIELDS INFLUENCE THE STRUCTURE AND ENZYMATIC DIGEST OF PROTEINS? A CRITICAL EVALUATION OF MICROWAVE-ASSISTED PROTEOMICS PROTOCOLS

Markus Damm, Christoph Nusshold, David Cantillo, Gerald N. Rechberger, Karl Gruber, Wolfgang Sattler, C. Oliver Kappe.

Journal of Proteomics. 2012. 1874-3919. doi: 10.1016/j.jprot.2012.07.043

This study reevaluates the putative advantages of microwave-assisted tryptic digests compared to conventionally heated protocols performed at the same temperature. An initial investigation of enzyme stability in a temperature range of 37–80 °C demonstrated that trypsin activity declines sharply at temperatures above 60 °C, regardless if microwave dielectric heating or conventional heating is employed. Tryptic digests of three proteins of different size (bovine serum albumin, cytochrome c and β -casein) were thus performed at 37 °C and 50 °C using both microwave and conventional heating applying accurate internal fiber-optic probe reaction temperature measurements.

The impact of the heating method on protein degradation and peptide fragment generation was analyzed by SDS-PAGE and MALDI-TOF-MS. Time-dependent tryptic digestion of the three proteins and subsequent analysis of the corresponding cleavage products by MALDI-TOF provided virtually identical results for both microwave and conventional heating. In addition, the impact of electromagnetic field strength on the tertiary structure of trypsin and BSA was evaluated by molecular mechanics calculations. These simulations revealed that the applied field in a typical laboratory microwave reactor is 3–4 orders of magnitude too low to induce conformational changes in proteins or enzymes.

MLFMA-FFT PARALLEL ALGORITHM FOR THE SOLUTION OF EXTREMELY LARGE PROBLEMS IN ELECTROMAGNETICS

J. M. Taboada, M. G. Araújo, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, L. Landesa.

Proceedings of the IEEE, Special issue on Large Scale Electromagnetic Computation for Modeling and Applications., Junio, 2012. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2194269

An efficient parallel implementation of the multilevel fast multipole algorithm—fast Fourier transform (MLFMA-FFT) has been successfully used to solve an electromagnetic problem involving one billion of unknowns, which indeed becomes the largest problem solved with the surface integral-equation approach up to now.

In this paper, we present a deep review of this challenging execution, focusing on the details of the parallel implementation step by step, with the aim of describing the different stages of the parallel algorithm and analyzing its overall parallel performance.

ON THE MECHANISM OF THE DAKIN–WEST REACTION

Luciana Dalla-Vechia, Vanessa G. Santos, Marla N. Godoi, David Cantillo, C. Oliver Kappe, Marcos N. Eberlin, Rodrigo O. M. A. de Souza and Leandro S. M. Miranda.

Organic & Biomolecular Chemistry. Agosto, 2012. DOI: 10.1039/C2OB26560E

The mechanism of the Dakin–West reaction has been thoroughly investigated by monitoring the reaction using ESI-MS/MS techniques in combination with M06-2X/6-311++G(d,p) calculations. Several of the key intermediates in the previously proposed “azlactone” mechanism have been experimentally detected and characterized. In particular, interception of the mixed anhydrides involved in the early and late stages of the mechanistic scheme, as well as of the cyclic acyl-oxazolone intermediate, supports the original pathway suggested by Dakin and West. All intermediates and transition structures involved in several competing mechanisms have been calculated.

The theoretical calculations support the experimental results and corroborate the proposed “azlactone” mechanism. The pathway involving the cyclic oxazolone (“azlactone”) intermediate represents an energy barrier more than 3 kcal mol⁻¹ lower than for the competing aldol-type mechanism, thus ruling out this alternative mechanism. The DFT calculations explain the observed ESI-MS data and assess those intermediates which the experiments cannot fully elucidate.

AN EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL ASSESSMENT OF ACID-CATALYZED AZIDE-NITRILE CYCLOADDITIONS

David Cantillo, Bernhard Gutmann, and C. Oliver Kappe.

The Journal of Organic Chemistry. Noviembre, 2012. DOI: 10.1021/jo3022742

The mechanism of the azide–nitrile cycloaddition mediated by different Brønsted and Lewis acids has been addressed through DFT calculations. In all cases activation of the nitrile substrate by the Brønsted or Lewis acid catalyst was found to be responsible for the rate enhancement. According to DFT calculations the cycloaddition proceeds in a stepwise fashion involving the initial formation of an open-chain imido-yl azide intermediate. Kinetic experiments performed using N-methyl-2-pyrrolidone as solvent and sodium azide as azide source demonstrate that all evaluated Brønsted acids have the same efficiency toward cycloaddition with benzonitrile, suggesting that hydrazoic acid is the actual dominant catalytic species in these tetrazole syntheses.

Lewis acids such as Zn or Al salts perform in a similar manner, activating the nitrile moiety and leading to an open-chain intermediate that subsequently cyclizes to produce the tetrazole nucleus. The most efficient catalyst evaluated was 5-azido-1-methyl-3,4-dihydro-2H-pyrrolium azide, which can readily be generated in situ from aluminum chloride, sodium azide in N-methyl-2-pyrrolidone. The efficiency of this catalyst has been examined by preparation of a series of 5-substituted-1H-tetrazoles. The desired tetrazole structures were obtained in high yields within 3–10 min employing controlled microwave heating.

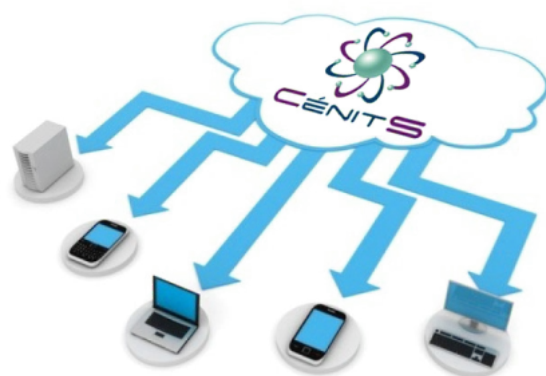
MEMORIAS DE POSTGRADO Y ESTUDIOS AVANZADOS

IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO CLOUD COMPUTING EN UN CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN



Máster en Dirección TIC. Universidad de Extremadura.

Jaime Rivero Ramos. Técnico investigador en CénitS.



El *cloud computing* se ha convertido en uno de los principales ejes de la investigación y la innovación en el sector de las TIC en los últimos años; el impacto generado por este modelo de servicio es comparable únicamente a la revolución generada por la llegada de internet durante los años 90. En CénitS surge la necesidad de investigar este nuevo paradigma, analizar el modelo de negocio y valorar la posibilidad de incorporarlo dentro de su catálogo de servicios.

En este trabajo fin de máster realizado por Jaime Rivero Ramos y codirigido por José Luis González Sánchez se analiza el estado actual del *cloud computing* y su influencia en el ámbito estratégico de la economía, estableciendo las motivaciones por las que una entidad pública cualquiera (y en particular para la Fundación COMPUTAEX) valora dar el salto hacia la oferta de este servicio en la modalidad de *IaaS (Infrastructure as a Service)*.

Para ello, se desarrolla un informe que comprende la visión empresarial en términos estratégicos con la metodología seguida para la inserción de este nuevo modelo de negocio en la entidad. El enfoque genérico permite aplicar los resultados a cualquier empresa, abordando cómo y por qué comenzar a ofrecer servicios de *cloud computing* en el contexto socio-económico y político actual.

El estudio también analiza diversas soluciones desde el punto de vista técnico (análisis de las posibles herramientas, modo de implantación y puesta en producción) para proporcionar servicios en la infraestructura de CénitS.

Por último, se incluye un estudio del funcionamiento de CénitS bajo el nuevo modelo de trabajo, detallando el impacto económico, operacional y las nuevas oportunidades de negocio para la Fundación COMPUTAEX.

SISTEMA DE VIGILANCIA TECNOLÓGICA PARA UN CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN



Máster en Dirección TIC. Universidad de Extremadura.

Javier Lázaro Jareño. Administrador web y paralelización de código en CénitS.

La investigación, el desarrollo tecnológico y la innovación son factores críticos en las organizaciones a la hora de determinar su crecimiento económico, nivel de bienestar y competitividad internacional. La normalización y certificación de estas actividades aportan calidad a los procesos productivos, generando mayor confianza en los clientes y mejores productos y servicios.

La vigilancia tecnológica es un proceso organizado, selectivo y permanente de captar información del exterior y de la propia organización sobre ciencia y tecnología, seleccionarla, analizarla, difundirla y comunicarla, para convertirla en conocimiento para tomar decisiones con menor riesgo y poder anticiparse

a los cambios. La vigilancia tecnológica es, por lo tanto, una herramienta clave en el marco de los sistemas de gestión de I+D+i, ya que constituye un primer escalón para obtener ideas útiles para nuevos proyectos, procesos y sistemas de I+D+i. El conocimiento generado a partir de este proceso permite desarrollar nuevos productos, servicios y soluciones tecnológicas a problemas concretos de la organización.



En este trabajo fin de máster realizado por Javier Lázaro Jareño y codirigido por Alicia Guerra Guerra y José Luis González Sánchez se presenta una pequeña introducción enfocada a comprender qué es un sistema de vigilancia tecnológica, cuáles son los factores que deben tenerse en cuenta a la hora de hacer vigilancia tecnológica, cómo debe implementarse e implantarse en una organización para que sea eficaz y los distintos procesos que un sistema de vigilancia tecnológica debe incluir.

También se analizan las necesidades actuales de la Fundación COMPUTAEX para diseñar e implantar un sistema de vigilancia tecnológica que permita mejorar sus capacidades de innovación y competitividad.

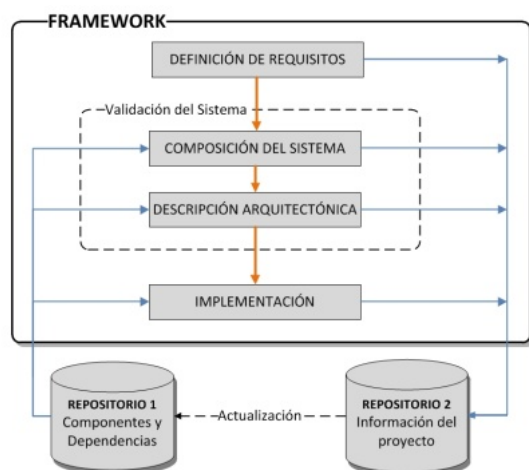
Este estudio finaliza con el desarrollo de una primera versión funcional de la herramienta tecnológica sobre la que se apoyarán los procesos de vigilancia tecnológica de la fundación y su implantación en la infraestructura hardware de CénitS.

METODOLOGÍA Y FRAMEWORK PARA EL DESARROLLO DE APLICACIONES CIENTÍFICAS EN ENTORNOS HPC



Diploma de Estudios Avanzados. Universidad de Extremadura.

Javier Corral García. Analista y paralelización de código en CénitS.



Se trata de un proyecto ambicioso de complejidad muy notable, con una propuesta trabajada desde un marco teórico y publicada en diversos artículos en congresos de ámbito internacional. Dicha propuesta pretende cubrir las necesidades detectadas y aportar nuevas soluciones sobre los desafíos abiertos en la computación de alto rendimiento, mediante la creación de una metodología y un framework basados en componentes y orientados a aspectos, para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos de computación de alto rendimiento, HPC (*High Performance Computing*). El objetivo es permitir a

investigadores y usuarios generar sus programas de manera más eficiente, con mayor confianza en su funcionalidad y alcanzando destacables reducciones de tiempo, esfuerzo y coste, mediante la reutilización de componentes con códigos paralelos ya desarrollados y probados previamente.

Numerosas investigaciones de diversa índole se enfrentan continuamente a desafíos realmente críticos que requieren un especial protagonismo por parte de la computación de alto rendimiento. Actualmente, la paralelización de sus códigos suele ser el primer problema que afrontan los usuarios a la hora de comenzar a utilizar HPC. En algunos casos, la propia tarea de crear los códigos secuenciales ya es complicada para expertos de determinadas ramas de la ciencia, que poco o nada tienen que ver con la programación informática. Cuando además estos usuarios se ven obligados a hacer uso de la potencia que ofrece la computación de alto rendimiento, la curva de aprendizaje se endurece, aumentando las dificultades para conseguir dar solución a los problemas planteados. Uno de los retos más importantes a los que se enfrentan la creación de aplicaciones científicas y el desarrollo en HPC es, precisamente, la carencia de entornos de programación que permitan generar código de forma eficiente.

La experiencia ha demostrado que sería muy útil para investigadores y usuarios de computación de alto rendimiento, seguir una metodología concreta y un framework que facilitasen el desarrollo de sus códigos y aplicaciones. Sin embargo, existe una patente falta de enfoques que presenten metodologías específicas o entornos de trabajo óptimos, obligándoles a afrontar los desafíos que supone la utilización de estos computadores. En un amplio número de casos, estos usuarios no tienen la formación previa y las habilidades necesarias para hacerlo o únicamente desean compilar sus códigos y ejecutarlos lo antes posible. En ocasiones, esto acaba siendo contraproducente en términos de eficiencia, dado que acaban teniendo que esperar más tiempo para obtener el resultado final, debido a la elección de un modelo incorrecto de programación o incluso a una arquitectura software errónea, por no hablar de errores en la propia paralelización de códigos inicialmente secuenciales.

Este trabajo de investigación ha sido realizado por Javier Corral García y dirigido por José Luis González Sánchez para la obtención del Diploma de Estudios Avanzados en la Universidad de Extremadura.

CASOS DE ÉXITO / ESTUDIO

TRES AÑOS DE SUPERCOMPUTACIÓN EN EXTREMADURA

Publicación: DatacenterDynamics. Número 11, Septiembre/Octubre 2012.

"El superordenador extremeño LUSITANIA no es, ni mucho menos, el más potente que existe en España y, sin embargo, en sus algo más de tres años de historia ha sido capaz de batir algún reto y de despertar el interés de la comunidad científica. Apenas dos meses después de haber abierto sus puertas, el centro ya tenía trabajos en su cola de espera y, hasta ahora, ha permanecido permanentemente ocupado".

José Luis González Sánchez, director general del CénitS (Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación), señala que el centro alberga una "máquina especialmente apta para problemas bastante complejos. Cuando la potencia de cómputo no es un requerimiento excesivo, pero sí los tiempos de respuesta, esta máquina funciona oportunamente". Para González, la característica fundamental que distingue a LUSITANIA del resto de centros de supercomputación son los dos teras de memoria principal, unidos a la capacidad de almacenamiento de cerca de 300 TB en disco, conectividad a 10 Gb, la alta disponibilidad de sus equipos y el apoyo técnico de su personal.



DISTINCIONES Y RECONOCIMIENTOS

LA ESCUELA POLITÉCNICA DE CÁCERES DISTINGUE LA LABOR DE LA FUNDACIÓN COMPUTAEX



La Fundación COMPUTAEX ha recibido la distinción que la Escuela Politécnica de Cáceres de la Universidad de Extremadura le ha otorgado durante el acto institucional celebrado el 10 de mayo, con motivo de la festividad del centro.

Con este galardón, se reconoce el compromiso que la Fundación ha adquirido desde su creación con la Escuela Politécnica. La Fundación

COMPUTAEX y su centro CénitS colaboran en tareas docentes (principalmente en los másteres TIC) y de apoyo a la investigación e investigadores del centro universitario.

CONVOCATORIAS DE PROYECTOS CONVENIOS DE COLABORACIÓN

CONVOCATORIAS DE PROYECTOS Y CONVENIOS DE COLABORACIÓN

Durante el año 2012, 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.

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.

A continuación se muestran los proyectos más importantes para los que se ha conseguido financiación y la relación de convenios de colaboración vigentes desde la creación de la fundación y los oficializados a lo largo de 2012.

RELACIÓN DE PROYECTOS PRESENTADOS A CONVOCATORIAS COMPETITIVAS CON LA PARTICIPACIÓN DE COMPUTAEX

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 €

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 €

FI4VDI: Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo

SUDOE, Programa de Cooperación Territorial del Espacio Sudoeste Europeo. Programa de Cooperación Territorial INTERREG IV B. Proyecto de cooperación territorial en los ámbitos de la competitividad y la innovación, el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la ordenación del territorio, para contribuir a reforzar la cohesión económica y social.

Eficware: Evaluación de la correlación entre la eficacia del código y la eficiencia energética para la agregación de sostenibilidad

Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica. Investigación Fundamental No Orientada. Proyecto de investigación fundamental no orientada consistente en trabajos experimentales o teóricos emprendidos con el objetivo primordial de adquirir nuevos conocimientos acerca de fundamentos subyacentes de fenómenos y hechos observables, que suponen avances aunque no existan perspectivas inmediatas de aplicación práctica y directa.

MITTIC. Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales

POCTEP, Programa de Cooperación Transfronteriza España-Portugal 2007-2013. Acciones de cooperación transfronteriza en el marco del POCTEP, estableciendo las condiciones y las bases para la obtención de ayudas del FEDER en régimen de concurrencia competitiva.

Eficware: Evaluación de la correlación entre la eficacia del código y la eficiencia energética para la agregación de sostenibilidad

IV Plan Regional de I+D+i de Extremadura. Formación e incorporación de personal investigador y tecnólogos a los centros de investigación en el ámbito de la Comunidad Autónoma de Extremadura. Ayuda de una duración máxima de dos años, para la formación de un tecnólogo, mediante la realización de labores de investigación, innovación y transferencia tecnológica a través de la formalización de un contrato en prácticas.

Impulso de la participación de CénitS en proyectos y programas europeos e internacionales en el campo de la I+D+i

Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica. Subprograma de Personal Técnico de Apoyo (PTA). Técnicos para apoyo al impulso de la participación internacional: Ayuda de una duración máxima de tres años para la contratación laboral de personal técnico de apoyo destinado al impulso de la participación en proyectos y programas europeos e internacionales en el campo de la I+D+i.

