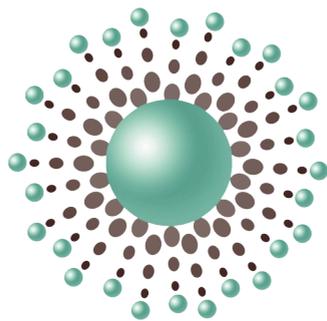


COMPUTAEX

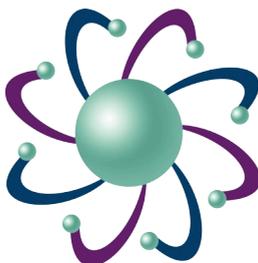
# MEMORIA ANUAL 2016





COMPUTAEX

MEMORIA  
2016



CÉNITS

© Fundación COMPUTAEX

EDICIÓN: Fundación COMPUTAEX  
DISEÑO: Fundación COMPUTAEX

Impreso en España  
Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-697-3233-5  
DEPÓSITO LEGAL: BA-298-2017



**Reconocimiento – NoComercial – SinObraDerivada (by-nc-nd)**

No se permite un uso comercial de la obra original ni la generación de obras derivadas.

# CONTENIDO

---

<b>2016. Si nunca vas más allá de donde has estado, nunca llegarás más lejos de donde has ido.....</b>	<b>7</b>
<b>1. Fundación COMPUTAEX.....</b>	<b>11</b>
Objeto y fines.....	12
Patronato.....	13
Equipo Cénits 2015.....	13
RES (Red Española de Supercomputación).....	15
Organizaciones colaboradoras.....	16
Agradecimientos.....	17
<b>2. Proyectos de investigación e innovación tecnológica de Cénits.....</b>	<b>19</b>
TaxonomTIC 2016.....	20
Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD.....	22
GeneTicACE – AGROACE.....	24
Red-Integra.....	24
Construcción y equipamiento de Centro de Proceso de Datos para computación de altas prestaciones.....	25
REME (Plataforma de resiliencia urbana para la gestión de micro-eventos en tiempo real).....	25
SGDC2 (Smart Green Data Center 2).....	25
Estudio de patrones de consumo en las farmacias.....	26
RUMIMETA (Disminución de la huella de metano por inclusión de polifenoles vitivinícolas en la alimentación de rumiantes).....	26
SCIoT (Sistemas Ciberfísicos enmarcados en IoT para aplicación en ganadería de precisión).....	26
HERITAGEN.....	27
ALABÁN.....	27
BiG-DatEx: Infraestructura Big Geospatial Data de Extremadura.....	27
Optimización de algoritmos y aplicaciones paralelas en sistemas heterogéneos mediante el uso combinado de modelos formales de cómputo y comunicaciones.....	28
Grupos operativos.....	28
<b>3. Proyectos de investigación soportados.....</b>	<b>31</b>
Ciencias de la Tierra.....	32
Ciencias de la Vida.....	38
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.....	52
<b>4. Resultados de investigación.....</b>	<b>57</b>
Publicaciones en congresos.....	58
Publicaciones en revistas.....	59
Trabajos finales de Máster.....	66
Distinciones y reconocimientos.....	67

<b>5. Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión.....</b>	<b>69</b>
Convenios de colaboración.....	70
Derecho tecnológico e informática forense.....	72
Colaboración en los másteres TIC de la Universidad de Extremadura.....	72
Becas de formación.....	73
Curso Big Data & Supercomputación .....	74
8ª Jornada CénitS.....	75
Presentación del Supercomputador LUSITANIA II.....	77
Noche europea de los investigadores 2016.....	79
Portal web.....	80
Redes sociales.....	82
Difusión y divulgación.....	83
CénitS – COMPUTAEX en los medios.....	84
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos.....	86
<b>6. Recursos tecnológicos.....</b>	<b>89</b>
LUSITANIA II.....	90
LUSITANIA.....	93
Consumo de recursos de LUSITANIA II.....	96
Consumo de recursos de LUSITANIA.....	99
Usuarios.....	102
Software.....	104
<b>7. Proyectos concluidos.....</b>	<b>105</b>
Ciencias de la Tierra.....	106
Ciencias de la Vida.....	111
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.....	117







## 2016

***Si nunca vas más allá de donde has estado,  
nunca llegarás más lejos de donde has ido***

Empezó el ejercicio 2016 con la incorporación de LUSITANIA II al proyecto de la supercomputación en Extremadura, ofreciendo sus recursos a importantes proyectos, a la vez que despertaba la atención de organismos promotores de la eficiencia energética por la forma de enfrentarnos a su diseño y administración.

Administrar dos supercomputadores no es tarea sencilla, y menos si están situados en dos CPD (Centros de Proceso de Datos) diferentes en las ciudades de Cáceres y Trujillo. Y no es sencillo porque este tipo de instalaciones deben garantizar unas características de calidad de servicio que implican un seguimiento continuado cada hora del día y cada día del año para que no se resientan los servicios que se proveen a los usuarios del Centro. La alta disponibilidad, la seguridad y la computación de elevadas prestaciones se dan por supuestas en los CPD que alojan supercomputadores. Pero al ser centros muy críticos por los servicios que ofrecen, le hemos añadido una característica muy humana y que ha popularizado la palabra resiliencia. Para nosotros la resiliencia consiste en recuperar lo antes posible y elásticamente el estado inicial del CPD cuando ha cesado la perturbación a la que estuviese sometido. Garantizarlo no es tarea simple porque en los CPD no sólo gestionamos sistemas de supercomputación, sino que se depende también del sistema de refrigeración, del sistema de alimentación eléctrica y del sistema de comunicaciones de red. Todo ello ha de funcionar perfectamente coordinado y afinado para ofrecer la calidad de servicio que nuestros usuarios y proyectos requieren.

En este empeño tenemos bien presente a Albert Einstein cuando dijo, que “...en épocas de crisis es más importante la imaginación que el conocimiento”, y a Pablo Ruiz Picasso que recomendó que “cuando llegue la inspiración... te encuentre trabajando”. De la tenacidad de Einstein y del tesón de Picasso puede obtenerse el convencimiento para seguir adelante cada día.

Los ingenieros de CénitS han puesto este ejercicio las infraestructuras disponibles al alcance de 25 proyectos de investigadores e innovadores que han usado los recursos del Centro. En el supercomputador LUSITANIA se han consumido 565.784 horas de CPU y se han requerido 51 máquinas virtuales y 3 unidades aceleradoras de cómputo, específicamente configuradas para ajustarse a los requisitos concretos de cada proyecto. Los trabajos de cómputo masivo ejecutados sobre LUSITANIA han usado 4,91 TB de memoria principal y consumido 22,6 TB de memoria secundaria para almacenar los resultados históricos obtenidos por los proyectos. En el supercomputador LUSITANIA II se han consumido 1.730.199 horas de CPU en la ejecución de trabajos de cómputo, usando 1.094 GB de memoria principal y 17,6 TB de memoria secundaria. Además, en el Centro se han atendido y resuelto un total de 154 incidencias y consultas técnicas.

El personal del Centro, además de administrar los recursos técnicos con la mayor calidad de servicio posible, continua con sus investigaciones e innovaciones, mejorando su cualificación científica y técnica, participando en proyectos y realizando publicaciones y ponencias especializadas. Además, a nuestra ya tradicional colaboración en actividades divulgativas en cursos, másteres, jornadas y congresos, CénitS ha incorporado en 2016 un programa formativo propio, con carácter de continuidad que ha empezado a impartir conocimientos avanzados.

De entre todos los mantras tecnológicos que se han popularizado en poco tiempo, en CénitS estamos especialmente interesados en encontrar la convergencia entre los tres siguientes paradigmas: High Performance Computing (HPC), Big Data Analytics (BDA) y Cloud Computing (CC). Estamos convencidos de que es posible llevar juntos con éxito los tres mundos: Computación rápida, Datos intensivos y Big Data como Servicio. El reto es excitante, mezclar las tres visiones tecnológicas para producir entornos que aporten: el alto rendimiento de HPC; la usabilidad y flexibilidad de Big Data y las comodidades de Cloud Computing. Los métodos analíticos de Big Data permiten descubrir unas veces y buscar otras, y también podrían socializar el acceso a la supercomputación, poniéndola al alcance de todos como servicio cloud. Entre la búsqueda y el descubrimiento, se está encontrando, cada vez en más proyectos, la deseable serendipia, de modo que, cuando estamos buscando o descubriendo algo concreto, acabamos encontrando de forma casual algo mucho mejor. Esto está siendo cada vez más habitual porque, en el tiempo que antes se evaluaba una hipótesis, ahora pueden validarse miles, lo que aumenta considerablemente la garantía y velocidad de éxitos.

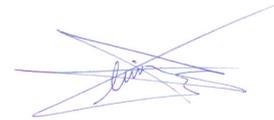
Precisamente, por todo lo anterior, HPC, BDA y CC, intervienen de forma muy directa en los quince retos de la humanidad que, hasta 2050, ha identificado el proyecto Millennium en el que participan más de 4.000 expertos de todo el mundo. Por su relación directa con la convergencia tecnología que promovemos destacan los siguientes retos: Cambio climático y desarrollo sostenible; Agua limpia; Población y recursos; Democratización; Toma de decisiones y previsiones globales; Escalón pobreza-riqueza; Convergencia global de las tecnologías informáticas; Salud; Educación y aprendizaje; Crimen organizado transnacional; Ciencia y tecnología; Ética global y Energía.

No obstante, los indicadores nacionales e internacionales, y los que la propia Fundación COMPUTAEX maneja, muestran una evidente carencia de expertos en tecnologías informáticas y de comunicaciones y nos encontramos con la paradoja de que, mientras la necesidad de profesionales crece sostenidamente año tras año, no lo hace al mismo ritmo el número de egresados en las universidades, institutos y academias. La Fundación COMPUTAEX continúa con su tarea de observatorio del sector TIC en Extremadura y el informe TaxonomTIC 2016 vuelve a demostrar que el sector goza de buena salud, aunque el contraste con la situación nacional y europea pone de relieve un notable escalón que es necesario allanar. En cualquier caso, la carencia de profesionales bien formados es muy evidente y parece necesario analizar esta situación de forma global, con detenimiento y buscarle una solución que, tal vez, esté en el camino del reconocimiento social que este tipo de profesionales ha de tener.

La Fundación COMPUTAEX recibió en 2016 de los presupuestos regionales un total de 495.956 € para sus gastos de funcionamiento con, prácticamente, idénticas transferencias nominativas que los tres ejercicios precedentes. Durante el ejercicio se han presentado propuestas de financiación de proyectos a varias convocatorias competitivas regionales, nacionales y europeas, aunque a cierre del ejercicio pocas de ellas han sido resueltas. Por ello, la captación de fondos propios este año ha descendido apreciablemente, representando algo menos del 10% de lo percibido de los presupuestos regionales. Las cuentas anuales al cierre del ejercicio 2016 han arrojado un resultado negativo (23.426 €) puramente técnico, debido a la amortización de equipos y reflejo del incremento del inmovilizado material de la Fundación.

Los gobiernos, empresas y ciudadanos han entendido que la información se ha convertido en el nuevo petróleo de nuestra actual sociedad, lo que ha desencadenado en ocasiones una cierta fiebre del oro. Sin embargo, consideramos que no se ha llegado a entender el verdadero valor de la información. Mientras cualquier materia prima tras su manufactura es consumida y desaparece (dejando residuos perniciosos en no pocos casos), la información representa una materia prima que puede ser procesada y refinada cuantas veces sea necesario, ganando cada vez mayor valor y conocimiento. Representa, por tanto, el mejor exponente del modelo de economía circular que puede cambiar el actual modelo productivo y de consumo.

Las sociedades que no sean capaces de entender la necesidad de contar con medios técnicos que permitan captar, generar, procesar, almacenar y servir información a científicos de datos capaces de buscar o descubrir su potencial conocimiento para ofrecerlo a la propia sociedad, no serán más que meras procrastinadoras, incapaces de enfrentarse a decisiones perentorias y difícilmente saldrán del bucle que propone la tautología que encabeza este texto.

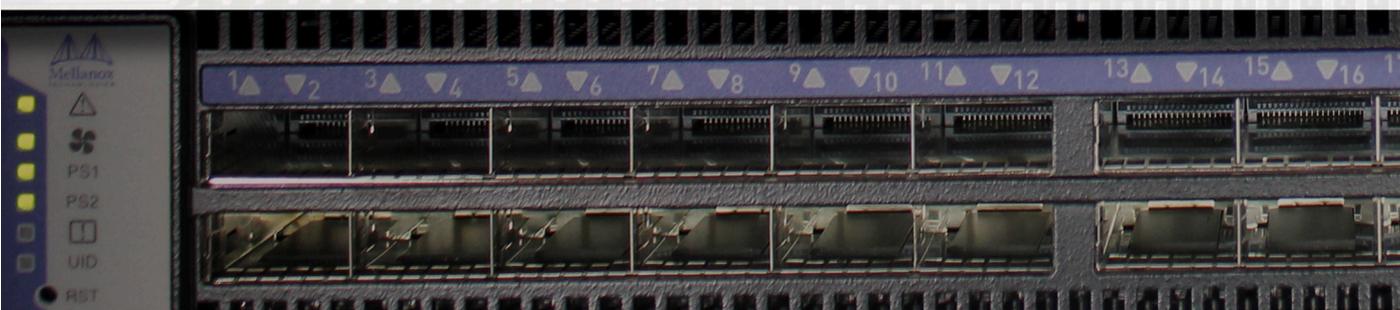


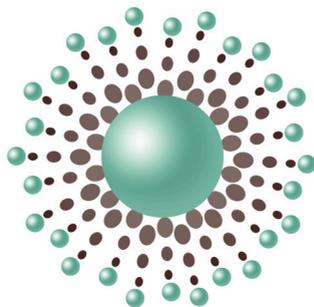
**Fdo. José Luis González Sánchez**





**Fundación COMPUTAEX**





# COMPUTAEX

**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, e inscrita en el Registro de Fundaciones de Extremadura el 27 de abril del mismo año, dependiendo de la Dirección General de Telecomunicaciones y Sociedad de la Información de la Consejería de Economía, Comercio e Innovación.**

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 en 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. En agosto de 2013, de acuerdo al decreto 135/2013 de 30 de julio, la Fundación COMPUTAEX se adscribe a la Secretaría General de Ciencia y Tecnología. El decreto 262/2015 de 7 de agosto, asignó a la Consejería de Economía e Infraestructuras las competencias que se encontraban asignadas a la anterior Consejería de Economía, Competitividad e Innovación de la Junta de Extremadura, quedando la Fundación COMPUTAEX adscrita a la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación.

## Objeto y fines

---

La Fundación COMPUTAEX tiene personalidad jurídica propia y plena capacidad de obrar, pudiendo realizar, en consecuencia, todos aquellos actos que sean necesarios para el cumplimiento de los fines para los que fue creada: todos aquellos que promuevan el desarrollo de las tecnologías de la información, el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas como instrumentos para el desarrollo socioeconómico sostenible, estimulando la participación de la sociedad civil movilizando sus recursos y dedicando especial atención a las relaciones de cooperación entre los centros de investigación públicos y privados y del sector productivo.

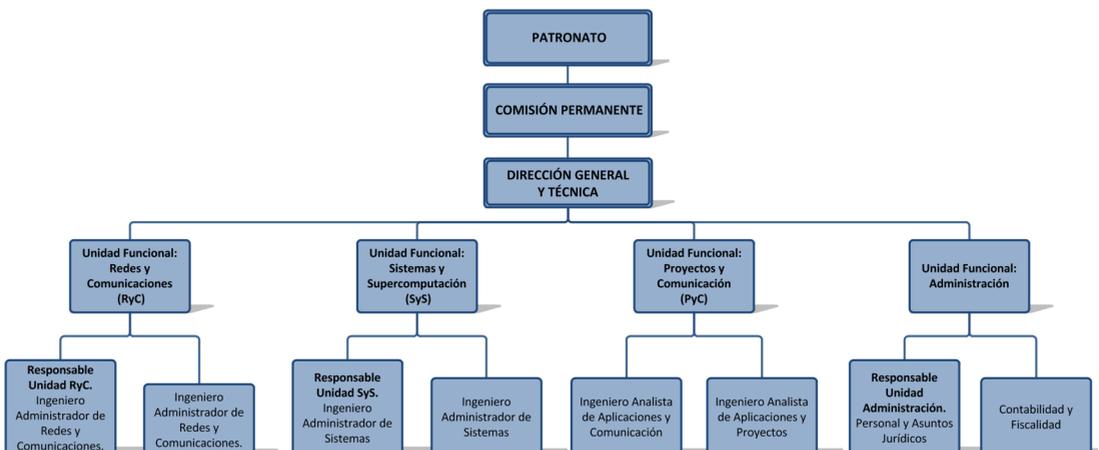
El objetivo básico de la Fundación es la creación, explotación y gestión de CénitS, el Centro de Supercomputación de Extremadura.

# Patronato



# Equipo CénitS 2016

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.





**José Luis González**  
 Director General de la  
 Fundación COMPUTAEX



**Maria Antonia Viniegra**  
 Responsable de personal y  
 asuntos jurídicos



**David Cortés**  
 Responsable de la Unidad  
 Funcional de redes y  
 comunicaciones



**Jesús Calle**  
 Responsable de la Unidad  
 F. de sistemas y  
 supercomputación



**Felipe Lemus**  
 Administrador de  
 redes y comunicaciones



**Javier Corral**  
 Analista de aplicaciones y  
 comunicación



**Manuel Alfonso López**  
 Analista de aplicaciones y  
 proyectos



**Blanca Pérez**  
 Técnico contable  
 y fiscal



**Javier Rubio**  
 Becario de investigación

## RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una infraestructura distribuida que consiste en la interconexión de 13 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica.

La RES es una Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS) distribuida por toda la geografía española. Su misión es ofrecer los recursos necesarios para el desarrollo de proyectos científicos y tecnológicos innovadores y de alta calidad. Está coordinada por el Barcelona Supercomputing Center (BSC) y formada por 13 instituciones y sus supercomputadores: MareNostrum & MinoTauro en Barcelona Supercomputing Center (BSC), Magerit en el Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid (CeSViMa), Universidad Politécnica de Madrid, FinisTerra2 en la Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA), LaPalma en Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC), Altamira en el Instituto de Física de Cantabria (IFCA) de la Universidad de Cantabria, Picasso en la Universidad de Málaga (UMA), Tirant en la Universitat de València (UV), Caesaraugusta en el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza, Caléndula en Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL), Pirineus en Consorci de Serveis Universitari de Catalunya (CSUC), Cibeles en la Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Atlante en el Instituto Tecnológico de Canarias (ITC) y LUSITANIA en CénitS-COMPUTAEX.



RED ESPAÑOLA DE  
SUPERCOMPUTACIÓN

La RES gestiona recursos de computación de alto rendimiento con el objetivo de impulsar el avance de la ciencia y la innovación en España. Para alcanzar este propósito, ofrece sus recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización óptima de todos los recursos disponibles en la red.

Por otra parte, la RES también promueve acciones de interés común para sus nodos, como planes de inversión, actividades de formación y divulgación, o participación conjunta en proyectos nacionales e internacionales.

La Red Española de Supercomputación fue creada en marzo de 2007 por el Ministerio de Educación y Ciencia. Desde el 2014, la RES forma parte del mapa de las Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares (ICTS), ya que es una infraestructura excepcional en su campo, de titularidad pública y disponible mediante acceso abierto y competitivo.



## Agradecimientos

---

Alcanzar los objetivos que se recogen resumidamente en este anuario de 2016 no hubiese sido posible sin el compromiso, apoyo, ayuda y colaboración de muchas personas que es complicado citar nominalmente, pero que de forma genérica destacan:

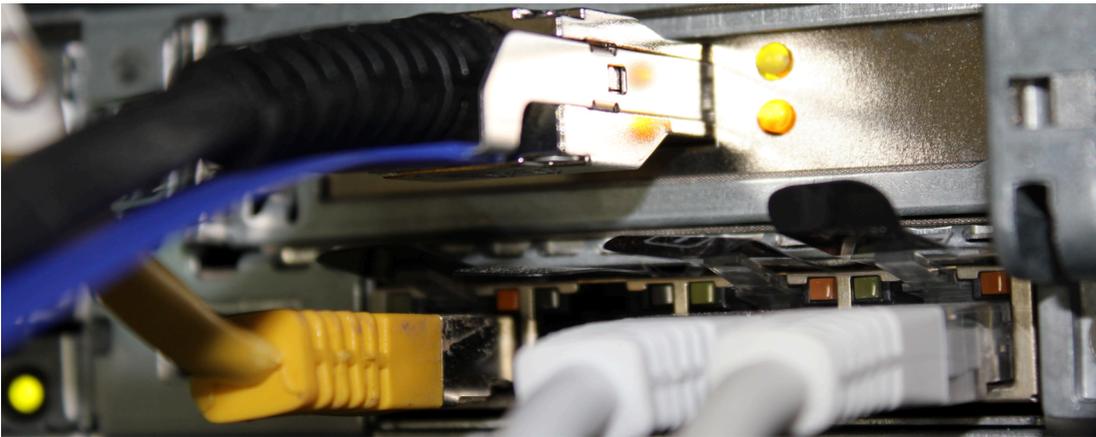
- Los usuarios de CénitS, cuya satisfacción es nuestro principal objetivo.
- El personal del Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesus Usón que acoge a LUSITANIA II.
- El personal del CETA-CIEMAT que acoge a LUSITANIA.
- Los técnicos de GPEx que nos ayudan en la gestión.
- El personal de la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación que colabora en tareas administrativas.
- El personal de la Consejería de Economía e Infraestructuras.
- Los técnicos del Protectorado de Fundaciones de Extremadura.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones que han colaborado en proyectos comunes.
- Las empresas, socios y tecnólogos con los que hemos tenido la oportunidad de cooperar.
- Los Patronos de la Fundación que aportan su apoyo y compromiso.





# Proyectos de investigación e innovación tecnológica de Cénits





# Proyectos de investigación e innovación tecnológica de CénitS

**Durante 2016, el equipo CénitS ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, con el fin de aportar soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.**

## TaxonomTIC 2016



El proyecto TaxonomTIC dio comienzo en el año 2013 y su objetivo principal consistía en conocer y entender las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) desde su origen, y no solo desde el punto de vista del usuario final, ya que existen empresas y profesionales cuyas actividades se constituyen como un potente motor económico dentro del nuevo ecosistema socio-económico y que merece la consideración de sector.

Como parte fundamental de dicho objetivo, se buscaba también la creación de un observatorio del Sector TIC en Extremadura. Este observatorio permite identificar que son las TIC, los elementos que las componen, describirlos y clasificarlos, para poder estudiar su impacto en la región y generar una fuente de información adicional, que permita conocer qué profesionales, empresas u organismos se encuentran relacionados con este sector y cuales se apoyan en dichas entidades para ofrecer servicios TIC.

El trabajo realizado durante 2016 ha supuesto la consolidación del proyecto como observatorio del Sector TIC en la región, realizando un exhaustivo análisis del mismo en Extremadura, España y Europa y profundizando en los perfiles profesionales del sector que empiezan a distinguirse en Europa

### Objetivos

- Actualización de la información recopilada desde el comienzo del proyecto sobre el sector regional, nacional y europeo.

- Realización de un estudio sobre los perfiles profesionales TIC más demandados en Extremadura. Este estudio incluye un análisis de las clasificaciones de perfiles existentes y la elaboración de un formulario web que permita conocer la realidad de los profesionales TIC en Extremadura.
- Integración de la información del proyecto en una única plataforma (OLISTIC) lo cual supone un rediseño y un nuevo desarrollo de la misma y la inclusión de nuevas funcionalidades.
- Elaboración de informes y obtención de conclusiones de la taxonomía del Sector TIC y su proyección para el futuro. Participación en eventos organizados por el propio sector para actuar como dinamizadores del mismo.

NÚMERO DE EMPRESAS POR SECTOR

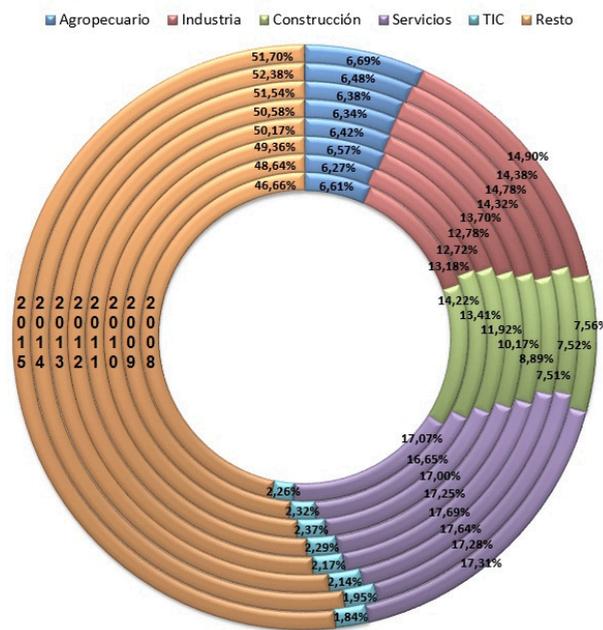


### Metodología

En primer lugar, se procedió a la actualización de la información extraída en años anteriores. Con tal fin, partiendo de los datos del proyecto de 2012, 2013 y 2014, y contando con el Instituto Nacional de Estadística (INE) como principal fuente externa, se elaboraron las estadísticas económicas y de sociedades más importantes del sector en Extremadura. Con el fin de aproximarse lo máximo posible a la realidad del sector, se optó por utilizar la clasificación de actividades del sector elaborada por el equipo de CénitS en el año 2013.

En segundo lugar, se realizó una comparativa económica del sector TIC frente a otros sectores más tradicionales de Extremadura pudiendo, de este modo, establecer una clara referencia del estado del sector en la región. A continuación, se recopiló información del INE y el Eurostat con el fin de analizar el estado del sector TIC en España y Europa y establecer una comparativa con la realidad regional del mismo.

Aportación al PIB regional por rama de actividad

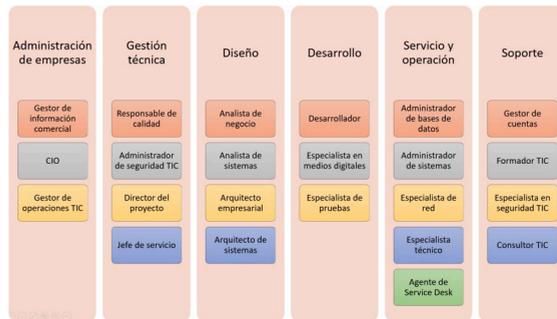


Dada la creciente importancia de las TIC en el contexto de la economía mundial y el enorme potencial del sector TIC en términos de creación de empleo, es necesario el establecimiento de un marco común que permita a los profesionales de las TIC describir y desarrollar sus capacidades, y que, por otro lado, facilite a las empresas y empleadores identificar qué personas poseen las habilidades que necesitan.

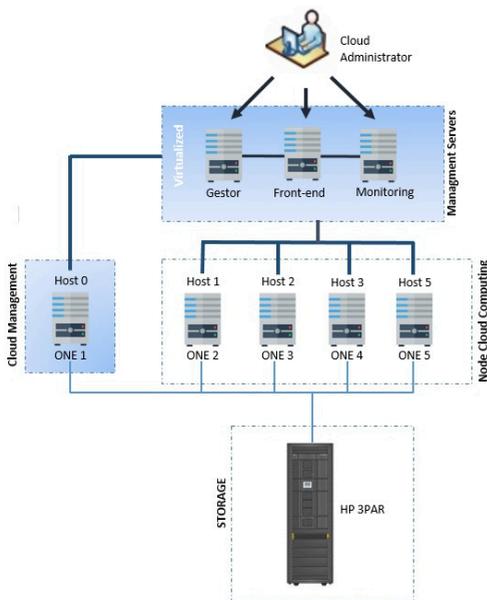
En este sentido, se llevó a cabo una prospectiva de los modelos europeos existentes de definición de perfiles TIC y se localizó el European e-Competence Framework, un marco de trabajo común europeo para establecer las competencias y perfiles de los profesionales TIC de la unión europea. Se realizó una traducción a español del mismo y se integró en la plataforma OLISTIC.

## Resultados

- Disposición de información (económica, empresarial y de formación) veraz y actualizada del sector TIC en Extremadura.
- Análisis actualizado del sector TIC en España y Europa y comparativa con el sector en Extremadura.
- Traducción de las competencias y los perfiles profesionales del marco de referencia europeo e-CF e integración del mismo en la plataforma OLISTIC.
- Actualización de contenidos de la plataforma OLISTIC.
- Documentación del proyecto. La memoria desarrollada puede encontrarse en la siguiente dirección web: [http://www.cenits.es/sites/cenits.es/files/proyectos/memoria\\_taxonomtic\\_2016.pdf](http://www.cenits.es/sites/cenits.es/files/proyectos/memoria_taxonomtic_2016.pdf)



## Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD



Debido a la creciente demanda de potencia computacional y, por consiguiente, de suministro eléctrico llevada a cabo por los Centros de Proceso de Datos (CPD), acompañado del intento de optimización de todo lo relacionado con el sistema de climatización requerido, surge la necesidad de maximizar la eficiencia de los equipos informáticos y de clima, minimizando el consumo energético de todos ellos.

En este sentido, Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD es uno de los dos proyectos enmarcados en CENITAL-2016, que propone obtener en los CPD el punto de equilibrio que maximice la eficiencia de los equipos informáticos, eléctricos y climáticos; en línea con la eficiencia energética y la eficacia computacional de los data center. En este proyecto se ha conseguido dotar al CPD de CénitS con un Sistema de Gobierno que permite administrar simultáneamente el comportamiento de los equipos de los cuatro sistemas más importantes de un data center como son

el sistema informático, el sistema telemático, el sistema de climatización y el sistema eléctrico, logrando un mejor desempeño desde el punto de vista computacional, energético y económico.