Detección, evaluación y monitorización del cáncer mediante técnicas de supercomputación

IV Plan Regional de I+D+i de Extremadura. Formación e incorporación de personal investigador y tecnólogos a los centros de investigación en el ámbito de la Comunidad Autónoma de Extremadura. Ayuda de una duración máxima de dos años, para la formación de un tecnólogo, mediante la realización de labores de investigación, innovación y transferencia tecnológica a través de la formalización de un contrato en prácticas.

CONVENIOS DE COLABORACIÓN

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).

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.

CESGA

El Centro de Supercomputación de Galicia es uno de los referentes nacionales en el campo de la supercomputación. CESGA y CénitS colaboran en la mayoría de sus ámbitos de actividad, compartiendo experiencias y buen hacer.

INTROMAC

El Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción es uno de los centros más activos de nuestra región. INTROMAC y CénitS mantienen una fluida relación y cooperación en los numerosos ámbitos de actividad comunes.

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.

INNOVEEX

Como modelo integrado para la implementación, crecimiento y desarrollo de la innovación en las empresas extremeñas, INNOVEEX (Extremadura Avante en la actualidad) ha aportado a COMPUTAEX y CénitS importantes colaboraciones para llevar a cabo sus objetivos.

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 Desarrollo.

RedIRIS

La Fundación COMPUTAEX ha pasado a formar parte de las instituciones afiliadas a RedIRIS (red española para la Interconexión de los Recursos InformáticoS de universidades y centros de investigación), fundada en el año 1988, convirtiéndose en la red académica y de investigación española. Actualmente, RedIRIS está integrada dentro de la Entidad Pública empresarial Red.es, del Ministerio de Industria, Energía y Turismo.

Esta afiliación permite a COMPUTAEX acceder a un gran número servicios que provee RedIRIS para la comunicad científica. De entre estos servicios son destacables, la interconexión a la red de datos académica española, la monitorización de servicios de las instituciones, la seguridad de equipos y redes informáticas, y servicios relacionados con identidad digital.

RedIRIS tiene alrededor de 400 instituciones afiliadas, principalmente Universidades y Organismos Públicos de Investigación.

ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN

ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN

La Fundación COMPUTAEX tiene entre sus actividades todas aquellas que promuevan la elaboración de proyectos de investigación y desarrollo tecnológico, la colaboración en la transferencia de resultados de investigación en el área de cálculo entre los centros públicos de investigación y las empresas, el fomento y promoción de la cooperación entre empresas e instituciones y colaboración en la organización de cursos, seminarios y reuniones.

Al amparo del convenio firmado entre la Universidad de Extremadura y COMPUTAEX se ha becado en 2012 a cuatro personas a tiempo completo en CénitS, ligadas a tareas de apoyo relacionadas con la investigación y desarrollo en entornos de Cloud Computing y GreenIT.

A continuación se muestran las actividades realizadas por la Fundación a lo largo de 2012 en el ámbito de la formación y la divulgación.

MEMORIAS DE ACTIVIDADES DE FORMACIÓN

COLABORACIÓN EN LOS MÁSTERES TIC DE LA UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

La Fundación COMPUTAEX y su Centro CénitS colaboran con los Másteres TIC impartidos por la Universidad de Extremadura ofreciendo su experiencia y sus recursos con el fin de dinamizar y fomentar el sector tecnológico de nuestra región.

Más concretamente, se ha impartido docencia en las asignaturas "Computación de Altas Prestaciones" y "Planificación y Diseño de Redes y Servicios" de los Másteres en Ingeniería Informática, Ingeniería de Telecomunicación y Dirección TIC.

También se han codirigido cuatro trabajos fin de máster, dos de ellos ya presentados y que pueden consultarse en el apartado de "Resultados de investigación".

Además, se han tutorizado dos becas de formación en entornos de Cloud Computing y Green IT, cuyas actividades se presentan a continuación.



BECA DE FORMACIÓN EN ENTORNOS DE CLOUD COMPUTING

Becarios

Jaime Rivero Ramos. Máster en Dirección TIC.

Manuel Alfonso López Rourich. Máster en Dirección TIC.

Descripción

El objetivo prioritario de esta beca ha sido abordar de forma directa la tecnología de *Cloud Computing* y conocerla de forma concreta para ser capaces de implantar un sistema de oferta de este servicio dentro de la Fundación COMPUTAEX. Para ello, se ha utilizado la infraestructura dispuesta en CénitS para poder conocer esta nueva tecnología desde la base y enfrentarla en el centro con el conocimiento necesario para asegurar una puesta en marcha de la misma de manera exitosa.

Se han estudiado las distintas tecnologías de virtualización que soportan este tipo de sistemas, hasta llegar a construir un ecosistema de *Cloud Computing* de manera completa mediante la oferta de Infraestructura como servicio (*IaaS*) a través de la implantación de un sistema de software *open source* que resuelve dicha tarea.

Además de esta tarea principal, se han abordado otras muchas actividades relacionadas fundamentalmente con el apoyo a las actividades cotidianas en CénitS y, en concreto, a la investigación en secuenciación genética y los aspectos de la bioinformática relacionados con esta tarea.

Objetivos

- Estudiar la tecnología de Cloud Computing en profundidad para conseguir su implantación en CénitS.
- Conocer la tecnología de virtualización que da el soporte a este tipo de sistemas.
- Conocer la oferta de servicios de Cloud Computing existentes en el mercado actual, sus características y el uso que la comunidad está haciendo de ellos.
- Disponer de una infraestructura que trabaje con este modelo y que se ofrezca a las entidades que necesiten de recursos de alta complejidad sin necesidad de adquirirlos de forma definitiva.
- Aportar el apoyo técnico necesario al personal investigador en tareas relacionadas con la secuenciación genética y acortar el gap existente entre la tecnología de supercomputación y los investigadores no expertos en aspectos informáticos.
- Ofrecer labor de apoyo a todas las actividades de CénitS que requieran agilidad en su resolución en momentos determinados.

Objetivos alcanzados

- Se ha dispuesto de una infraestructura virtualizada a disposición del tejido empresarial e investigador de la región para realizar tareas concretas que necesitan recursos diferentes a los que puede aportar el supercomputador Lusitania.
- Se ha construido un ecosistema Cloud Computing basado en OpenNebula.
- Se ha finalizado durante este periodo el Máster en Dirección TIC, obteniendo el título de postgraduado, entregándose el Trabajo Fin de Máster relacionado con la temática del Cloud Computing obteniendo una calificación de Sobresaliente, además de realizar el periodo de prácticas externas de dicho Máster en la propia Fundación COMPUTAEX.
- Se ha colaborado en diversas actividades y proyectos de CénitS de forma activa.
- Se han conseguido importantes resultados en las tareas del proyecto de secuenciación genética, llegando a obtenerse la secuencia completa del genoma de dos pacientes anónimos con un porcentaje de similitud sobresaliente.

BECA DE FORMACIÓN EN GREEN IT

Becarios

José Casero Cantos. Máster en Ingeniería Informática.

Miguel Cerrato Martín. Máster en Ingeniería de Telecomunicaciones.

Descripción

Esta beca está enfocada a la investigación en eficiencia energética aplicada a la supercomputación, centrándose en tres campos de acción: sistemas, redes y explotación de recursos medioambientales.

En el ámbito de sistemas, el objetivo es comprobar la eficiencia de los elementos que componen la infraestructura IT de CénitS, desarrollar algún proyecto que optimice el consumo energético de los sistemas y estudiar la eficiencia de los protocolos a nivel de la infraestructura de red y las tecnologías existentes en el mercado actual.

La explotación de recursos medioambientales consiste en aplicar los medios naturales disponibles para realizar el enfriamiento de los equipos, reduciendo el consumo de energía y la emisión de dióxido de carbono.

La eficiencia energética supone un factor a tener en cuenta en todo momento a la hora del despliegue de cualquier sistema. La supercomputación de altas prestaciones es un campo donde es necesaria la optimización constante de los recursos. Es tal el volumen de consumo energético y emisión de dióxido de carbono, que es necesario tomar iniciativas para mejorar el problema.

Objetivos

- Detección de las características técnicas del CPD y su adecuación a las buenas prácticas aconsejadas por la organización *The Green Grid* que vela por el uso eficiente de las energías en entornos IT. Esto comprende instaurar un exhaustivo control de consumos mediante un protocolo de medida de consumos, para obtener determinada información que permita hacer previsiones de consumos tanto de la infraestructura IT como de los mecanismos de enfriamiento con los que cuenta el CPD.
- Desarrollar un estudio sobre la posible implantación de un sistema de refrigeración basado en *Free Cooling* (FCD), suponiendo que el CPD resida en la ciudad de Cáceres.
- Estudiar la eficiencia de código visto desde la determinación del lenguaje más conveniente hasta los métodos de eficiencia basados en el uso de determinadas instrucciones y sentencias de los lenguajes.

Objetivos alcanzados

- El sistema de control de consumo ha permitido generar unas estimaciones de consumo tanto de la infraestructura IT como de los mecanismos de enfriamiento del CPD.
- Mediante el estudio de las temperaturas de Cáceres en años anteriores se ha llegado a la conclusión de que sería posible la implantación de este sistema consiguiendo un ahorro energético considerable. La estimación media de horas de FCD se aproxima a los indicativos que da *The Green Grid* en su mapa de horas de FC.
- Valorando el lenguaje de programación, en supercomputación se obtienen ejecuciones más eficientes con problemas implementados de forma paralela mediante MPI. Los consumos en tiempo y memoria utilizando memoria compartida son menores, pudiendo ser una ventaja a costa de la imposibilidad de portar el código a otras máquinas.
- Respecto a la eficiencia en las redes de comunicación de CénitS, se ha elaborado un estudio sobre la posible implantación de nuevos estándares de eficiencia como el IEEE 802.3az *Energy-Efficient Ethernet* (EEE).
- En este campo, se está desarrollando un Trabajo Fin de Máster que trata de un middleware para la Eficiencia Energética en Computación de Alto Rendimiento.

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

V JORNADAS DE SUPERCOMPUTACIÓN Y AVANCES EN TECNOLOGÍA



Las V Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología se celebraron los días 19 y 20 de noviembre de 2012 en la Escuela Politécnica de Cáceres. La apertura se realizó a las 10:00 por parte de Teodomiro Cayetano López (Director General de Administración Electrónica y Tecnologías de la Información - Gobierno de Extremadura), Antonio Manuel Silva Luengo (Subdirector de Nuevas Tecnologías de la Escuela Politécnica de Cáceres - Universidad de Extremadura) y José Luis González Sánchez (Director General de la Fundación COMPUTAEX).

Las jornadas reunieron a más de 60 asistentes entre empresarios, investigadores y alumnos. El programa contó con 10 ponencias a lo largo de sus 15 horas de duración y una visita a las instalaciones de CénitS para conocer más de cerca el supercomputador LUSITANIA:

- *"High Performance Cloud Computing: Supercomputación en Nube"*. José Luis González Sánchez (CénitS, Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación).
- *"El CESCA, más allá de la supercomputación"*. Miquel Huguet Vilella (CESCA, Centro de Servicios Científicos y Académicos de Cataluña).
- *"Programación de GPUs y productividad en el desarrollo de software"*. Manuel Arenaz Silva (Universidad de La Coruña).
- *"Investigaciones computacionales de estructura y reactividad"*. Pedro Cintas Moreno (Universidad de Extremadura).
- *"Profesionales de la Informática en el siglo XXI: ¿Vuelta a los Data Centers?"*. Alfonso Gazo Cervero (CPIIEX, Colegio Profesional de Ingenieros en Informática de Extremadura).
- *"Supercomputación aplicada a la ingeniería"*. César Gómez Martín (CénitS).
- *"Computación a bajo coste. Procesamiento con ARM"*. Héctor Orón Martínez (Collabora).
- *"Soluciones para Entornos de HPC"*. Abel Francisco Paz Gallardo (CETA-CIEMAT, Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas).
- *"Eficiencia energética en las tecnologías de la información y comunicaciones"*. José Alberto Hernández Gutiérrez (Universidad Carlos III de Madrid).
- *"Baja Latencia y Escalabilidad en los cluster MPI"*. Ignacio Eiguren Larraondo (HP, Hewlett-Packard).



La Fundación comenzó la difusión del evento el día 24 de octubre a través de su página web oficial y de los medios sociales a su disposición, obteniendo un notable impacto en los distintos medios (sala de prensa del Gobierno de Extremadura, RTVE, Canal Extremadura, El periódico Extremadura, EuropaPress, etc.).

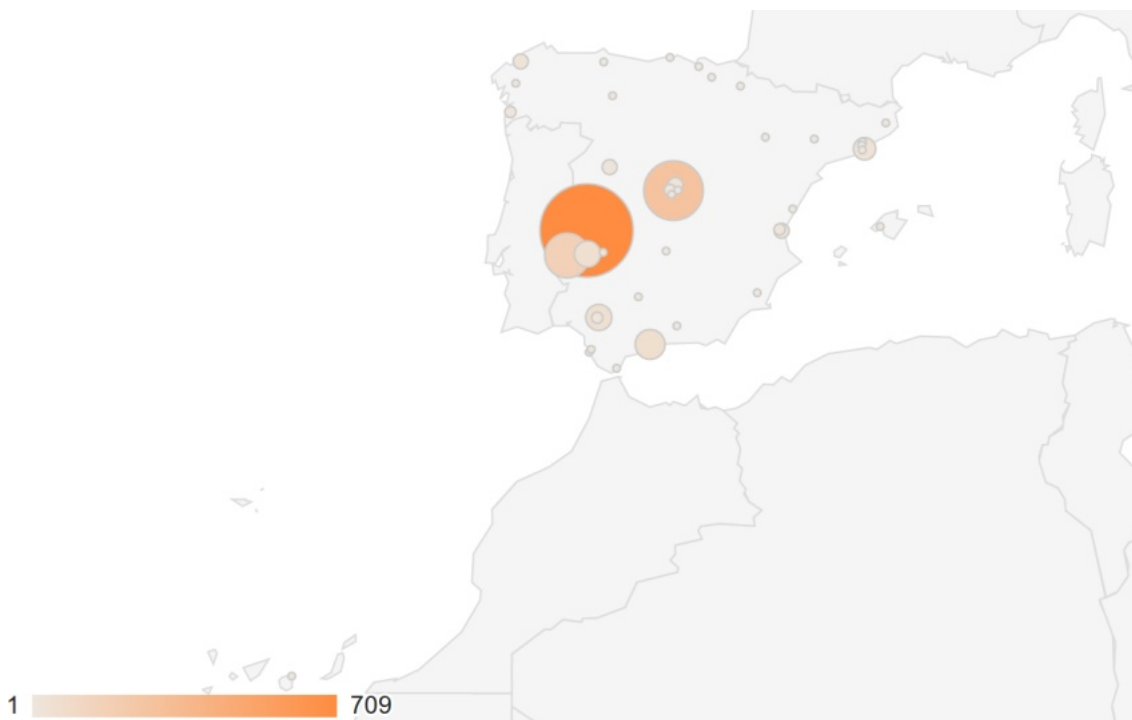
TELEVISIÓN	RADIO	PRENSA ESCRITA	PRENSA DIGITAL
1	2	1	31

La repercusión alcanzada en las redes sociales fue la siguiente:

	FACEBOOK	TWITTER	LINKEDIN
Envíos propios	7	32	6
Interacciones	55	61	9

El tráfico generado con la difusión del evento supuso un 11,27% del tráfico anual de la web de la fundación. Los datos más relevantes se muestran en la siguiente tabla:

PÁGINAS VISTAS	VISITAS	VISITAS NUEVAS (%)	VISITAS HABITUALES (%)
6.067	1.532	60,97	39,03



En la web oficial de la fundación se encuentran disponibles las presentaciones utilizadas por los ponentes y las ponencias en formato vídeo.