## Objetivos

En este proyecto se han alcanzado los siguientes objetivos:

- Analizar y diseñar de un sistema de gobierno para la gestión inteligente de los sistemas informático, telemático, climático y electrónico de un CPD.

- Gestionar los recursos compartidos en Federaciones de CPD de manera eficiente a través de una aplicación informática.
- Proponer mecanismos de seguridad, defensa y alta disponibilidad en federaciones de CPD.

### Metodología

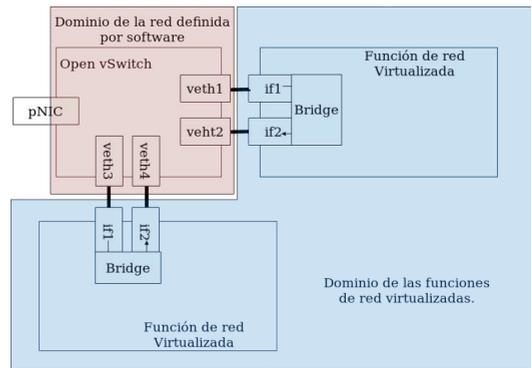
La principal motivación de este trabajo es la gestión inteligente de un Centro de Proceso de Datos desde un punto de vista estructural, comenzando con el despliegue de servicios de gestión inteligente para un CPD y finalizando con el despliegue de una federación de CPDs basado en un ecosistema abierto.

Para la gestión inteligente de un CPD se ha desarrollado en este proyecto, un software que gestione los recursos hardware y software de un CPD a través de la plataforma OpenNebula. Además, se han propuesto mecanismos de seguridad y de alta disponibilidad para proporcionar a las federaciones de CPD herramientas que las protejan de ataques y fallos en los sistemas de información.

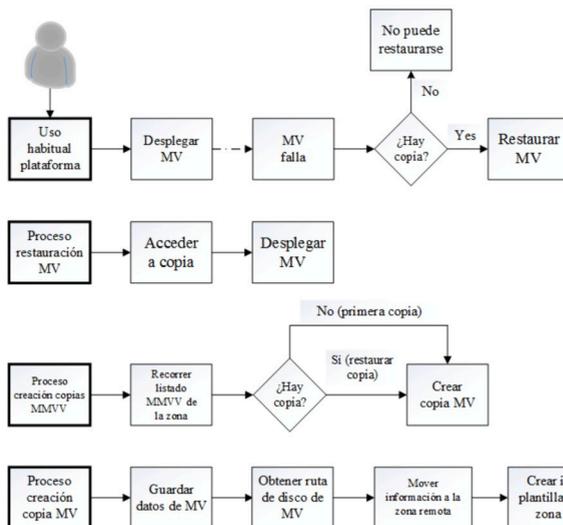
### Resultados

La gestión inteligente de un Centro de Proceso de Datos no sólo ayuda a tomar decisiones a los administradores del momento en el que deben programar el funcionamiento del CPD, sino que permite una mayor planificación tanto de los procesos que soporta el CPD como de las máquinas activas, dependiendo de diferentes factores como el rendimiento, el coste económico, o, incluso, la implicación con el medio ambiente.

Para el desarrollo del gestor inteligente, así como las herramientas de alta disponibilidad, se ha utilizado Ruby (a través de la API de OpenNebula) y shell scripts de bash. Esta interfaz permite implementar aplicaciones que acceden a todos los recursos asociados a la plataforma de OpenNebula y es capaz de ejecutar diferentes operaciones para operar con esos recursos.



El proyecto ha cubierto una primera fase de despliegue en la que se ha decidido implantar el sistema de gobierno en un subconjunto de la infraestructura de CénitS-COMPUTAEX.



La herramienta de seguridad que se ha desarrollado proporciona mecanismos de detección y mitigación de ataques DoS (Denegación de Servicio) a la federación. De esta manera, se protegen los activos más importantes de la misma que son los recursos que se están ejecutando.

A través de tecnologías como funciones de red virtualizadas (NFV, Network Function Virtualization) y redes definidas por software (SDN, Software Defined Networks) se ha conseguido implementar dos módulos para la detección y mitigación de ataques DoS, los cuales se encuentran interconectados,

ya que la mitigación necesita información específica sobre el flujo de tráfico implicado, las IP origen y destino, los puertos origen y destino y el protocolo utilizado para realizar el ataque

Además, en el proyecto se describen mecanismos de alta disponibilidad en forma de sistemas de respaldo de la información y de las máquinas virtuales que se están ejecutando en la federación, de forma que se salvaguarde la información ante posibles incidencias o catástrofes.

Esta funcionalidad es complementaria a los mecanismos de seguridad aportados por OpenNebula para la propia zona, los cuales no permiten que el usuario haga copias en zonas distintas de la federación, sino solamente dentro del mismo conjunto de recursos de cloud de la propia zona local (por ejemplo snapshots del disco o de la propia máquina virtual).

## **GeneTicACE - AGROACE**

---

Si se entiende que la sostenibilidad consiste en lograr más productividad y mejor calidad con menos consumo de recursos naturales, tal vez la genética y la aplicación de la tecnología a los métodos tradicionales, sean las mejores aportaciones que una región puramente agropecuaria como la EuroACE pueda realizar para mejorar la productividad de sus especies animales y vegetales, manteniendo la reconocida calidad de sus materias primas y garantizando la eficiencia en el uso de sus recursos naturales.

Por ello, el principal objetivo del proyecto es el de extraer información de alto nivel y relevante, mediante técnicas de supercomputación y big data, de los factores externos e internos más influyentes en la mejora de la productividad y de la calidad de los productos derivados de las especies estudiadas.

### **Entidades participantes**

Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS (coordinador de la tarea), CTAEX (Centro Tecnológico Agroalimentario de Extremadura), INIAV (Instituto Nacional de Investigación Agraria e Veterinária, I.P. Elvas), CEBAL (Centro de Biotecnología Agrícola e Agro-alimentar do Alentejo) y ESAELVAS (Escola Superior Agrária de Elvas).

## **Red-Integra**

---

Resulta de especial importancia valorizar, divulgar y promover el patrimonio histórico, cultural y paisajístico disponibles, para así lograr una integración de ello con el sector económico. Por ello, el proyecto persigue la mejora de la eficiencia de las administraciones y servicios públicos transfronterizos, así como la reducción de las barreras transnacionales en el ámbito formativo y laboral. Por último, el proyecto también persigue el desarrollo de una agenda de servicios públicos transfronterizos hacia una mayor integración del territorio.

### **Entidades participantes**

Ayuntamiento de Cáceres (coordinador), Câmara Municipal de Portalegre, Município de Castelo Branco, Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS, Ayuntamiento de Plasencia, TRIÁNGULO URBANO IBÉRICO RAYANO – TRIURBIR,AEIE y Universidad de Extremadura.

## **Construcción y equipamiento de Centro de Proceso de Datos para computación de altas prestaciones**

---

La construcción de un CPD que no solo permita trasladar la infraestructura de LUSITANIA II (para albergarla en las mejores condiciones posibles), sino para poder ampliar la capacidad de cómputo de la Fundación COMPUTAEX (para adaptarla a las necesidades vigentes), permitirá seguir contribuyendo al desarrollo regional, nacional, internacional y en particular al local. Por ello, se persigue solicitar financiación (convocatoria “Adquisición de Equipamiento Científico-Técnico 2015” del MINECO (Ministerio de Economía, Industria y Competitividad), cerrada en 2016) para acometer la construcción y dotación de infraestructura de un CPD que acoja al supercomputador LUSITANIA II, del Centro Extremeño de Investigación, Innovación y Supercomputación (CénitS), dependiente de la Fundación pública COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)

### **Entidades participantes**

Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

## **REME (Plataforma de Resiliencia Urbana para la gestión de Micro-Eventos en Tiempo real)**

---

El proyecto REME plantea desarrollar una Plataforma de Resiliencia urbana para la gestión de Micro-eventos en tiempo real (REME), la cual se configurará como un sistema integral capaz de integrar grandes volúmenes de información y convertirlos en conocimiento para prevenir situaciones de riesgo o problemáticas acaecidas en la vida cotidiana de las ciudades.

### **Entidades participantes**

Amaranto Eurogroup S.L (coordinador), Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, Universidad de Alcalá, Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS y Gradiant (Centro Tecnológico de Telecomunicaciones de Galicia).

## **SGDC2 (Smart Green Data Center 2)**

---

El objetivo general del proyecto SGDC2 es la investigación y desarrollo de un sistema inteligente que permita el control y gobierno de todos los elementos que conformen un CPD (Centro de Proceso de Datos) de manera que se logre la eficacia de sus partes más importantes (cómputo, climatización y suministro energético) para alcanzar la eficiencia ecológica y económica de todo el conjunto de CPD.

### **Entidades participantes**

Cobra Instalaciones y Servicios, S.A (coordinador), Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, Amaranto Eurogroup, S.L, Fibratel, Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS y GITACA (Grupo de investigación de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas).

## **Estudio de patrones de consumo en las farmacias para la identificación de modelos de comportamiento que faciliten la mejora de la adherencia a tratamientos relacionados con la salud, la generación de cross-selling (ventas cruzadas), y la detección de otras necesidades no contempladas en los tratamientos del Sistema Nacional de Salud**

---

El principal objetivo del proyecto es dotar a las farmacias de conocimiento y tecnología que les permitan adaptarse a las nuevas necesidades que el sector farmacéutico está demandando. Con ello se logrará mejorar la prestación de los servicios profesionales farmacéuticos, cuyo modelo se hace necesario revisar.

### **Entidades participantes**

Desarrollo y Gestión de farmacias, S.L., Centro Médico Adelante, S.L., Grupo de Investigación de 'Fisiología, Química Analítica y Salud Comunitaria' de la Universidad de Extremadura y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

## **RUMIMETA (Disminución de la huella de metano por inclusión de polifenoles vitivinícolas en la alimentación de rumiantes. Monitorización de su efecto en el bienestar de los animales durante el cebo de terneros).**

---

Determinar los efectos producidos en animales rumiantes, tanto en el ámbito de su influencia en la huella de metano, como en las repercusiones en la calidad de la carne, bienestar animal y costes de producción, debido a la incorporación de polifenoles en las dietas de los mismos.

### **Entidades participantes**

COPRECA SDAD. COOP. (coordinador), Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L., Heral Enología S.L, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Extremadura y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

## **SCIoT (Sistemas Ciberfísicos enmarcados en IoT para aplicación en ganadería de precisión)**

---

El objetivo principal de este proyecto se centra en la aplicación de los sistemas PLF (Precision Livestock Farming) para la consecución de modelos de bienestar animal, a partir de la investigación de nuevos sistemas ciberfísicos basados en el concepto de Internet de las Cosas (IoT) destinados a la monitorización, en tiempo real, del comportamiento y respuesta de los animales, en las explotaciones bobinas de carácter intensivo.

## Entidades participantes

Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

## HERITAGEN

---

El objetivo general del proyecto es estudiar los beneficios de la unificación del patrimonio genealógico y genético en el estudio de enfermedades hereditarias, para reducir la ratio de variaciones de significado incierto detectadas en estudios de secuenciación masiva. Ello se apoyará en el uso de infraestructuras de supercomputación, así como en técnicas de big data, que garanticen la obtención de resultados en el menor tiempo posible, así como la seguridad, la alta disponibilidad y el almacenamiento de la información tratada.

## Entidades participantes

Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS (centro de procedencia del investigador principal), Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara y Fundesalud (Fundación para la Formación e Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura).

## ALABÁN

---

El objetivo general del proyecto es el desarrollo de una plataforma que permita la gestión integral del consumo energético (principalmente adquisición de datos y tratamiento de los mismos), tanto del equipamiento industrial, como doméstico, a través de técnicas de Big Data, para así hacer un mejor uso de los recursos existentes, es decir, una utilización inteligente de los recursos energéticos.

## Entidades participantes

Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS (centro de procedencia del investigador principal) y GITACA (Grupo de investigación de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas) de la Universidad de Extremadura.

## BiG-DatEx: Infraestructura Big Geospatial Data de Extremadura

---

Conseguir hacer fácil la gestión, tratamiento e interacción de las enormes cantidades de geodatos de interés (Big Geo Data), referidos a la Comunidad Autónoma de Extremadura, y extraídos de los satélites orbitales terrestres. Ello conlleva aspectos como los de permitir el acceso abierto (Open Data) a los datos, la provisión de un acceso común a la infraestructura de soporte de los datos o a la interoperabilidad de los servicios proporcionados en la Nube.

## Entidades participantes

Grupo Quercus de ingeniería del software de la Universidad de Extremadura (centro de procedencia del investigador principal) y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

## **Optimización de Algoritmos y Aplicaciones Paralelas en Sistemas Heterogéneos Mediante el Uso Combinado de Modelos Formales de Cómputo y Comunicaciones.**

---

El objetivo último del proyecto consiste en el desarrollo de una herramienta de usuario que proponga una distribución de carga de cómputo en sistemas heterogéneos que encontramos en instalaciones actuales de supercomputación, teniendo en cuenta los modelos computacional y de comunicaciones. La integración de ambos modelos es la parte central de la propuesta. Supondría el primer modelo de estas características que no solo puede ser usado en aras del rendimiento y el consumo energético, sino en simuladores y algoritmos de optimización

### **Entidades participantes**

GIM (Grupo de Ingeniería de Medios) de la Universidad de Extremadura (centro de procedencia del investigador principal), MAPLI (Matemática Aplicada) de la Universidad de Extremadura y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

### **Grupos Operativos**

---

Los objetivos generales del Plan de Comunicación y Difusión para los Grupos Operativos son los siguientes:

- Optimizar el flujo de la información entre los socios del proyecto y organizar una comunicación eficiente entre la instituciones participantes en el proyecto.
- Dar a conocer el proyecto a los potenciales actores involucrados y a los principales beneficiarios.
- Informar y comunicar los resultados del mismo a organismos y entidades públicas y privadas de otras regiones europeas y de las instituciones nacionales y europeas que podrían estar interesadas en el proyecto.

### **Grupo operativo “Agricultura de precisión aplicada para la mejora de explotaciones frutales” (APMEF).**

Este Grupo Operativo tiene como objetivo la mejora y optimización de las explotaciones de frutales, mediante la aplicación de la agricultura de precisión, orientado a la aplicación de nuevas tecnologías en el manejo de nutrientes, del suelo y del cultivo para la consecución de nuevos modelos eficientes y sostenibles de producción de frutales.

### **Entidades participantes**

Grupo Fruvaygo Machuca, Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, ADEVICE, Cellnex Telecom, Agrodrono, Tepro Consultores Agrícolas, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Sevilla Escuela Técnica Superior de Ingeniería (Telecomunicaciones) y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.

## **Grupo Operativo “Ganadería de precisión para terneros, sostenibilidad y bienestar animal” (GAPTER).**

Este Grupo Operativo se centra en la aplicación los sistemas PLF (Precision Livestock Farming) para la consecución de modelos de bienestar animal, a partir de la monitorización, en tiempo real, del comportamiento y respuesta de los animales, frente a nuevas formulaciones alimenticias y nutricionales que reducen la huella de carbono y el impacto ambiental de las explotaciones bobinas de carácter intensivo.

### **Entidades participantes**

Copreca, Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, ADEVICE, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Sevilla Escuela Técnica Superior de Ingeniería (Telecomunicaciones) y Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)-CénitS.





3

# Proyectos de investigación soportados

# Proyectos de investigación soportados

CénitS ofrece su infraestructura, sus recursos y apoyo técnico para acometer proyectos (científicos, técnicos o empresariales). En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2016.

Estos proyectos son llevados a cabo por Universidades, Centros de Investigación y Centros Tecnológicos y requieren una gran cantidad de recursos informáticos (elevada capacidad de cómputo, almacenamiento, equipamiento, etc). En este sentido, se valen de la infraestructura de los supercomputadores LUSITANIA y LUSITANIA II para realizar simulaciones, extrapolar resultados, demostrar hipótesis y diseñar innovaciones.

Los proyectos han sido clasificados en tres categorías que son “Ciencias de la Tierra”, “Ciencias de la Vida” y “Ciencias Informáticas y de Comunicaciones”.

## Ciencias de la Tierra

---



### Applying an ensemble data assimilation technique to generate a high-resolution regional dust analysis

---

**Sara Basart. Barcelona Supercomputing Center. Astronomy, Space and Earth Sciences.  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]**

There is an increasing need for accurate predictions of sand and dust storms because of its impact on life, health, property, environment and economy in many countries. In alignment with the mission of the first Regional Specialized Meteorological Center on Atmospheric Sand and Dust Forecast, the present project aims to prepare the operational implementation of an ensemble data assimilation technique to generate an improved high-resolution regional dust forecast for Northern Africa, Middle East and Europe. The novelty of the proposed project will be the generation of a dust forecast at an

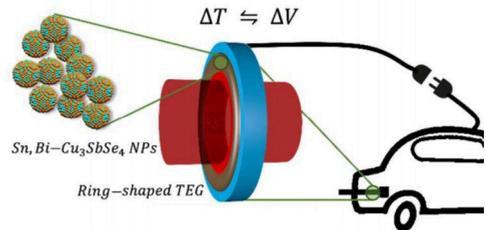
unprecedented high-resolution using a state-of-art dust model and its advanced data assimilation capabilities with the assimilation of satellite products over source regions with specific observational constraints for dust.

## Electronic and Thermoelectric Properties of doped-Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> based compounds from First Principles

**Pablo Palacios Clemente. Universidad Politécnica de Madrid. Departamento de Física Aplicada a las Tecnologías Aeronáutica y Naval.**

Thermoelectric (TE) materials, which can directly convert heat into electricity or viceversa are attracting much attention due to their potential applications not only in the energy conversion industry but also in providing power for electronics. The performance of a TE material is usually evaluated through the dimensionless figure of merit (ZT):  $ZT = (S^2 \sigma T) / k$  (1) where  $S$  is the Seebeck coefficient,  $\sigma$  is the electrical conductivity,  $T$  is the absolute temperature,  $k$

is the thermal conductivity and  $S^2 \sigma$  is the so-called power factor (PF). The thermal conductivity  $k$  is defined as:  $k = k_e + k_l$  (2) where  $k_e$  and  $k_l$  represent the electronic and the lattice components of the thermal conductivity, respectively. Nowadays, only those materials with ZT values amounting to around 1.0 or above are considered to be efficient TE materials. The most efficient way to improve TE performance should increase the Seebeck coefficient and the electrical conductivity (i.e., the power factor should be maximized), while the thermal conductivity  $k$  should be minimized. However, these properties are strongly coupled. As matter of fact, the increase in electrical conductivity by increasing carrier concentration results in lower Seebeck coefficient. These problems are appealing the use of theoretical methods for exploring TE materials with improve performance. Among copper based chalcogenide semiconductors, Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> shows excellent electrical transport properties and relatively low thermal conductivity. Near of the bandgap region, the valence band is mainly due to the hybridization between Cu-3d and Se-4p states, while the conduction band is formed by the hybridization between Sb-5s and Se-4p states. In this configuration, the Cu-Se bonds network plays as the hole conduction path. Therefore, the substitution of Sb atoms could be a reasonable strategy to fine tune the TE properties by adjusting the carrier concentration and minimizing the adverse effects on the hole mobility.



Several works have reported experimental results on the improvement of TE features in Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> by doping in Sb sites with elements such as Ge, In, Sn, Al and Bi. In this project, we propose combination of first-principles calculations and their comparison with available experimental data to investigate the potential of doped-Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> based compounds as TE materials and their relationship with properties such as electronic structure, effective masses or bandgap. Concretely, doped-Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> compounds here studied are obtained by replacing Sb atoms by Ge, In, Sn, Al and Bi, for whose there are available experimental data. In addition, we also explore the TE performance of doped- Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> with As, Pb and Ga. Our results will provide a detailed picture of the thermoelectric performance and useful structure-property relationship between TE features and properties such as electronic structure, effective masses, bandgap or charge carrier concentration.

### Methodology

The most popular theoretical framework to study TE properties is based first-principles calculations in combination with the semi-classical Boltzmann transport theory. Thermoelectric materials are narrow bandgap semiconductors. Therefore, in order to obtain accurate thermoelectric parameter, precise bandgap values are mandatory. Based our previous experience, the electronic band structure will be

calculated using density functional theory (DFT) as implemented in VASP code in combination with the projected augmented wave (PAW) method. Total energy calculations were carried out by using GGA+U approach. The PBE exchange correlation functional, along to the formalism proposed by Dudarev et al. were applied. In this work, we use  $U_{\text{eff}} = 15$  eV for the Cu-3d states. In addition, some test calculations for selected system will be carried out by using HSE. Plane-wave energy cutoff of 450 eV, an energy convergence criterion of 10<sup>-4</sup> eV, and Methfessel-Paxton first-order scheme with 0.1 eV of smearing to extract the occupations of Kohn-Sham eigenvalues. For the Brillouin zone integration, a 12x12x12 Monkhorst-Pack scheme k-point mesh will be used. BoltzTrap code needs a high-number of k-points to calculate transport properties. The convergence test of thermoelectric properties should start at 1000000/V, where V is the volume of the primitive unit cell. Hence, denser k-point mesh will be also tested to assess the convergence of calculated TE parameters as a function of the number of k-points. The model system Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> will be defined through a tetragonal unit cell with 144 atoms (Cu<sub>54</sub>Sb<sub>18</sub>Se<sub>72</sub>), while crystal structures of doped-Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> compounds will be built by replacing one Sb atom by one dopant atom. In this way, the doping concentration is equal to  $x=0.055$ , which is comparable with those doping concentration reported for doped-Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> compounds. Finally, k-point mesh will be increased in order to assess the thermoelectric properties.

Although thermoelectric properties are obtained as a post-process of DFT results by using VASP outputs. Boltztrap code uses a mesh of self-consistent band energies from VASP program, and their calculations will be carried out by using computational resources of our group. A very high-number of k-points are needed to calculate transport properties. Thus, the convergence test of thermoelectric properties should start at 1000000/V, where V is the volume of the primitive unit cell. Therefore, all computational resources requested in this project are due to the calculations of the electronic structure of selected compounds because we will need dense k-mesh and precise density functional methods.

### Publicaciones y congresos:

- Y. Liu, G. García, et al., J. Mat. Chem. A., DOI: 10.1039/C6TA08467B (2016) R. Lucena, J.C. Conesa, I. Aguilera, P. Palacios, P. Wahnón, J. Mat. Chem. A., 2, 8236 -8245. (2014).
- A.L. Montero-Alejo, E. Menendez Proupin, D. Hidalgo-Rojas, P. Palacios, P. Wahnón, J. C. Conesa. J. Phys. Chem. C, 120, 7976-7986, (2016).
- Y. Seminovski, P. Palacios, P. Wahnón, Solar Energy Materials & Solar Cells, 114, 99-103, (2013).
- E. Menendez-Proupin, P. Palacios. P. Wahnón. Material Chemistry and Physics. 160, 420 - 428, (2015).

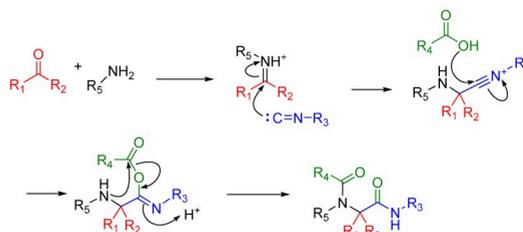
### Fuentes de financiación:

- Ministerio de Economía Industria y Competitividad (MINECO). ENE2013-46624-C4-2-R

## Estudios computacionales en reacciones multicomponentes

**Carlos Fernández Marcos. Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Extremadura.**

Dada la gran demanda actual de productos con finalidades biomédicas, la síntesis de compuestos bioactivos supone un reto para la investigación en química orgánica y química médica. En nuestro grupo estamos interesados en el desarrollo de nuevas reacciones multicomponente de isonitrilos (RMCI) para la síntesis de compuestos de interés biológico.



En estas reacciones se combinan simultáneamente 3 o más reactivos con una gran eficiencia atómica, para dar lugar a un nuevo producto que incluye la mayoría de los átomos de partida. Ejemplos clásicos de RMCI son las condensaciones de Ugi y Passerini, que han encontrado múltiples aplicaciones en la industria farmacéutica. Estas reacciones están gobernadas por una serie de equilibrios reversibles e irreversibles, que pueden verse afectados por sutiles modificaciones en los reactivos de partida o en la condiciones de reacción. Los métodos computacionales son una herramienta muy útil para explicar y fundamentar los resultados experimentales, así como para hacer previsiones con un alto grado de fiabilidad.

## Objetivos

Estudio teórico de nuevas RMCI y, en concreto, planteamos el estudio computacional de dos tipos de reacciones descubiertas en nuestro grupo de investigación: reacciones tipo Ugi con enoles y procesos tándem de cicloadición de isonitrilos para la obtención de aminas aromáticas.

## Metodología

El proyecto consta de una parte experimental en síntesis orgánica y una parte de cálculos computacionales. La investigación sintética se realizará en los laboratorios del grupo en Cáceres.

Los cálculos computacionales se llevarán a cabo utilizando el programa Gaussian y constarán de tres etapas diferenciadas:

- Una primera fase de estudio será la localización de los mínimos de energía, frecuencias, cargas, etc. de todos los reactivos implicados en las reacciones, así como de los productos a los que se llega.
- En una segunda fase mucho más compleja, se elaborará un perfil energético completo de la reacción, calculando estados de transición, orbitales moleculares y estudiando los posibles caminos que pueden llevar a los productos.
- En una tercera etapa se racionalizarán los datos obtenidos para un entendimiento y conexión entre los resultados experimentales y los calculados o bien, haremos uso de la información obtenida para el diseño de nuevas estrategias de síntesis.

## Publicaciones y congresos

- Bornadiego, A., Díaz, J. and Marcos, C. F. (2014), Synthesis of 4-Aminoxanthenes by an Uncatalyzed, Multicomponent Reaction. *Adv. Synth. Catal.*, 356: 718–722. doi: 10.1002/adsc.201300750
- Ana G. Neo, Leda Garrido, Jesús Díaz, Stefano Marcaccini, Carlos F. Marcos. Furo[3,4-b]chromones, and not Pyrano[3,4-b]chromones, are Obtained by the Reaction of 3-Formylchromones with Isocyanides. *Synlett* 2012; 23(15): 2227-2230. DOI: 10.1055/s-0032-1317032.
- Ana G. Neo, Jesús Díaz, Stefano Marcaccini and Carlos F. Marcos. Conjugate addition of isocyanides to chromone 3-carboxylic acid: an efficient one-pot synthesis of chroman-4-one 2-carboxamides. *ORG. BIOMOL. CHEM.*, 2012,10, 3406-3416. DOI: 10.1039/C2OB07011A
- Teresa G. Castellano, Ana G. Neo, Stefano Marcaccini, and Carlos F. Marcos. Enols as Feasible Acid Components in the Ugi Condensation. *Organic Letters* 2012 14 (24), 6218-6221. DOI: 10.1021/ol302976g.

## Flow instabilities in two-component 2D Bose-Einstein condensates

**Antonio Muñoz Mateo. Universidad de Barcelona**

**[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]**

Study of the generation and evolution of nonlinear excitations in two-component (pseudo-spin 1/2) 2D Bose-Einstein condensates of ultracold atomic gases. The project will be focused on the onset of the instabilities in stationary states that give place to the appearance of vortices and solitons.

The equations of motion of the coupled superfluids, in a mean field approximation, will be numerically solved by means of a massively parallel Trotter-Suzuki-MPI solver, with all computational details made available to the public to ensure easy reproducibility of the results.

## Simulación del clima mediante el modelo WACCM

**José Agustín García. Departamento de Física de la Universidad de Extremadura. 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 FINISTERRAE 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

- Se han realizado dos simulaciones del clima, una con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y la 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  $8.5 \text{ W/m}^2$  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.
- 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 realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Community Earth System Model).

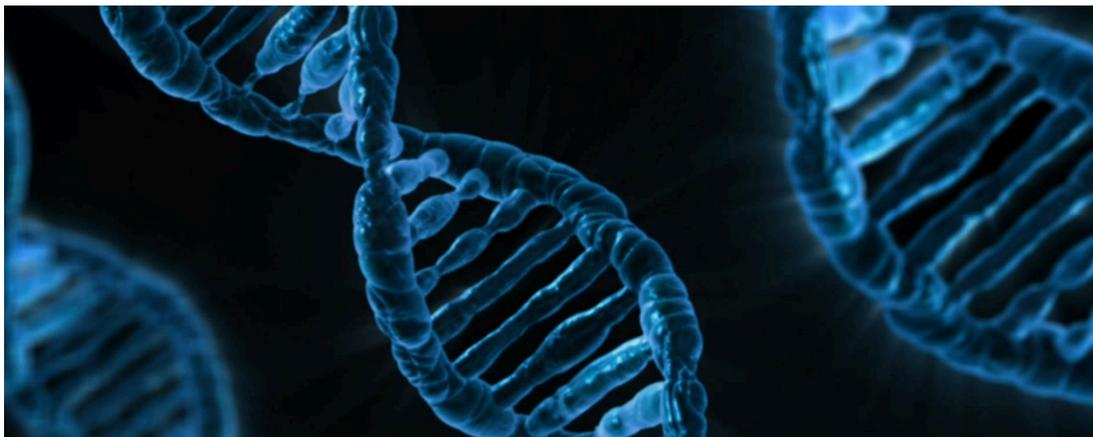
- La idea de este proyecto es analizar la posibilidad de la realización de simulaciones climáticas mediante el supercomputador LUSITANIA. Los modelos anteriores son modelos desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, USA) y están especialmente adaptados para el 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 indica 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.
- Estudio de la tropopausa extratropical mediante el modelo WACCM. Presentación en Ibergrid 2010.

## Ciencias de la Vida

---



### **Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces.**

---

**Sergio Diaz Tendero. Universidad Autónoma de Madrid.**

Study of different properties of small carbon clusters, fullerenes, metal clusters and biomolecules. The main purpose is to understand the mechanism behind the collisions of these species with highly charged atomic ions and energetic photons.

In carbon clusters, the project is focused on properties such as the electronic structure, geometrical properties and stability. For that it uses usual quantum chemistry methods (coupled cluster and multireference methods) as well as Density Functional Theory (DFT).

Study of the charge transfer and fragmentation in collisions of highly charged fullerenes, using a time-dependent close-coupling method developed in our group. The energy deposited leads to fragmentation, which we study using statistical methods also developed in our group.

Study of bigger systems, such as biomolecules (i.e. uracyl or adenine). Application of statistical methods and time-dependent DFT to study the fragmentation of such molecules after collisions with ions and photons.

### **Activación molecular mediante complejos organometálicos con enlaces múltiples heterometálicos**

---

**Miguel Angel Ruiz Alvarez (IP), Daniel García-Vivó, M<sup>a</sup> Esther García Díaz, M<sup>a</sup> Angeles Alvarez Fidalgo. Area de Química Inorgánica, Universidad de Oviedo.**

El objetivo general de la presente investigación es sintetizar nuevos complejos con enlaces múltiples heterometálicos y estudiar su reactividad en un sentido amplio, poniendo especial atención en los procesos generales de activación de moléculas sencillas y su posible utilidad en campos más aplicados como la catálisis. Se parte de la hipótesis, contrastada en distintos estudios experimentales previos, de que los compuestos con enlaces múltiples heterometálicos pueden mostrar una reactividad superior a la de sus homólogos homometálicos, debido a la polaridad intrínseca del enlace heteronuclear. En

particular, y aprovechando la gran experiencia del grupo investigador en el área de los compuestos carbonílicos homobinucleares de los elementos de transición, se abordará la síntesis de nuevos compuestos carbonílicos y ciclopentadienílicos con enlaces múltiples entre átomos metálicos diferentes, principalmente de los grupos 6 a 8, estabilizados mediante ligandos puente de tipo fosforo (PR2) o fosfinideno (PR), que adicionalmente pueden contener, o no, ligandos hidruro puente. En una fase posterior se estudiará la reactividad general de estos complejos frente a moléculas orgánicas e inorgánicas sencillas, y frente a otros complejos metálicos, y también se analizará su actividad en relación con algunos procesos de interés más aplicado, tales como procesos de hidrogenación, activación de óxidos de nitrógeno y del fósforo elemental.

### **Metodología**

El proyecto posee una componente mayoritaria de síntesis inorgánica y estudios de reactividad química. En el transcurso de estos estudios, sin embargo, se plantean con frecuencia problemas que no pueden resolverse exclusivamente mediante técnicas espectroscópicas convencionales, y cuya solución precisa acudir a cálculos mecanocuánticos, típicamente de tipo DFT, que serán realizados empleando el programa GAUSSIAN para obtener información relativa a distintos extremos:

- Determinación de la estructura electrónica más probable de compuestos químicos de baja estabilidad, o de estructura no determinable mediante técnicas espectroscópicas y difractométricas.
- Determinación de energías relativas de isómeros geométricos.
- Análisis de la estructura electrónica y enlace de compuestos de especial relevancia por su inusual estructura geométrica o reactividad.
- Estudio de perfiles energéticos de reacción en transformaciones de especial interés, con identificación de especies intermedias y los correspondientes estados de transición.

## **Estudio de efectos estereoelectrónicos en heterociclo saturados hidroxilados**

**Juan Manuel Garrido Zoido. Grupo de investigación “Química Orgánica” (QUOREX) de la Universidad de Extremadura.**

Realización de una tesis doctoral, investigando sobre los efectos estereoelectrónicos en heterociclos saturados hidroxilados

### **Metodología**

Cálculos de energías relativas de los compuestos estudiados.

## **Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas**

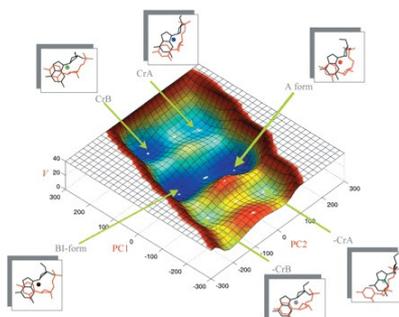
**Guadalupe Silvero Enríquez, Ignacio López-Coca Martín y María José Arévalo Caballero. Grupo de investigación Laboratory of Applied and Sustainable Organic Chemistry (LABASOC). Departamento de Química Orgánica e Inorgánica del Semidistrito de Cáceres de la Universidad de Extremadura.**

Estudiar desde un punto de vista teórico reacciones químicas, para optimizar las condiciones de reacción y los tiempos y rendimientos experimentales y llegar a comprender y explicar los mecanismos por los que transcurren determinados procesos.

Utilización del paquete de programas Gaussian para abordar el estudio.

## GCYDEX. Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos

Joaquín Espinosa García, José C. Corchado Martín-Romo, Cipriano Rangel Delgado, Manuel Monge Palacios, Juan de la C. García Bernáldez, Alberto Cabello Sánchez y José L. Bravo Trinidad. Universidad de Extremadura.



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 Cl+NH<sub>3</sub>, el cual presenta una complicada topología en la superficie de energía potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH<sub>3</sub>, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremanera la construcción de la superficie.

## Glicoconjugados basados en el esqueleto de aminopoliol. Estructura agregación y modificación superficial

**Pedro Cintas Moreno, Martín Ávalos González, Reyes Babiano Caballero, David Cantillo Nieves, José Luis Jiménez Requejo, Rafael Fernando Martínez Vázquez, Juan Carlos Palacios Albarrán y Esther Matamoros Castellano. Grupo QUOREX. Universidad de Extremadura.**

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 herramienta importante:

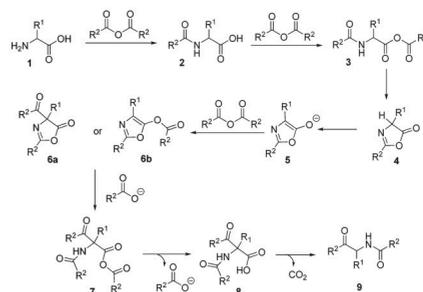
- Estudio de reactividad química en moléculas orgánicas, a elevado nivel teórico; en particular procesos regio-, enantio- y diastereoselectivos catalizados por complejos metálicos.
- Diseño computacional de cápsulas oligoméricas como medios de reacción organizados, evaluando transformaciones selectivas 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.

### Metodología

- Optimización de las estructuras de moléculas mediante cálculos teóricos.

### 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, aminopoliololes 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 aminopolioltris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G\* y M06-2X/6-311++G\*\* se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación (< 8 kcal.mol<sup>-1</sup>). A través de un complejo y costoso protocolo computacional se ha modelado la estructura cristalina, lo que ha puesto de manifiesto la mayor estabilidad de la forma enamínica en el retículo cristalino, hecho que concuerda totalmente con los datos obtenidos a través de difracción de rayos X de monocristal.



- Se ha estudiado también la tautomería imina-enamina en derivados de anilinas y o-hidroxinaftaldehídos, tanto en estado sólido como en disolución. Se han realizado cálculos DFT (a nivel B3LYP/6-31G\*\* y M06-2X/6-311++G\*\*) que han permitido obtener las energías relativas de las formas imínicas, enamínicas y de los estados de transición implicados en su transformación. En este caso se ha encontrado que las diferencias de energía entre iminas y enaminas es mucho menor, tanto en estado sólido como en disolución. También se ha cuantificado la proporción de imina presente en todos los equilibrios, mostrando una buena concordancia con las proporciones obtenidas experimentalmente mediante resonancia magnética nuclear. La simulación de la estructura cristalina de un derivado delnaftaldehído ha puesto de manifiesto que la estructura imínica es ligeramente más estable que la enamínica, lo cual vuelve a estar de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.
- Se han 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 Nussold, 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, azetidines 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
- 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.
- 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.



### Publicaciones y congresos:

- Olsen, B. D.; Segalman, R. A. *Materials Science & Engineering R-Reports* 2008, 62, (2), 37-66.
- Olsen, B. D.; Teclemariam, N. P.; Muller, S. J.; Segalman, R. A. *Soft Matter* 2009, 5, (12), 2453-2462.
- Likhtman, A.; Talib, M.; Vorselaars, B.; Ramirez, J. *Macromolecules* 2013, 46, 1187-1200.
- Ramírez, J.; Sukumaran, S.K.; Vorselaars, B.; Likhtman, A.E. *J. Chem. Phys.* 2010, 133, 154103.
- Likhtman, A.E.; Sukumaran, S.K.; Ramirez, J. *Macromolecules* 2007, 40, 6748-6757.
- Wang, M.; Timachova, L.; Olsen, B.D. *Macromolecules* 2015, 48 (9), 3121–3129.
- Wang, M.; Timachova, L.; Olsen, B.D. *Macromolecules* 2013, 46, 1651–1658

## Nuevas sustancias gelificantes derivadas de monosacáridos e hidrazidas derivadas de diácidos

**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.**

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.

## Química computacional

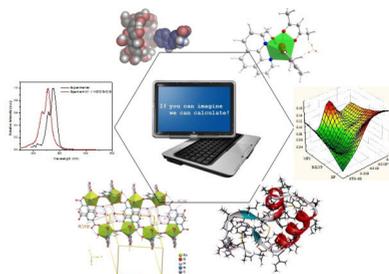
**José Carlos Corchado Martín-Romo del departamento de Ingeniería Química y Física de la Universidad de Extremadura.**

### 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

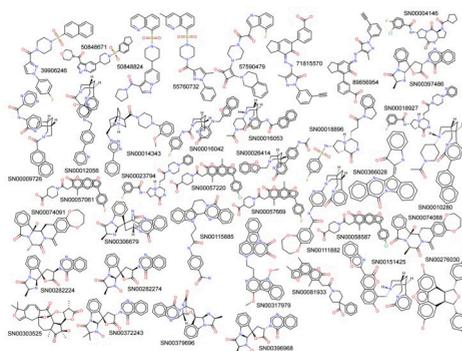


biológico en fase gaseosa o condensada mediante la aplicación de metodologías cinéticas (teorías del estado de transición) y dinámicas (cálculos de trayectorias clásicas, cuasiclásicas o cuánticas, cálculos de dinámica molecular).

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

## Simulaciones moleculares de docking para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus

**Vicente Galiano (IP), José Villalaín, Emmanuel Fajardo. Departamento de Física y Arquitectura de Computadores. Universidad Miguel Hernández de Elche.**



Entre los patógenos que causan las mayores tasas de mortalidad y morbilidad en los seres humanos y los animales podemos nombrar los virus. Sin embargo, en la gran mayoría de los casos, no hay vacunas o tratamientos terapéuticos eficaces. A la familia Flaviviridae de virus pertenecen una serie de patógenos humanos de gran relevancia médica. Virus como el virus de la hepatitis C, el virus de la fiebre amarilla, el virus West Nile, el virus de la encefalitis transmitida por garrapatas, el zika y el dengue pertenecen a esta familia. El dengue (DENV), así como el zika (ZIKV), causan las enfermedades virales transmitidas por artrópodos más

frecuentes entre los seres humanos, afectando a millones de personas al año. Estas enfermedades han evolucionado en los últimos tiempos desde una ocurrencia esporádica a un gran problema de salud pública de orden mundial. Es significativo que todos los procesos inherentes al ciclo de replicación viral están directa o indirectamente relacionados con sistemas de membrana o membranas derivadas de ellas. Todo aquello que pueda interferir con cualquiera de estos procesos sería potencialmente útil para que el virus o bien no puede entrar o bien no pueda salir de la célula. Nuestro grupo tiene como objetivo estudiar la estructura y la interacción con diferentes tipos de sistemas modelo de biomembrana de varios dominios de péptidos derivados de las proteínas estructurales y no estructurales de los virus DENV y ZIKV. A partir del conocimiento experimental que tenemos sobre las proteínas estructurales y no estructurales del DENV, nuestros objetivos son el estudio in silico de la dinámica molecular de los péptidos seleccionados de DENV y ZIKV interactuantes con sistemas modelo de iomembranas, la obtención de información exhaustiva sobre su estructura y su interacción específica con los lípidos, la determinación mediante in silico screening y peptide docking con el fin de obtener péptidos antivirales y moléculas bioactivas contra aquellas estructuras obtenidas anteriormente, y en su caso probarlas in vitro para comprobar su efectividad utilizando diferentes composiciones de biomembranas modelo. Todo esto permitirá el desarrollo de nuevos compuestos útiles para la mejora de las terapias combinadas con el fin de lograr el objetivo final, la erradicación de las infecciones virales producidas por DENV y ZIKV.

### Publicaciones y congresos:

- Vicente Galiano, Pablo Garcia-Valtanen, Vicente Micol, Jose Antonio Encinar. Looking for inhibitors of the dengue virus NS 5 RNA-dependent RNA-polymerase using a molecular docking approach. *Drug Design, Development and Therapy*. Volume 2016:10 Pages 3163-3181. DOI: <https://dx.doi.org/10.2147/DDDT.S117369>

# Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional

**Santiago Aparicio. Departamento de Química de la Universidad de Burgos.**

Air pollution is attracting an increasing attention through-out the world. SO<sub>2</sub>, mainly emitted from fossil-fuel combustion, is one of the main air pollutants. Besides, SO<sub>2</sub> is also an important and useful source for many intermediates in chemical synthesis. Thus, to develop efficient techniques to control the emissions of SO<sub>2</sub> would have a pivotal role for the use of fossil fuels from an environmental point of view. Nowadays, the most effective methods to control SO<sub>2</sub> emissions from fossil fuel combustion are based on flue gas desulphurization (FGD) using several technologies such as water scrubbing, metal ion solution, catalytic oxidation, activated carbon adsorption, wet lime or limestone scrubbing, double alkali process, ammonia scrubbing, NH<sub>3</sub> gas injection, and organic solvent absorption.

However, most of these methods show several problems. For example, thus methods need a large amount of water and subsequent treatment of the resultant waste, or they produce calcium sulfate, between others. One of the most interesting techniques for the capture of a concrete compound from a mixture of gases in a gas stream is selective absorption into a liquid. In this sense, ionic liquids (ILs) have received an increasing attention in the field of acid gases (for example CO<sub>2</sub> or SO<sub>2</sub>) capture owing to their unique properties such as negligible vapor pressures, high thermal stability, wide liquid temperature ranges, and the possibility of tailoring their properties for and specific applications through the judicious combination of suitable ions.<sup>6</sup> So far, ILs have been demonstrated to be very useful to absorb CO<sub>2</sub> from mixed gases or flue gases with high absorption capacity and selectivity and they can be easily regenerated (see review works by Brennecke et al. and Ramdin et al., and references therein, for an analysis of the state-of-the-art for CO<sub>2</sub> capture using ILs). Unfortunately, researches about ILs for SO<sub>2</sub> capture are scarcer in comparison with CO<sub>2</sub>.<sup>2,3,5,6</sup> To design new ILs with improved / concrete features for SO<sub>2</sub> capture, or acid gases capture, in general, we need a deeper knowledge from a molecular point of view about those factors which govern absorption process and their relationship with the molecular structure. Often, the properties of this kind of systems are due to the contribution of several complex factors, which are not completely described for the quantum chemical methods. Even if, these have been prove to be a powerful tool to obtain better insights into interactions between ILs and CO<sub>2</sub>. To our knowledge, there are few works dealing with SO<sub>2</sub> capture from a quantum chemical perspective.

## Objetivos

Therefore, this work is devoted to a predictive study of those properties related with interactions between ILs and SO<sub>2</sub> from a molecular point of view through a quantum methodology, mainly Density Functional Theory (DFT) calculations (see 3.4 section). The obtained results will allow understanding the relationships between molecular structure and properties and proposing new ILs or modifications of those existing to obtain systems with improved features for SO<sub>2</sub> capture.

## Metodología

This project is devoted to obtain a deeper knowledge about the SO<sub>2</sub> capture and its relation with the molecular structure from a quantum chemistry perspective. Most of the works about acid gases capture through DFT calculations are referred to CO<sub>2</sub> absorption, which mostly employ B3LYP functional along Pople's basis sets (such as 6-311+G\*\* or 6-31+G\*\*) in gas phase.<sup>9</sup> About SO<sub>2</sub> capture, theoretical works are still scarce, and most also use B3LYP functional.<sup>6</sup> When the acid gas capture occurs through a physical sorption process (physisorption), we could classify the interaction in our system into two groups: i) ionic interactions between cation and anion forming the IL; and ii) Dispersion interaction between acid gas and ILs. Due to the nature of these interactions, the first step in the study of SO<sub>2</sub> capture from a DFT perspective should have been to analyze the effect of the

employed functional about SO<sub>2</sub> capture related properties, such as geometries and interactions energies (between ionic pairs of the IL and absorbate and the gas and the IL). This study will allow us obtain information, between others, about the effect of the employed functional (pure, hybrid, meta-GGA, % Hartree-Fock, HF, contribution) about the calculated properties. For such purpose, the first step in this study is to choose a set of several functionals, such as: pure functional (PBE, BLYP), hybrid and meta-GGA functional with different % HF (B3LYP: 20%, PBE0: 25% and M06: 27%, M06-2X: 54%, M06-HF: 100%), range separated hybrid functional with an asymptotically %HF (LC-PBE, CAM-B3LYP,  $\omega$ B97X). Due to the possible dispersion interactions between the gas and the ionic liquids, we will also use dispersion corrected functionals according the semiempirical model proposed by Grimme: PBE-D, PBE0-D, B3LYP-D,  $\omega$ B97XD, which use Grimme's D2 dispersion model.

Finally, pure HF and MP2 calculations will also be carried out. The Pople's 6-31+G\*\* and 6-311+G\*\* basis sets have been selected. Thus, we can also test the effect of the basis sets. Due to the high computational cost, MP2 would be done over B3LYP geometries, and obtained MP2/6-311+G\*\* energies will be considered as reference energies. From this systematic work, we should be also able to select a suitable functional based on calculated properties and computational cost. For this purpose a set of common alkyl-imidazolium cation based ILs amply used to capture acid gases have been selected. Although this project is devoted to SO<sub>2</sub> capture, this kind of study is also required for CO<sub>2</sub> capture. For our calculations, our model is constituted by the anion and the cation corresponding to the IL and the absorbed molecule. At the beginning all calculation will be done in gas phase. Actually, sulfonated gases from fossil-fuel combustion are mixture of several gases besides SO<sub>2</sub>, such as CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, or N<sub>2</sub>. In this sense, obtain information about the selectivity of the ILs is also important. Therefore, the next step in our work is considered a molecule of another gas (CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, or N<sub>2</sub>) along and without SO<sub>2</sub> to obtain information about the selectivity of a concrete ILs from a molecular point of view. So far, all proposed computational works would be done in gas-phase. However, once know the dielectric constant of a given IL (obtained from experimental measures or Molecular Dynamics Simulations carried out in our laboratory), we could also study the SO<sub>2</sub> capture in a most realistic liquid environment through continuum solvation model (CPCM).

### Publicaciones y congresos

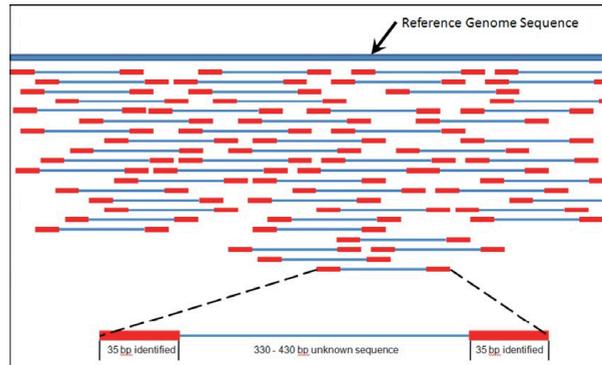
- S. Aparicio, M. Atilhan. Molecular Dynamics Study of Carbon Nanostructures in N-Methylpiperazinium Lactate Ionic Liquid. *J. Phys. Chem. C* 2013, 117, 22046.
- S. Aparicio, M. Atilhan. On the Properties of CO<sub>2</sub> and Flue Gas at the Piperazinium-Based Ionic Liquids Interface: A Molecular Dynamics Study. *J. Phys. Chem. C*, 2013, 117, 15061.
- F. Karadas, B. K z, J. Jacquemin, E. Deniz, D. Rooney, J. Thompson, C. T. Yavuz, M. Khraisheh, S. Aparicio, M. Atilhan. High Pressure CO<sub>2</sub> Absorption Studies on Imidazolium-Based Ionic Liquids: Experimental and Simulation Approaches. *Fluid Phase Equilibr.*, 2013, 351, 74.
- J. Y. Jung, F. Karadas, S. Zulfiqar, E. Deniz, S. Aparicio, M. Atilhan, C. T. Yavuz, S. M. Han. Limitations and High Pressure Behavior of MOF-5 for CO<sub>2</sub> Capture. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2013, 15, 13319.
- S. Aparicio, M. Atilhan. A Computational Study on Choline Benzoate and Choline Salicylate Ionic Liquids in the Pure State after CO<sub>2</sub> Adsorption. *J. Phys. Chem. B*, 2012, 116, 9171.

## Utrasecuenciaci n gen tica mediante t cnicas de supercomputaci n

**Luis Fern ndez Pereira, Silvia Romero Chala y Jos  Antonio Garc a Trujillo. Servicio de Inmunolog a y Gen tica Molecular del Hospital San Pedro de Alc ntara.**

Este proyecto, asistencial y de investigaci n, est  siendo desarrollado por el Servicio de Inmunolog a y Gen tica Molecular del Hospital San Pedro de Alc ntara de C ceres (Servicio Extreme o de Salud) en colaboraci n con investigadores de la Fundaci n COMPUTAEX. Las nuevas t cnicas de

secuenciación masiva de ADN, cuyo uso se está imponiendo en el ámbito de la genética y la bioinformática, permiten secuenciar el genoma de un ser humano con una reducción en términos de tiempo y coste económico cada vez mayor. Por ello, se hace necesaria la utilización de supercomputadores como LUSITANIA, que además de procesar la ingente cantidad de datos generada, para poder estudiar la información contenida en el ADN, permite simular rasgos complejos de genes, estructuras subatómicas y tridimensionales, así como aminoácidos de las proteínas.



## Objetivos

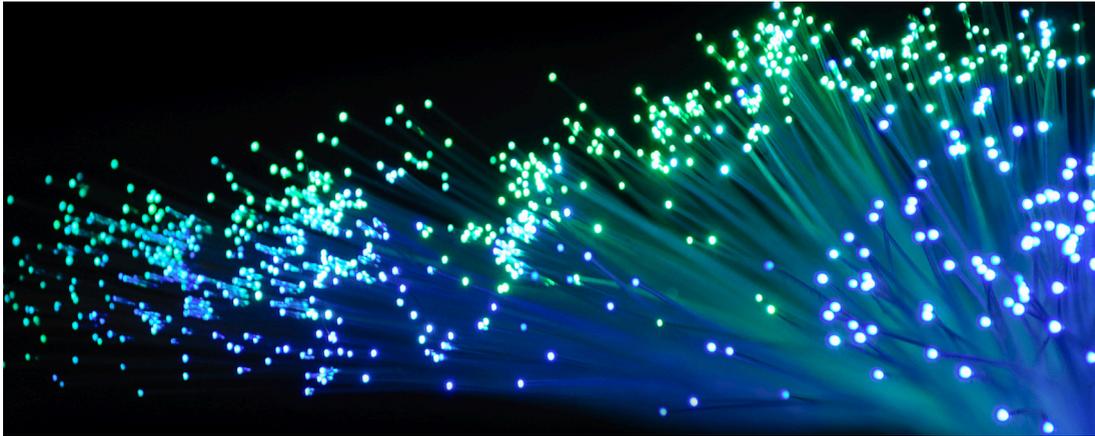
- Investigación de enfermedades genéticas y neurodegenerativas.
- Investigación sobre el desarrollo y la predisposición genética a desarrollar distintos tipos de cáncer y posterior mejora en la determinación de estrategias para prevenirlos y tratarlos adecuadamente.
- Análisis de la predisposición al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

## Objetivos alcanzados

- Se ha dispuesto la infraestructura necesaria, mediante un modelo de Cloud Computing, para llevar a cabo las diferentes tareas de procesamiento de la información obtenida al llevar a cabo las tareas del flujo de trabajo de un estudio de resecuenciación del ADN 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 exoma de un paciente anónimo de forma autónoma e independiente, obteniendo datos para que los especialistas interpreten la predisposición de esa persona al desarrollo de determinadas enfermedades hereditarias.
- Se ha trabajado para desarrollar herramientas para la interpretación, de forma manual, de la información obtenida en el procesamiento de las secuencias genéticas procesadas en LUSITANIA.

## Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

---



### Adecuación del CPD de LUSITANIA II

---

#### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Inicialmente el desarrollo y despliegue del nuevo supercomputador de Extremadura, LUSITANIA II, arrancó tras la aplicación de los resultados obtenidos en el proyecto Smart Green Data Center (SGDC) para la instalación del supercomputador en un CPD (Centro de Proceso de Datos) al aire libre. Esto permitió evaluar el comportamiento de la supercomputación en campos tan dispares como el de la movilidad, la modularidad y la monitorización, siendo capaz de poner a disposición de la comunidad investigadora un supercomputador en un CPD logrando la eficacia de sus partes más importantes (cómputo, climatización y suministro energético) maximizando la eficiencia y minimizando los impactos que experimentan los edificios que albergan los CPD (consumo energético, ruidos, vibraciones, radiaciones, etc).

Una vez finalizado el periodo del proyecto definido para la toma de datos, tanto del uso del supercomputador al aire libre, como del rendimiento del mismo en un CPD al aire libre, se ha procedido a la ejecución de la segunda fase del proyecto en la que se traslade el supercomputador a su nuevo emplazamiento, en una sala técnica en el interior del centro CénitS, debiendo, para ello, abordar la correcta adecuación de un espacio habilitado dentro del centro para su conversión en un CPD que permita el traslado y alojamiento de los equipos que componen el supercomputador LUSITANIA II.

Esta sala, por tanto, ha sido acondicionada desde el estado actual en el que se encontraba hasta una sala técnica con la adecuación necesaria para el correcto funcionamiento de los equipos.

#### Objetivos

El alcance de las tareas de adecuación que se han llevado a cabo, han comprendido el diseño completo de una sala técnica trabajando en cada uno de los siguientes grupos de trabajo:

- Adecuación del suelo de la sala para acoger equipamiento técnico.
- Sistemas de climatización destinados a mantener los niveles de refrigeración correctos de los sistemas que alberga la sala técnica.
- Adecuación eléctrica para alimentar correctamente a los equipos TI y a los sistemas de climatización.

## Metodología

La sala es una estancia de 60 metros cuadrados, de forma rectangular que ha sido habilitada como sala para albergar equipamiento TI. En la sala técnica se ha dispuesto una zona de falso suelo elevado donde se ha instalado todo el equipamiento informático.

El sistema de climatización para la sala técnica se ha implementado mediante un sistema in-row, compuesto por una chiller instalada en el exterior del edificio, de 77 kW de capacidad de refrigeración. El equipo in-row tiene una capacidad de refrigeración de 17 kW y está destinado al enfriamiento de los equipos TI.

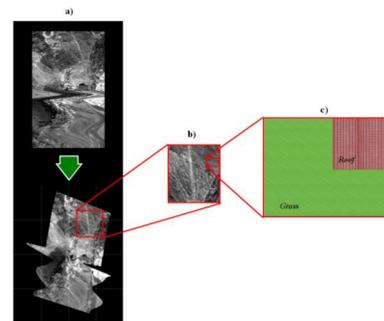
Se ha realizado la adecuación completa de la alimentación eléctrica para dotar de 100 KVA de capacidad requerida por el supercomputador, tanto para su uso actual, como para el crecimiento futuro.

## Optimization of the Diffused Matrix Format for Heterogeneous Parallel Computing

**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 diferentes 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 multispectrales 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, Hernández LM, Pérez RM, Plaza A, Plaza J, Aguilar PL (2009). "Análisis del Funcionamiento de la Matriz Difusa para el Tratamiento de Imágenes Hiperespectrales". Globalgeo. Geomatic & Geotelematic International Show. International Geomatic Week, Barcelona (Spain).
- Martínez P, Cristo A, Koch M, Pérez RM, Schmid T, Hernández LM (2010). "Diffused Matrix Format: A New Storage and Processing Format for Airborne Hyperspectral Sensor Images". *Sensors* 10: 4996-5013.
- Cristo A, Martínez P, Pérez RM, Hernández LM, Merino J, Valencia D (2010). "Diffused Matrix Format: A New Output Format for Onboard Processing Systems". JPL/NASA HypsIRI Science Workshop - Hyperspectral Infrared Imager, Pasadena (USA).
- Cristo A, Martínez P, Koch M, Pérez RM, Schmid T, Hernández LM (2010). "Storage of Hyperspectral Sensor Images, Sources of Error and Footprint Analysis". Recent Advances in Quantitative Remote Sensing III, Torrent (Spain).
- Pérez RM, Cristo A, Koch M, Martínez P, Schmid T, Gualtieri AJ, Hernández LM (2010). "FLEX/Sentinel-3 Data Fusion by Using the Diffused Matrix Format (DMF)". 4th International Workshop on Remote Sensing of Vegetation, Valencia (Spain).
- 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).