COLABORACIÓN EN LA ORGANIZACIÓN Y PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
19/04/12	CCMI, Cáceres	Seminario Internacional sobre TIC & Desarrollo Económico Inteligente	Colaboradores
23/05/12 25/05/12	Valencia	6th Euro American Conference on Telematics and Information Systems	Ponentes
11/06/12	CETA-Ciemat, Trujillo	I Jornadas de Computación Distribuida Inteligente y Sistemas Complejos	Ponentes
21/06/12	Hotel Badajoz Center, Badajoz	Los sistemas regionales de innovación: La estrategia de Extremadura	Grupo de trabajo
18/07/12 20/07/12	Cartagena	W-Fierro 2012	Ponentes
24/09/12 27/09/12	Nevers, Francia	ENGAGE Kick off meeting	Grupo de trabajo
02/10/12	INTA, Madrid	HP-CAST Ibérica 2012	Ponentes
07/11/12 09/11/12	Lisboa, Portugal	IBERGRID '12. 6th Iberian Grid Infrastructure Conference.	Ponentes
15/11/12	Fundecyt, Badajoz	VI Simposio Transfronterizo de Energías Renovables	Ponentes
19/11/12 20/11/12	Escuela Politécnica, Cáceres	V Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología	Organizadores Ponentes
21/11/12	Madrid	Data Centers 2012: Eficiencia, Disponibilidad y Seguridad	Ponentes

ASISTENCIA A CURSOS Y JORNADAS

FECHA	LUGAR	NOMBRE
08/03/12	CATAA, Castelo Branco, Portugal	Presentación del Proyecto Red de Investigación Transfronteriza de Extremadura, Centro y Alentejo
21/03/12	Centro Tecnológico FEVAL, Don Benito	Foro de Ideas TICAUD
23/03/12 25/03/12	Escuela Politécnica, Cáceres	Curso de ITIL Foundations
03/05/12	Fundecyt, Badajoz	Proyectos Europeos, una oportunidad. Implicaciones, recomendaciones e impacto de la participación
08/05/12	CCMI, Cáceres	Sesión informativa: Cómo financiar la innovación en tu empresa
17/05/12	Biblioteca Regional, Badajoz	Conferencia: "El agua subterránea, no se ve pero está presente"
23/05/12	IFEBA, Badajoz	Jornada técnica de seguimiento de proyectos de cooperación en la EUROACE
24/05/12	Los Santos de Maimona, Badajoz	2ª Conferencia Internacional de Espacios Sociales de Innovación
25/05/12	Plasencia	Reunión de Asamblea General de la Asociación Extremeña de Fundaciones
28/05/12	Mérida	VII itSMF España. Congreso Académico Internacional en Gobierno y Gestión del Servicio de TI
31/05/12	Mérida	Jornada AENOR: La certificación en Extremadura
05/06/12 07/06/12	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	XXXIII Grupos de Trabajo RedIRIS
21/06/12	Madrid	Foro BYOD: Tendencias, retos y oportunidades
29/06/12 30/06/12	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	II Jornadas de Seguridad Informática del CPIIEx
11/09/12	Mérida	Reunión Agenda Digital de Extremadura
12/09/12 13/09/12	Málaga	Jornada Red Española de Supercomputación
21/09/12	Cáceres	Apertura curso de la Universidad de Extremadura
03/10/12	Escuela Superior de Hostelería, Mérida	Oportunidades de financiación para la I+D+i en el FP7
06/10/12	PCTEx, Badajoz	5º Bellota Valley
17/10/12	INIA, Elvas, Portugal	Comité de coordinación de socios de RITECA II
22/10/12	IPROCOR, Mérida	I Jornada de formación de grupos de trabajo para presentar propuestas al Espacio Europeo de investigación
28/10/12	Barcelona	Jornada inLAB
31/10/12	Fundecyt, Badajoz	I Jornada informativa sobre convocatorias europeas de la red RITECA

31/10/12	Almendralejo, Badajoz	Presentación Plan de Sistemas de Información de Extremadura
06/11/12	Facultad de Ciencias Empresariales, Badajoz	Jornada sobre la 2ª convocatoria de proyectos del POCTEP del Gobierno de Extremadura
07/11/12	Cáceres	Foro Emprende
13/11/12	Badajoz	Jornada ROT - Red de Observatorios Territoriales
16/11/12	Cáceres	Reunión de Asociación Española de Fundaciones
29/11/12	Edificio Gadiana (UEx), Badajoz	Seminario Novedades en Análisis Genómico
11/12/12	IPROCOR, Mérida	II Jornada de formación de grupos de trabajo para presentar propuestas al Espacio Europeo de investigación
11/12/12	León	Jornada de supercomputación
18/12/12	Madrid	Curso CEOE: Iniciación al logro

DIFUSIÓN

A lo largo del año se han recibido en el Centro más de 300 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.

También se presentó la Memoria Anual de 2011, que puede consultarse en la web oficial de la Fundación.



RECURSOS

RECURSOS

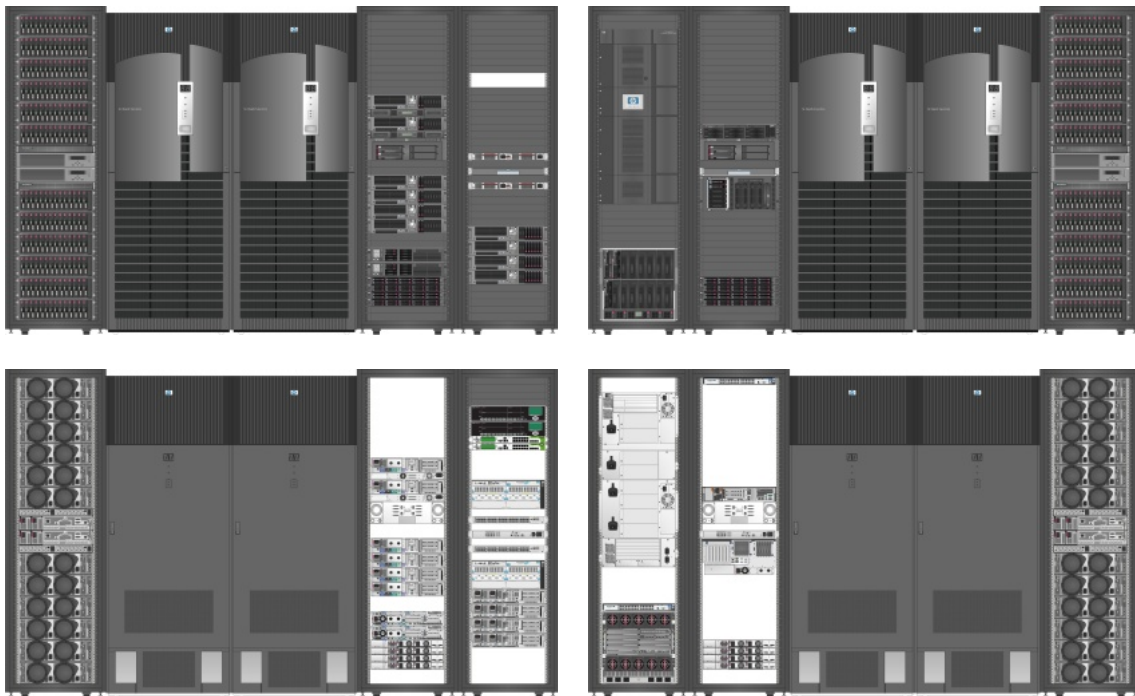
La Fundación COMPUTAEX tiene como objetivo básico la creación, explotación y gestión de CénitS, el Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación, cuyo objeto es fomentar, difundir y prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a las comunidades investigadoras 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.

HARDWARE

El núcleo principal del supercomputador LUSITANIA está compuesto de dos servidores HP Integrity SuperDome que ofrecen un total de 256 núcleos de procesamiento con 2 TB de memoria RAM compartida para actividades de computación de alto rendimiento. Además de este potente recurso, CénitS cuenta con un conjunto de servidores que soportan el resto de funcionalidades destinadas principalmente a proporcionar el entorno de trabajo óptimo para que los usuarios desarrollen su trabajo.

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 principales.
- Servidores auxiliares.
- Infraestructura de almacenamiento.
- Infraestructura de red.
- Sistema de copias de seguridad.



SERVIDORES PRINCIPALES

La base del supercomputador LUSITANIA está formada por dos servidores idénticos HP Integrity SuperDome SX2000. Estos dos servidores cuentan, cada uno, con 64 procesadores Intel Itanium 9140M Dual-Core a 1.6GHz (128 procesadores lógicos por servidor). Asimismo, cada servidor está equipado con 1 TB de memoria RAM principal distribuida de manera uniforme entre las 16 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 SuperDome son capaces de conectarse entre sí gracias a las tarjetas 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 interconectan a las redes de servicio, usuarios y los dispositivos de E/S 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 y el resto del espacio está configurado en RAID6 + RAID 0 que conforma una única unidad de 3 TB. 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 sola máquina de memoria compartida de alto rendimiento y posibilita la ejecución de tareas con grandes demandas de almacenamiento, utilización de memoria principal y capacidad de cómputo, conformando el núcleo principal de la potencia de cálculo del supercomputador LUSITANIA.

SERVIDORES AUXILIARES

La necesidad de uso de 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 centralizada 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.

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 se describirá en la sección de Almacenamiento.

Servidores del Sistema de Cloud Computing

Un servidor IBM xSeries 345 equipado con dos procesadores Intel Xeon Dual Core y 2,5 GB de memoria RAM, soportando la infraestructura de gestión 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 albergar servicios independientes, optimizando el uso de los recursos existentes en LUSITANIA.

Dos servidores HP ProLiant BL465c Gen8 Server Blade con procesadores HP BL465c Gen8 AMD Opteron 6276 (2.3GHz/16-core/16MB), 256 GB de memoria RAM por servidor y cuatro discos SAS de 300GB (2 por servidor).

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.

Unidades de procesamiento gráfico (GPUs)

Dos servidores HP ProLiant WS460c G6 Workstation Blade con procesadores HP BL460c G7 Intel Xeon E5645 (2.40GHz/6-core/12MB), 96 GB de memoria RAM por servidor, cuatro discos SAS de 300 GB y dos NVIDIA Tesla M2070Q (448 cuda cores y 6GB GDDR5).

ALMACENAMIENTO

El sistema de almacenamiento se compone de dos equipos HP StorageWorks 8100 Enterprise Virtual Array que proporcionan 265 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:

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

Esta distribución de discos permite disponer de la suficiente flexibilidad para afrontar tareas que requieren un alto rendimiento de E/S (utilización de 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 discos de tecnología FATA de elevada capacidad).

El almacenamiento se distribuye a los servidores 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 EVA8100.

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 histórico de los datos con el fin de poder recuperar información pasada, eliminada por error o de estudios previos que se desecharon y 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 ejecutándose 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 en cinta diariamente de todos los servidores y de los datos almacenados por los usuarios del supercomputador LUSITANIA.

RED

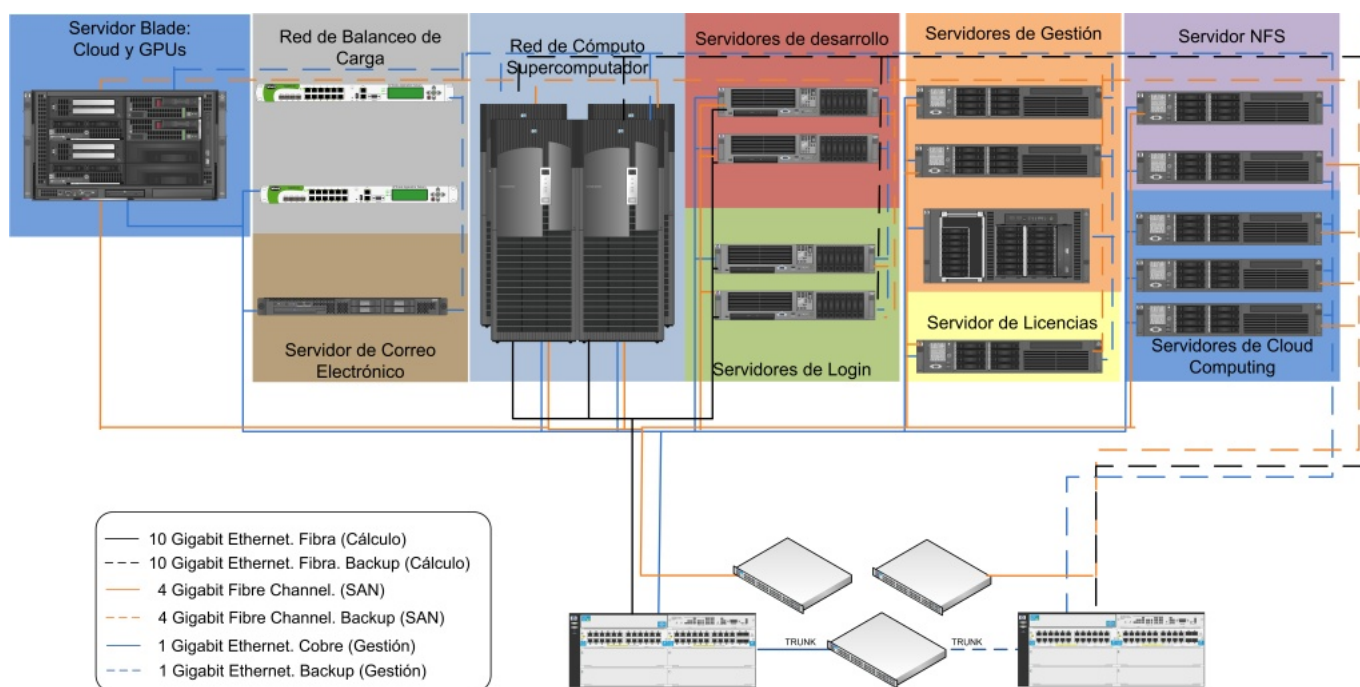
Una infraestructura de las características del supercomputador LUSITANIA requiere, para su máximo aprovechamiento, una conectividad de red con unas prestaciones similares al resto de las instalaciones.

La conectividad del Centro con el exterior se resuelve a través de la Red Científico Tecnológica 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. Cuentan con 48 puertos ethernet y 4 fiber channel cada uno.
- 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.

La siguiente figura muestra la interconexión de todos los servidores del cluster LUSITANIA :



Como se puede observar, la arquitectura se basa en dos switches de core que interconectan toda la electrónica de red mediante 1Gb Ethernet para la administración de los equipos y el acceso de los investigadores al cluster LUSITANIA para poder ejecutar sus trabajos.

Por otro lado, un gran número de equipos usa tecnología Fibre Channel para el sistema de intercambio de ficheros por red desde las cabinas de almacenamiento. De esta manera, en cualquier equipo del cluster, los ficheros de los usuarios estarán disponibles para su ejecución en el cluster o para su análisis.

Por último, los nodos de cómputo del cluster están conectados por una fibra de 10 Gb que permite una comunicación muy rápida entre los nodos para el cálculo intensivo, principal labor para la que el cluster fue concebido.

Debido a los requerimientos de diseño, todas las comunicaciones están redundadas, de manera que si se produce algún problema en las comunicaciones, se contará con un camino de respaldo para continuar en funcionamiento.

CONSUMOS 2012

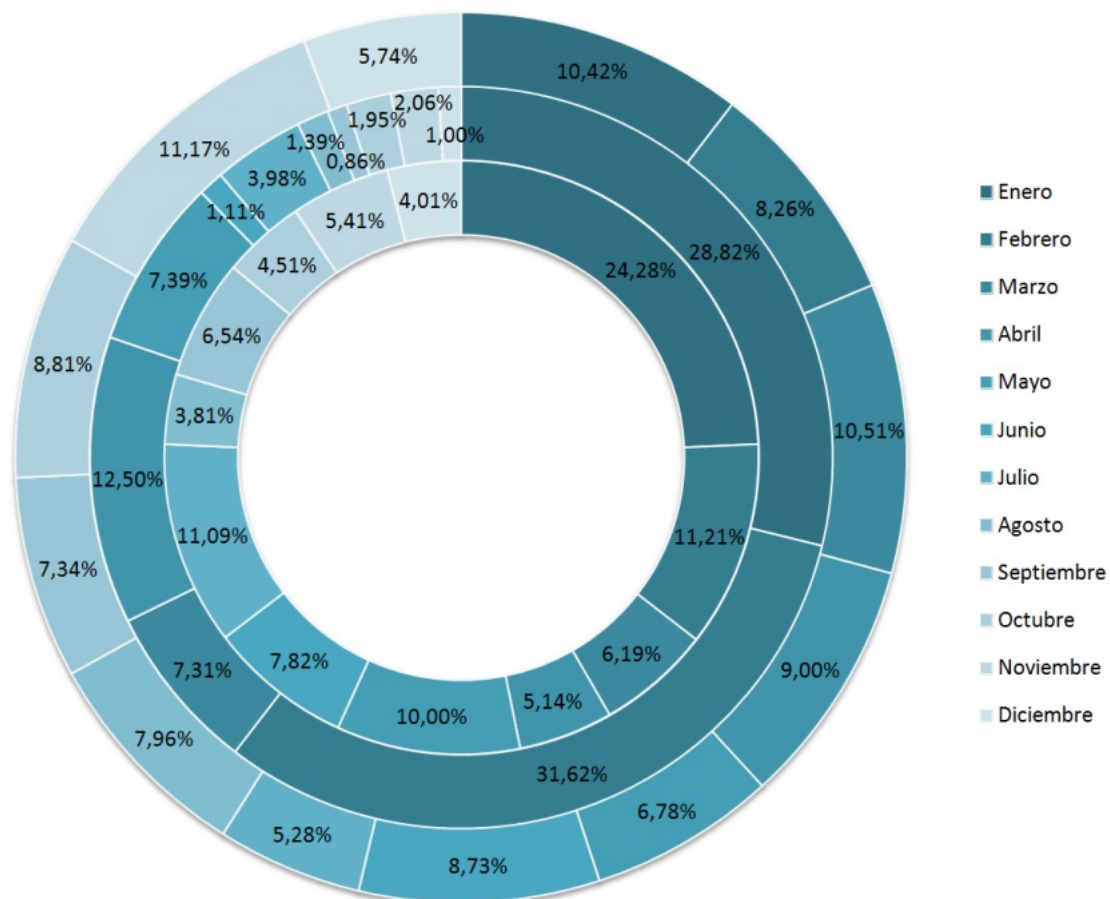
USO DE RECURSOS

Durante el año 2012, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura hardware de LUSITANIA. A continuación, se muestran las gráficas relacionadas con el consumo de los recursos en los nodos principales, que son los que soportan la mayoría de la carga de computación del centro.

Este año se han ejecutado un total de 13.377 trabajos de usuario, divididos en dos categorías:

- **De cómputo:** 10.807. Se utilizan para generar resultados para su posterior análisis.
- **De control:** 2.570. Se utilizan para optimizar el entorno de ejecución de cada trabajo.