### **Metodología**

Se pretende lanzar simulaciones costosas para optimizar el modelado de sistemas MIMO. Se usarán metaheurísticas, especialmente secuenciales, pero también paralelas, para reducir los tiempos cómputo a valores razonables.

## **Paralelización automática de códigos secuenciales para el uso eficiente de recursos en centros de computación de alto rendimiento.**

**Javier Corral García y José Luis González Sánchez, Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CénitS). Miguel Ángel Pérez Toledano, Departamento de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos. Universidad de Extremadura.**

La computación de alto rendimiento (HPC – High Performance Computing) es requerida por científicos de todas las ramas de la ciencia, en aplicaciones donde el tiempo de obtención de resultados juega un papel crucial. Sin embargo, la ejecución de códigos en centros HPC puede resultar una tarea complicada, especialmente para investigadores que no tienen experiencia previa en programación paralela. Estos usuarios necesitan un apoyo adicional para paralelizar y optimizar sus códigos, con el fin de obtener resultados fiables y al mismo tiempo hacer un uso eficiente de los recursos disponibles. El principal problema reside en el hecho de que los algoritmos paralelos no son diseñados únicamente para describir cómo se realizará el trabajo, sino también para definir cómo éste será descompuesto y distribuido a través de múltiples procesadores.

Por ello, este proyecto persigue la creación de un novedoso analizador de código para la paralelización automática de códigos secuenciales, centrado en la gestión de recursos de un centro de supercomputación, donde las decisiones de programación eficientes y el ahorro energético se convierten en desafíos clave.

### **Objetivo:**

- Desarrollo de un analizador para la paralelización automática de códigos secuenciales, orientado a usuarios inexpertos, para realizar un uso eficiente de los recursos de HPC de manera adecuada y eficaz, minimizando el consumo de energía y evitando pérdidas de tiempo innecesarias en el aprendizaje y uso de la programación paralela.

### **Metodología:**

El código secuencial de entrada es descompuesto generando un árbol de sintaxis abstracta (AST), que contiene la representación del código a ser paralelizado. El análisis posterior del árbol se realiza con la ayuda de patrones de comportamiento y tablas de símbolos, mediante los cuales se extrae la información útil que permite realizar la traducción final en código OpenMP. Para determinar un uso eficiente de los recursos disponibles, se emplean algoritmos evolutivos que realizan tareas de optimización multiobjetivo, con el fin de equilibrar el consumo energético con la necesidad de obtener resultados en tiempos adecuados, escogiendo automáticamente la estrategia de planificación más adecuada y determinando el número óptimo de procesadores que deben ser reservados para su ejecución.

### **Publicaciones:**

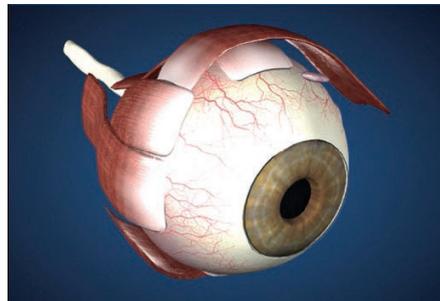
- Javier Corral-García, José-Luis González-Sánchez and Miguel A. Pérez-Toledano. Towards Automatic Parallelization of Sequential Programs and Efficient Use of Resources in HPC Centers. Proceedings of the 2016 International Conference on High Performance Computing & Simulation. IEEE HPCS 2016. Innsbruck, Austria. July 18-22, 2016. ISBN: 978-1-5090-2087-4, electronic ISBN: 978-1-5090-2088-1. pp 947-954. DOI: 10.1109/HPCSim.2016.7568436
- Javier Corral-García, César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez. Green Code, Energy Efficiency in the Source Code for High-Performance Computing. Sistemas y Tecnologías de la Información, Actas de la 10ª Conferencia Ibérica de Sistemas y Tecnologías de la Información, Vol. II. CISTI 2015. Águeda, Aveiro, Portugal. 17-20 junio 2015. ISBN: 978-989-98434-5-5. pp 61-64.

- Javier Corral-García, César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez y David Cortés-Polo. Development of Scientific Applications with High-Performance Computing through a Component-Based and Aspect-Oriented Methodology. International Journal of Advanced Computer Science, Vol. 3, No. 8, August 2013. IJEC International Journal Editorial. ISSN: 2251-6379. pp 400-408.
- Javier Corral-García, José-Luis González-Sánchez, César Gómez-Martín y David Cortés-Polo. Aplicabilidad de la Reutilización de Código a la Implementación de Soluciones en Entornos HPC. Sistemas y Tecnologías de la Información, Actas de la 8ª Conferencia Ibérica de Sistemas y Tecnologías de la Información, Vol. II. CISTI 2013. Lisboa, Portugal. 19-22 junio 2013. ISBN: 978-989-98434-0-0. pp 359-362.
- Javier Corral-García, César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez, and David Cortés-Polo. Development of Pattern-Based Scientific Applications for High-Performance Computing. Proceedings of 6th Iberian Grid Infrastructure Conference, IBERGRID '12. Lisboa, Portugal. 7-9 noviembre 2012. ISBN: 978-989-98265-0-2. pp 147-158.
- Javier Corral-García, David Cortés-Polo, César Gómez-Martín y J.L. González-Sánchez. Methodology and Framework for the Development of Scientific Applications with High-Performance Computing through Web Services. 6th Euro American Conference on Telematics and Information Systems, EATIS 2012. Valencia, España. 23-25 Mayo 2012. ISBN: 978-1-4503-1012-3. pp 173-180. DOI: 10.1145/2261605.2261631.

## Unidad Interactiva 3D

**Dr. Jesús Usón Gargallo, coordinador de proyecto. Mario Suárez, coordinador del equipo de trabajo y especialista en diseño y animación 3D. Alejandro Cristo, doctor en tecnologías informáticas. Alfonso Rodríguez, licenciado en comunicación audiovisual.**

El proyecto contempla la creación de una unidad especializada en aplicaciones multimedia dirigida a un mercado constituido por los profesionales sanitarios que se forman en el CCMIJU, así como usuarios y pacientes que puedan ser objeto de las técnicas que se describen y miembros de la sociedad en general, que tengan interés en conocer, de una forma sencilla, el procedimiento a seguir en el tratamiento intervencionista en una patología, como por ejemplo mediante la visualización de vídeos de operaciones quirúrgicas.

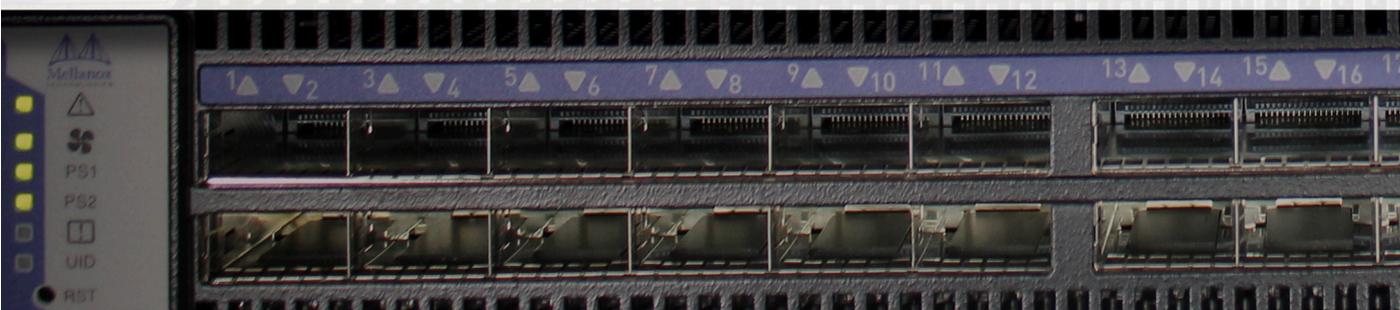


### Objetivos

- Crear dentro del propio CCMIJU un proyecto con proyección internacional, cuya oferta y forma de operar constituyan una empresa de referencia en el sector biosanitario, y que al mismo tiempo proporcione empleo creciente conforme se vayan ampliando el número de especialidades y aplicaciones desarrolladas.
- Utilizar los recursos del supercomputador LUSITANIA para disminuir los tiempos de procesado que requiere el proyecto.



# Resultados de investigación





## Resultados de investigación

La obtención de resultados de investigación es esencial para un centro de investigación e innovación tecnológica como CénitS, que permite a un destacado número de investigadores e innovadores acometer sus actividades. Muchos de estos proyectos llegan a alcanzar una notable visibilidad con publicaciones de diverso ámbito, en la necesaria transferencia tecnológica, una de las prioridades la Fundación COMPUTAEX.

Esta sección presenta los resultados más notables que han sido publicados en congresos y revistas durante el año 2016, además de los Trabajos Finales de Máster desarrollados.

### Publicaciones en congresos

---

#### **Human Body Feature Detection and Classification for Rehabilitation Therapies with Robots**

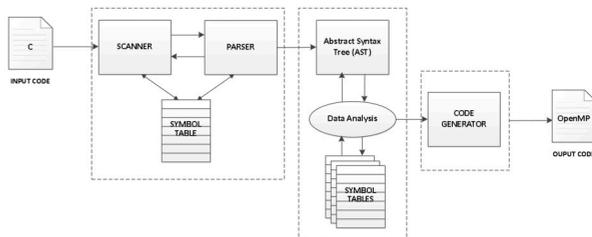
**Mógena-Cisneros, E., Núñez Trujillo, P., and González-Sánchez, J. L.. XVII Workshop of Physical Agents. Proceedings of the WAF 2016 pp 39-46**

Current modern society is characterized by an increasing level of elderly population. This population group is usually ligated to important physical and cognitive impairments, which implies that older people need the care, attention and supervision by health professionals. In this paper, a new system for supervising rehabilitation therapies using autonomous robots for elderly is presented. The therapy explained in this work is a modified version of the classical 'Simon Says' game, where a robot executes a list of motions and gestures that the human has to repeat each time with a more level of difficulty. The success of this therapy from the point of view of the software is to provide from an algorithm that detect and classified the gestures that the human is imitating. The algorithm proposed in this paper is based on the analysis of sequences of images acquired by a low cost RGB-D sensor. A set of human body features is detected and characterized during the motion, allowing the robot to classify the different gestures. Experimental results demonstrate the robustness and accuracy of the detection and classification method, which is crucial for the development of the therapy.

## Towards automatic parallelization of sequential programs and efficient use of resources in HPC centers. In High Performance Computing & Simulation

Javier Corral-García, José-Luis González-Sánchez and Miguel A. Pérez-Toledano. *Proceedings of the 2016 International Conference on High Performance Computing & Simulation. IEEE HPCS 2016. Innsbruck, Austria. July 18-22, 2016. ISBN: 978-1-5090-2087-4, electronic ISBN: 978-1-5090-2088-1. pp 947-954. DOI: 10.1109/HPCSim.2016.7568436*

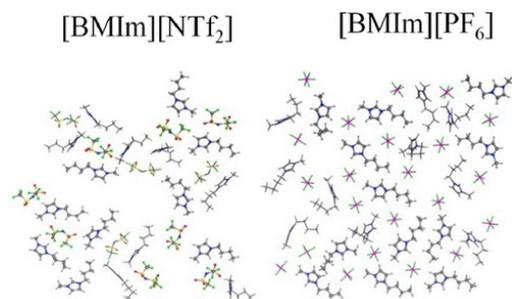
High-Performance Computing (HPC) is becoming increasingly required by scientists of all branches in order to achieve their desired research results. However, carrying out their research in an HPC center can be a difficult task when they are new to parallel programming. These users need support in the parallelization and optimization of their codes, in order to obtain reliable results as well as make efficient use of the available resources. For this purpose, a novel code analyzer for automatic parallelization of sequential codes is presented, focused on resource management of a supercomputing center, where efficient scheduling decisions and energy saving become key challenges. Thus, this paper aims to introduce the analyzer so as to demonstrate the importance of using it, specially in terms of efficiency, when running parallel codes in HPC centers.



## Publicaciones en revistas

### A molecular dynamics study on aminoacid-based ionic liquids

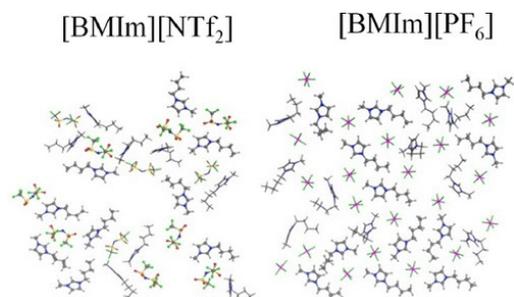
Herrera, C., García, G., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2016). *Journal of Molecular Liquids*, 213, 201-212



The properties of aminoacid based ionic liquids are studied using classic molecular dynamic simulations. Ionic liquids comprising glycine, serine, alanine and phenyl alanine anions combined with 1-ethyl-3-methylimidazolium, cholinium and N-methylpiperazinium cations are considered. Intermolecular forces, fluids' structuring and dynamic properties were analyzed from a nanoscopic viewpoint. The report showed large interionic hydrogen bonding, both for anion-cation and anion-anion interactions for ionic liquids containing 1-ethyl-3-methylimidazolium cation, with strong effect raising from the anion functional groups. The extension of hydrogen bonding in cholinium-based ionic liquids is almost the half of these in 1-ethyl-3-methylimidazolium ones, but the strength of interactions is equivalent. The intermolecular interactions in piperazinium-based compounds are characterized by strong anion-cation hydrogen bonding leading to the transfer of one of the amino hydrogen atoms from the cation to the anion. This study provides molecular level information on new families of ionic liquids, which can be used for the rational design of ionic liquids regarding to new applications.

## C–C and C–N Couplings in Reactions of the Benzylidyne-Bridged Complex $[\text{Mo}_2\text{Cp}_2(\mu\text{-CPh})(\mu\text{-PCy}_2)(\text{CO})_2]$ with Small Unsaturated Organics

García, M. E., García-Vivó, D., Menéndez, S., & Ruiz, M. A. (2016). *Organometallics*, 35(20), 3498-3506.

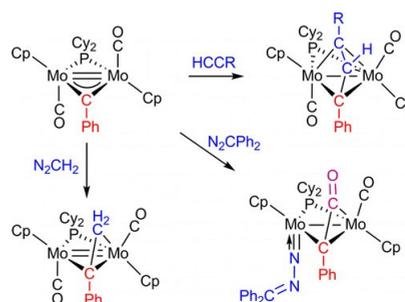


The ability of the title compound to promote C–C coupling processes has been analyzed by examining its reactions with diazoalkanes, alkynes, and other unsaturated organic molecules. The title compound reacted with  $\text{N}_2\text{CPh}_2$  at room temperature to give a mixture of ketenyl complex  $[\text{Mo}_2\text{Cp}_2\{\mu\text{-}\kappa^1\text{:}\eta^2\text{-C(Ph)CO}\}(\mu\text{-PCy}_2)(\text{CO})(\kappa^1\text{-N}_2\text{CPh}_2)]$  and carbyne complex  $[\text{Mo}_2\text{Cp}_2(\mu\text{-CPh})(\mu\text{-PCy}_2)(\text{CO})(\kappa^1\text{-N}_2\text{CPh}_2)]$ , products which can be converted into each other by addition/removal of CO, respectively. In contrast, denitrogenation took place rapidly in analogous reactions with diazomethane and benzylazide at room temperature, to yield, respectively, the corresponding alkenyl  $[\text{Mo}_2\text{Cp}_2\{\mu\text{-}\kappa^1\text{:}\eta^2\text{-C(Ph)CH}_2\}(\mu\text{-PCy}_2)(\text{CO})_2]$  and iminoacyl  $[\text{Mo}_2\text{Cp}_2\{\mu\text{-C(Ph)NCH}_2\text{Ph}\}(\mu\text{-PCy}_2)(\text{CO})_2]$  derivatives, following from selective C–C and C–N couplings. The title compound reacted at 333 K with methyl propiolate to give the corresponding propenylidene derivative  $[\text{Mo}_2\text{Cp}_2\{\mu\text{-}\kappa^2\text{:}\eta^3\text{-CPhCHC(CO}_2\text{Me)}\}(\mu\text{-PCy}_2)(\text{CO})_2]$ , as a result of selective coupling of the carbyne ligand to the terminal carbon of the alkyne. A related complex could be obtained when using the internal alkyne dimethyl acetylenedicarboxylate.

## Cycloaddition Reactions of the Phosphinidene-Bridged Complex $[\text{Mo}_2\text{Cp}(\mu\text{-}\kappa^1\text{:}\eta^5\text{-PC}_5\text{H}_4)(\text{CO})_2(\eta^6\text{-HMes}^*)]$ with Diazoalkanes and Other Heterocumulenes

Albuérne, I. G., Alvarez, M. A., Amor, I., García, M. E., García-Vivó, D., & Ruiz, M. A. (2016). *Inorganic Chemistry*, 55(20), 10680-10691.

The title phosphinidene complex reacted at room temperature with  $\text{CS}_2$  and  $\text{SCNPh}$  to give the phosphanyl derivatives  $[\text{Mo}_2\text{Cp}\{\mu\text{-}\kappa^2_{\text{PS}}\text{:}\kappa^1_{\text{S}}\text{:}\eta^5\text{-P(CS}_2\text{)C}_5\text{H}_4\}(\text{CO})_2(\eta^6\text{-HMes}^*)]$  and  $[\text{Mo}_2\text{Cp}\{\mu\text{-}\kappa^2_{\text{PS}}\text{:}\kappa^1_{\text{P}}\text{:}\eta^5\text{-P(C(NPh)S)C}_5\text{H}_4\}(\text{CO})_2(\eta^6\text{-HMes}^*)]$ , respectively ( $\text{Mes}^* = 2,4,6\text{-C}_6\text{H}_2\text{(tBu)}_3$ ), which result from a [2 + 2] cycloaddition of a C=S bond in the organic reagent to the Mo=P bond of the phosphinidene complex, with further insertion of S into the remaining Mo–P bond, in the  $\text{CS}_2$  reaction. The title complex also reacted with diazoalkanes phosphalkene derivatives  $[\text{Mo}_2\text{Cp}\{\mu\text{-}\eta^2\text{:}\kappa^1_{\text{P}}\text{:}\eta^5\text{-P(CRR')C}_5\text{H}_4\}(\text{CO})_2(\eta^6\text{-HMes}^*)]$  ( $\text{CRR}' = \text{CH}_2, \text{CPh}_2, \text{CH(SiMe}_3)$ ).



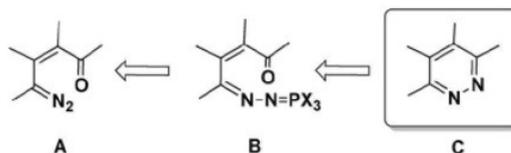
These products follow from a formal [2 + 1] cycloaddition of the carbene  $\text{CRR}'$  fragment to the Mo=P bond of the parent compound but were shown to proceed through a [3 + 2] cycloaddition of the diazoalkane molecule, followed by  $\text{N}_2$  elimination. The diazomethane reaction allowed the identification at low temperature of a stabilized form of the intermediate product, the phosphanyl complex  $[\text{Mo}_2\text{Cp}\{\mu\text{-}\kappa^2_{\text{P}}\text{:}\kappa^1_{\text{N}}\text{:}\eta^5\text{-P(CHN}_2\text{H)C}_5\text{H}_4\}(\text{CO})_2(\eta^6\text{-HMes}^*)]$ , which follows from a reversible 1,3-shift of a methylenic H atom from C to N. It was concluded that all of the above cycloaddition reactions are initiated by heteroatom coordination of the unsaturated organic molecule to the

MoCp(CO)<sub>2</sub> fragment in the parent phosphinidene complex, this triggering the P-C bond formation step which leads to the products eventually isolated. The structures of the new complexes were determined by spectroscopic, diffractometric, and (in some cases) density functional theory methods.

## Diazo Strategy for the Synthesis of Pyridazines: Pivotal Impact of the Configuration of the Diazo Precursor on the Process.

Nikolaev, V. A., Cantillo, D., Kappe, C. O., Medvedev, J. J., Prakash, G. K., & Supurgibekov, M. B. (2016). *Chemistry—A European Journal*, 22(1), 174-184.

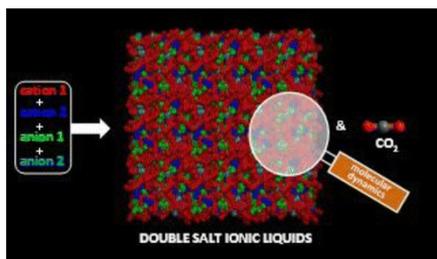
Phosphazenes of vinyl diazocarbonyl compounds having cis stereochemistry of the functional groups on the vinyl bond readily produce pyridazines by a diaza-Wittig process, whereas their counterparts with trans configuration remain intact under similar reaction conditions. Upon UV ir-radiation



trans-phosphazenes furnish pyridazines through a tandem trans-to-cis isomerization followed by intramolecular cyclization. At elevated temperatures trans-(triphenyl)-phosphazenes dissociate to give the initial vinyl diazo compounds, which produce pyrazoles in high yields. The first theoretical study on the mechanism of the diaza-Wittig process by DFT calculations at the M06-2X/6-31G(d) level of theory suggest that for the cis-phosphazenes a rapid tandem [2++2] cycloaddition/cycloelimination process with low energy barriers is preferred over trans isomers.

## Double Salt Ionic Liquids Based on Ammonium Cations and Their Application for CO<sub>2</sub> Capture

Atilhan, M., Anaya, B., Ullah, R., Costa, L. T., & Aparicio, S. (2016). *The Journal of Physical Chemistry C*, 120(31), 17829-17844.



Simple ionic liquids (containing one type of cation with one type of anion) and complex mixed ionic liquids (containing several types of anions and cations, double salts) based on ammonium cations were studied in this work using a combined computational and experimental approach. Theoretical studies were carried out using classical molecular dynamics simulations. The properties and structure of these fluids and their changes upon CO<sub>2</sub> absorption were analysed. The fluids' structural, energetic

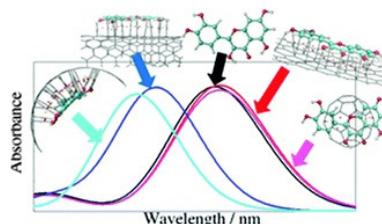
and dynamic properties were considered as a function of the type of ions composing the ionic liquids together with their changes when CO<sub>2</sub> is present as a function of CO<sub>2</sub> concentration. Likewise, experimental measurements analyse carbon capturing abilities for the studied mixed ionic liquids as a function of pressure and temperature. The reported results show that mixing two neat ammonium-based ionic liquids does not change remarkably the properties of the involved neat ionic liquids, and also the affinities for CO<sub>2</sub> are also similar in the mixed ionic liquids. Therefore, vastly different ions should be considered when designing mixed ionic liquids for stimulating CO<sub>2</sub> physisorption by increasing the available volume and tuning affinity toward CO<sub>2</sub>. This work provides a nanoscopic and macroscopic characterization of complex ionic liquids and their ability for carbon capturing for the first time.



## Flavonol–carbon nanostructure hybrid systems: a DFT study on the interaction mechanism and UV/Vis features.

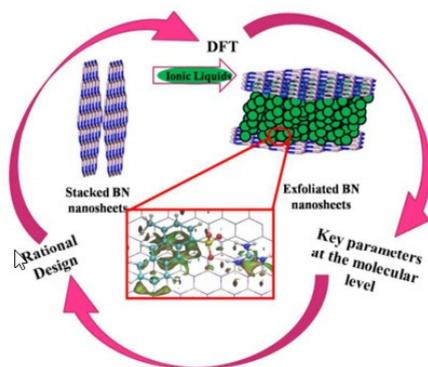
García, G., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2016). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(6), 4760-4771.

Flavonols are a class of natural compound with potential biological and pharmacological applications. They are also natural pigments responsible for the diversity of colors in plants. Flavonols offer the possibility of tuning their features through chemical functionalization as well as the presence of aromatic backbone, which could lead to develop non covalent interactions with different nanostructures or aromatic molecules. In this work, a protocol based on ONIOM (QM/QM) calculations to investigate the structural features (binding energies, intermolecular interactions) of flavonols interacting with the surface of several carbon nanostructures (such as graphene, fullerene C60 and carbon nanotubes) is developed. The confinement of flavonols inside carbon nanotubes has been also studied. Three flavonols, Galangin, Quercetin and Myricetin, as well as pristine Flavone were selected. A special attention has been also paid to the changes of UV/Vis features of flavonols due to the interaction with carbon nanostructures. Our results point out that  $\pi$ -stacking interactions are the driving force for the adsorption onto carbon nanostructures as well as for the confinement inside carbon nanotubes. Likewise, UV/Vis features of flavonols could be fine-tuned through the interaction with suitable carbon nanostructures.



## In silico rational design of ionic liquids for the exfoliation and dispersion of boron nitride nanosheets.

García, G., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2016). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(2), 1212-1224

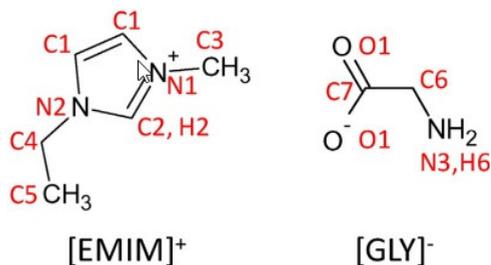


A requirement for exploiting most of the unique properties of boron-nitride (BN) nanosheets is their isolation from the bulk material. A rational design of task-specific ionic liquids (ILs) through DFT simulations is reported in this work. The applied computational protocol allowed the screening of large IL families, which was carried out bearing in mind the achievement of strong  $\pi$ - $\pi$  stacking between the anions and BN nanosheets as well as a negative charge transfer from the anion to the surface. The selected ionic liquids yielded strong interaction energies with BN nanosheets and high charge transfer values, while the main features of the ionic liquid are not affected in the presence of nanosheets. DFT simulations provided a detailed picture of the interaction mechanism and useful structure–property relationships in the search of a new ionic liquid for BN exfoliation.

## Interfacial properties of 1-ethyl-3-methylimidazolium glycinate ionic liquid regarding CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> and water from molecular dynamic.

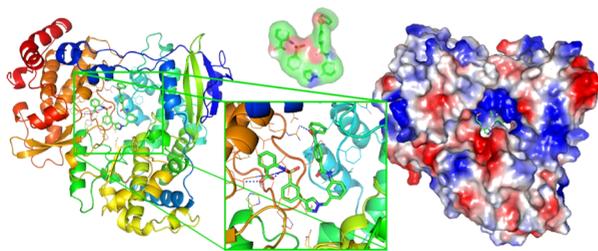
Herrera, C., García, G., Alcalde, R., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2016). *Journal of Molecular Liquids*, 220, 910-917.

The surface properties of 1-ethyl-3-methylimidazolium glycinate ionic liquid, as a model of amino acid-based compounds, in contact with a vacuum, CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> and flue gas phases are studied using molecular dynamics simulations. The orientation of ions at the interface and the characteristics of the adsorbed gas layers are inferred from the theoretical study. Densely adsorbed layers are obtained for CO<sub>2</sub> molecules at fast adsorption rates, with CO<sub>2</sub> interacting preferentially with imidazolium cations at the interface. SO<sub>2</sub> is adsorbed faster than CO<sub>2</sub> at the ionic liquid interface, showing large affinity for glycinate anions. The contact of the studied ionic liquid with a model flue gas leads to the fast development of an adsorbed layer of water molecules, with CO<sub>2</sub> molecules being adsorbed on top of this water layer. Therefore, the interface is initially blocked by the presence of water molecules, which would delay the adsorption and diffusion of CO<sub>2</sub> molecules across the ionic liquid interface.



## Looking for inhibitors of the dengue virus NS5 RNA-dependent RNA-polymerase using a molecular docking approach.

Galiano, V., Garcia-Valtanen, P., Micol, V., & Encinar, J. A. (2016). *Drug design, development and therapy*, 10, 3163.



Los miembros de la familia Flaviviridae causan una gran variedad de enfermedades en seres humanos y otras especies animales. Los Flavivirus pueden transmitirse de los animales a los humanos por especies de vectores artrópodos tales como garrapatas y mosquitos. La familia Flaviviridae incluye cuatro géneros principales, Flavivirus, Pestivirus, Hepacivirus, y Pegivirus, así como algunos no clasificados virus. El

género Flavivirus tiene un total de 67 virus, varios de los cuales infectan a los humanos, por ejemplo, el virus del dengue (DENV), el virus de la encefalitis japonesa, el virus de la fiebre amarilla, el virus del Nilo Occidental. El virus del dengue supone un grave riesgo para la salud humana, por ejemplo en 2013, causó de 40 a 58 millones de infecciones sintomáticas, incluyendo 13.586 casos mortales. Sin embargo, a pesar de su enorme impacto en la salud pública en todo el mundo, las terapias antivirales eficaces contra DENV y otros flavivirus no se han desarrollado todavía.

La incidencia de DENV ha crecido rápidamente y ahora se estima que la mitad de la población humana está en riesgo de infectarse con este virus. A pesar de esto, no hay medicamentos eficaces para el tratamiento de infecciones de DENV. El presente estudio está dirigido a la búsqueda de nuevos inhibidores de la ARN polimerasa dependiente de ARN NS5 de los cuatro serotipos de DENV. Se utilizó una biblioteca química que comprende 372,792 compuestos no nucleótidos (alrededor de 325,319 compuestos naturales) para llevar a cabo experimentos de acoplamiento molecular contra un sitio de unión del túnel plantilla de ARN del virus de la polimerasa. Los compuestos con la variación

de energía libre negativa alta ( $\Delta G < -10,5$  kcal / mol) fueron seleccionados como los inhibidores putativos. Se aplicaron filtros adicionales para una farmacobilidad favorable y buena absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad. Finalmente, después se completó el proceso de selección y se identificaron 39 compuestos como candidatos a inhibidores de la polimerasa. Potencialmente, estos compuestos podrían actuar como inhibidores de la polimerasa DENV como eficaces *in vitro* e *in vivo*. Por otro lado, los investigadores de la UMH han creado la web <http://docking.umh.es> para consultar los datos primarios de los experimentos de acoplamiento molecular en todas las diferentes proteínas y bibliotecas químicas evaluadas.