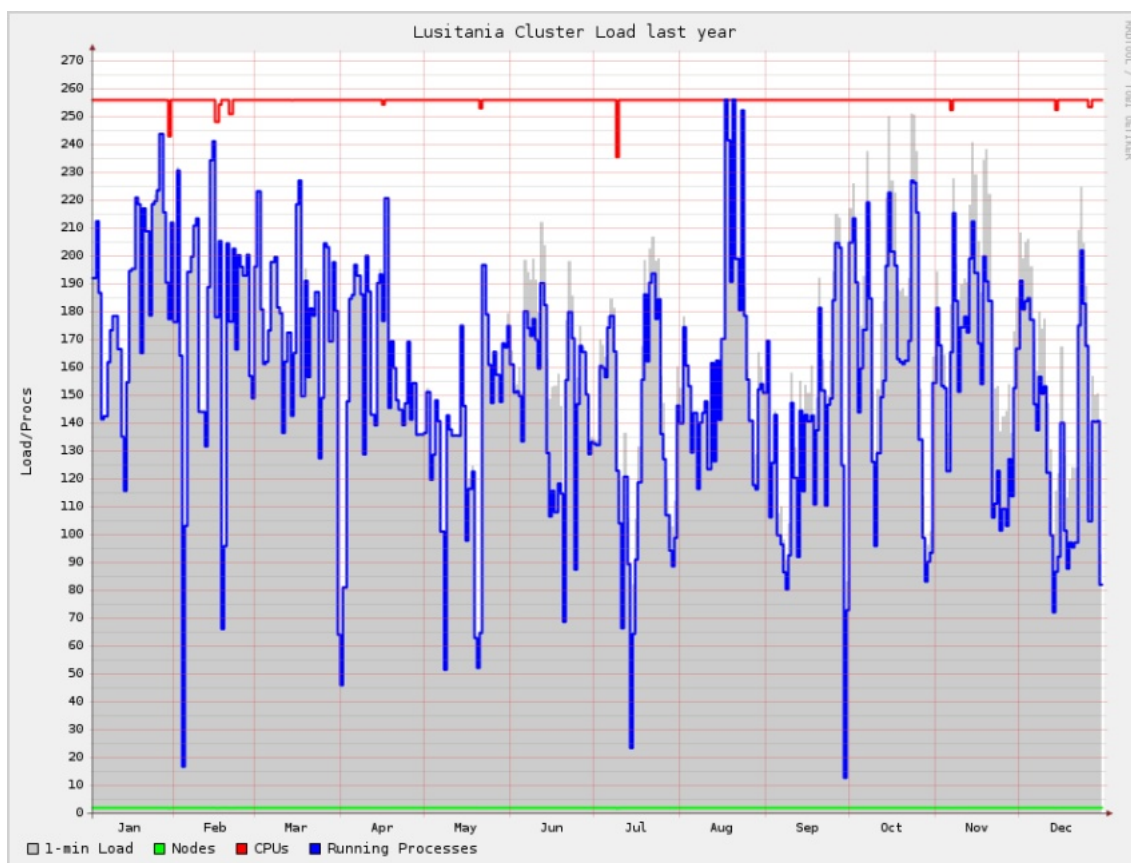
En la siguiente gráfica se muestra la relación mensual de los trabajos ejecutados y el uso de CPU. La circunferencia interna representa los trabajos de control, la circunferencia central, los trabajos de cómputo y la circunferencia externa, el uso de CPU.



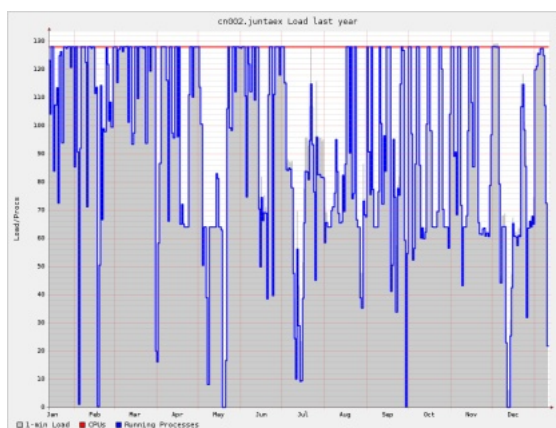
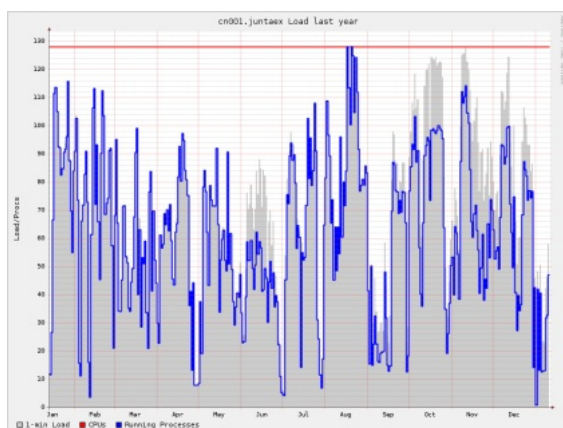
De la figura anterior se puede extraer que existen trabajos con necesidades muy dispares, concentrándose durante los primeros meses del año aquellos trabajos que demandan menos tiempo de ejecución y menos recursos, mientras que a final de año la tendencia se invierte.

CARGA DEL SISTEMA

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 trabajos ejecutados. Las bajadas observadas en los meses de febrero, julio y septiembre, se deben a tareas de mantenimientos programadas por el equipo técnico de CénitS para garantizar el correcto funcionamiento del cluster LUSITANIA.

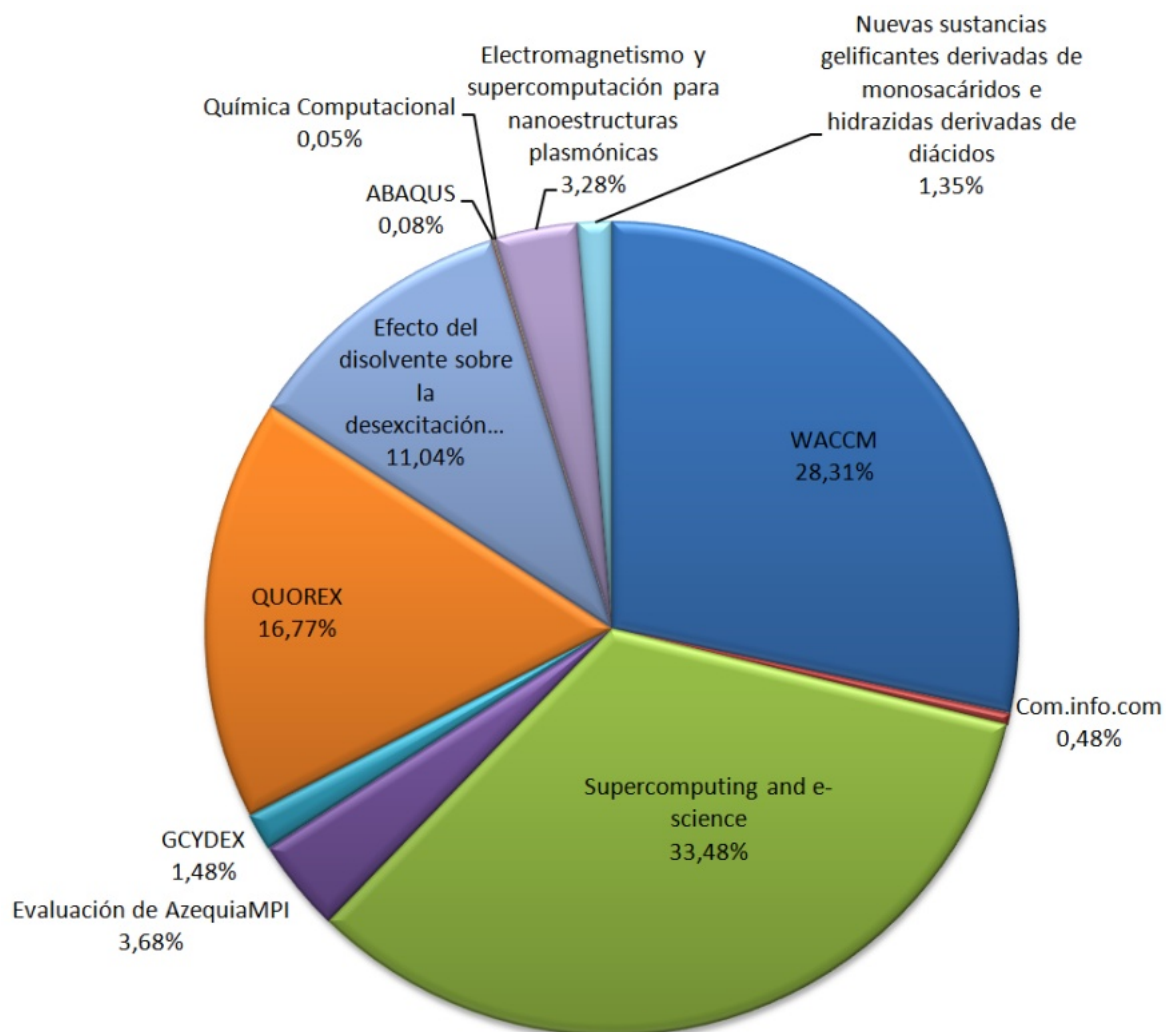


De las siguientes figuras es destacable la carga del nodo 2 del cluster (imagen derecha), donde se puede apreciar el intenso uso de los recursos existente en dicho nodo, debido a que aloja las tareas de usuario que más recursos demandan. Las variaciones de los valores se deben nuevamente a las tareas realizadas por el software de gestión y a las tareas de mantenimiento como ya se explicó en la gráfica anterior.



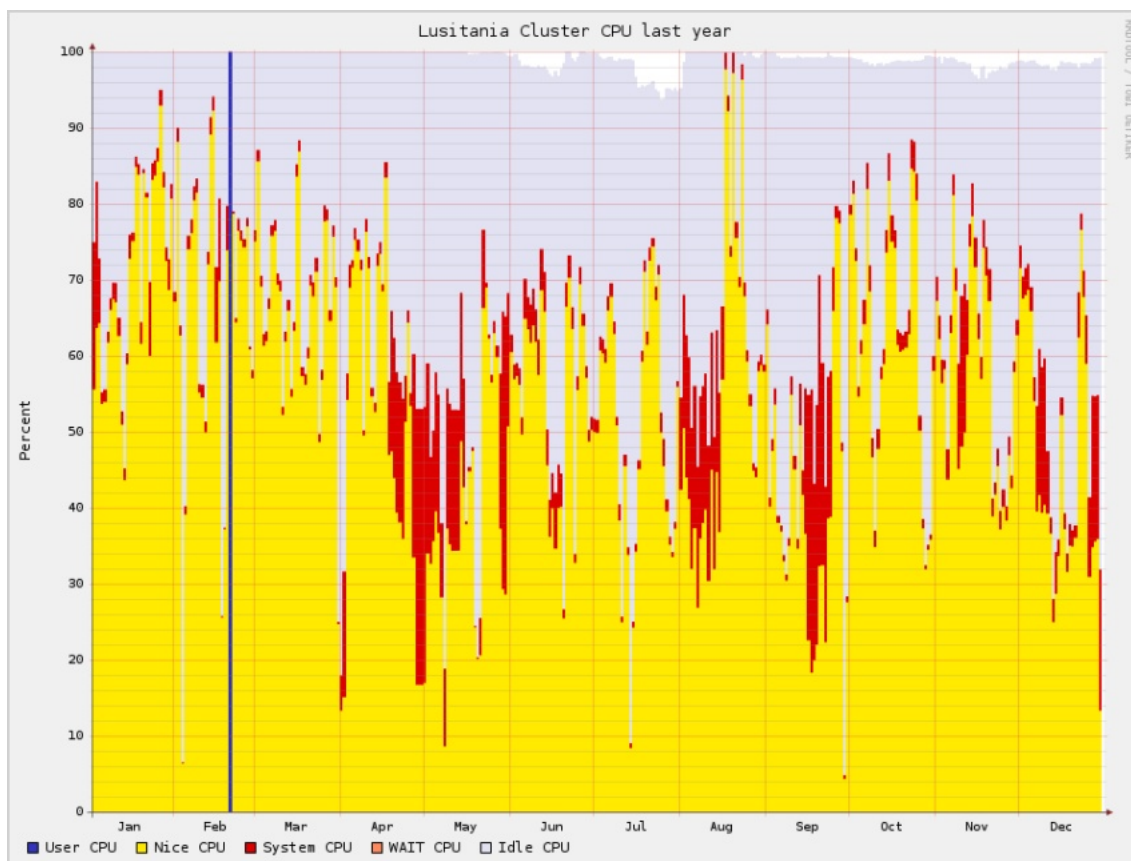
Uso de CPU

La gráfica que se presenta a continuación indica la relación del consumo anual de CPU de LUSITANIA de los proyectos de investigación que más recursos emplean.

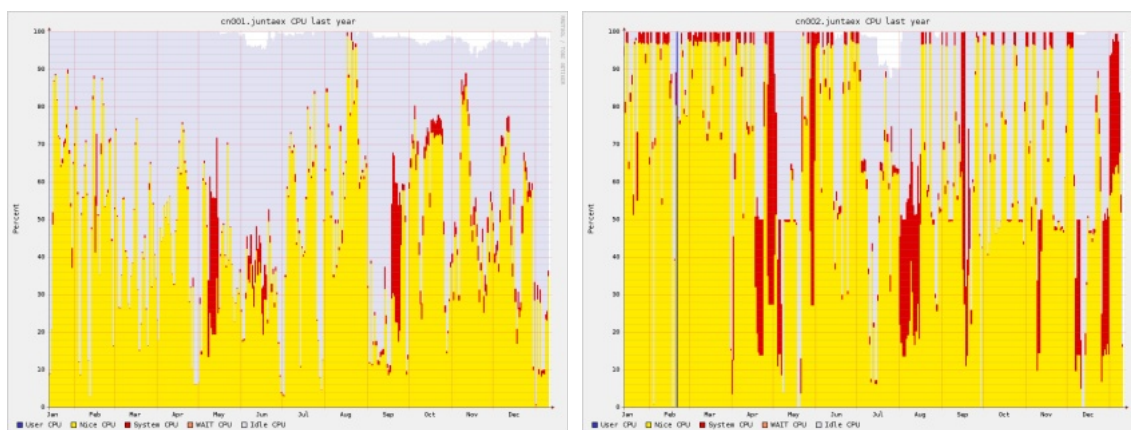


Como ya se ha podido observar en las figuras del apartado anterior, el motivo de la aparición de oscilaciones en las gráficas, coincide con los inicios y fin de ejecución de los distintos trabajos y las tareas de adaptación del entorno, periodo en el que se realizan tareas de preprocesamiento y postprocesamiento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

La línea azul que aparece en el mes de febrero corresponde a una prueba de rendimiento que realizó uno de los investigadores sobre el nodo de cómputo 2, mediante un envío masivo de hilos de ejecución dentro de un único trabajo de usuario.

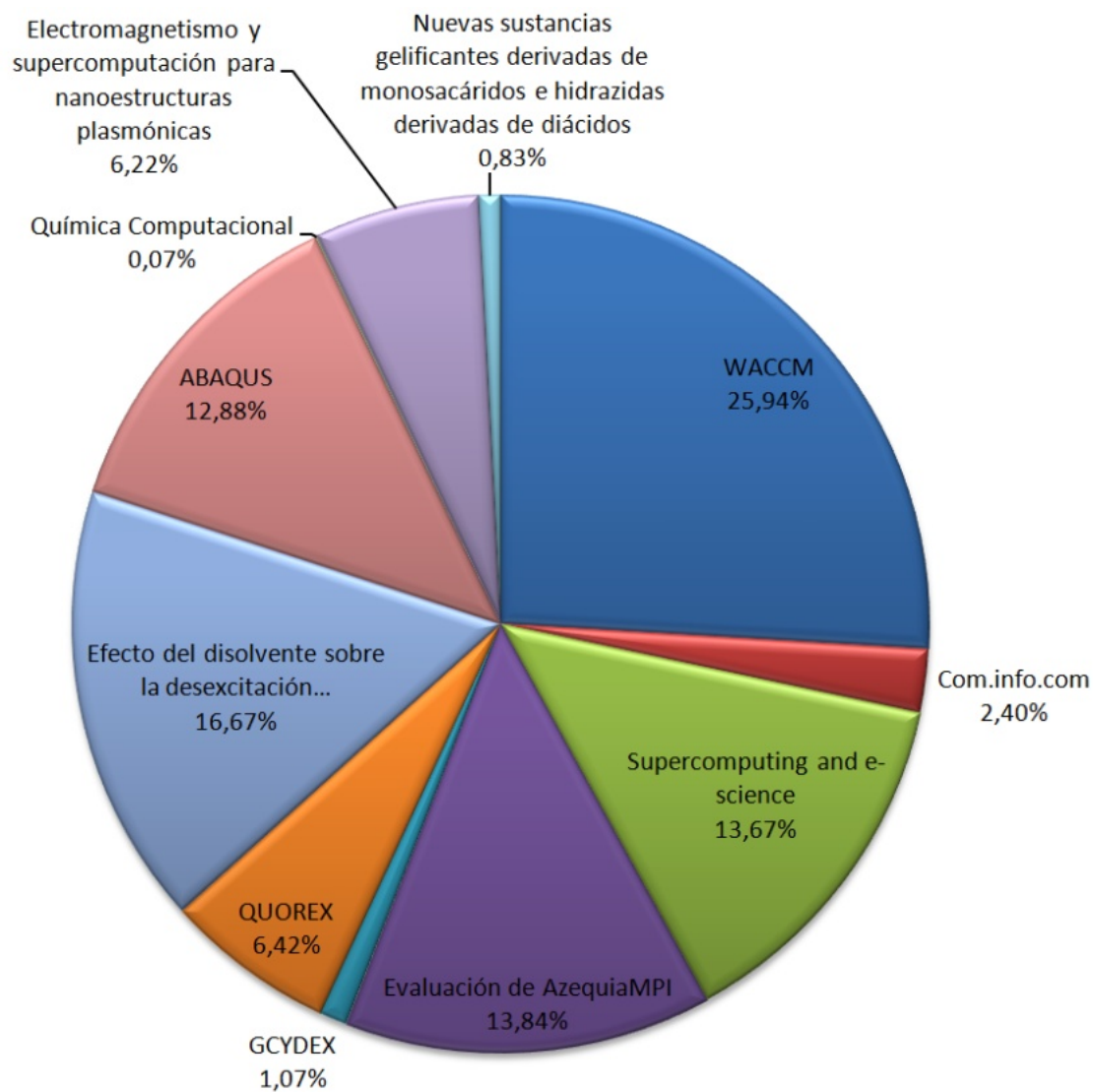


En este apartado vuelve a ponerse de manifiesto el uso intensivo de recursos existente en el nodo 2 del cluster (imagen derecha), debido a la ejecución de las tareas de usuario que más recursos demandan. Las variaciones de los valores se deben nuevamente a las tareas realizadas por el software de gestión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