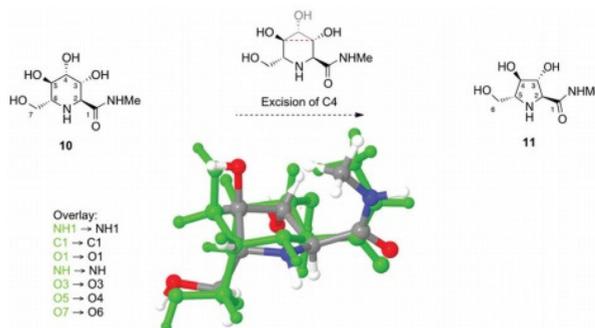
De este modo, de un total de más 325.000 compuestos, se han seleccionado 39 compuestos que se proponen para ser evaluados *in vitro* e *in vivo* reduciendo a un 0,012% el número de compuestos interesantes. Estos trabajos de modelado que han permitido evaluar el alto número de compuestos han sido realizados en el supercomputador LUSITANIA II. A partir de este trabajo, se abre el camino a otros investigadores, y se expone un conjunto muy limitado de compuestos para ser evaluados *in vivo* e *in vitro* y que permitan acercar y posibilitar la creación de una vacuna del virus Dengue.

## Structural essentials for $\beta$ -N-acetylhexosaminidase inhibition by amides of prolines, piperolic and azetidine carboxylic acids

Glawar, A. F. G., Martínez, R. F., Ayers, B. J., Hollas, M. A., Ngo, N., Nakagawa, S., ... & Jenkinson, S. F. (2016). *Organic & Biomolecular Chemistry*, 14(44), 10371-10385.

This paper explores the computer modelling aided design and synthesis of  $\beta$ -N-acetylhexosaminidase inhibitors along with their applicability to human disease treatment through biological evaluation in both an enzymatic and cellular setting. We investigated the importance of individual stereocenters, variations in structure-activity relationships along with factors influencing cell penetration. To achieve these goals we modified nitrogen heterocycles in terms of ring size, side chains present and ring nitrogen derivatization.

By reducing the inhibitor interactions with the active site down to the essentials we were able to determine that besides the established 2S,3R trans-relationship, the presence and stereochemistry of the CH<sub>2</sub>OH side chain is of crucial importance for activity. In terms of cellular penetration, N-butyl side chains favour cellular uptake, while hydroxy- and carboxy-group bearing sidechains on the ring nitrogen retarded cellular penetration. Furthermore we show an early proof of principle study that  $\beta$ -N-acetylhexosaminidase inhibitors can be applicable to use in a potential anti-invasive anti-cancer strategy.



# Trabajos finales de Máster

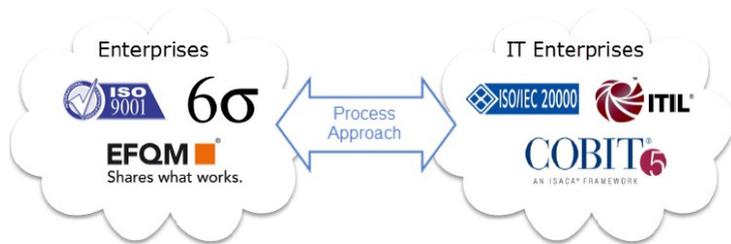
## Diseño de un sistema de gestión por procesos de negocio en CénitS/COMPUTAEX

**Felipe Lemus Prieto**

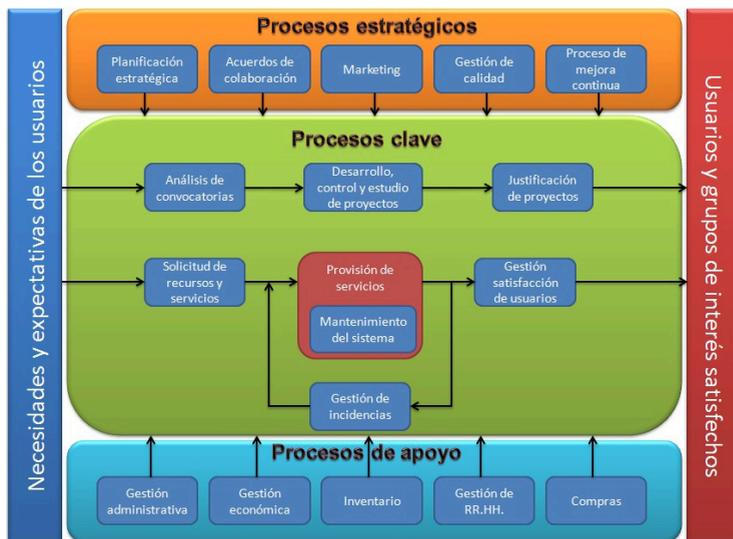
Hoy en día, es un hecho innegable que las organizaciones están inmersas en mercados y entornos globalizados; entorno donde cualquier organización que desee tener éxito, o, al menos, sobrevivir, necesita obtener buenos resultados empresariales.

Para lograr estos buenos resultados comerciales, las organizaciones necesitan gestionar adecuadamente su actividades y recursos para alinearlos con los objetivos de negocio, lo que ha desembocado en la necesidad de utilizar herramientas y metodologías que permitan a las organizaciones configurar su sistema de gestión.

Existen diferentes estándares internacionales para la implantación de sistemas de gestión en las organizaciones, tales como ISO 9000, ISO 20000 o EFQM (Fundación



Europea de Gestión de la Calidad), pero todos ellos poseen un elemento en común, todos proponen implementar dichos sistemas a través de un enfoque basado en procesos. Un enfoque basado en procesos permite organizar y gestionar las actividades de la organización más eficientemente con el fin de generar más valor para los clientes y demás partes interesadas.



El objetivo principal de este Trabajo Fin de Máster era el diseño e implementación de un sistema de gestión de una organización basado en procesos, tomando como ejemplo real una organización de TI, CénitS. Para, a continuación, optimizar los procesos implicados con el fin de mejorar el rendimiento (eficiencia y efectividad) de la organización. Además, este trabajo buscaba servir de ejemplo práctico para la implementación y optimización de un sistema de gestión por procesos.

Para alcanzar estos objetivos fue necesaria, en primer lugar, la realización de un estudio y análisis de la organización. Como resultado de dicho análisis, se identificaron y clasificaron los procesos internos más relevantes de la organización, en este caso CénitS. El siguiente paso consistió en el estudio de diferentes alternativas para la gestión y optimización de los procesos en organizaciones de TI,

profundizando en la Gestión de Procesos de Negocio como principal estrategia para la implementación y optimización de procesos.

Finalmente se seleccionó la herramienta de software Bonita BPM para realizar el diseño y la implementación de aquellos procesos clasificados como clave dentro de la organización con el fin de automatizarlos y optimizarlos.

Los principales resultados de este proyecto fueron los siguientes:

- Definición y clasificación de procesos CénitS.
- Mayor conocimiento del funcionamiento interno de la organización.
- Avances en la implementación de la gestión de procesos en CénitS.
- Aprendizaje de marcos de gestión, estándares y mejores prácticas en TI.
- Automatización de procesos clave.
- Implementación de herramientas para el diseño, simulación y optimización de procesos.
- Ejemplo práctico de un sistema de gestión de procesos.

## Distinciones y reconocimientos



El proyecto "LUSITANIA II, un supercomputador en un CPD al aire libre", de CénitS-COMPUTAEX, fue seleccionado como finalista en dos categorías, Smart TI Infraestructure y Smart Cloud, de la cuarta edición de los enerTIC Awards.

Estos galardones suponen un reconocimiento a la innovación y a las mejores prácticas, premiando proyectos tecnológicos innovadores, comprometidos con la eficiencia energética y la sostenibilidad, así

como actuaciones e iniciativas que promueven el uso de las Tecnologías de la Información y de la Comunicación (TICs) para la mejora de la eficiencia energética.

El Comité Técnico de la plataforma enerTIC evaluó los 60 proyectos presentados, eligiendo tres finalistas por cada categoría, en base a diversos criterios de evaluación, como el grado de innovación, el nivel de uso de las TICs, el impacto en la reducción de consumo energético y emisiones CO2, la ejemplaridad o aplicabilidad en otras organizaciones y entornos, y el uso de métricas e indicadores de mejora.

Cabe destacar además, que el Director General de COMPUTAEX, D. José Luis González, fue propuesto por el Comité Técnico de la organización, en la categoría de Apoyo a la Investigación, que reconoce a aquellos directivos que son considerados como referentes en el ámbito de la aplicación de las TICs para la mejora de la eficiencia energética y la sostenibilidad.

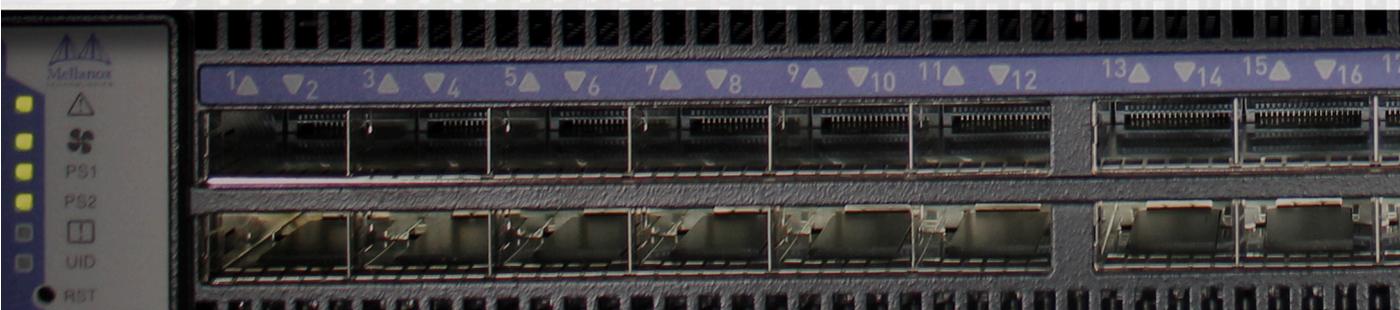


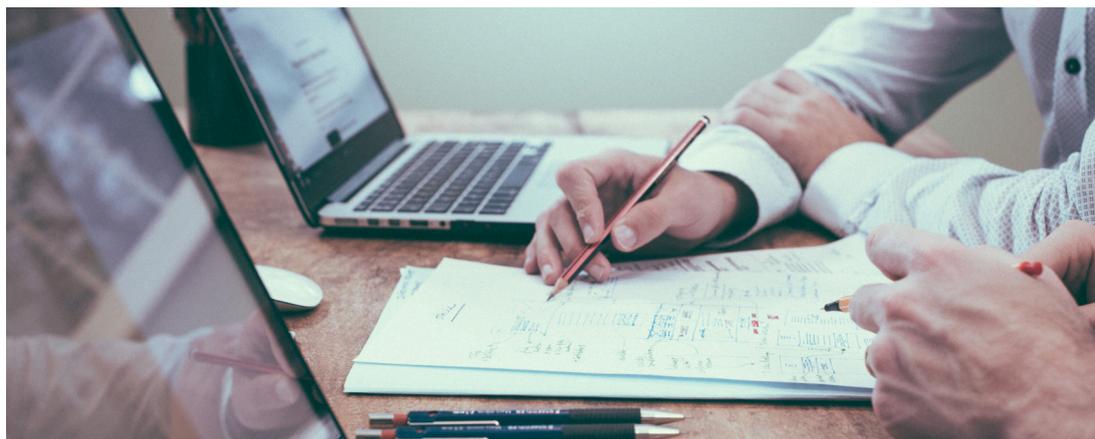




5

**Convenios de colaboración,  
acciones formativas y difusión**





## Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión

La Fundación COMPUTAEX tiene entre sus actividades la organización de cursos, seminarios, reuniones y la materialización de convenios con diferentes organismos y entidades. Esta sección muestra los convenios de colaboración y las actividades realizadas por la Fundación a lo largo de 2016 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación. Destacan especialmente la impartición de un curso sobre Big Data, la organización de la 8ª Jornada CéniTS y la presentación de LUSITANIA II.

### 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. 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 permitió convocar una beca ligadas a tareas de investigación, desarrollo, implantación y provisión de servicios en CéniTS, teniendo como objetivo la formación del becario a través de dichas tareas. Además, COMPUTAEX y CéniTS colaboran con los Másteres TIC impartidos por la Universidad de Extremadura desde 2011, impartiendo

docencia en la asignatura "Computación de Altas Prestaciones" del Máster en Ingeniería Informática.

#### Fujitsu



Fujitsu es socio tecnológico de CéniTS siendo el fabricante del supercomputador LUSITANIA II.

#### CESGA



El Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) es el centro de cálculo, comunicaciones de altas prestaciones y servicios avanzados de la Comunidad Científica Gallega, Sistema Académico Universitario y del Consejo Superior de Investigaciones Científicas

(CSIC). Es uno de los referentes nacionales en el campo de la supercomputación. CESGA y CénitS colaboran en la mayoría de sus ámbitos de actividad.

## 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 per-sigue 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.

## Extremadura Avante



Como modelo integrado para la implementación, crecimiento y desarrollo de la innovación en las empresas extremeñas, Extremadura Avante ha aportado a COMPUTAEX

y CénitS importantes colaboraciones para llevar a cabo sus objetivos.

## REDIRIS



La Fundación COMPUTAEX forma 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 comunidad 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.

## Red Española de Supercomputación



En 2015, CénitS pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES). La RES surgió como infraestructura distribuida, para dar servicio a la comunidad científica, con la voluntad de cubrir las necesidades de supercomputación de los diversos grupos de investigación existentes. De este modo, la RES ofrece un servicio optimizado y unificado a usuarios de la supercomputación en España, mediante la aplicación de criterios homogéneos de acceso a su uso, gracias a una eficiente coordinación de sus recursos. Para ello, cada centro cede parte de los mismos, los cuales son gestionados por un comité común e independiente, encargado de evaluar las peticiones de acceso en base a la excelencia científica y la necesidad real de cada interesado.

## Appentra Solutions



Appentra Solutions es una spin-off de la Universidade da Coruña creada en julio de 2012, cuya misión es desarrollar herramientas software de alta calidad que permitan un uso extensivo de las técnicas de computación de alto rendimiento en todas los campos de la ingeniería, la ciencia y la industria. Este convenio potencia el desarrollo de nuevos proyectos de I+D+i que permitan explotar la potencia de los modernos

sistemas HPC de una forma más eficiente y productiva, aumentando la rentabilidad de las inversiones realizadas en los sistemas disponibles en CénitS.

## Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León

 La Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL) es una Organización no lucrativa, perteneciente al Sector Público de Castilla y León, que tiene como actividad principal, la mejora de las tareas de investigación en las Universidades, los centros de I+D y las empresas de Castilla y León, promoviendo y desarrollando acciones de innovación en el mundo de la Sociedad del Conocimiento, el área del cálculo intensivo, las comunicaciones

y los servicios avanzados, contribuyendo mediante el perfeccionamiento tecnológico al desarrollo económico de la Comunidad y a la mejora de la competitividad de las empresas. Este convenio permite la colaboración con el objeto de compartir experiencias y elaborar proyectos conjuntos en el ámbito de la I+D+i, la formación y la divulgación científica.

## Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón



Centro de Cirugía de Mínima Invasión  
Minimally Invasive Surgery Centre  
Jesús Usón

La Fundación COMPUTAEX y la Fundación CCMI han llegado a un acuerdo de colaboración para la cesión de espacios en el edificio del CCMI, que acoge a los recursos técnicos y humanos de CénitS.

## Derecho tecnológico e informática forense



La Fundación COMPUTAEX participa en la impartición del curso universitario de Derecho Tecnológico e Informática Forense (DTIF). Se trata de un título universitario de experto profesional orientado a profesionales del mundo de derecho tecnológico, de la informática forense, así como de las Fuerzas y Cuerpos de Seguridad del Estado, para que conozcan las técnicas y metodologías que se usan en estos sectores, y profundicen en las de su propio campo.

## 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 desde principios de 2011, 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 la asignatura “Computación de Altas Prestaciones” del Máster en Ingeniería Informática.

También se ha dirigido un Trabajo Final de Máster y se ha tutorizado una beca de formación, cuyas actividades se presentan a continuación.

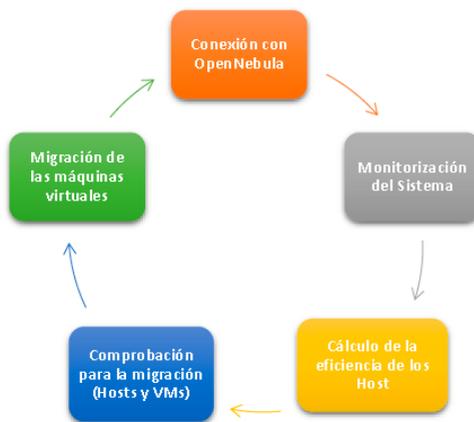


# Becas de formación

## Javier Rubio Bravo

La presente beca de formación ha tenido como principal objetivo ofrecer un acercamiento al ámbito empresarial de los futuros titulados en los Máster TIC que se realizan en la Universidad de Extremadura. Para ello, la fundación COMPUTAEX brinda un contacto al mundo laboral de la supercomputación, sirviendo esta estancia para dar a conocer de primera mano la responsabilidad que conlleva el desarrollo de proyectos pioneros dentro del sector TIC y su aplicabilidad en un desarrollo tecnológico en nuestra región.

Respecto al ámbito académico, se propone desarrollar el Trabajo Fin de Máster utilizando los recursos propios que posee la fundación, llegando a límites inalcanzables realizando el mismo estudio del trabajo siendo ajenos a la organización. Para ello, en estas prácticas se realizó la implementación y posterior evaluación de un Sistema de Gobierno de Federaciones CPD.



La necesidad de maximizar la eficiencia de los equipos informáticos y de clima, surgida a raíz de la creciente demanda de potencia computacional y por tanto del consumo eléctrico, acompañado del intento de optimización de los elementos relacionados con el sistema de climatización requerido, forman parte de los temas tratados en el mencionado Trabajo Fin de Máster.

### Objetivos

- Apoyo de las actividades cotidianas realizadas en CénitS.
- Investigación sobre los Centros de Datos, Cloud Computing y la organización de Federaciones de CPDs.
- Despliegue de una infraestructura de Centros de Datos Federados como una plataforma de innovación.
- Proporcionar los servicios de coordinación necesarios que faciliten al acceso homogéneo a las diferentes infraestructuras.
- Creación de un ecosistema de componentes middleware open-source para desplegar Clouds interoperables.
- Explorar las posibilidades de aplicaciones del modelo de computación Cloud relacionados con la calidad, seguridad, disponibilidad, interoperabilidad y mejora de la eficiencia energética en los CPDs federados.
- Facilitar una arquitectura de referencia abierta y plantear estándares para este tipo de organizaciones federativas, con la creación de un orquestador que gestione los recursos de las mismas.

### Objetivos alcanzados

- Realización del Trabajo Fin de Máster denominado: “Análisis de un sistema de gobierno para federaciones de Centros de Procesamiento de Datos con Computación de Alto Rendimiento”.
- Desarrollo de una herramienta de gestión de recursos en CPDs mediante una organización federativa y optimización de los activos de dicha federación.
- Estudio tanto del consumo energético específico de cada máquina de la nube OpenNebula de CénitS como de la disponibilidad de la red de la misma.
- Participación en eventos realizados por la Fundación.

# Curso Big Data & Supercomputación. Transformando datos en conocimiento.

CénitS impartió el curso "Big Data y Supercomputación: Transformando datos en conocimiento" en la Escuela Politécnica de Cáceres entre los días 12 y 20 de diciembre.

El curso tuvo una duración de 23 horas, y estuvo destinado principalmente a satisfacer necesidades formativas en el campo del tratamiento de grandes volúmenes de datos de egresados universitarios en Ingeniería Informática e Ingeniería de Telecomunicación, estudiantes de 3º y 4º de las mismas ingenierías y estudiantes de doctorado o máster de titulaciones afines.

El curso fue dividido en cuatro bloques: un primer bloque introductorio, un segundo bloque dedicado a la supercomputación y al framework Hadoop (utilizado para el almacenamiento distribuido y el procesamiento de grandes conjuntos de datos), un tercero centrado en la Ciencia de Datos, y un cuarto bloque integrado en el marco de las 8ª Jornadas CénitS (celebradas el 15 de diciembre), en la que expertos en la materia impartieron ponencias sobre casos de éxito en big data en sus organizaciones.



Con el fin de atender la alta demanda por asistir al curso, desde la fundación COMPUTAEX se tomó la decisión de reeditar el mismo durante el año 2017.



## 8ª Jornada CénitS: Talento y Vocaciones en el Sector TIC

La Fundación COMPUTAEX presentó la octava edición de sus jornadas que, con el título *Talento y Vocaciones en el Sector TIC*, tuvo lugar en el salón de actos de la Escuela Politécnica de Cáceres el jueves 15 de diciembre de 2016.



La jornada estuvo dirigida a empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores, interesados en la actualidad del sector TIC, el Big Data y las nuevas tecnologías, el emprendimiento y la innovación. El acceso fue libre, aunque se requirió la realización de una inscripción on-line previa.

El evento comenzó a las 10:00 de la mañana, tras la acreditación de los asistentes, con un acto de apertura que

contó con la presencia de D. Pablo García, Director de la Escuela Politécnica de Cáceres, y D. José Luis González, Director General de COMPUTAEX, quién posteriormente impartió la ponencia *Mantras socio-tecnológicos y planes estratégicos*. A continuación, D. Vicente Martín, Director del CCS (Center for Computational Simulation) ofreció su conferencia *Tecnologías cuánticas para la Información y las Comunicaciones*.

Del mismo modo, durante la mañana se sucedieron las presentaciones de D. Felipe Lemus, Ingeniero de Comunicaciones de CénitS, D. Pedro Núñez, Subdirector TIC e Investigación de la Escuela Politécnica y D. Luis Arévalo, Subdirector de Planificación Académica del Centro Universitario de Mérida.



A partir de las 13 horas comenzó una mesa redonda centrada en la búsqueda de soluciones para la promoción del talento y las vocaciones en el sector TIC, en la cual participaron, además de los subdirectores anteriormente mencionados, D. Markus Hernández, Presidente del Colegio Profesional de Ingenieros en Informática de Extremadura, D. Alberto Serna Martín, Secretario de la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación, D. Juan Miguel Trejo, Director Gerente de la empresa Ariadnex Tecnología Flexible, junto con D.ª Ana del Mar Briones y D. Adrián San Román, dos estudiantes de los grados en Ingeniería Informática y Telemática, y el propio José Luis González, que actuó como moderador.



Especialmente destacables fueron los casos prácticos de éxito en Big Data que se presentaron durante la tarde: *Big Data en el sector turístico*, a cargo de D. Josep Bernat, Fundador de Nuk Consultants, *Detección de fraude a la Seguridad Social: Empresas ficticias*, por D. Enrique Cebrían, Ingeniero de prevención de soluciones analíticas de Viewnext, y *Aplicación de técnicas Big Data para la predictibilidad del consumo energético* en la que D. David Cortés, responsable de la Unidad Funcional de Redes y Comunicaciones de CénitS, presentó el Proyecto ConSumar, cuya finalidad es poner al servicio de los consumidores y de las empresas extremeñas un conjunto de herramientas que permitan la gestión del consumo energético, así como una planificación adecuada de los periodos en los que el ahorro por un menor coste energético pueda resultar interesante.



#8JornadaCénitS  
15 de diciembre de 2016

# 8ª JORNADA CÉNIT S

## TALENTO Y VOCACIONES EN EL SECTOR TIC

Escuela Politécnica. Av. de la Universidad s/n - 10.003 Cáceres  
Acceso libre. Información y registro en [www.cenits.es](http://www.cenits.es)

**Jueves, 15 de diciembre**

<p>09:00 h. Acreditación.</p> <p>10:00 h. Apertura de la 8ª Jornada CénitS. D. Jesús Alonso Sánchez. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación. D. Pablo García Rodríguez. Director de la Escuela Politécnica. D. José Luis González Sánchez. Director General de la Fundación COMPUTAEX y CénitS.</p> <p>10:30 h. <i>Mantras socio-tecnológicos y planes estratégicos.</i> D. José Luis González Sánchez. Director General de la Fundación COMPUTAEX y CénitS.</p> <p>10:45 h. <i>Tecnologías cuánticas para la Información y las Comunicaciones.</i> D. Vicente Martín Ayuso. Director del CCS (Center for Computational Simulation) y Profesor de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM).</p> <p>11:30 h. Pausa.</p> <p>12:00 h. <i>Taxonomía TIC. Análisis del sector y descripción de los perfiles profesionales TIC.</i> D. Felipe Lemus Prieto. Ingeniero de Comunicaciones de CénitS.</p> <p>12:30 h. <i>La importancia de la formación TIC.</i> D. Pedro Nuñez Trujillo. Subdirector TIC e Investigación de la Escuela Politécnica de Cáceres. D. Luis Arvelo Rosado. Subdirector de Planificación Académica del Centro Universitario de Mérida.</p>	<p>13:00 h. Mesa redonda <i>¿Cómo promover el talento y las vocaciones en el sector TIC?</i> D. Markus Hernández Droth. Presidente del CPIEx (Colegio Profesional de Ingenieros en Informática de Extremadura). D. Alberto Serra Martín. Secretario de AEXIT (Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación). D. Juan Miguel Trejo Fernández. Director Gerente de Ariadnex Tecnología Flexible S.L. D. Luis Arvelo Rosado. Centro Universitario de Mérida. D. Pedro Nuñez Trujillo. Escuela Politécnica de Cáceres. D.ª Ana del Mar Briones Salgado. Estudiante de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software. D. Adrián Jesús San Román Gabriel. Estudiante de Doble Grado en Ingeniería Telemática e Informática en Tecnologías de la Información. D. José Luis González Sánchez. Director Gen. de la Fundación COMPUTAEX.</p> <p>14:30 h. Comida de pie. <b>CASOS PRÁCTICOS DE ÉXITO EN BIG DATA</b></p> <p>16:00 h. <i>Big Data en el sector turístico.</i> D. Josep Bernat Pané. Fundador de Nuk Consultants.</p> <p>17:00 h. <i>Detección de fraude a la Seguridad Social: Empresas Ficticias.</i> D. Enrique Cebrían Liebres. Ingeniero de prevención de soluciones analíticas de Viewnext.</p> <p>18:00 h. <i>Aplicación de técnicas Big Data a la predictibilidad del consumo energético. Proyecto ConSumar.</i> D. David Cortés Polo. Responsable de la Unidad Funcional de Redes y Comunicaciones de CénitS.</p>
--	--

**Organización**

**Cofinanciación**

**Colaboración**

**Información**

Consejería de Economía e Infraestructuras  
 Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación

# JUNTA DE EXTREMADURA

## Presentación del Supercomputador LUSITANIA II

El lunes 23 de mayo de 2016 se realizó la presentación del Supercomputador LUSITANIA II, en un evento que tuvo lugar en la sede social de la Fundación COMPUTAEX, ubicada en el Centro de Cirugía de Mínima Invasión, en Cáceres. El acceso fue libre, aunque requirió la realización de una inscripción on-line previa.



El evento comenzó a las 9:30 de la mañana, tras la recepción de los asistentes, y contó con diversas personalidades: D. José Luis Navarro, Ilmo. Sr. Consejero de Economía e Infraestructuras y Presidente de la Fundación COMPUTAEX, D.<sup>a</sup> Elena Nevado, Excm. Alcaldesa de Cáceres, D. Jesús Alonso, Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación y Vicepresidente de la Fundación COMPUTAEX, D. Fernando Egido, Director de Tecnología de Fujitsu España y D. José Luis González Sánchez, Director General de la Fundación COMPUTAEX.



La jornada también contó con expertos de primer nivel en el ámbito de la Supercomputación. De este modo, al acto de apertura le sucedieron tres ponencias relacionadas con la computación de alto rendimiento, que pusieron de manifiesto la importancia que representa este tipo de infraestructuras, tanto para la comunidad científica, como para la región extremeña en general. Concretamente, D. Fernando Martín, Catedrático del área de Química Física de la Universidad Autónoma de

Madrid, presentó la ponencia "Luz de attosegundos y HPC: construyendo la cámara superlenta de la física, la química y la biología", tras la cual, D. Sergi Girona. Director de operaciones del BSC-CNS (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación) ofreció su ponencia HPC: ciencia y tecnología en Europa. A continuación, se desarrolló la ponencia "Simulando el clima: una ventana al futuro", ofrecida por D. José Agustín García, Catedrático del área de Física de la Universidad de Extremadura.



Posteriormente tuvo lugar la presentación del Supercomputador LUSITANIA II, el cual supuso una destacable ampliación de los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, que vio aumentada considerablemente la potencia de cálculo de la que ya disponía en sus instalaciones de Trujillo, con el primer supercomputador LUSITANIA.



Financiado tanto por el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO), con fondos FEDER, como por la propia Fundación COMPUTAEX, este nuevo Supercomputador se encuentra desde entonces a disposición de investigadores, innovadores, tecnólogos y todo tipo de usuarios que necesiten sus recursos.