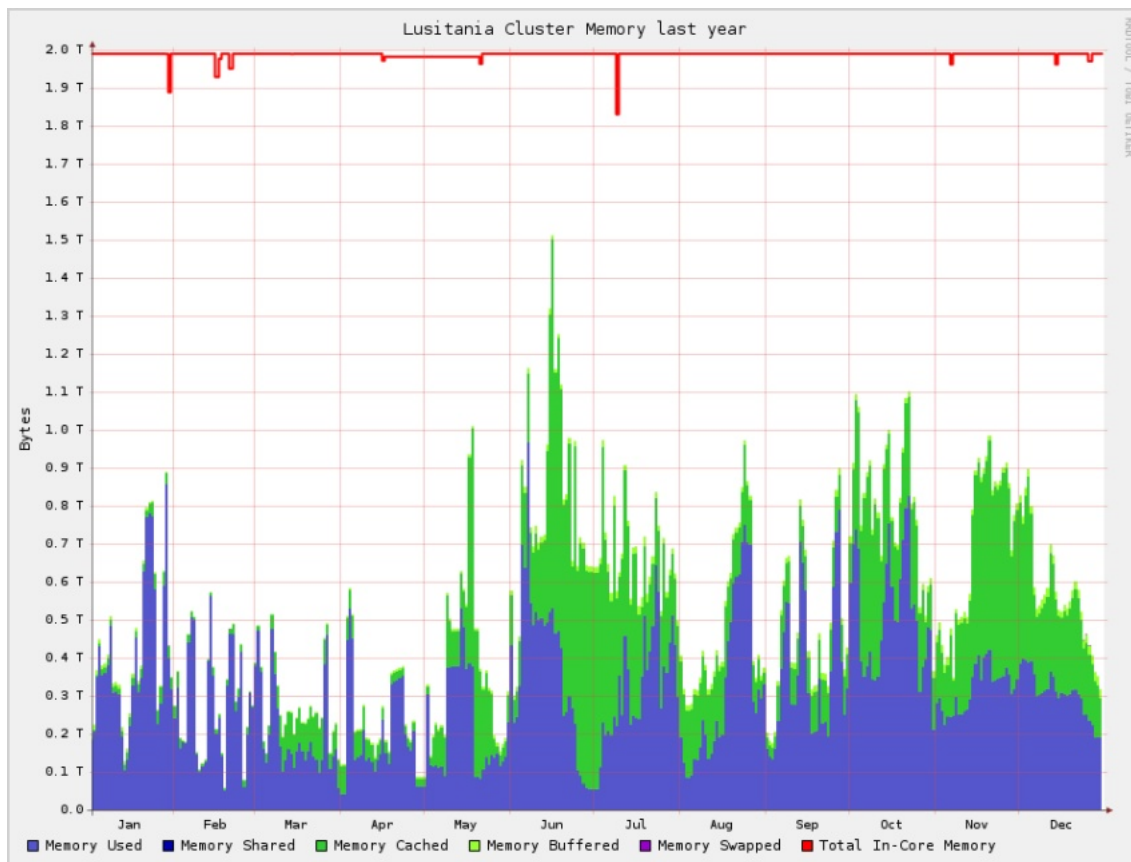


USO DE MEMORIA PRINCIPAL

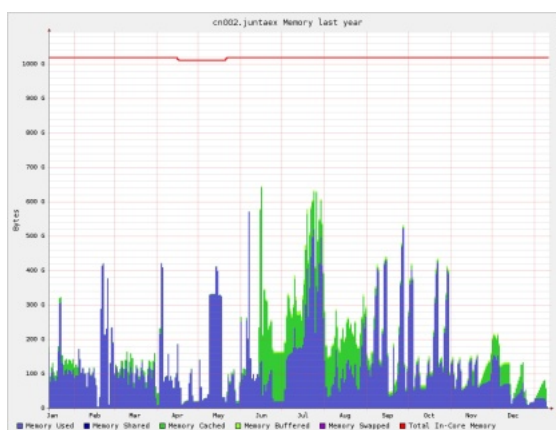
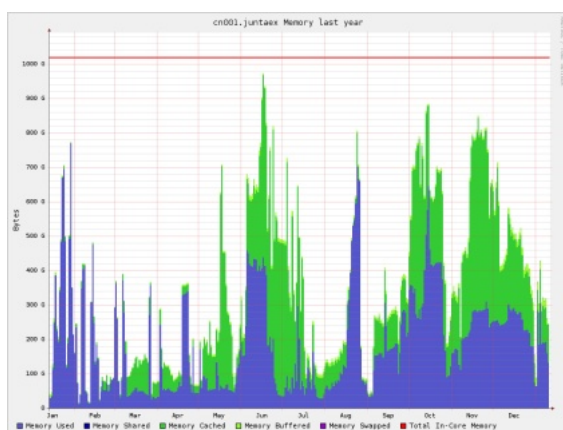
La gráfica que se presenta a continuación muestra la relación de consumo anual de memoria RAM de LUSITANIA de los proyectos de investigación que más recursos emplean.



Como se puede observar, no se alcanzan los límites físicos existentes en el cluster pese a su consumo bastante elevado. Este hecho se debe a que en el ejercicio 2012, 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.

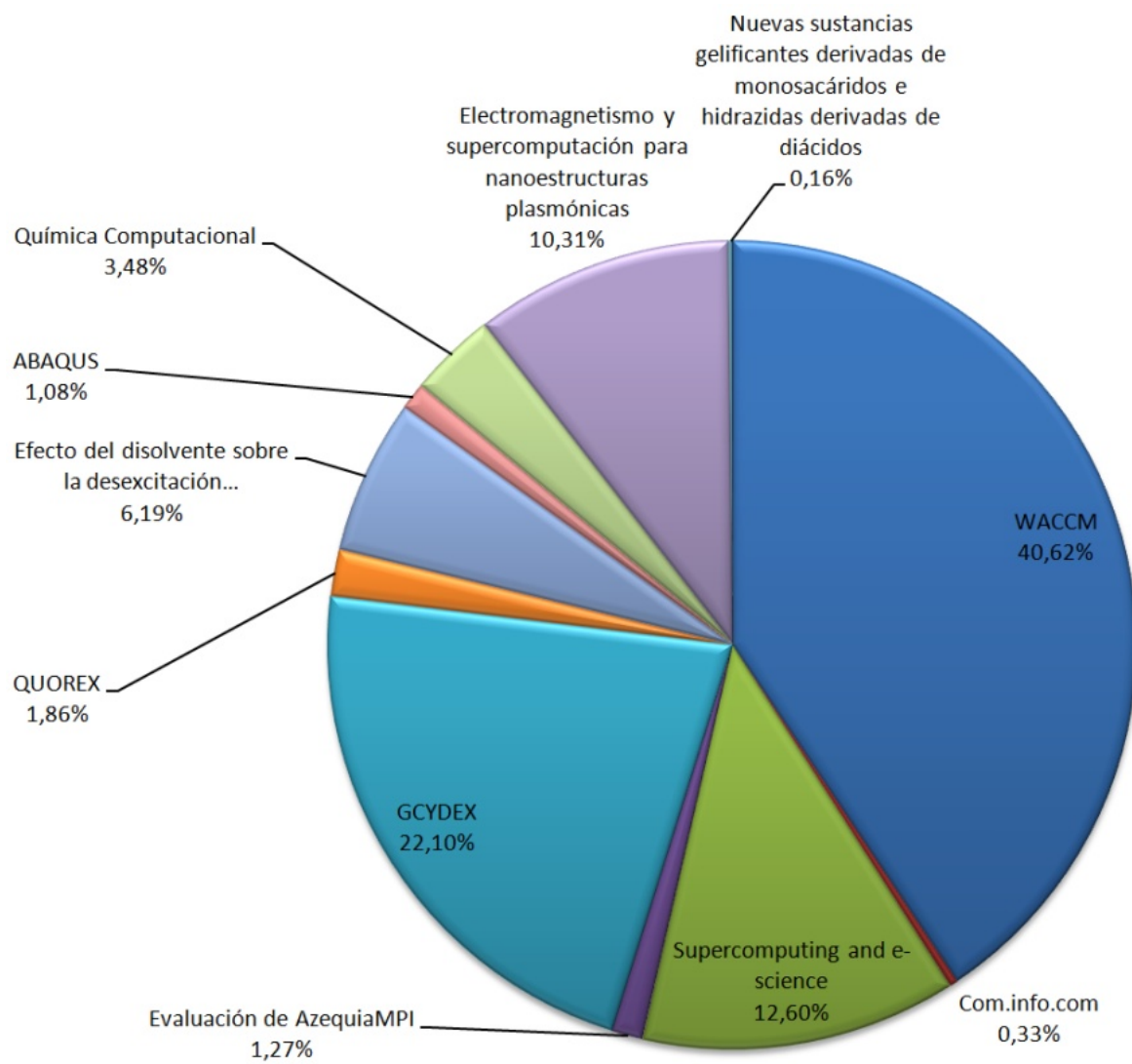


En este apartado, a diferencia de los dos anteriores, hay que destacar el uso de la memoria RAM en el nodo 1 del cluster LUSITANIA (imagen izquierda). En la gráfica se puede apreciar una gran oscilación en el consumo de los recursos, debido a la naturaleza multidisciplinar de las tareas que se ejecutan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



USO DE ALMACENAMIENTO

La gráfica que se presenta a continuación muestra el volumen en disco de los proyectos de investigación que más recursos emplean.

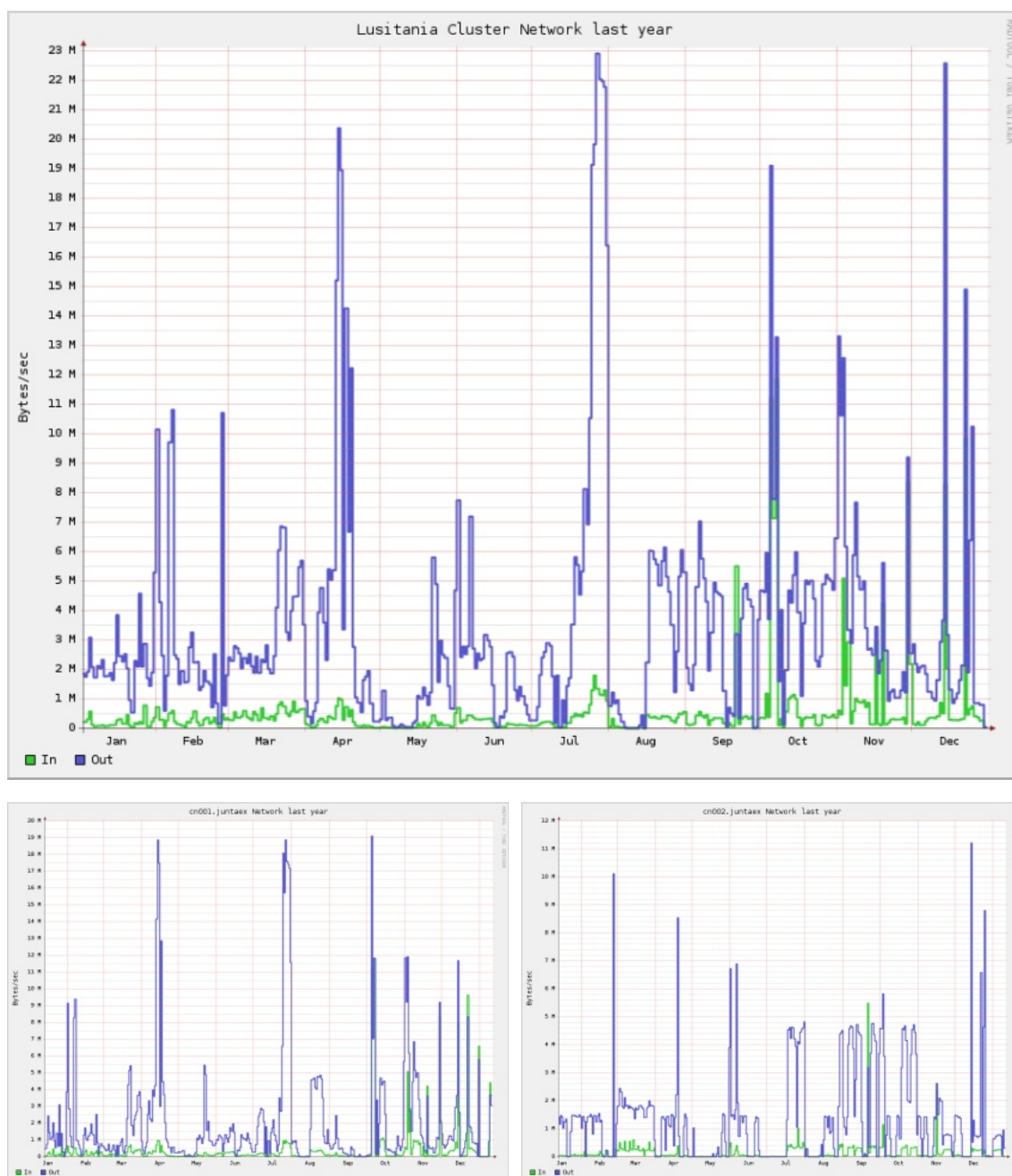


USO DE RED

Las comunicaciones en LUSITANIA se generan principalmente entre los nodos de cómputo y los sistemas de ficheros, que se encuentran ubicados en los sistemas de almacenamiento en disco.

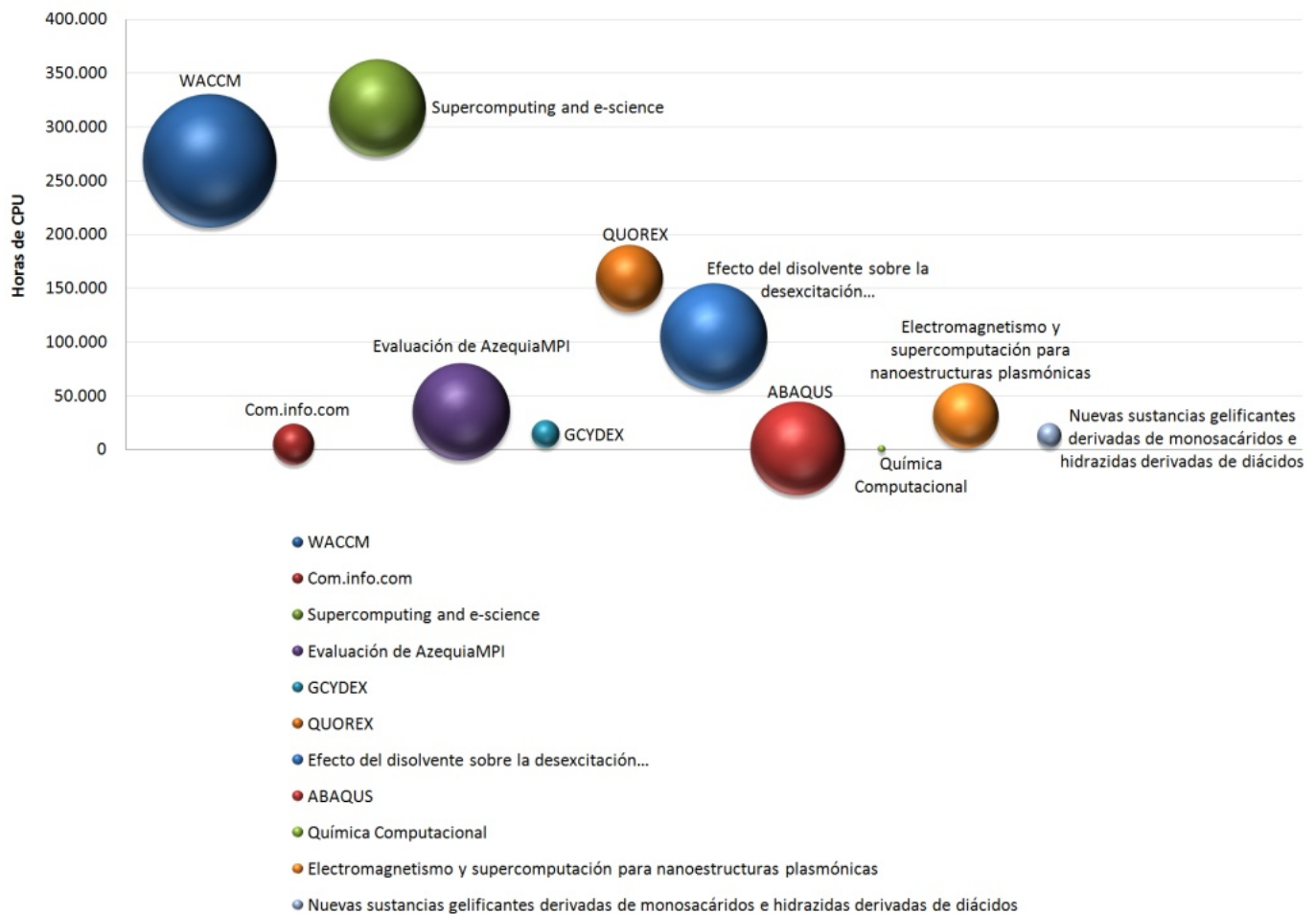
Cuando los usuarios ejecutan sus trabajos en los nodos de cómputo, se genera un tráfico de entrada consistente en mover la información desde la red de almacenamiento a los nodos de cómputo. Una vez se han ejecutado los trabajos de usuario, se genera un tráfico saliente, que devuelve los datos generados al espacio de usuario. Toda esta transferencia de información se realiza a través de la red de cómputo.