**PRESENTACIÓN DEL SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA II**

COMPUTAEX CENITS

**LUSITANIA II**

Centro de Cirugía de Mínima Invasión. Carretera N-521, km 41,8 - Cáceres. Acceso libre. Información y registro en [www.cenits.es](http://www.cenits.es)

**23 MAYO**

09:00 h. Recepción de asistentes.

09:30 h. Apertura.  
 D. José Luis Navarro, IImo. Sr. Consejero de Economía e Infraestructuras. Presidente de la Fundación COMPUTAEX.  
 D.ª Elena Navarro, Excmo. Alcaldesa de Cáceres.  
 D. Jesús Alonso, IImo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación. Vicepresidente de la Fundación COMPUTAEX.  
 D. Fernando Egojo, Director de Tecnología de Fujitsu España.  
 D. José Luis González, Director General de la Fundación COMPUTAEX.

10:00 h. Luz de attosegundos y HPC: construyendo la cámara superlenta de la física, la química y la biología.  
 D. Fernando Martín, Catedrático del área de Química Física de la Universidad Autónoma de Madrid.

10:30 h. HPC: ciencia y tecnología en Europa.  
 D. Sergi Girona, Director de operaciones del BSC-CNS (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación).

11:00 h. Simulando el clima: una ventana al futuro.  
 D. José Agustín García, Catedrático del área de Física de la Universidad de Extremadura.

11:30 h. Presentación de LUSITANIA II.

12:00 h. Clausura.

Organización: CENITS COMPUTAEX  
 Financiación: UNIÓN EUROPEA, MINISTERIO DE ECONOMÍA Y COMPETITIVIDAD, JUNTA DE EXTREMADURA  
 Colaboración: CENITS, COMPUTAEX, UNIÓN EUROPEA, MINISTERIO DE ECONOMÍA Y COMPETITIVIDAD, JUNTA DE EXTREMADURA, FUJITSU

Consejería de Economía e Infraestructuras  
 Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación

**JUNTA DE EXTREMADURA**



## Noche europea de los investigadores 2016



La Noche de los Investigadores es un proyecto financiado por el Programa Horizonte 2020 de la Unión Europea, estando enmarcada dentro de las Acciones Marie Curie. Cada año, investigadores de más de trescientas ciudades europeas dedican, al unísono, una noche a la divulgación de la Ciencia con el objetivo de demostrar que la investigación y los avances científicos y tecnológicos están al alcance de todos los públicos.

La Universidad de Extremadura ofreció así la oportunidad de conocer, de forma amena e interactiva, en qué consiste el trabajo de los investigadores y cuál es su aportación a la sociedad, a través de unas actividades dirigidas a personas de todas las edades, interesadas en descubrir cuál es el impacto de los avances científicos en nuestra vida diaria. Los eventos se celebraron en los centros universitarios de Cáceres, Badajoz, Mérida, Plasencia y Almodrachejo.

CénitS estuvo presente, por quinto año consecutivo, en la Escuela Politécnica de Cáceres, ofreciendo el taller "Construye tu propio supercomputador con piezas de LEGO y Raspberries Pi". En él se mostró la construcción de un supercomputador compuesto por pequeños ordenadores del tamaño de una tarjeta de crédito y ensamblado con piezas de LEGO. El principal objetivo fue aprender a utilizar un clúster doméstico de ordenadores de bajo coste, sobre el que se ejecutaron distintos problemas que típicamente son resueltos gracias a la supercomputación.



# Portal web

El Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación y la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura dispone de un portal web corporativo accesible y conforme a los estándares de la W3C, basado en software libre.

Conociendo la importancia de las redes sociales en cuestión de difusión de información, la Fundación y el Centro ha seguido trabajando en la presencia en las distintas redes sociales más populares como: Facebook, Twiter, Google+, LinkedIn; con el fin de dar a conocer las noticias más relevantes entorno al centro CénitS y a las investigaciones e innovaciones científicas que surgen del uso de los recursos de los supercomputadores LUSITANIA y LUSITANIA II.

## Funciones

- Suministrar información relativa a la identidad corporativa, actividades desempeñadas y servicios prestados por el Centro y la Fundación.
- Divulgar noticias y eventos de interés referentes a la supercomputación, investigación e innovación tecnológica.
- Publicar los resultados de las investigaciones propias y de los usuarios que hacen uso de los recursos del Centro.
- Facilitar un modelo de contacto para las personas interesadas en el uso de los servicios ofertados por el Centro y la Fundación.

## Contenidos

- Identidad corporativa: incluye 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 respecto a esos estudios.
- Zona de eventos: agenda informativa que recoge los eventos que se realizan, en los que se colabora, participa o se consideran de interés.
- Portal de Transparencia: zona habilitada con el objetivo de facilitar a todas las personas interesadas, un acceso sencillo a la información más importante relativa a las actividades económicas de la Fundación. De esta forma, se cumple el compromiso con la transparencia a la sociedad, rindiendo cuenta de las actuaciones llevadas a cabo en el Centro y la Fundación.



- 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).

## Datos estadísticos

Seguidamente se exponen los datos más relevantes respecto a las fuentes de tráfico en el ecosistema web para el año 2016, según GoogleAnalytic.

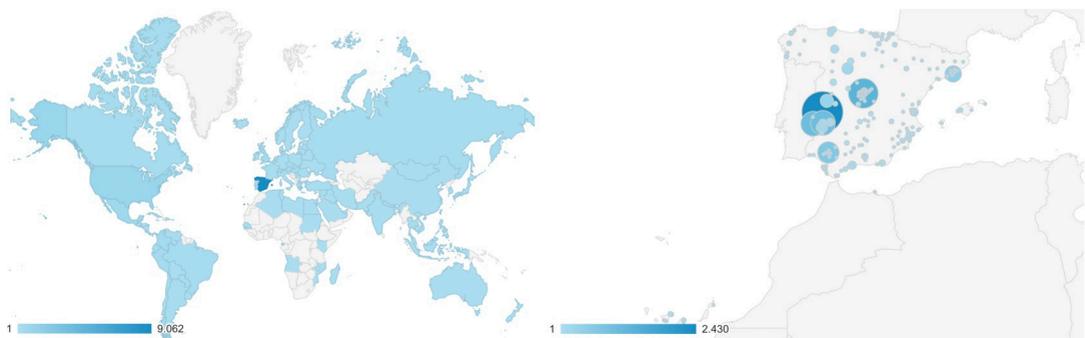
### Evolución mensual

En la gráfica que se muestra a la derecha, se observan los datos de acceso a la web corporativa organizados por meses y según el número de sesiones realizadas por los usuarios (línea naranja) y según el número de páginas vistas en todas las sesiones consumadas en cada mes (línea azul).



### Ubicación geográfica

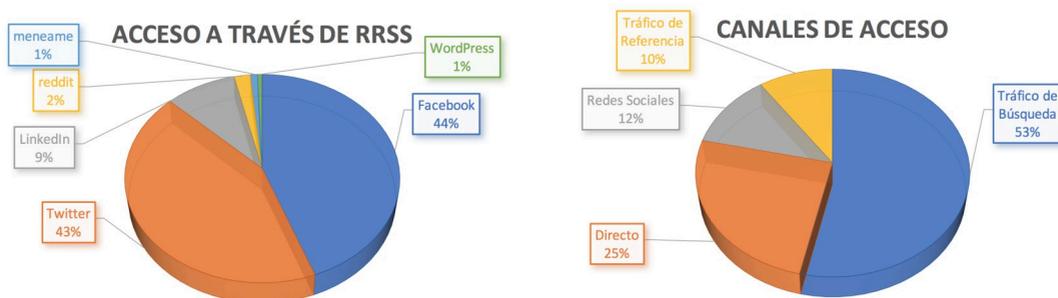
Respecto a la información anterior, a continuación se muestran los datos relacionados con la ubicación geográfica de los visitantes, que confirma el interés generado a nivel internacional y nacional.



### Fuente de tráfico

En la siguiente figura se muestra cómo acceden los usuarios a la plataforma web. El desarrollo en base a los estándares, las buenas prácticas en cuestiones de accesibilidad y las técnicas SEO han mejorado el porcentaje de accesos a través de los distintos motores de búsqueda y tráfico directo. Otro porcentaje importante respecto a los canales de acceso es el tráfico llevado a cabo a través de referencias, debido a la colaboración de la Fundación COMPUTAEX y CénitS en la creación y difusión de proyectos y eventos.

El esfuerzo de divulgación de noticias y actividades realizadas por la Fundación a través de las redes sociales (RRSS), también ha contribuido a las visitas de la página web. Siendo Facebook y Twitter los dos motores principales que han centralizado la visita a la web corporativa desde las RRSS, como se aprecia en el gráfico de la izquierda.



## Redes sociales



Sabiendo la gran importancia del uso de las redes sociales para la difusión de información, se ha continuado 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 de los supercomputadores LUSITANIA y LUSITANIA II, mediante las siguientes redes sociales:

**Facebook:** página sobre la Fundación COMPUTAEX. Este canal permite divulgar las noticias que SE publicamos en la página 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 sociales.

**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 CénitS.

**Issuu:** espacio destinado a la compartición de las publicaciones digitales que se realizan en el centro o que lo implican.

## Difusión y divulgación

Durante el año 2016, CénitS ha recibido la visita de más 400 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, universitarios y estudiantes de educación secundaria.

Desde su creación en el año 2009, estas visitas se han ido traduciendo en colaboraciones en proyectos de investigación, en prestación de servicios o en la difusión de conocimiento a los agentes regionales, nacionales e internacionales.



## CénitS - COMPUTAEX en los medios

El alcance mediático conseguido en televisión, radio, prensa escrita y prensa digital, proporciona evidencia del esfuerzo que se ha llevado a cabo a la hora de divulgar las labores acometidas por el Centro y la Fundación, y los logros de los investigadores e innovadores a lo largo de este año.

Dicho efecto difusor de esas actividades se añade al impacto en la investigación científica y tecnológica que ya se ha mostrado en el apartado de Resultados de Investigación.

### Estadísticas generales

Televisión	Radio	Prensa escrita	Prensa digital
2	4	10	86

### Televisión

Fecha	Titular	Fuente
24/05/16	Noticia sobre el evento de presentación del Supercomputador LUSITANIA II	RTVE Noticias de Extremadura
26/05/16	Entrevista al Director General de la Fundación COMPUTAEX	Programa Escúchame de Canal Extremadura

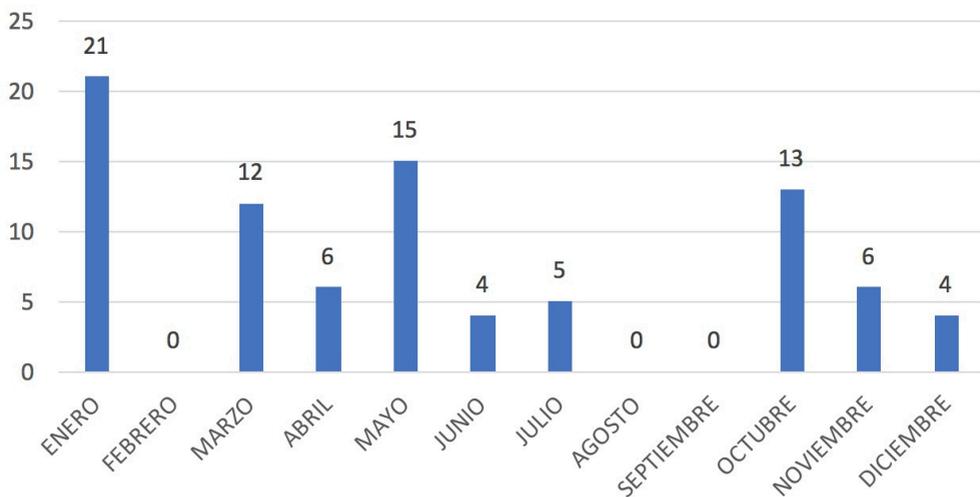
### Radio

Fecha	Titular	Fuente
13/01/16	Entrevista sobre LUSITANIA II	Cadena SER
04/04/16	Entrevista sobre el proyecto de Evaluación de la Accesibilidad Web	Cadena SER
24/05/16	Noticia sobre el evento de presentación de LUSITANIA II	Las mañanas de RNE
24/05/16	Noticia sobre el evento de presentación de LUSITANIA II	RNE Informativo de Extremadura

## Prensa escrita

Fecha	Titular	Fuente
14/01/16	La región estrena un Supercomputador	Diario Hoy Extremadura
17/01/16	El ferrari de los ordenadores	El periódico Extremadura
16/05/16	Se presenta LUSITANIA II en el Centro de Cirugía de Mínima Invasión	El periódico Extremadura
17/05/16	El supercomputador LUSITANIA II, que estará en Cáceres, se presentará el 23 de mayo	Diario Hoy Extremadura
24/05/16	El supercomputador LUSITANIA II ya funciona	Diario Hoy Extremadura
24/05/16	El ferrari de los ordenadores, en Cáceres.	El Periódico Extremadura
26/05/16	Viñeta cómica sobre el supercomputador LUSITANIA II	El Periódico Extremadura
30/06/16	Competitividad empresarial y crecimiento económico	Especial empresas 2016. El Periódico.
25/07/16	Innovación en alta computación con sello extremeño en Austria	El Periódico Extremadura
09/11/16	El ordenador LUSITANIA II ayuda a conseguir la primera vacuna contre el Dengue	Diario Hoy Extremadura

## Prensa digital



## Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
18/02/16	Badajoz	Entrega de premios Babantic	Asistentes
26/02/16	Escuela Politécnica de Cáceres	HackForGood	Asistentes
08/03/16	Madrid	Consejo de la Red Española de Supercomputación	Asistentes
10/03/16	Mérida	I Encuentro Tecnológico (ENTIC) Extremadura	Asistentes
11/03/16	Madrid	Evento Computerworld	Asistentes
15/03/16	Escuela Politécnica de Cáceres	Mesa redonda sobre Mujer, ciencia y tecnología	Asistentes
01/04/16	Badajoz	Jornada CDTI	Asistentes
04/04/16	Escuela Politécnica de Cáceres	V Olimpiada Informática de Extremadura	Ponentes y Patrocinio
05/04/16	Mérida	F5 Networks, mejores usos y costumbres	Participantes
07/04/16	Madrid	Data Center Dynamics Converged	Participantes
13/04/16	Madrid	Jornada AsLAN	Participantes
21/04/16	Mérida	Compra Pública Innovadora	Participantes
03/05/16	Mérida	Jornada sobre nuevos criterios de contratación.	Participantes
10/05/16	Escuela Politécnica de Cáceres	Sesiones técnicas Wolfram	Asistentes
13/05/16	Madrid	Presentación memoria Fundación COTEC	Asistentes
23/05/16	Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, Cáceres	Jornada de Presentación de LUSITANIA II	Ponentes
25/05/16	Madrid	Fujitsu World Tour	Asistentes
1-2/06/16	BSC-CNS	Reunión técnica de la RES	Participantes

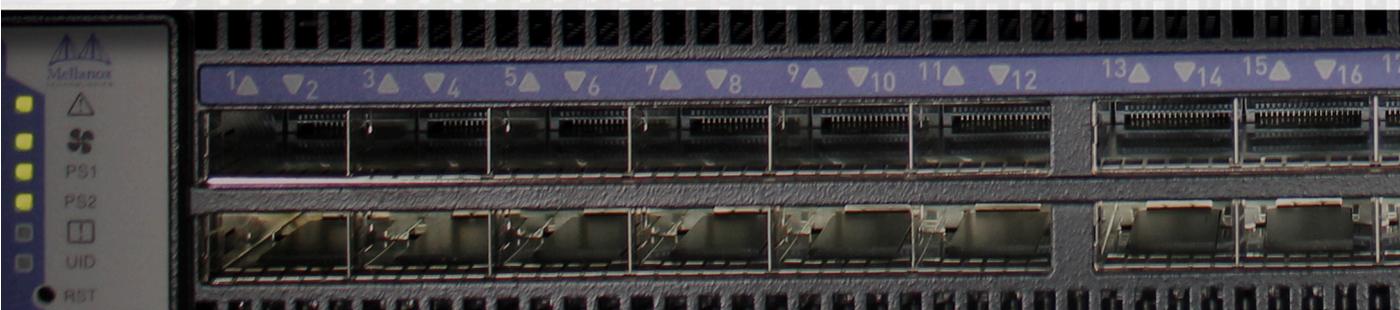
FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
8-10/06/16	Cáceres	V HPC Users Group FUJITSU	Ponentes y Asistentes
10/06/16	Madrid	Reunión grupo de trabajo Big Data de COTEC	Asistentes
17/06/16	Badajoz	Programa LIFE de la Unión Europea	Asistentes
20/06/16	Badajoz	Reunión AFEX	Asistentes
11/07/16	Madrid	H2020: Salud, cambio demográfico y bienestar. Jornada de presentación de las Convocatorias 2017	Asistentes
12/07/16	Escuela Politécnica de Cáceres	Curso internacional de verano "Smart city, movilidad sostenible y seguridad vial"	Ponentes
18-21/7/16	Innsbruck, Austria	2016 International Conference on High Performance Computing & Simulation (HPCS 2016)	Ponentes
19/09/16	Escuela Politécnica de Cáceres	XXVII Congreso de Estudios de Telecomunicación	Ponentes
20/09/16	León	Conferencia anual del consejo asesor de HPC	Asistentes
21/09/16	León	Congreso de usuarios de la RES	Asistentes
22/09/16	Escuela Politécnica de Cáceres	Curso internacional de verano "Industria 4.0 y su repercusión socioeconómica"	Ponentes
30/09/16	Escuela Politécnica de Cáceres	Noche Europea de los Investigadores	Ponentes
4/10/16	Mérida	Encuentro Programa Mentoring	Asistentes
10/10/16	Don Benito	CDTICA, Smart Small Cities	Asistentes
11/10/16	FEVAL	Techday Smartagro 4.0	Asistentes
19/10/16	Universidad Carlos III de Madrid	Workshop on OpenDayLight and NFV/SDN Orchestration	Asistentes
25/10/16	Madrid	Cátedra CE Consulting	Asistentes
10/11/16	Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, Cáceres	RIS3 Forum 2016. Estrategia de investigación e innovación para la especialización inteligente de Extremadura	Asistentes

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
11/11/16	Cáceres	Noche AEXIT (Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación)	Asistentes
14/11/16	Universitat Politècnica de València	Grupos de Trabajo y Jornadas Técnicas de RedIRIS	Asistentes
15/11/16	Sede de la Asociación de la Prensa de Madrid	Seminario Experiencias prácticas de Big Data en Administraciones Públicas	Ponentes
16/11/2016	Mérida	Jornada Women's Age	Asistentes
18-19/11/16	Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, Cáceres	I Foro Ciberderecho tecnológico y Seguridad informática	Ponentes y Asistentes
30/11/16	Madrid	Entrega de premios enerTIC	Asistentes
12-20/12/16	Escuela Politécnica de Cáceres	Curso Big Data y Supercomputación: Transformando datos en conocimiento.	Organizadores y ponentes
15-16/12/16	Escuela Politécnica de Cáceres	8ª Jornada CéniTS: Talento y Vocaciones en el Sector TIC	Organizadores y ponentes
20/12/16	IES Castelar de Badajoz	XI Charlas sobre Informática y Jóvenes Emprendedores	Ponentes



6

# Recursos tecnológicos





## Recursos tecnológicos

El centro CénitS tiene como objetivo principal la explotación de los Supercomputadores LUSITANIA I y II, pero también el fomento, la difusión y la prestación de servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas.

Aunque los nodos de cálculo forman el grupo del Supercomputador, CénitS también dispone de otros recursos tecnológicos que se utilizan para dar servicios de Cloud Computing y Big Data a la comunidad investigadora.

## LUSITANIA II

Desde finales de 2015, Extremadura cuenta con el supercomputador LUSITANIA II, alojado en Cáceres. Éste incrementa de forma destacable los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, alcanzando una capacidad de cálculo de 25,05 Teraflops, y aumentando así considerablemente la potencia disponible en sus instalaciones de Trujillo, con el primer supercomputador LUSITANIA.

Las características técnicas de LUSITANIA II se detallan a continuación:

### Nodo de cómputo de memoria compartida

- 1 Primergy RX4770 M2 con 4 procesadores Intel Xeon E7-4830v3 con 12 cores cada uno, a 2,1GHz, con 30MB de Caché (48 cores en total), 1,5 TB de memoria RAM DDR4, 4 fuentes de alimentación y discos SAS de 300GB.

### Clúster de memoria distribuida

- 10 chasis Fujitsu Primergy CX400 con capacidad para albergar hasta 4 servidores cada uno.





- 40 servidores Fujitsu Primergy CX2550 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2660v3, de 10 cores cada uno, a 2,6GHz (20 cores por nodo, 800 cores en total) y 25 MB de caché, con 80GB de RAM y 2 discos SSD 128GB.

#### Nodos de servicio

- 3 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1, cada uno, con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 32GB de RAM DDR4, 2 discos SAS de 300GB.

#### Nodos de desarrollo

- 2 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 64GB de RAM DDR4, 2 discos SAS de 300GB.

#### Almacenamiento

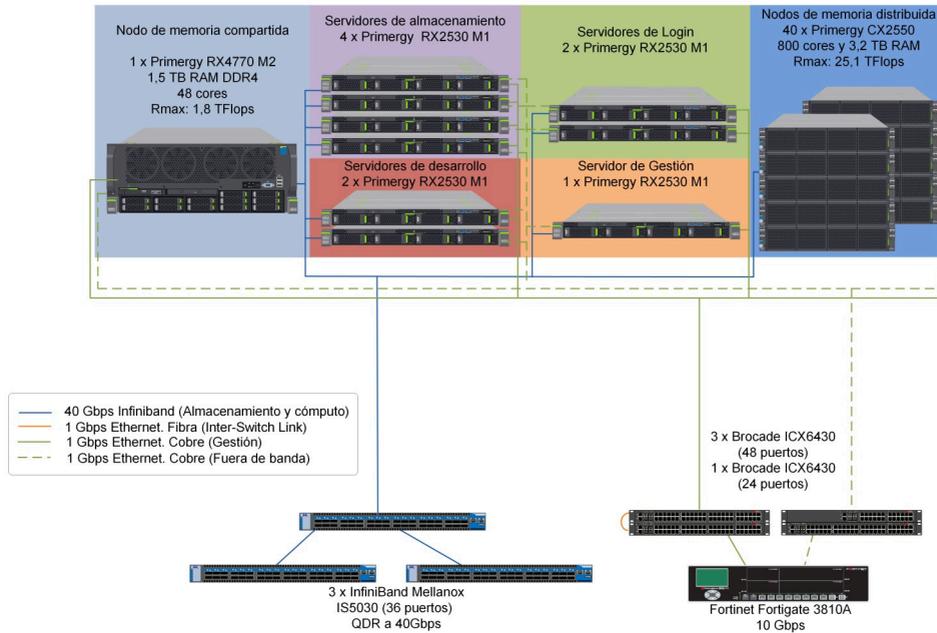
- Cabina de metadatos (MDT) Eternus DX 200S3 (15 discos de 900GB SAS) = 12 TB.
- 2 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 64GB de RAM DDR4 y 2 discos SAS de 300GB para gestión de metadatos con Lustre.
- Cabina de datos (OST) Eternus DX 200 (41 discos de 2TB NL-SAS) = 82 TB.
- 2 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 64GB de RAM DDR4, 2 discos SAS de 300GB para gestión de los objetos con Lustre.



## Topología de red

La conectividad del supercomputador con el exterior se resuelve a través de una conexión de hasta 10Gbps con la Red Científico Tecnológica de Extremadura, que conecta las principales ciudades y centros tecnológicos de la región. Interconectada a su vez con RedIRIS y con la red europea GÉANT.

### Arquitectura LUSITANIA II



Internamente, la infraestructura de servicio y cálculo se vertebra sobre:

- Un firewall Fortinet Fortigate 3810A como sistema de seguridad perimetral, con conexiones de hasta 10 Gbps, capacidad de firewall, VPN, antivirus, detección de intrusiones y gestión de ancho de banda por conexión.
- Tres switches Brocade ICX6430 de 48 puertos y un switch Brocade ICX6430 de 24 para la red de comunicación y de gestión del supercomputador.
- Tres switches InfiniBand Mellanox IS5030 de 36 puertos QDR a 40Gbps para la red de cómputo.



Este proyecto (FCYA10-1E-157) ha sido cofinanciado con fondos FEDER por el Ministerio de Economía y Competitividad, dentro del subprograma de Proyectos de Infraestructura Científico-Tecnológica (2010-2011), del Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica, 2008-2011.

# LUSITANIA



Desde el año 2009, CénitS gestiona el Supercomputador LUSITANIA, el primer supercomputador de Extremadura, alojado en Trujillo. Desde su puesta en marcha ha proporcionado a investigadores, innovadores y tecnólogos un recurso capaz de satisfacer requerimientos que de otra forma no sería posible atender, prestando servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a la comunidad investigadora, empresas, instituciones y centros tecnológicos de Extremadura.

Las características técnicas de LUSITANIA se detallan a continuación:

### Nodos de cómputo

- 2 x HP Integrity SuperDome SX2000 con 64 procesadores de doble núcleo cada uno (128 procesadores, 256 cores), Itanium2 Montvale @ 1.6 GHz, 18 MB cache.
- 2 x 1TB de memoria RAM en una sola imagen = 2TB de memoria.
- 2 x 40x146GB discos SAS = 2 x 3,6TB para "scratch" en RAID 5.
- Sistema Operativo Suse Linux Enterprise Server 11 (con posibilidad de ejecutar simultáneamente Windows Server, HP-UX, Red Hat, SLES, ...).
- Alta disponibilidad.
- Hasta 16 particiones físicas y 64 particiones virtuales.

### Nodos de servicio

- Servicio de acceso/desarrollo/gestión HPC.
- 4 x HP Integrity rx2660 cada uno con: 4 núcleos del procesador Intel Itanium-2 dual-core Montvale (1,6Ghz/18MB "caché-en el chip"); 16GB de memoria DDR-2; 6 discos SAS de 146 GB.

### Nodos de gestión

- 2 x HP ProLiant DL380-G5 cada uno con: con 8 núcleos del procesador Intel Xeon Quad-Core E5450 (3.0 GHz, 1333 FSB, 80W); 8 GB de memoria FBD DDR-2; 2 discos SAS de 146 GB.

### Nodos de cloud computing

- 2 x HP ProLiant DL-380-G7 cada uno con dos procesadores Intel Xeon E5630 (2,53GHz/4-core/12MB), uno con 32 GB de memoria RAM y otro con 64 GB y dos discos SAS de 146 GB por servidor.
- 1 x HP ProLiant DL-380-G5 con 2 procesadores Intel Xeon E5450 (3GHz/4-core/12MB), con 16 GB de memoria RAM y dos discos SAS de 146 GB.
- 2 x HP ProLiant BL465c Gen8 con dos procesadores AMD Opteron 6366 HE (1,8GHz/8-core/16MB), 128 GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 300 GB por servidor. Estos servidores pertenecen al proyecto FI4VDI (Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa

Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

- 2 x HP ProLiant BL465c Gen8 con dos procesadores AMD Opteron 6276 (2,3GHz/8-core/16MB), 256 GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 300 GB por servidor. Estos servidores y el software Intel Cluster Studio for Linux incluido en ellos, pertenecen al proyecto Siatdeco (RITECA II), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.
- 4 x HP ProLiant BL460c G6 con dos procesadores Intel Xeon E5540 (2,53GHz/4-core/8MB), 24GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 146 GB por servidor. Estos servidores pertenecen al proyecto FI4VDI (Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional.
- 4 x HP ProLiant BL465c Gen8 con dos procesadores AMD Opteron 6376 (2,3GHz/16-core/16MB), 128 GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 300 GB por servidor.
- 1 x Fujitsu Server PRIMERGY RX350 S8, con dos procesadores Intel Xeon E5 2620v2 (2,10GHz/6 cores/15MB), 256 GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 300GB. Este servidor pertenece al proyecto MITTIC (Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.



### Unidades aceleradoras de cómputo

- 2 x 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). Estos servidores pertenecen al proyecto Siatdeco (RITECA II), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.
- 1 x Intel Xeon Phi Co-Processor 3120P. Este procesador pertenece al proyecto MITTIC (Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales), que está cofinanciado Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.

### Almacenamiento

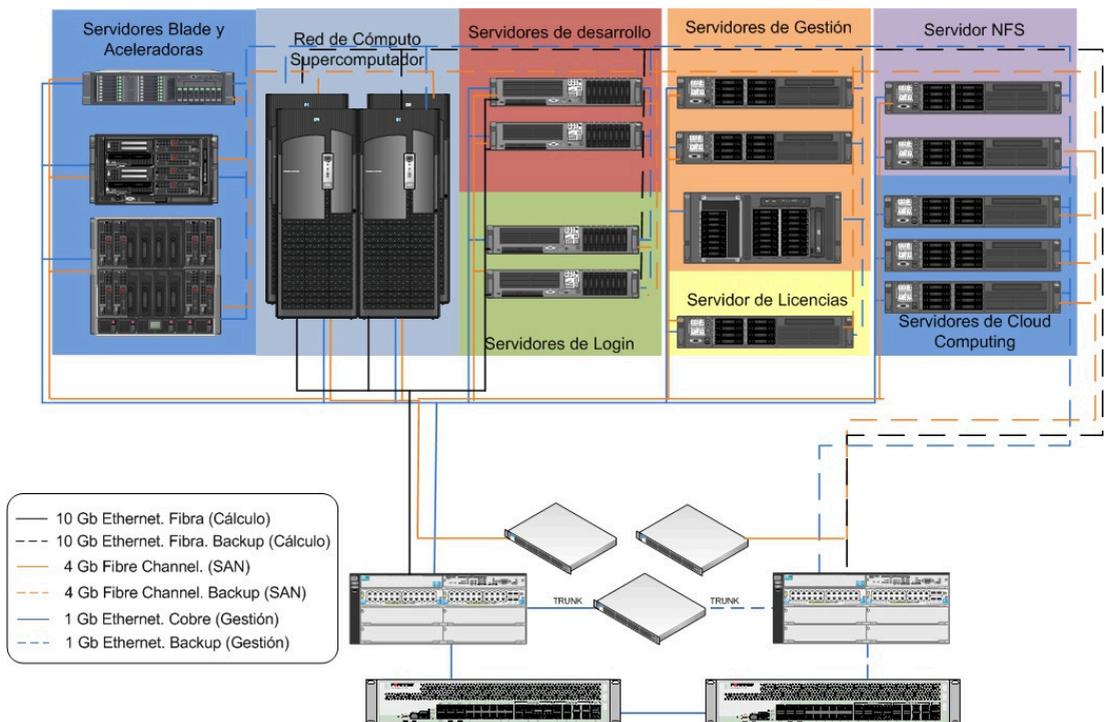
- Red fibre channel con multipathing activo-activo (8 puertos x 4 controladoras).
- 2 x EVAs 8100 x [(208 discos FATA x 1TB) + (128 discos FC x 450GB)] = 265,6TB.
- 2 x DL380-G5 servidores NAS ejecutando el sistema de ficheros distribuido HP StorageWorks PolyServe.
- HP 3PAR StoreServ 7200 x (14 discos SAS 10k x 900GB) = 11,5TB. Esta unidad de almacenamiento pertenece al proyecto FI4VDI (Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional.

## Copias de seguridad

- Sistema de backup basado en la librería de cintas HP Storageworks EML 245e.
- Capacidad para 245 cintas de tecnología LTO-4 Ultrium 1840, lo que ofrece una capacidad de 392 TB en comprimido 2:1.
- Software de gestión y planificación de backups desatendidos HP StorageWorks DataProtector.

## Topología de red

La conectividad del Centro con el exterior se resuelve a través de una conexión a 10Gbps con la Red Científico Tecnológica de Extremadura, que conecta las principales ciudades y centros tecnológicos de la región. Interconectada a su vez con RedIRIS y con la red europea GÉANT.



Internamente, la infraestructura de servicio y cálculo se vertebra sobre:

- Dos firewall Fortinet Fortigate 1000C como sistema de seguridad perimetral, con conexiones a 10Gbps, capacidad 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, 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 fibre 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 el resto de servidores y a los usuarios la conexión a las redes de servicio.

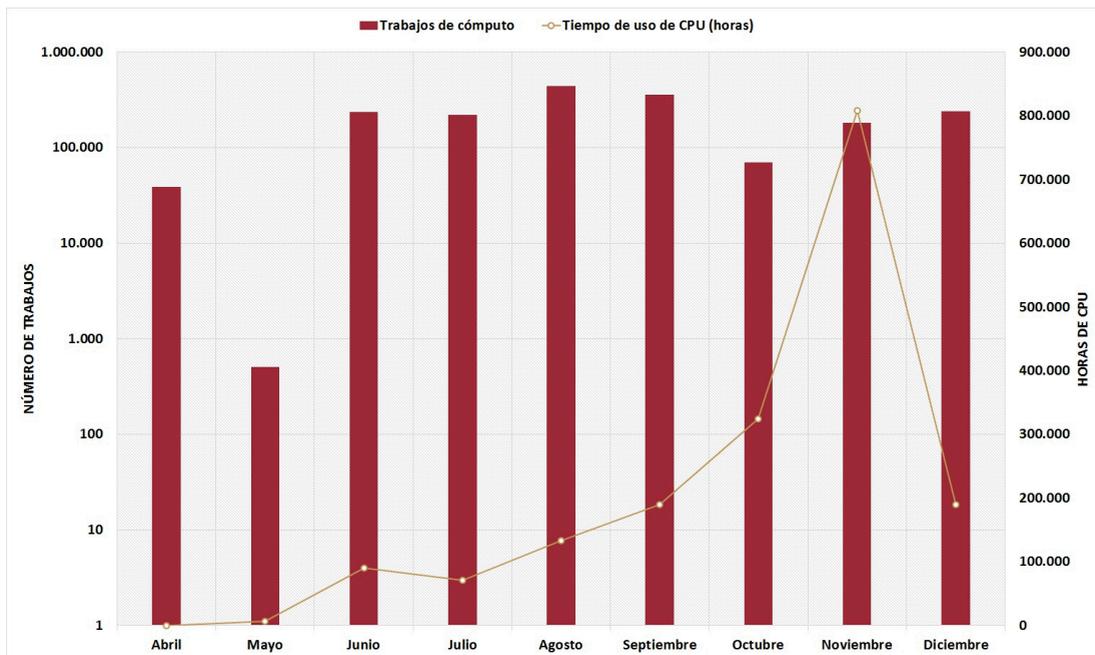
## Consumo de recursos de LUSITANIA II

### Uso de recursos

Durante el año 2016, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la nueva infraestructura hardware y software de LUSITANIA II. La gráfica que se presenta a continuación muestra los datos relacionados con el consumo de los recursos de los nodos de memoria distribuida y compartida de LUSITANIA II.

Durante el ejercicio de 2016, se han ejecutado un total de 1.815.430 trabajos de cómputo, encargados de generar datos para posteriormente ser analizados.

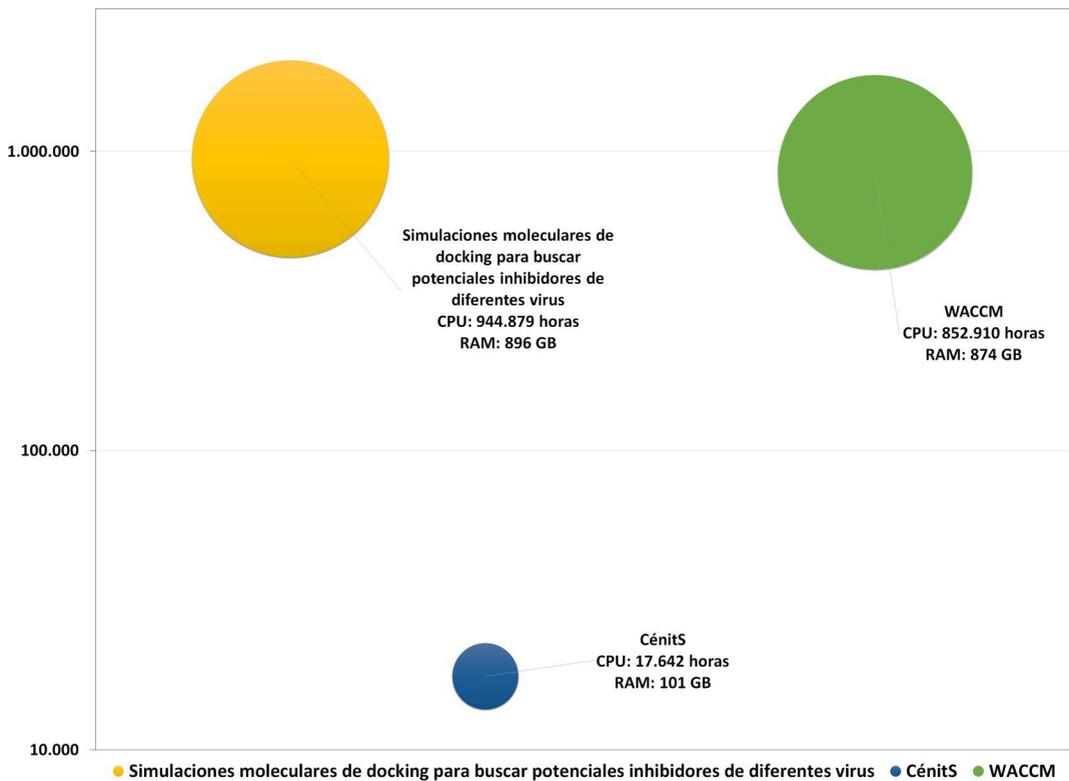
En la siguiente gráfica se muestra la relación mensual de los trabajos finalizados en cada mes, independientemente de la fecha de comienzo de ejecución, y el uso de CPU. Tanto el número de trabajos como las horas de CPU se han incrementado considerablemente con respecto al supercomputador LUSITANIA.



### Relación de recursos por proyecto

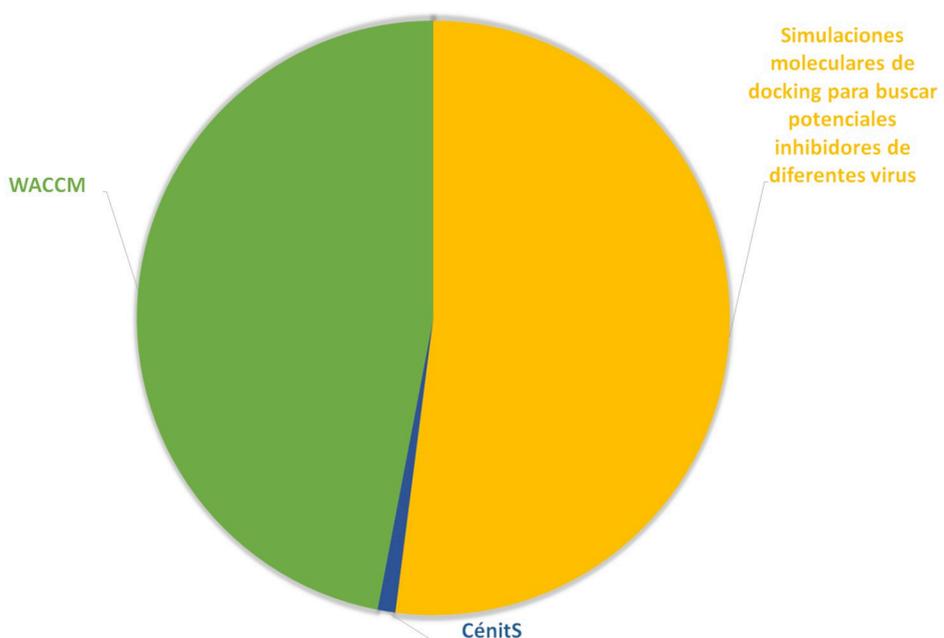
A continuación se muestran las gráficas que relacionan los distintos consumos de los proyectos ejecutados en el supercomputador LUSITANIA II.

El centro de cada esfera representa el consumo anual de CPU (2016), medido en horas de procesamiento por proyecto. El volumen de la esfera indica el total de la memoria RAM (GB) utilizada por proyecto, durante el tiempo que ha estado consumiendo CPU.



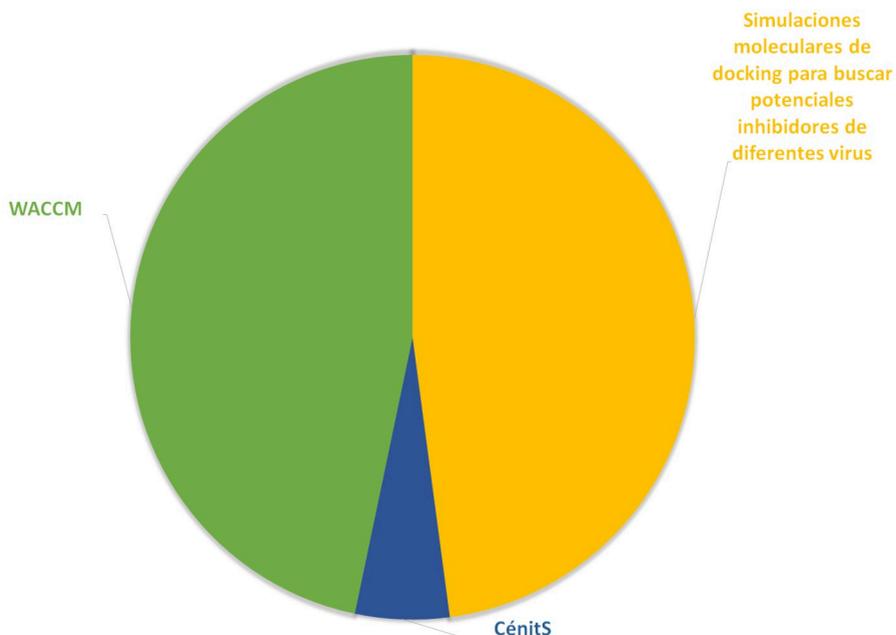
## Uso de CPU

La gráfica que se presenta a continuación indica el consumo anual de CPU de LUSITANIA II referente a los proyectos que más carga computacional han requerido. Durante el año 2016, dos proyectos han hecho uso de casi la totalidad de recursos de CPU de LUSITANIA II, además de los proyectos de investigación desarrollados en el propio centro CéniTS.



## Uso de Memoria Principal

El consumo anual de memoria principal (RAM) de LUSITANIA II referente a los proyectos de investigación ejecutados sobre él, ha seguido un comportamiento análogo al consumo de CPU expuesto en la sección anterior, tal y como muestra la gráfica que se presenta a continuación.



## Uso de Almacenamiento

Tal y como muestra la gráfica que se presenta a continuación, el consumo anual de almacenamiento en discos de LUSITANIA II ha estado monopolizado por el proyecto WACCM, alcanzando un 96% con respecto a los demás proyectos de investigación que han necesitado hacer uso de ello; con un 3% en el caso del proyecto *Simulaciones moleculares de docking para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus*, y un 1% para los proyectos ejecutados en CénitS.



# Consumo de recursos de LUSITANIA

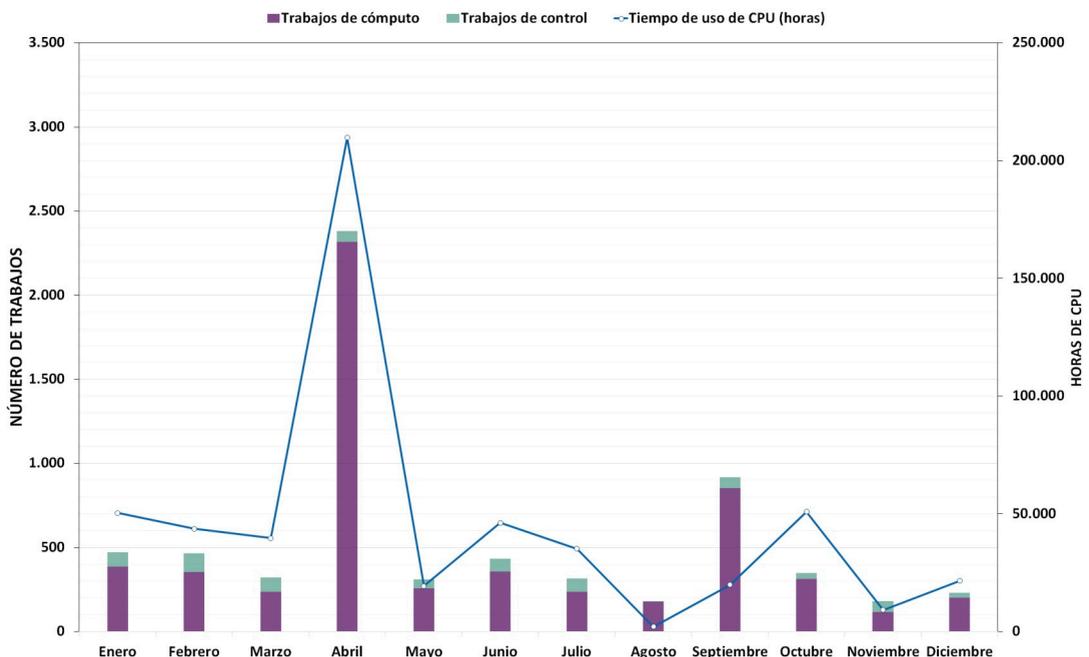
## Uso de recursos

Durante el año 2016, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura hardware y software de LUSITANIA. La gráfica que se presenta a continuación muestra los datos relacionados con el consumo de los recursos en los nodos principales de LUSITANIA, que son los que soportan la mayoría de la carga de computación del Centro, en base a todos los trabajos ejecutados sobre ellos.

Durante el ejercicio de 2016, se han ejecutado un total de 6.511 trabajos de usuarios, divididos en dos categorías:

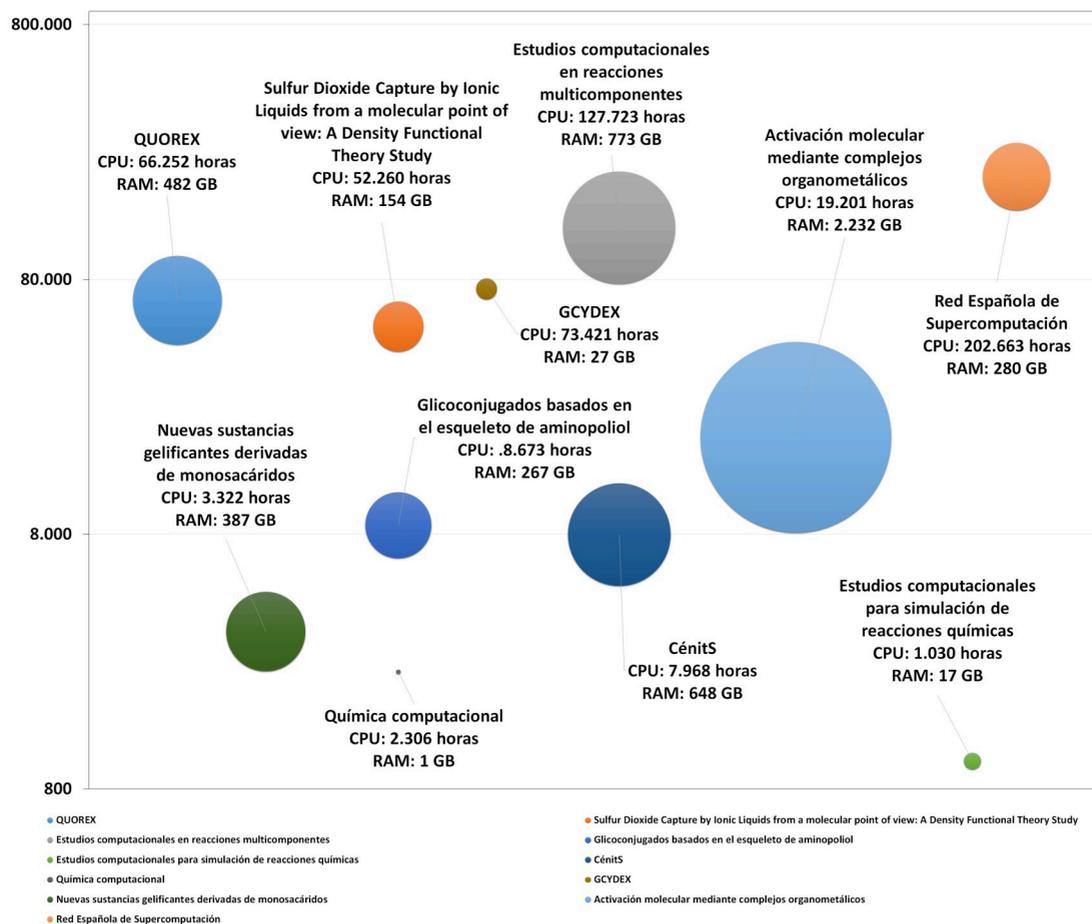
- Trabajos generales: 5.751. Estos trabajos están destinados a generar datos para su posterior análisis.
- Trabajos de control: 760. Estos trabajos son ejecutados por los usuarios para optimizar el entorno de ejecución de cada trabajo.

En la siguiente gráfica se muestra la relación mensual de los trabajos finalizados, tanto de cómputo como de control, y el uso de CPU. Como se puede apreciar, existen trabajos con necesidades muy dispares ya que no hay una relación directa entre el número de trabajos y las horas de CPU requeridas para su ejecución. Este hecho pone de manifiesto que la infraestructura del supercomputador LUSITANIA es muy versátil ya que puede ejecutar tareas de muy diversa naturaleza.



## Relación de recursos por proyecto

A continuación se muestran las gráficas que relacionan los distintos consumos de los proyectos ejecutados en el supercomputador LUSITANIA.



El centro de cada esfera representa el consumo anual de CPU (2016), medido en horas de procesamiento por proyecto. El volumen de la esfera indica el total de la memoria RAM (GB) utilizada por proyecto, durante el tiempo que ha estado consumiendo CPU.

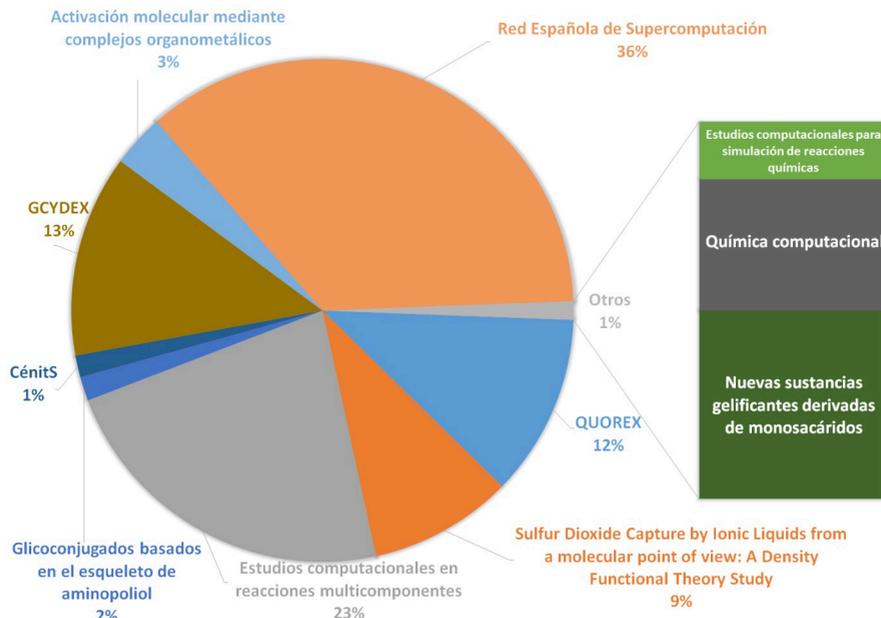
Claramente se pueden visualizar los proyectos que han hecho uso intensivo de los recursos de LUSITANIA, además de apreciar la capacidad de que dispone el propio supercomputador para albergar proyectos heterogéneos, gracias a su singular infraestructura.

Tal y como se ha comentado anteriormente, CénitS cuenta con proyectos heterogéneos en lo que a necesidades de cómputo se refiere. En la siguiente figura se presenta la relación existente entre el consumo de memoria RAM, el consumo de CPU y el volumen de disco utilizado, agrupados por proyecto.

## Uso de CPU

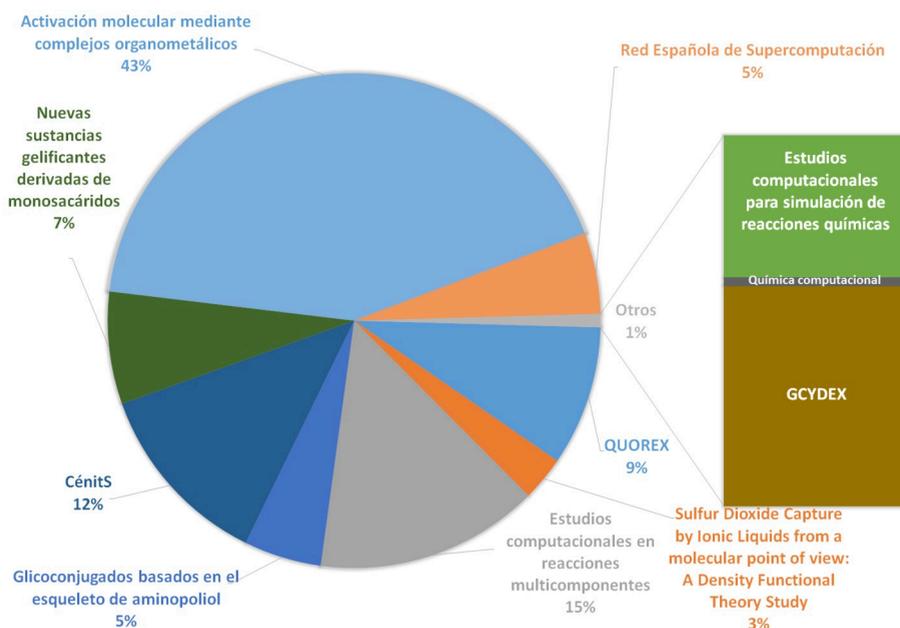
La gráfica que se presenta a continuación indica el consumo anual de CPU de LUSITANIA referente a los proyectos de investigación ejecutados sobre él. Durante el año 2016, los proyectos de la Red Española de Supercomputación han consumido un 36% de horas de CPU, seguidos del proyecto

*Estudios computacionales en reacciones multicomponentes* y *GCYDEX*, con un 23% y 13% respectivamente.



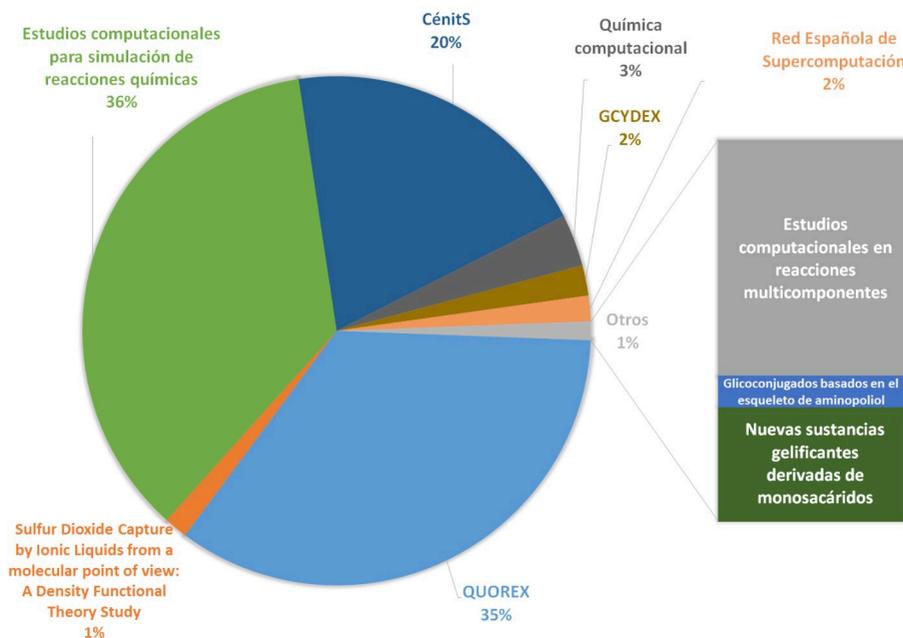
## Uso de Memoria Principal

La gráfica que se presenta a continuación indica el consumo anual de memoria principal (RAM) de los proyectos de investigación ejecutados sobre LUSITANIA. En este caso, el proyecto *Activación molecular mediante complejos organometálicos* ha necesitado un 43% de memoria RAM, seguido de *Estudios computacionales en reacciones multicomponentes* con un 15% y de los proyectos ejecutados en el propio centro CénitS con un 12%.



## Uso de Almacenamiento

La gráfica que se presenta a continuación establece el consumo anual de almacenamiento en discos de LUSITANIA. Los proyectos que más almacenamiento en disco han requerido para sus investigaciones han sido: *Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas* (36%), los proyectos ejecutados por el grupo de investigación QUOREX (35%) y los proyectos de investigación ejecutados en el propio centro CénitS (20%).



## USUARIOS

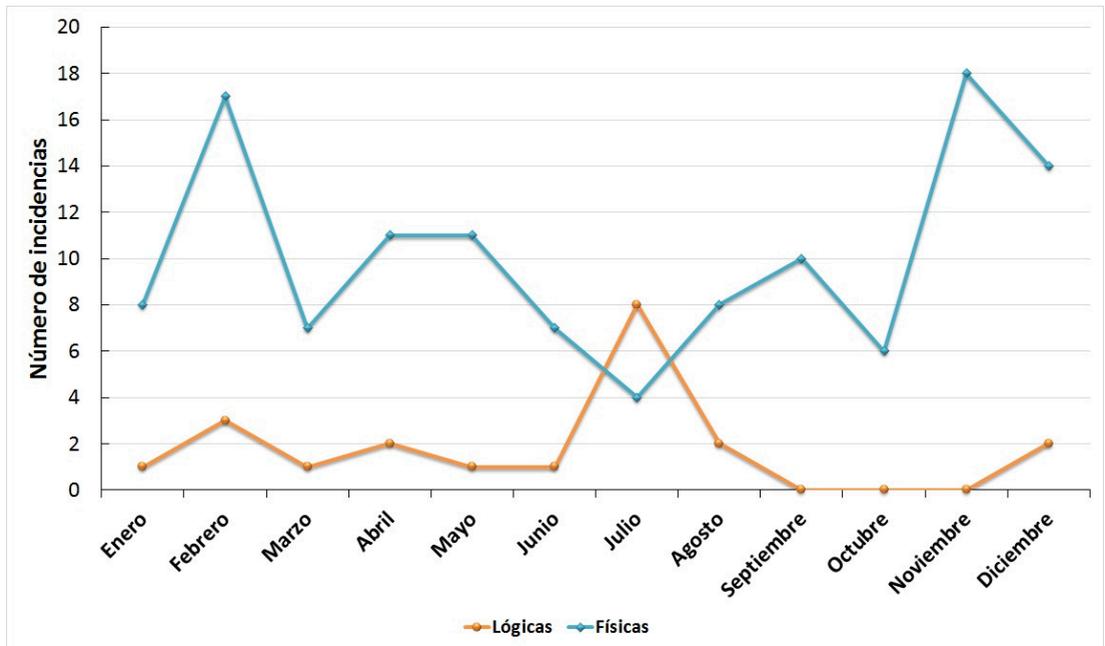
Durante el año 2016, un importante número de técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en los dos supercomputadores de CénitS: LUSITANIA y LUSITANIA II.