En la siguiente gráfica se muestra la relación del tráfico de E/S de la red de cómputo.



RELACIÓN DE RECURSOS POR PROYECTO

A continuación se muestran las gráficas que relacionan los distintos consumos de los proyectos que más recursos emplean, agrupados por proyecto.



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

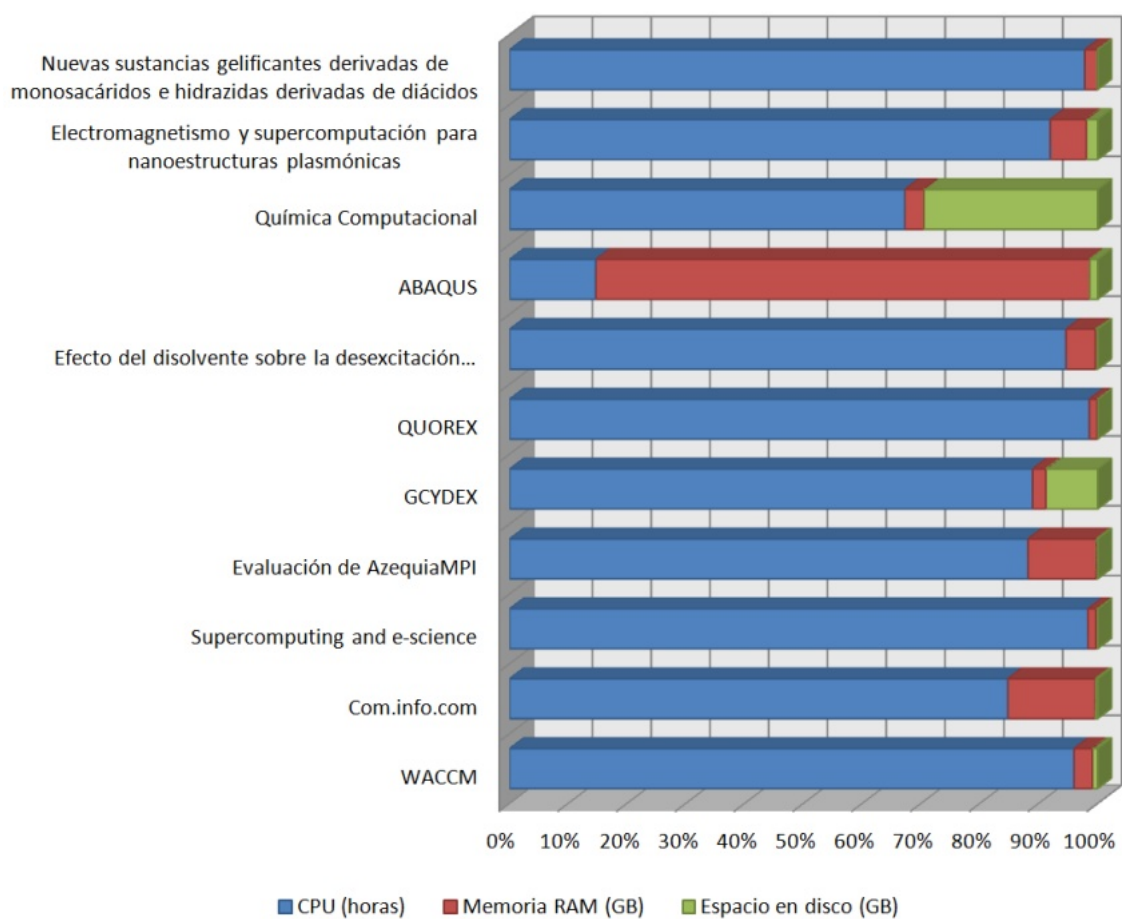
El volumen de las esferas indica el total de memoria RAM utilizada por cada proyecto durante todo el tiempo en que ha estado consumiendo CPU.

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 gráfica que se muestra en la siguiente página 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.



USUARIOS

Durante el año 2012, técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en el supercomputador LUSITANIA. Más de una treintena de 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 individualizado 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 suficientes 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 transmitida 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 vuelto a reducir aún más que en el año anterior, resolviéndose un total de 21 incidencias de usuario.

SOFTWARE

LISTADO DE HERRAMIENTAS

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

APLICACIÓN	SERVIDORES	VERSIÓN
SISTEMAS OPERATIVOS		
Suse Linux Enterprise Server	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	10 SP1
Microsoft Windows Server	SMS, Licencias, Gestión2, Watson	2003 R2 Enterprise 2008 R2 OLP
Debian GNU/Linux	Máquinas virtuales	Squeeze Wheezy
LIBRERÍAS		
Intel MPI Library	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	3.2
Intel Math Kernel Library (MKL)	login1, login2, dev1, dev2, cn002 cn001	10.1.0.015, 10.1.1.019, 10.2.5.035, 10.2.6.038 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
Meep	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
Platform MPI	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	2.3.1
	login1, login2, dev1, dev2	2.2.7
	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	8.0
COMPILADORES		
Intel C++ Compiler	login1, login2, dev1, dev2, cn001, cn002	11.1.064, 11.1.073
Intel Fortran Compiler	login1, login2, dev1	10.1.025, 11.0.074, 11.1.064
	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	Máquina virtual	7.13
Gaussian	dev1	9 Rev.C01
Citrix XenServer Advanced Edition	Newton, Pascal	6.1
Abaqus	cn001, cn002	6.11
Comsol Multiphysics	Máquina virtual	4.3
WACCM	cn001, cn002	4.0
Genotyping Console	Máquina virtual	4.1.3.840
Chromosome Analysis Suite	Máquina virtual	CytoB-N1 .2.2.271
Lifescape	Máquina virtual	2.5.1

SISTEMAS OPERATIVOS

Suse Linux Enterprise Server

Es un sistema operativo basado en Linux desarrollado por SUSE. Está diseñado para servidores, mainframes y estaciones de trabajo. Las versiones principales son liberadas en un intervalo de 3-4 años, mientras que las versiones menores (llamados service packs) se liberan aproximadamente cada 18 meses.

Licencia: GNU GPL.

Microsoft Windows Server

Es una edición del sistema operativo lanzada por Microsoft Corporation, diseñada para servidores, mainframes y estaciones de trabajo.

Licencia: Microsoft CLUF (EULA)

Debian GNU/Linux

Es un sistema operativo libre, desarrollado por más de mil voluntarios alrededor del mundo, que colaboran a través de Internet.

La dedicación de Debian al software libre, su base de voluntarios, su naturaleza no comercial y su modelo de desarrollo abierto la distingue de otras distribuciones del sistema operativo GNU.

Licencia: GPL.

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 Microsoft 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 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.

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 "multi-threaded". 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, procesamiento 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 varios de 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 dinámico muy potente y versátil. 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.

HERRAMIENTAS

Intel Debugger

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

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, se pueden 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 molecular 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.

Citrix XenServer

Citrix XenServer es una plataforma de virtualización de servidores administrada, completa e integrada al potente hipervisor Xen. La tecnología Xen es reconocida como el software de virtualización más rápido y seguro de la industria. XenServer está diseñado para una gestión eficiente de los servidores virtuales de Windows® y Linux®, y proporciona una consolidación rentable de los servidores y continuidad del negocio.

Licencia: Citrix

Abaqus

Es una suite de software para el análisis de elementos finitos y de ingeniería asistida por ordenador, lanzado originalmente en 1978. El nombre y el logotipo de este software se basan en la herramienta de cálculo ábaco.

Licencia: Propietaria.

Comsol Multiphysics

Es un paquete de software de análisis y resolución por elementos finitos para varias aplicaciones físicas y de ingeniería, especialmente fenómenos acoplados, o multifísicos. También ofrece una amplia y bien gestionada interfaz a MATLAB y sus toolboxes que proporcionan una amplia variedad de posibilidades de programación, preprocesado y postprocesado.

Licencia: Propietaria.

WACCM

Es un completo modelo numérico que abarca el rango de altura de la superficie de la Tierra a la termosfera. El desarrollo unifica determinados aspectos de la modelización de la atmósfera

superior de HAO, atmósfera media de ACD y de la troposfera de la CGD, utilizando la CCSM como marco numérico común.

Licencia: Public domain.

Genotyping Console

Es un software que integra SNP (Single Nucleotide Polymorphism), genotipado de CNP (Copy Number Polymorphism), identificación de los escasos CNV (Copy Number Variation) y análisis citogenéticos en una sola aplicación. También genera "genotyping calls", detección de número de copias para regiones de CNV y conjuntos de pruebas individuales, datos de pérdida de heterocigosidad (LOH), gráficos cluster y métricas de control de calidad.

Licencia: Propietaria.

Chromosome Analysis Suite

Es un software diseñado específicamente para investigadores citogenéticos. Entre sus características se incluyen múltiples vistas gráficas, opciones flexibles de análisis y un flujo de trabajo de análisis simplificado.

Licencia: Propietaria.

Lifescop

Es un software de análisis genómico que permite la conversión rápida de datos de secuenciación de siguiente generación (NGS) a resultados biológicos y significativos, para los análisis de biólogos y científicos.

Licencia: Propietaria

WEB

WEB

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, accesible y conforme a los estándares de la W3C.

Del mismo modo, dada la importancia de las redes sociales para difusión de información, la Fundación y el Centro cuentan con presencia en ellas con el fin de dar a conocer las noticias más relevantes entorno a CénitS y de los investigadores que hacen uso de los recursos del supercomputador LUSITANIA.

PORTAL WEB CORPORATIVO

Funciones del Portal Web corporativo

- Proporcionar información referente a la identidad corporativa, actividades desempeñadas y servicios ofrecidos por el Centro y la Fundación.
- Difundir noticias y eventos de interés relacionados principalmente con la supercomputación, investigación e innovación tecnológica.
- Difundir los resultados de las investigaciones propias y de los usuarios que hacen uso de los recursos del Centro.
- Contactar con las personas interesadas en el uso de los servicios ofrecidos por el Centro y la Fundación.

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, noticias destacadas y hemeroteca.
- 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 que recoge los eventos que se realizan, en los que se colabora, participa o se consideran de interés.
- Zona multimedia: contenido digital de tipo texto, audio, gráfico y vídeo, enlaces de interés, premios y reconocimientos.



- 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 desde 2009 hasta el momento, debido a la aparición de nuevas necesidades, planteamientos y mejoras del servicio existente. El trabajo realizado puede enmarcarse en las siguientes 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.
- **Tercera etapa:** optimización general a nivel técnico. Se han realizado mejoras en los niveles de accesibilidad y usabilidad de la plataforma para garantizar el acceso desde cualquier tipo de dispositivo electrónico. Para ello, los esfuerzos se han centrado en reducir los tiempos de respuesta y la carga de información necesaria en los distintos apartados de la web.

Servicio basado en *Cloud Computing*

Durante el año 2011, tras la adquisición de nuevos servidores para el centro, se optó por dar un paso más en la evolución de la infraestructura hardware utilizada y plantear una estrategia basada en el paradigma *IaaS* de *cloud computing* para dar soporte al creciente ecosistema web. El objetivo perseguido con este modelo era tener la capacidad de proporcionar recursos adaptados a las necesidades de los servicios según se planteasen, de manera flexible, segura e independiente de la estructura hardware que los soportara.

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

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.

En 2012 se ha dado un paso más en la estabilidad del sistema, aportando las siguientes características:

- **Alta disponibilidad:** para garantizar que los recursos se hallen accesibles en todo momento, se optó por crear un cluster con tres servidores que alojan las máquinas virtuales de cada servicio. De este modo, los servicios pueden migrarse de una máquina a otra para cualquier tarea de mantenimiento o ajustes en los recursos asignados.
- **Redundancia:** para garantizar la seguridad de los datos, el espacio de almacenamiento utilizado por las máquinas virtuales se sirve desde las EVA en sistemas de ficheros contruidos sobre diversos discos con la configuración RAID apropiada para cada caso.

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 utilizando menos recursos que con 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 necesario para servirlos. De este modo, aunque el número total de visitas crece cada año, el tráfico generado para cada conexión de usuario es menor, suponiendo un importante descenso entre 2010 y 2011 (época en la que se hicieron la mayoría de los cambios), para estabilizarse y evolucionar de forma más lineal hasta 2012.

	VELOCIDAD MEDIA (SEGS.)	TRÁFICO (MB)	VISITAS
2010	3,8	42.055,68	7.033
2011	1,8	14.470,32	11.048
2012	1,1	20.322,42	13.599

DATOS ESTADÍSTICOS

A continuación se muestran los datos que se han estimado más relevantes para el año 2012.

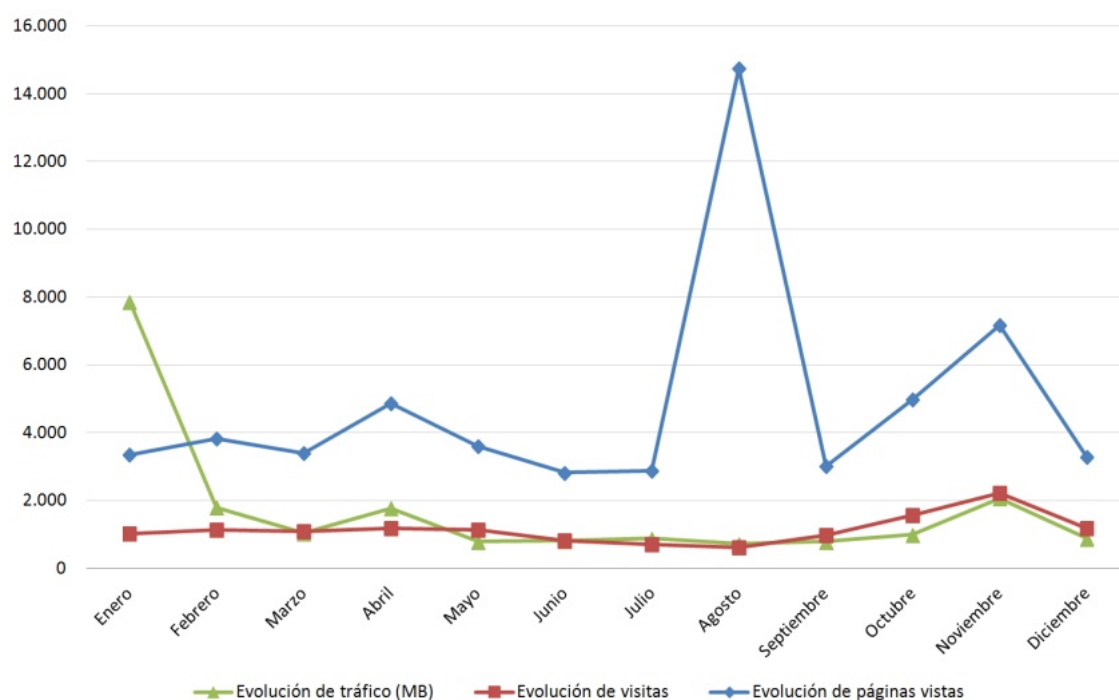
Datos generales

PÁGINAS VISTAS	VISITAS	VISITAS NUEVAS (%)	VISITAS HABITUALES (%)	TRÁFICO (MB)
57.915	13.599	57,42	42,58	20.322,42

Evolución mensual

En la siguiente tabla, se muestran los datos de acceso a la web corporativa organizados por meses y según las variables más representativas:

	PÁGINAS VISTAS	VISITAS	TRÁFICO (MB)
Enero	3.349	1.012	7.854,08
Febrero	3.828	1.127	1.792
Marzo	3.401	1.081	1.034,24
Abril	4.868	1.180	1.761,28
Mayo	3.600	1.138	781,12
Junio	2.817	821	809,43
Julio	2.875	705	873,06
Agosto	14.748	606	714,74
Septiembre	3.006	970	781,11
Octubre	4.968	1.565	985,1
Noviembre	7.177	2.213	2.064,48
Diciembre	3.278	1.181	871,78
	57.915	13.599	20.322,42



En la gráfica se muestra un elevado incremento de páginas vistas en el mes de agosto frente a una cantidad de visitas y tráfico generado muy inferior, originado por un estudio que pretendía comprobar los límites de rendimiento del entorno web.

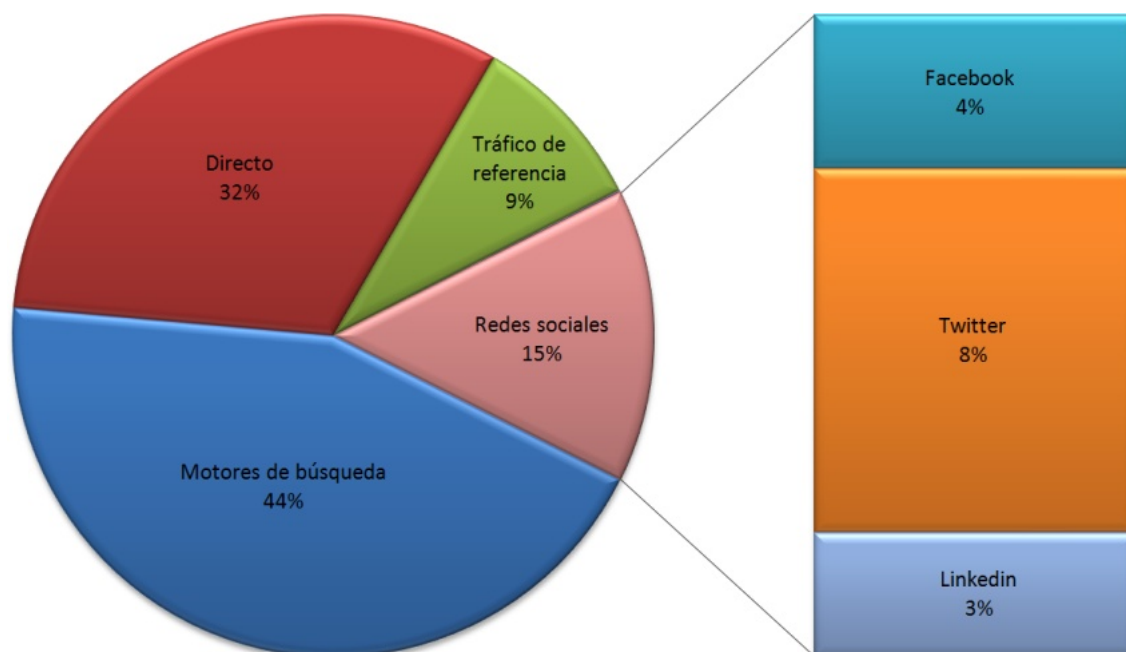
Fuente de tráfico

A continuación se muestra cómo acceden los usuarios al ecosistema web.

El esfuerzo de difusión de la actividad de la Fundación COMPUTAEX y CénitS a través de las redes sociales ha experimentado un notable incremento con respecto al año anterior (un 8% más).

El desarrollo en base a los estándares, las buenas prácticas en cuestiones de accesibilidad y las técnicas SEO también han mejorado el porcentaje de accesos a través de los distintos motores de búsqueda y tráfico directo.

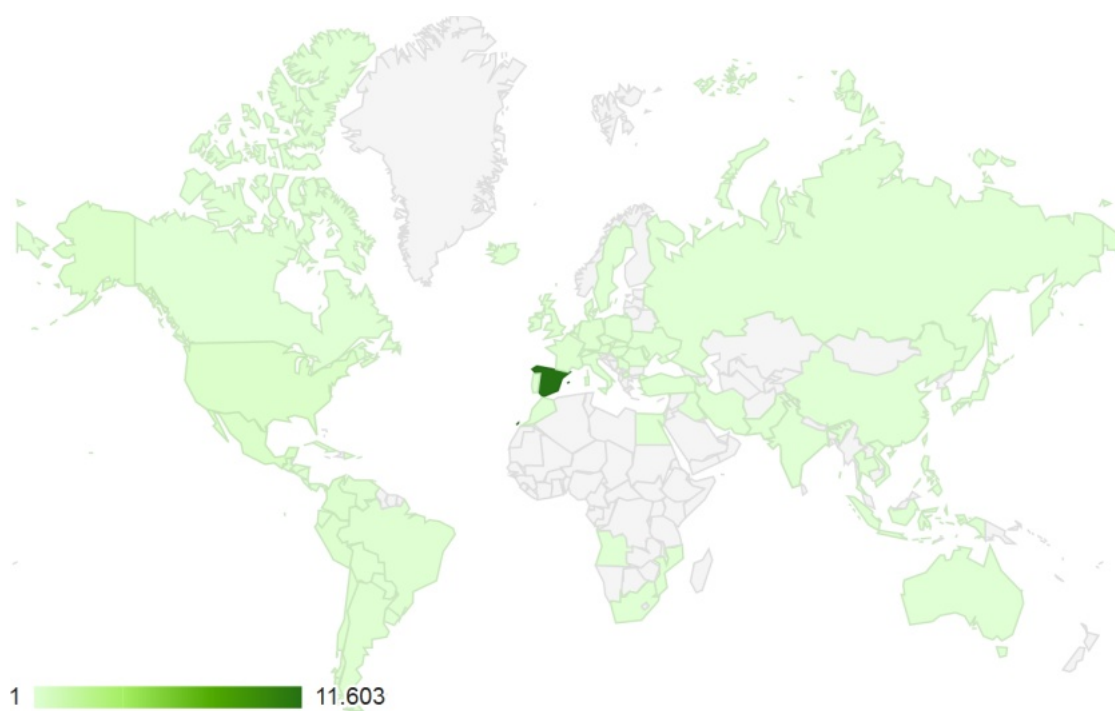
FUENTE DE TRÁFICO	VISITAS
Motores de búsqueda	5.978
Directo	4.342
Tráfico de referencia	1.247
Redes sociales	2.021
Otros	11



Ubicación geográfica: internacional

Países: se ha accedido al web desde 71 países distintos.

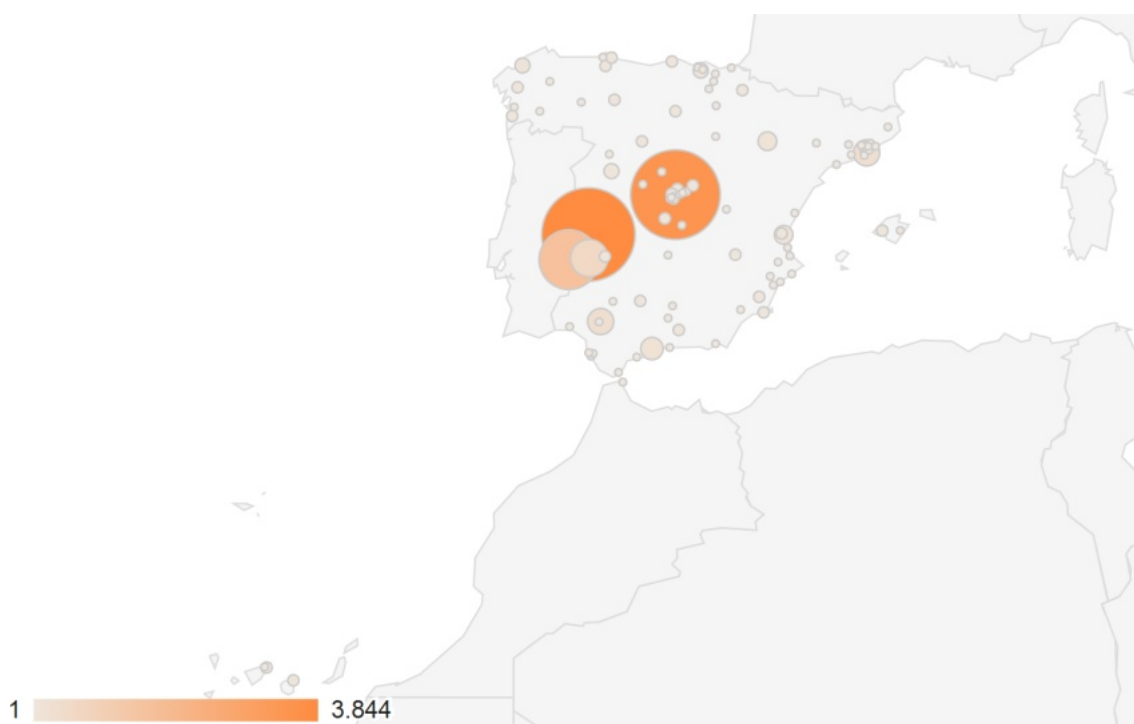
País	VISITAS	PORCENTAJE
España	11.603	85,32
Estados Unidos	332	2,44
México	327	2,40
Colombia	197	1,45
Perú	126	0,93
Austria	99	0,73
Chile	87	0,64
Argentina	86	0,63
Venezuela	79	0,58
Brasil	70	0,51
Resto	593	4,36



Ubicación geográfica: nacional

Ciudades españolas: se ha accedido al web desde 101 ciudades distintas.

CIUDAD	VISITAS	PORCENTAJE
Cáceres	3.844	33,13
Madrid	3.441	29,66
Badajoz	1.574	13,57
Mérida	550	4,74
Sevilla	304	2,62
Barcelona	286	2,46
Málaga	179	1,54
Valencia	133	1,15
Zaragoza	129	1,11
La Coruña	76	0,66
Resto	1.083	9,37



CANALES COMPLEMENTARIOS DE DIFUSIÓN

Conociendo la importancia de las redes sociales en cuestiones de difusión de información, se ha 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 a las investigaciones e innovaciones que surgen del uso de los recursos del supercomputador LUSITANIA:

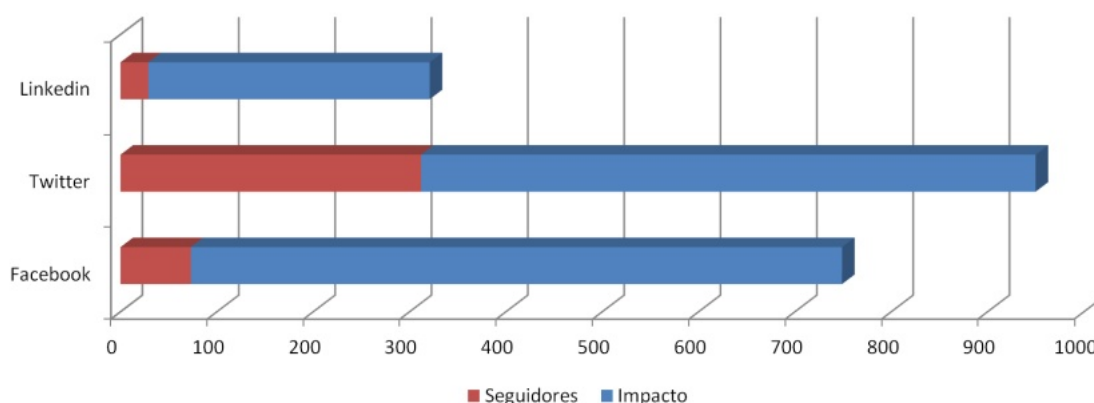
- **Facebook:** página sobre el supercomputador LUSITANIA. Este canal permite difundir las noticias que publicamos en la web, permitiendo que los usuarios participen aportando opiniones y compartiendo la información con otros usuarios.
- **Twitter:** este canal permite notificar cualquier tipo de evento 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.

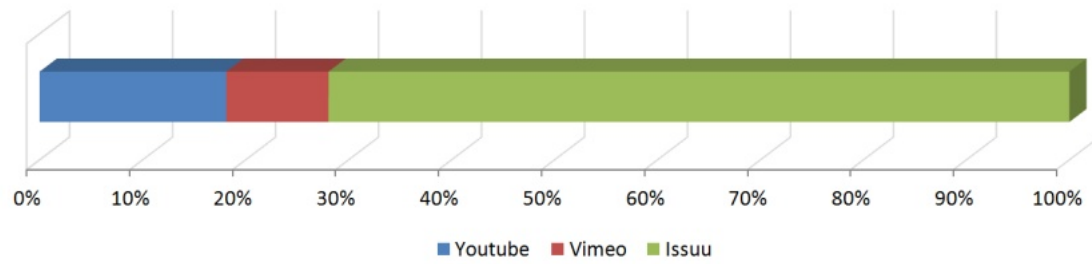
NOTA: el impacto hace relación al número de veces que los usuarios han visitado o interactuado de algún modo con los distintos perfiles.

Datos estadísticos

	LINKEDIN	FACEBOOK	TWITTER
Seguidores	29	73	312
Impacto	292	676	638



	YOUTUBE	VIMEO	ISSUU
Reproducciones	465	255	1.846



NOTAS DE PRENSA

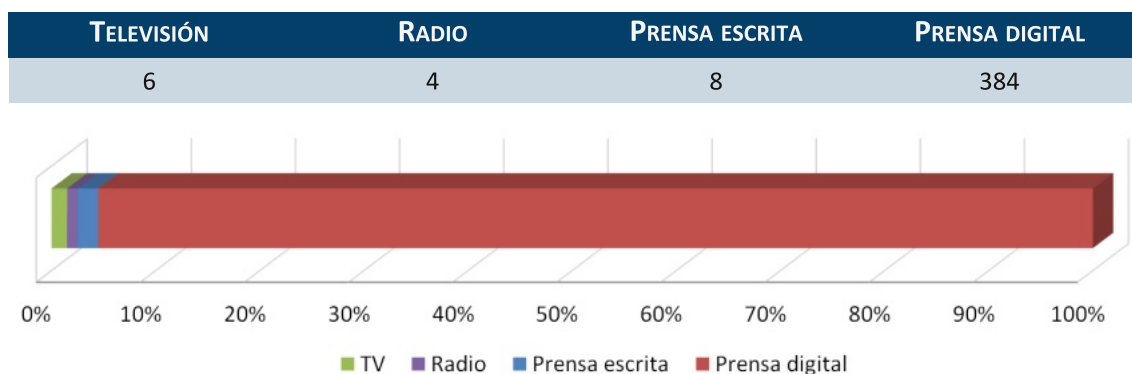
NOTAS DE PRENSA

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, y los logros de los investigadores e innovadores que han hecho uso de los recursos a lo largo del año.

El efecto divulgador de esas actividades se suma el impacto en la investigación científica y tecnológica que ya se ha expuesto en el apartado de resultados de investigación.

CÉNITS-COMPUTAEX EN LOS MEDIOS

ESTADÍSTICAS GENERALES



TELEVISIÓN

FECHA	TITULAR	FUENTE
05/01/12	COMPUTAEX oferta una plaza de apoyo I+D+I con un proyecto de cooperación con Portugal	K30 TV
24/09/12	Avances en ultrasecuenciación genética: convenio Infanta Cristina	Canal Extremadura TV Noticias I
24/09/12	Avances en ultrasecuenciación genética: convenio Infanta Cristina	Canal Extremadura TV Noticias II
19/11/12	Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología	Canal Extremadura TV Noticias I
19/11/12	Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología	RTVE Noticias I
19/11/12	Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología	RTVE Noticias II

RADIO

FECHA	TITULAR	FUENTE
30/07/12	Entrevista al Director General en relación a la evolución de la Fundación COMPUTAEX	Hora 14 Cadena SER
10/09/12	Entrevista al Director General de la Fundación COMPUTAEX sobre avances en biomedicina	Canal Extremadura
24/09/12	Entrevista al Director General de la Fundación COMPUTAEX sobre el efecto de las radiaciones microondas en la salud	Aquí en la Onda Onda Cero
19/11/12	Entrevista al Director General sobre las V Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología	RNE
19/11/12	Entrevista al Director General sobre las V Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología	Primera Hora Canal Extremadura

PRENSA ESCRITA

FECHA	TITULAR	FUENTE
29/01/12	Cáceres abre su 'Silicon Valley'	El Periódico Extremadura
12/02/12	Empresas de la región recurren al supercomputador Lusitania para hacer previsiones	Diario HOY
13/02/12	Un proyecto busca ayudar a las empresas a tomar decisiones	El Periódico Extremadura
10/03/12	Investigadores de la UEx colaboran con Alemania	Diario HOY
25/03/12	El campus espera para el verano la llegada de sus 500 nuevos inquilinos	Diario HOY
01/10/12	Tres años de supercomputación en Extremadura	Focus DatacenterDynamics
01/10/12	El "supersalvavidas" de la ciencia	El Periódico Extremadura
12/11/12	La Politécnica acoge unas jornadas sobre supercomputación	El Periódico Extremadura

COMPUTADOR LUSITANIA

Un proyecto busca ayudar a las empresas a tomar decisiones

REDACCIÓN
MÉRIDA

El Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (Cenits), encargado de la gestión del supercomputador Lusitania, colabora con tres empresas de la región para la puesta en marcha del Proyecto SEDE (Sistema Empresarial de Decisiones de Entorno), un programa de I+D+i destinado a crear un nuevo sistema de vigilancia estratégica para empresas. Con SEDE, según informa la Junta, se pretende desarrollar una herramienta de gestión capaz de proporcionar a las empresas "información fiable sobre escenarios futuros" en la que apoyar el proceso de toma de decisiones en todos los ámbitos que les afectan, como las referidas a inversiones, implementa-

Pretende aportar una información más viable sobre escenarios futuros

ción de tecnología o estrategias de mercado.

El proyecto se basa en los principios de la "vigilancia tecnológica e inteligencia competitiva tradicionales, pero apoyado en herramientas tecnológicas innovadoras de gran potencia". La principal novedad radica en que se integra la supercomputación en el proceso de obtención y análisis de la información estratégica necesaria. De esta manera, es posible "despejar y predecir situaciones que dependen de una gran cantidad de variables". ■



4 | EXTREMADURA

Sábado 10.03.12
HOY**Investigadores de la UEx colaboran con Alemania****PARA MEJORAR FÁRMACOS**

Investigadores de la UEx y la universidad alemana Karl-Franzens de Graz acaban de culminar un proyecto destinado a describir en «detalle» los mecanismos que permiten mejorar e intensificar la preparación de fármacos y productos de «alto» valor añadido mediante procesos conocidos como termólisis, gracias a la capacidad de cálculo del supercomputador 'Lusitania'.

MÁS DE 20 AÑOS JUNTO A LAS MUJERES**UNA MUJER DE LA UEX**

LOS LOGROS DEL POTENTE ORDENADOR UBICADO EN TRUJILLO



El 'supersalvavidas' de la ciencia

El supercomputador Lusitania ha participado en un treintena de proyectos desde 2009. Su capacidad ha permitido demostrar que la radiación del microondas no es nociva para la salud y se investiga la opción de crear fármacos contra el cáncer o el sida

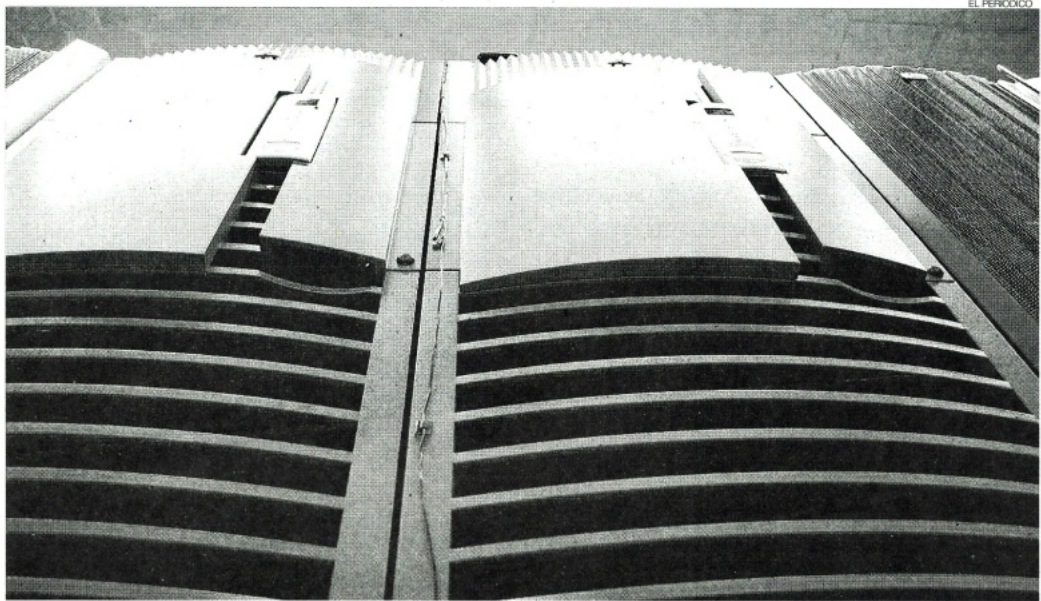
G. M.
region@extremadura.elperiodico.com
CÁCERES

Es el aliado perfecto para los investigadores extremeños. El que los hace desarrollar sus mejores proyectos y el que da proyección internacional a sus resultados. Así lo vendieron cuando el supercomputador Lusitania cuando llegó a Extremadura hace más de dos años y medio y así lo demuestran los investigadores extremeños y extranjeros que desde entonces han desarrollado más de una treintena de proyectos científicos gracias a su capacidad.

Los últimos en obtener resultados a través de los potentes cálculos que puede realizar esta virtuosa máquina -solo necesita un segundo para obtener información de 500 millones de personas-, fabricada por Hewlett-Packard y gestionada por el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación de Trujillo, es un equipo austro-extremeño de investigadores que tenían entre uno de sus objetivos descubrir si la radiación del microondas es nociva para la salud. Y no, parece que no lo es.

Los científicos de dos universidades austriacas -Karl-Franzens de Graz y la universidad Médica de Graz- y de la extremeña han podido averiguar, gracias a la capacidad de cálculo del supercomputador, que tales radiaciones no contribuyen a la alteración de las proteínas, al menos durante el proceso de digestión enzimática y, por tanto, "por esa vía no son nocivas para la salud humana". La misión del Lusitania en este proyecto ha sido modelar las estructuras de las proteínas implicadas bajo la influencia de campos eléctricos de diferente intensidad.

Pero no es la única misión en la que se ha empleado esta máquina que costó a la ante-



► El superordenador ► Tres grandes máquinas forman el Lusitania, instalado en Trujillo desde 2009.

rior Consejería de Comercio, Industria e Innovación 7,7 millones de euros. Desde el 2009, el superordenador extremeño ha participado en más de una treintena de proyectos entre los que destacan aquellos relacionados con los modelos climáticos, la secuenciación genética o el efecto de la radioterapia en estudios oncológicos, precisa Computaex, la fundación que gestiona el Lusitania. Es precisamente el campo biomédico el que más rédito está obteniendo últimamente.

Grupos de la Uex

El departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Uex, a través del grupo Quorex, es asíduo a sus capacidades con varias líneas de trabajo en marcha. "Esta herramienta nos abre más posibilidades de trabajo, es un siste-

Nos abre más posibilidades de trabajo, permite obtener resultados más precisos y de más calidad

ma muy bueno y robusto que nos permite hacer cosas aquí que antes eran imposibles, obtener resultados de más calidad, más precisos y a un nivel más alto" con el que los científicos pueden acceder a publicaciones de prestigio, explica Pedro Cintas, coordinador del grupo Quorex de la Uex. Antes de la llegada de Lusitania a Extremadura tenían que acudir al centro de supercomputación de Cataluña, que alquila por ho-

ras sus instalaciones.

El último trabajo que realiza con el supercomputador el equipo de Cintas se basa en modelizar estructuras a fin de predecir, en función de la disposición tridimensional de las mismas, su grado de actividad biológica y su comportamiento ante una reacción química. Es un primer paso para poder llegar a obtener medicinas que ataquen enfermedades como el cáncer, el sida o la diabetes.

"Estas simulaciones son muy interesantes para lanzar una molécula bioactiva que pueda llegar a convertirse en un fármaco contra importantes enfermedades", explica Cintas. En términos prácticos, "para tratar por ejemplo la malaria, si conozco la estructura del receptor de la enfermedad puedo predecir nuevas moléculas que encajen bien

con ese receptor, es como crear una llave para una cerradura concreta, y saber cómo se va a comportar y si el enlace es el suficientemente bueno, si es la mejor llave que entra en la cerradura, para empezar a preparar un ensayo contra esa enfermedad". El grupo, en colaboración de con la Universidad de Oxford, investiga en esta línea con la aplicación de iminoazúcares. Además, en otro de sus últimos trabajos ha desvelado, usando la computación, los mecanismos que podrían haber dado lugar a la formación de los primeros fragmentos de azúcar en el Universo a partir de moléculas sencillas en ausencia de vida. Trabajos que han sido recientemente publicados en prestigiosas revistas internacionales, lo que da más valor a su labor. ■

SECCIÓN FOCUS: HPC LUSITANIA

El superordenador extremeño Lusitania no es, ni mucho menos, el más potente que existe en España y, sin embargo, en sus menos de tres años de historia ha sido capaz de batir algún reto y de despertar el interés de la comunidad científica. Apenas dos meses después de haber abierto sus puertas, el centro tenía ya trabajos en su cola de espera y, hasta ahora, ha permanecido permanentemente ocupado.

José Luis González Sánchez, director general del CénitS (Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación), señala que el centro alberga una "máquina especialmente apta para problemas bastante complejos. Cuando la potencia de cómputo no es un requerimiento excesivo, pero sí los tiempos de respuesta, esta máquina funciona oportunamente". Para González, la característica fundamental que distingue Lusitania del resto de centros de supercomputación son los dos teras de memoria principal. "Con solo un proceso que tenga realmente disponibilidad de 2 teras de memoria principal, para determinados problemas es una instalación bastante atractiva. Para los químicos, los físicos, los expertos en cuestiones médicas... Está dando un resultado muy notable".

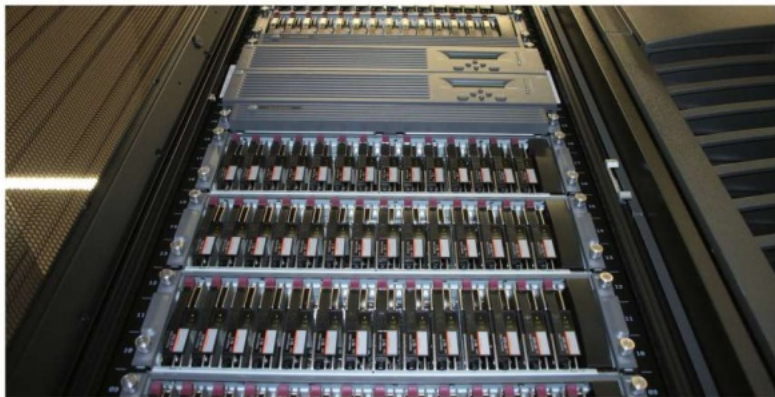
El otro factor que define el Centro de Supercomputación de Extremadura es su capacidad de almacenamiento, que alcanza los 300 teras en cinta. "Pocos centros de supercomputación tienen esa capacidad de almacenamiento. En cierto modo, unes lo uno con lo otro y da la singularidad que tiene Lusitania en el panorama de supercomputación en España y Europa".

El sistema se basa en dos HP Integrity Superdome SX2000, cada uno de ellos con 64 procesadores de doble núcleo Intel Itanium 2 Montvale a 1,6 GHz. La redundancia a todos los niveles, con configuraciones n+1 para ventiladores, caminos eléctricos y caminos de datos, etc., asegura la alta disponibilidad de todo el sistema.

González es consciente de la necesidad de actualizar el equipo de supercomputación; espera, por ejemplo, poder instalar máquinas de memoria distribuida antes de que acabe el año. Y, pese a que la situación económica no ayuda en este sen-

TRES AÑOS DE SUPERCOMPUTACIÓN EN EXTREMADURA

El superordenador Lusitania, del centro extremeño CénitS, está a punto de cumplir su tercer aniversario, con algún récord del mundo a sus espaldas y la certeza de ser uno de los centros más singulares de España. Por Rafa M. Claudín



Los sistemas de almacenamiento de Lusitania. Imagen: Jornero



Los nodos de cómputo de HP en los que se basa el superordenador extremeño. Imagen: Jornero



El centro cuenta con el apoyo del Centro Europeo de Desarrollo Regional. Imagen: Jornero

tido, el directivo cree que hay que "ir potenciando todo en la misma línea. Tenemos que hacer un planning estratégico a 2 años vista y esperamos que en ese tiempo estemos en el nivel que debemos. De cara al futuro, tenemos que pensar en renovar los equipos".

Las características de Lusitania, en todo caso, han dado bastantes alegrías al CénitS. La más llamativa, todo un récord mundial: "Hemos batido un récord de supercomputación en electromagnetismo; a los pocos meses de inaugurar la máquina, batimos un récord mundial en la resolución de sistemas de ecuaciones de 620 millones de incógnitas. Han ido surgiendo proyectos en el ámbito de ciencias de la vida. Los químicos son unos grandes consumidores de centros de cómputo porque se enfrentan a simulaciones muy complejas. Simulaciones que hasta ahora les llevaban meses en sus clusters, en poco más de un día las tienen hechas".

El centro no desarrolla una labor estanca: es habitual la colaboración entre centros de supercomputación de España, con cesión mutua de recursos y propuestas comunes de cara a proyectos de la Unión Europea. González espera, además, que esta estrecha relación entre diferentes centros dé un paso más con la extensión del RES (Red de Supercomputación de España).

"La idea", explica González, "es que sea el propio Ministerio quien coordine la tarea de tener esos recursos de cómputo a disposición de todo el mundo de forma más centralizada, aunque cada uno con su cierta libertad de acción. En eso estamos trabajando. Tenemos los convenios casi firmados para que todos los centros de ámbito regional que quieran formar parte de la RES den los pasos oportunos y seamos capaces de tener una red de supercomputación bien cohesionada dando servicio no solo a investigadores, sino a empresas, tecnólogos y gente innovadora". ■

El Ayuntamiento de Cáceres ha organizado una serie de actividades para celebrar el Día de la Ciencia y la Tecnología. Entre ellas, se incluye una exposición de obras de arte que representan la ciencia y la tecnología, así como una serie de conferencias y talleres dirigidos a los estudiantes de la ciudad.



Escaparatista curioso en Cultura Sotillo

El Ayuntamiento de Sotillo del Riázar ha organizado una serie de actividades para celebrar el Día de la Ciencia y la Tecnología. Entre ellas, se incluye una exposición de obras de arte que representan la ciencia y la tecnología, así como una serie de conferencias y talleres dirigidos a los estudiantes de la ciudad.

El Ayuntamiento de Sotillo del Riázar ha organizado una serie de actividades para celebrar el Día de la Ciencia y la Tecnología. Entre ellas, se incluye una exposición de obras de arte que representan la ciencia y la tecnología, así como una serie de conferencias y talleres dirigidos a los estudiantes de la ciudad.

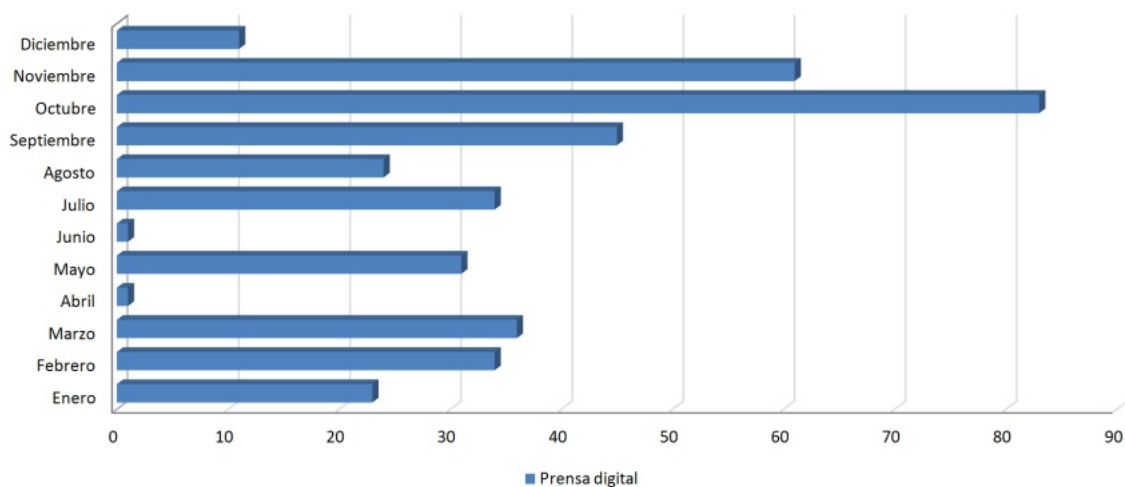


La Politécnica acoge unas jornadas sobre supercomputación

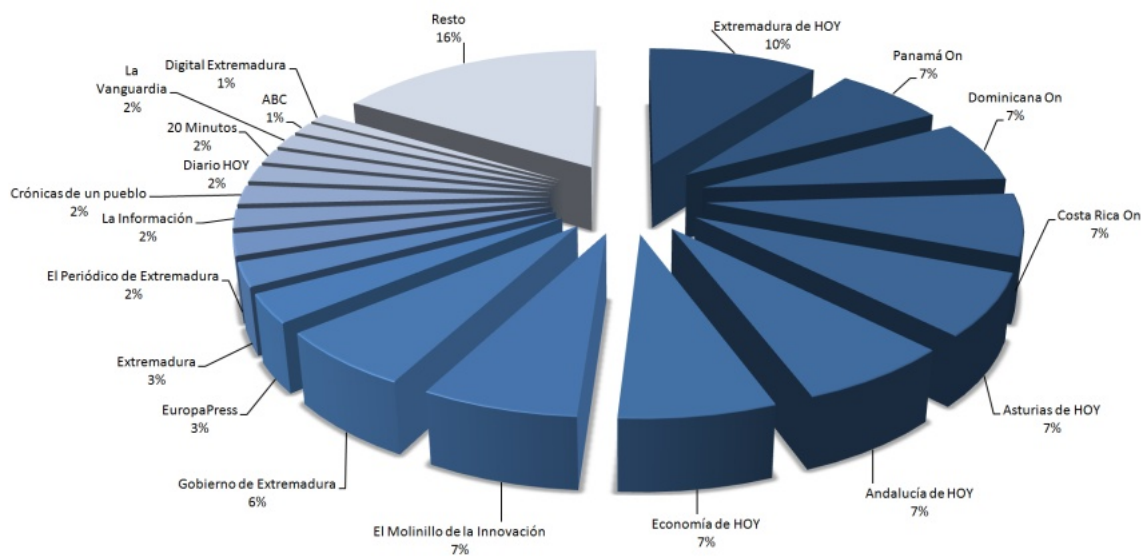
LA FUNDACIÓN Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (Computaex), organiza el 19 y 20 de noviembre las V Jornadas de Supercomputación y Avances en Tecnología. Permitirán poner de relieve las nuevas profesiones y oportunidades que el mundo de la informática y las nuevas tecnologías están generando en nuestro entorno. dirigidas a empresas, centros tecnológicos, investigadores y estudiantes, las jornadas se celebrarán en las instalaciones de la Escuela Politécnica.

PRENSA DIGITAL

A continuación se presentan dos gráficas. En la primera de ellas se puede observar la evolución mensual de las apariciones de la Fundación COMPUTAEX, del Centro y sus actividades en prensa digital.



En esta segunda gráfica se presentan los medios digitales en los que más veces han aparecido noticias relacionadas con la Fundación, el Centro y sus actividades.

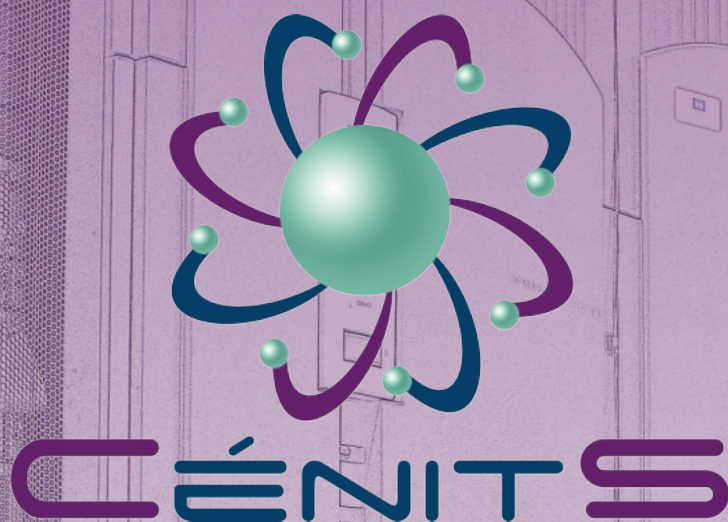


© Fundación COMPUTAEX

DEPÓSITO LEGAL: CC-000062-2013

ISBN - 10: 84-616-3320-2

ISBN - 13: 978-84-616-3320-3



Centro Extremeño de iNvestigación,
Innovación Tecnológica y Supercomputación

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

Tel.: +34 927 659 317

Fax: +34 927 323 237

GOBIERNO DE EXTREMADURA



Unión Europea

Fondo Europeo de Desarrollo Regional



Unión Europea

Fondo Social Europeo

Una manera de hacer Europa