### Incidencias

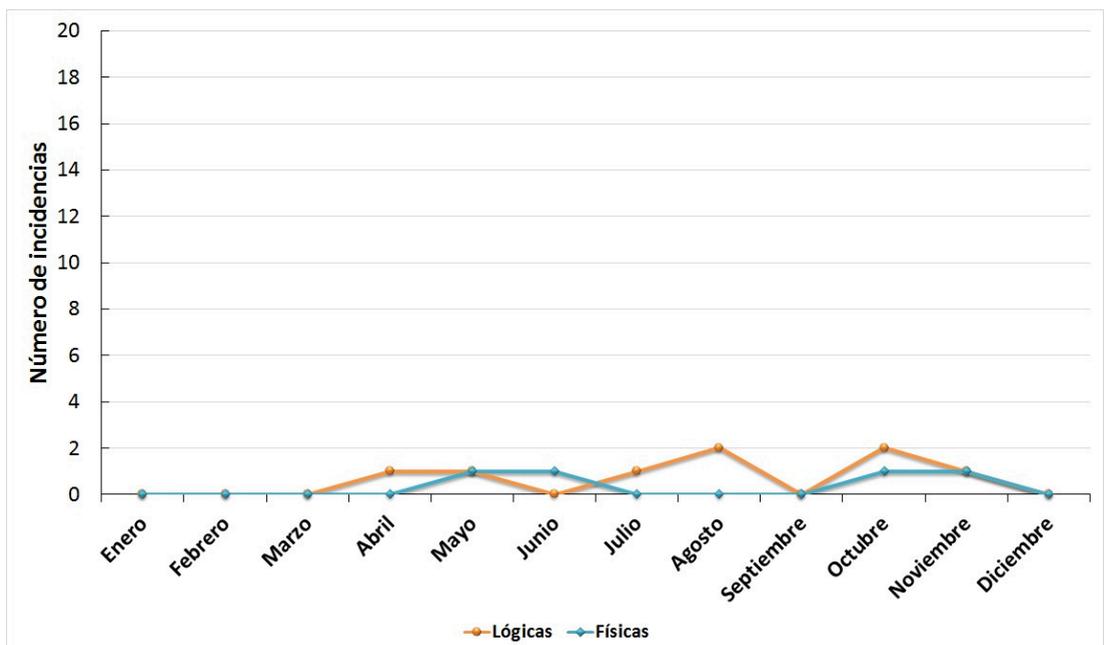
Las incidencias y peticiones que realizan los usuarios se resuelven mediante un servicio de atención individualizado basado en la herramienta de gestión de tickets osTicket. Con esta herramienta se logra gestionar y controlar todas las incidencias y peticiones de una manera ordenada. osTicket permite 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.

En relación al supercomputador LUSITANIA, se han resuelto un total de 142 incidencias de usuario. A continuación se muestra la relación de incidencias lógicas o software y de incidencias físicas o hardware resueltas durante los distintos meses del año 2016.



Por otro lado, el número de incidencias de usuario en el supercomputador LUSITANIA II ha sido menor, con un total de 12 incidencias de usuario en todo el año 2016. A continuación se muestra la relación de dichas incidencias.



## SOFTWARE

<b>Sistemas Operativos</b>
Suse Linux Enterprise Server
Red Hat Enterprise
Debian
CentOS
Ubuntu

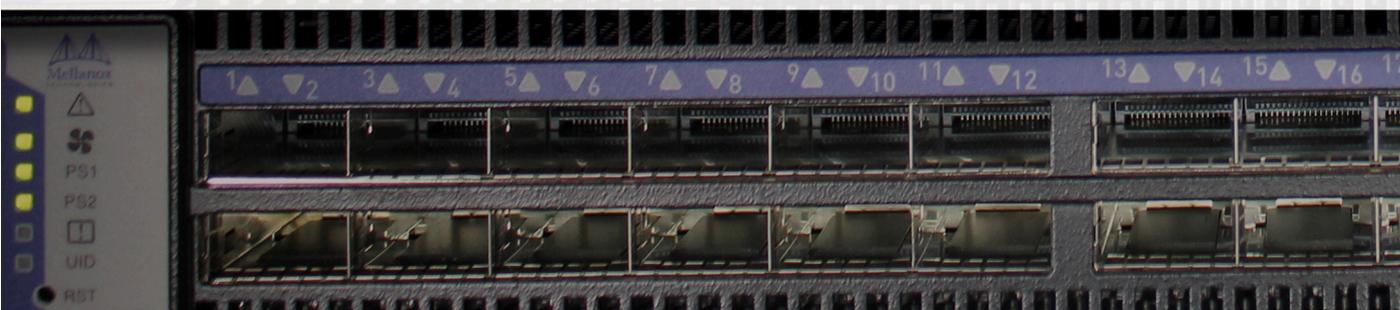
<b>Computación Técnica</b>
Octave
Matlab
Gaussian
IDL
NWChem
R
COMSOL
VASP

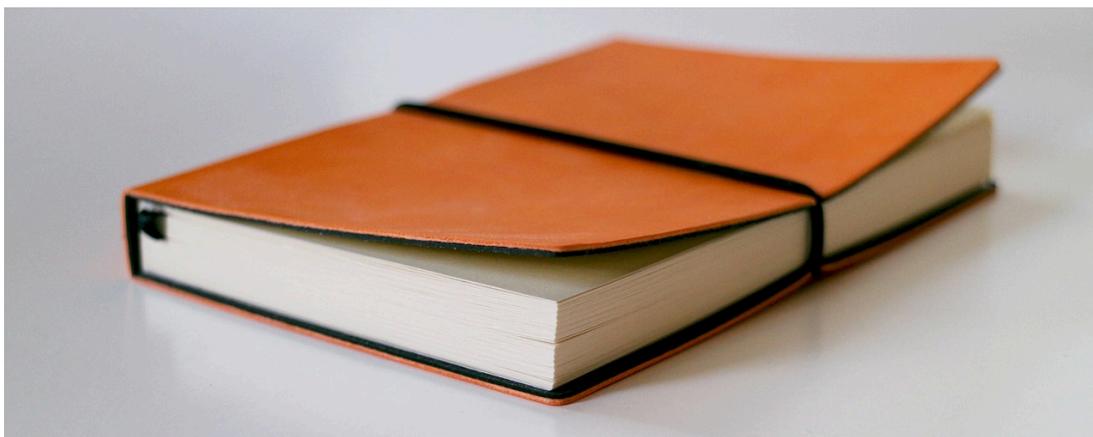
<b>Compiladores</b>
Intel C/C++ Compiler
Intel Fortran Compiler
GNU GCC
Python
Java JDK

<b>Herramientas</b>
Intel Advisor Vectorization Optimization and Thread Prototyping
Inter Inspector Memory and Thread Debugging
VTune Amplifier Performance Profile
Intel ITAC MPI Analyzer and Profiler
Slurm
Intel Debugger
Intel Trace Analyzer and Collector
Platform LSF



**Proyectos concluidos**





## Proyectos concluidos

En esta sección se incluye la relación de los proyectos de investigación e innovación que han concluido y han sido desarrollados por CénitS, universidades, centros de investigación, centros tecnológicos, organismos públicos y empresas, utilizando los recursos tecnológicos de CénitS.

Los proyectos se presentan divididos en las tres categorías en que apoya CénitS sus actividades: Ciencias de la Tierra, Ciencias de la Vida y Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.

### Ciencias de la Tierra

#### ABAQUS

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

#### Objetivos

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), gracias a la simulación, usando el método de elementos finitos, de diversos ensayos mecánicos (compresión, tracción, etc.) y de permeabilidad en este tipo de 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.**

**Eduardo Sabio Rey. Universidad de Extremadura.**

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 han analizado los fenómenos de transferencia de energía, momento y materia en los procesos termoquímicos a los que se somete la biomasa, prestando especial atención a la reducción de la exergía perdida.
- 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

Uso del Método de los Elementos Finitos, con la aplicación COMSOL Multiphysics, para analizar simultáneamente la distribución de los valores de las variables estudiadas (temperatura, presión, velocidad, entalpía, entropía, exergía, etc.) dentro del dominio analizado, lo que permitirá la creación de modelos para la mejora de procesos termoquímicos aplicados a la biomasa y producción de carbones ad hoc.

#### 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

### **Aplicación de técnicas Big Data a la predictibilidad de flujos de tráfico urbano en Ciudades Inteligentes**

#### **Equipo de CémitS - COMPUTAEX.**

El tráfico rodado es uno de los principales problemas a los que se enfrenta la mayoría de las ciudades. Las nuevas tecnologías (en particular el Cloud Computing y el Big Data) juegan un papel principal a la hora de establecer sistemas de control y seguimiento de los mismos con vistas a facilitar la movilidad y la sostenibilidad. La adecuada gestión del tráfico revierte en un mejor aprovechamiento de las infraestructuras, en una reducción de las emisiones contaminantes a la atmósfera, en un menor consumo de carburante, en una mejor gestión del tiempo y en un incremento en la seguridad de los ciudadanos.

#### Objetivos

- Software resultante de un cuidadoso análisis comparado de herramientas existentes y de la modelización del tráfico.
- Informe técnico que recoja los puntos más conflictivos del tráfico de Cáceres.
- Producto software operativo sobre las instalaciones de CémitS que almacena y muestra la información histórica del tráfico de la ciudad de Cáceres y el estudio de viabilidad de extenderlo a todas las ciudades extremeñas.
- Documento que recoja y divulgue los resultados del proyecto.

#### Metodología

La primera fase del proyecto consistió en analizar las diferentes herramientas de modelización de tráfico para obtener los datos simulados del tráfico en cualquier ciudad estudiada, los cuales deberían ser volcados, de forma automática, con herramientas que más tarde se desarrollarían.

Una vez establecida la porción a estudiar, y realizada la simulación, se necesitaba almacenar los datos obtenidos en alguna aplicación que permitiera poner a disposición de los usuarios los datos obtenidos de las diferentes simulaciones, así como información histórica y posibles optimizaciones del tráfico para evaluar las mejoras introducidas en el tráfico de la ciudad.

#### Objetivos alcanzados

- Desarrollo de un conjunto de herramientas que sirven de apoyo al simulador de tráfico y permiten una fácil adaptación de cualquier ciudad para ser simulada.
- Implantación de herramientas para publicar las rutas y que los datos obtenidos en las simulaciones sean accesibles a cualquier ciudadano, y se pueda consultar la información sobre cada una de las rutas.
- Realización de pruebas piloto, usando la ciudad de Cáceres para, a través de diferentes algoritmos de optimización de la duración de los semáforos, estudiar el impacto sobre el tráfico rodado.

#### Fuentes de financiación

“Aplicación de técnicas Big Data a la predictibilidad de flujos de tráfico urbano en Ciudades Inteligentes” forma parte de CENITAL-2, un proyecto de innovación e investigación, desarrollado bajo el Programa Operativo FEDER Extremadura 2007-2013, dentro del Eje 1 “Desarrollo de la Economía del Conocimiento”.

## Cálculos ab-initio

**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 electroquímicamente 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.

## Distribución de niveles electromagnéticos en determinados entornos geográficos

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

### Objetivos

Calcular 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.

### Metodología

Se han implementado 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. Sistematizar estos algoritmos para su extrapolación en la aplicabilidad a entornos de grandes dimensiones, con el apoyo de información derivada de Sistemas de Información Geográficos (SIG), hace que sea prometedor el uso de supercomputadores en esta materia, debido a la obtención de resultados muy precisos en puntos o áreas críticas de interés.

## Estudio de olas de calor en Extremadura: clima actual y futuro

**Universidad de Extremadura y Fundación COMPUTAEX.**

Proyecto financiado por el V Plan Regional de I+D+i, para el estudio de las series de temperaturas disponibles en la región extremeña, eligiendo aquellas más largas y con menos lagunas. El objetivo principal fue el cálculo de los niveles de retorno de temperatura extrema en una situación de cambio climático, y analizar la variabilidad espacio-temporal de los eventos de olas de calor a partir de salidas de modelos climáticos globales y regionales para periodos actuales y futuros.

## Evaluación de los recursos eólicos y solares en Andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoescala (RENUOVA)

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

La revolución protagonizada por las energías renovables tiene en España a uno de sus mayores impulsores, al ser líder aprovechando la energía eólica y solar. Sin embargo, la variabilidad espacio-temporal de los recursos asociados afecta a su integración en el sistema energético. Además, 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.

### Objetivos

- Estudiar la disponibilidad de los recursos solar y eólico mediante el uso de modelos de predicción numérica.
- Analizar 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

Ha estado basada en el uso del modelo Weather Research and Forecasting (WRF), uno de los Modelos Meteorológicos de Mesoescala más usados por la comunidad científica, el cual implementa 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.

### **Implementación paralela de modelo matemático de Tsunamis en el Mediterráneo y Atlántico**

**David Valencia, Laboratorio de Radiactividad Ambiental de la Universidad de Extremadura.**

El interés en modelar tsunamis se incrementaron en los últimos años a raíz de las terribles consecuencias del tsunami del océano Índico del 2004 y posteriormente del tsunami ocurrido en 2011 en Japón. Los tsunamis pueden producir efectos catastróficos por medio de olas de gran amplitud y fuerte corrientes que rompen contra la línea de costa. A raíz de la agencia española de cooperación internacional se desarrolló un modelo numérico de propagación de tsunamis para las aguas de Marruecos y el sur de la península ibérica, ambas zonas sísmicamente activas puesto que la placa africana y la eurásica confluyen en esta zona. A consecuencia de ello, a lo largo de la historia han ocurrido varios tsunamis en la zona. El modelo desarrollado ha sido probado con las simulaciones de los tsunamis históricos de 1755 de Lisboa y de 1856 y 2003 de Algeria. El principal inconveniente de estos modelos es el elevado tiempo de cómputo para obtener resultados acerca de las posibles situaciones de emergencia.

#### Objetivos

Desarrollar una versión paralela del modelo descrito basada en OpenMP y MPI para reducir el tiempo de ejecución del mismo y poder obtener resultados en un tiempo reducido que permita actuar ante posibles riesgos de tsunamis en la zona del sur de la península ibérica y en Marruecos.

#### Metodología

Se partió de tsunamis de los que se disponía de registros históricos de las catástrofes producidas. Para acelerar la ejecución de las simulaciones se procedió a realizar una implementación del código Fortran con MPI y OpenMP. Como primera aproximación al desarrollo del código, evaluaron implementaciones puramente basadas en OpenMP y en MPI por separado, para identificar las ventajas e inconvenientes de cada una de ellas en el código. Una vez identificados los puntos de unión de ambas librerías se procedió a realizar una versión híbrida de MPI y OpenMP para mejorar al máximo posible el rendimiento del código.

### **Magnetic connectivity through the Solar Partially Ionized Atmosphere**

**Ángel de Vicente, Departamento de Física Solar del Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC).**

Being the closest star, the Sun is the only one whose surface can be spatially resolved. Solar astronomers are lucky to obtain information about their object of research at spatial and temporal resolutions impossible in other fields of astrophysics. The state-of-art techniques in modern observational solar physics make it possible to reach a spatial resolution of 0.1 arc seconds, meaning that we can “see” details on the Sun as small as 70 km (the size of the island of Tenerife). To increase our understanding, the models describing the physical processes are forced to be one step ahead in their degree of realism over the field of stellar astrophysics. This makes the Sun a threshold star. Many stars are similar to the Sun in their magnetic activity cycles, presence of starspots on their surface, or active phenomena such as jets. Understanding the magnetic activity of the Sun can be extended to other stars, guiding theories of stellar structure and evolution.

The complex interactions in magnetized stellar plasmas are best studied via numerical simulations, a new powerful method of research that appeared in astrophysics with the development of large supercomputer facilities.

With a coming era of large aperture solar telescopes, ATST and EST, spectropolarimetric observations of the Sun will become available at extraordinary high spatial and temporal resolutions. New modelling tools are required to understand the dynamical behaviour of the plasma, related to magnetic field, at these tiny spatial scales. The aim of this project is to create such tools.

#### Objetivos

Exploración de una descripción novedosa del plasma de la atmósfera solar que incluye una aproximación multi-fluido.

#### Metodología

El bajo nivel de ionización en la fotosfera y cromosfera del sol conlleva diferencias sobre el tratamiento clásico magneto-hidrodinámico de su atmósfera. El código desarrollado en este proyecto permite hacer simulaciones de las regiones sub-fotosférica y fotosférica del sol, hasta la cromosfera baja, con un realismo no conseguido en el pasado.

## Publicaciones y congresos

- "Rayleigh-Taylor instability in prominences from numerical simulations including partial ionization effects", Khomenko, E.; Díaz, A.; de Vicente, A.; Collados, M.; Luna, M., *Astronomy & Astrophysics*, Volume 565, id.A45, 15 pp.
- "Rayleigh-Taylor instability in partially ionized prominence plasma", Khomenko, E.; Díaz, A.; de Vicente, A.; Collados, M.; Luna, M., *Nature of Prominences and their role in Space Weather*. Edited by Brigitte Schmieder, Jean-Marie Malherbe and S.T Wu. *Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium*, Volume 300, pp. 90-93
- "Fluid description of multi-component solar partially ionized plasma", Khomenko, E.; Collados, M.; Díaz, A.; Vitas, N., *Physics of Plasmas*, accepted on 6/08/2014
- Observations and Implications of Large-amplitude Longitudinal Oscillations in a Solar Filament", Luna, M.; Knizhnik, K.; Muglach, K.; Karpen, J.; Gilbert, H.; Kucera, T. A.; Uritsky, V., *The Astrophysical Journal*, Volume 785, Issue 1, article id. 79, 13 pp.
- "Rayleigh-Taylor instability in partially ionized compressible plasmas: One fluid approach", Díaz, A. J.; Khomenko, E.; Collados, M., *Astronomy & Astrophysics*, Volume 564, id.A97, 16 pp.
- "Prominence Mass Supply and the Cavity", Schmit, Donald J.; Gibson, S.; Luna, M.; Karpen, J.; Innes, D., *The Astrophysical Journal*, Volume 779, Issue 2, article id. 156, 7 pp.
- "Propagating Waves Transverse to the Magnetic Field in a Solar Prominence", Schmieder, B.; Kucera, T. A.; Knizhnik, K.; Luna, M.; Lopez-Ariste, A.; Toot, D., *The Astrophysical Journal*, Volume 777, Issue 2, article id. 108, 11 pp.
- "Properties of oscillatory motions in a facular region", Kostik, R.; Khomenko, E., *Astronomy & Astrophysics*, Volume 559, id.A107, 10 pp.
- "Dislocations in Magnetohydrodynamic Waves in a Stellar Atmosphere", López Ariste, A.; Collados, M.; Khomenko, E., *Physical Review Letters*, vol. 111, Issue 8, id. 081103
- "Properties of convective motions in facular regions", Kostik, R.; Khomenko, E., *Astronomy & Astrophysics*, Volume 545, id.A22, 9 pp.
- "Heating of the Magnetized Solar Chromosphere by Partial Ionization Effects", Khomenko, E.; Collados, M., *The Astrophysical Journal*, Volume 747, Issue 2, article id. 87, 11 pp.

### Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre

**Antonio Plaza Miguel de la Universidad de Extremadura.**

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.

#### Objetivos

Implementar técnicas de análisis hiperespectral desarrolladas por expertos del grupo de investigación "Computación Hiperespectral" (HYPERCOMP) de la Universidad de Extremadura, utilizando las infraestructuras del Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación.

#### Metodología

Ha consistido en el desmezclado eficiente de imágenes hiperespectrales de gran dimensionalidad, usando firmas espectrales puras (conocidas como endmembers) junto con sus correspondientes contribuciones o abundancias.

### The impact of the 11 year cycle in WACCM simulations

**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. Natalia Calvo de la Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García de la Universidad de Extremadura, Katja Matthes de Helmholtz-Zentrum 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 cual es capaz de simular reacciones químicas (como las del ozono estratosférico), y el transporte de una multitud de especies químicas.

## Metodología

Se acometerán modelizaciones climáticas a través de integraciones de modelos de circulación general (WACCM) e integración numérica de ecuaciones diferenciales, con el apoyo del supercomputador LUSITANIA.

## 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 WACCM.
- Se han llevado a cabo 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.
- 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.

## 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 titulado "Impact of idealized spectral solar forcing in the WACCM-3.5 model", y con agradecimientos a CénitS. G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera and N.Calvo.
- Exposición oral en el congreso Space Climate 4 en Goa (India) Enero 2011. titulada "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. intitulada "The 11-y solar cycle in transient WACCM-3.5 simulations". G.Chiodo, N.Calvo and R.Garcia-Herrera.

## Ciencias de la Vida

### **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**

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

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 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. La hipótesis residió en que estos análisis podrían desentrañar las alteraciones genéticas implicadas en la enfermedad.

## Objetivos

Estudio de Exoma completo en 3 pacientes seleccionados:

- SigAD esporádico.
- Asociado a autoinmunidad.
- Con asociación familiar.
- Valorar las variantes en el número de copias génicas (CNVs) en los tres grupos de pacientes anteriores.
- Estudiar la prevalencia de enfermedades autoinmunes, alérgicas e infecciosas de la serie.
- Valorar la infección por *Helicobacter Pylori* de los pacientes adultos.
- 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.

## Cálculo de la corriente de bootstrap en el Stellarator TJ-II

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

### Objetivos

Calcular el perfil radial de la corriente de bootstrap en el stellarator TJ-II. Ésta es una corriente neoclásica, paralela al campo magnético, que aparece en todos los dispositivos de confinamiento magnético de plasmas. Se forma debido a la combinación de dos efectos: atrapamiento de partículas debido a la variación en la fuerza del campo magnético y gradientes radiales de temperatura y/o densidad.

### Metodología

Ha consistido en la resolución de la Ecuación Cinética de Deriva (DKE, en inglés), que describe la evolución de la función de distribución de una partícula en presencia de campos magnéticos y eléctricos y de un operador de colisión que describe colisiones de pares de partículas. Se tendrá en cuenta la hipótesis de transporte local y difusivo, válida bajo ciertas condiciones en TJ-II, para simplificar la DKE.

Objetivos alcanzados

El uso de LUSITANIA permitió calcular los coeficientes monoenergéticos asociados a la

corriente de bootstrap en varias posiciones del plasma, teniendo en cuenta varios valores de la colisionalidad y el campo eléctrico, aplicando el código NEO-MC.

## Consolider TECNO\_FUS

**José M<sup>a</sup> 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.

## Construcción de superficies de energía potencial

**Eloísa González Lavado. Departamento de Ingeniería Química y Química Física (GCYDEX) de la Universidad de Extremadura.**

### Objetivos

Construcción de superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos basada en cálculos ab initio de alto nivel.

### Metodología

Ejecución de programas escritos en lenguaje FORTRAN.

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

**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.

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

**Francisco Javier Olivares del Valle (coordinador), 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. Investigadores del grupo de investigación QCAMM (Quantum Chemistry And Molecular Modelling) del Departamento de Ingeniería Química y Física de la Universidad de Extremadura.**

## Objetivos

- El estudio teórico de la espectroscopia y evolución temporal de estados excitados, mediante el desarrollo de un tratamiento teórico unificado para clarificar el papel que representa el disolvente en la desexcitación de estados excitados.
- Abordar 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.

## Metodología

Empleo de cálculos teóricos mecanocuánticos de alto nivel (CASSCF, CASPT2, TD-DFT) en la descripción de estados excitados de moléculas de interés biológico, caracterizando los distintos puntos críticos de las hipersuperficies de energía potencial de los estados excitados que intervengan en la fotofísica y fotoquímica de los cromóforos.

## 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.
- Se ha completado un estudio sobre los estados

excitados de una molécula de interés biológico como el 11-cis-retinal.

## 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.

## Estirpex

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Uno de los hallazgos más importantes en la investigación sanitaria ha sido determinar que el estudio de la secuencia de ADN permite conocer los procesos biológicos fundamentales del organismo y su funcionamiento. En ese sentido, las tecnologías NGS (Next Generation Sequencing) representan un nuevo paradigma que permite secuenciar el genoma o secciones de éste a gran escala, con una importante disminución del tiempo y del coste del proceso.

## Objetivos

- Crear un repositorio de datos históricos y clínicos a partir de la digitalización de archivos de interés genealógico, para garantizar su conservación y ponerlo a disposición de ciudadanos y especialistas en genética para su consulta.
- Investigar y desarrollar soluciones que permitan profundizar en el estudio de enfermedades hereditarias, a través de filtrado, extracción y visualización de datos genómicos de alto nivel procedentes del árbol genealógico de sus pacientes.

## Metodología

Combinación de tareas destinadas a la búsqueda de información genealógica y genética relevante con tareas para implementar y desplegar el software especificado, con especial interés en la obtención de información genética de alto nivel mediante la infraestructura de LUSITANIA.

## Financiación

Estirpex forma parte de CENITAL, un proyecto de innovación e investigación desarrollado bajo el Programa Operativo FEDER Extremadura 2007-2013, dentro del Eje 1 "Desarrollo de la Economía del Conocimiento".

## Estirpex-2

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Estirpex-2 persigue la continuidad del trabajo desarrollado en el proyecto Estirpex; concretamente el estudio, desarrollo y despliegue de un catálogo de servicios para sectores económicos relevantes en la región que puedan beneficiarse de la tecnología de secuenciación genética masiva (NGS, Next-Generation Sequencing), apoyada en el uso de la supercomputación y garantizado la seguridad de la información tratada.

## Objetivos

- Estudiar las implicaciones técnicas asociadas a cada actividad del proyecto.
- Implantar soluciones para apoyar el despliegue de un servicio NGS del catálogo.
- Analizar la seguridad de los activos y sistemas de información asociados al servicio.
- Acercar los servicios del catálogo a los sectores económicos de la región que pudieran estar interesados, haciendo hincapié en el valor añadido de la secuenciación del genoma en especies autóctonas, animales y vegetales.

## Metodología

La primera fase del proyecto ha consistido en un análisis pormenorizado de las implicaciones técnicas asociadas a cada una de las actividades del proyecto: conocer las técnicas y métodos bioquímicos para llevar a cabo un proceso de ultra-secuenciación genética, el equipamiento necesario para ello, los tipos de estudios de secuenciación masiva o el valor estratégico de los servicios propuestos destaca dentro de esta fase ejecutada en el proyecto. Así mismo, se han implantado soluciones software para apoyar el despliegue de un servicio NGS del catálogo, donde destaca un prototipo en la plataforma OpenNebula, para el procesamiento automático de secuencias generadas por un servicio de resecuenciación, incluyendo herramientas manuales de interpretación.

## Objetivos alcanzados

- Se ha establecido un catálogo de servicios de procesamiento y análisis de secuencias genéticas obtenidas mediante técnicas de ultra-secuenciación en el centro CénitS.
- Establecimiento de medidas para preservar la seguridad de la información de los activos envueltos en la provisión de servicios de ultra-secuenciación.
- Se ha analizado el estado del arte del uso de la secuenciación de especies animales y vegetales y sus posibles aplicaciones en Extremadura, tales como la caracterización de denominaciones de origen o la catalogación de especies autóctonas.
- Desarrollo de la herramienta PedigreeX, para facilitar, a los consejeros genéticos, la construcción de pedigrís de manera interactiva.

Estirpex-2 forma parte de CENITAL 2, un proyecto de innovación e investigación desarrollado bajo el Programa Operativo FEDER Extremadura 2007-2013, dentro del Eje 1 "Desarrollo de la Economía del Conocimiento".

## Estudio teórico de la fotofísica y fotoquímica de complejos cromóforo-ciclodextrina y cromóforo-proteínas PYP y GFP

**Manuel Ángel Aguilar Espinosa del Dpto. de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura. 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, Ruth María Barata Morgado y Samuel Frutos Puerto.**

## Objetivos

- Desarrollo de 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.

## Expedición Shelios 2009

El principal objetivo de la expedición Shelios 2009 fue la observación y retransmisión del eclipse total de sol que tuvo lugar en julio de 2009.

### Metodología

La imagen se enviaba desde China vía satélite y se recepcionaba en los servidores de las entidades españolas que a la vez distribuían a Internet y que mediante un Round-Robin DNS que proporcionaban los servidores ubicados en CénitS que servían la web a todo el mundo de forma balanceada y con tolerancia a fallos.

## Flow-induced anisotropy in metallic glasses

**Daniel Crespo, Eloi Pineda y Jorge E. Velasco.**  
**Departamento de Física de la Universidad Politécnica de Catalunya. Amadeu Concustell.**  
**Centro de proyección térmica de la Universidad de Barcelona.**

Experimentos recientes han mostrado que la aplicación de esfuerzos mecánicos sobre un vidrio metálico puede generar anisotropía atómica. De este modo, tras la aplicación del esfuerzo se generan direcciones privilegiadas en el vidrio, y las propiedades mecánicas del material en las diferentes direcciones se ven afectadas. Para analizar este fenómeno, el grupo de investigación ha realizado un experimento utilizando radiación Sincrotrón en ESRF (European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Francia), en el que se ha analizado la respuesta estructural de la aleación amorfa Pd<sub>42</sub>Ni<sub>7.5</sub>Cu<sub>30</sub>P<sub>20</sub>. Se escogió este material porque se trata de un vidrio metálico dúctil, estable en un amplio rango de temperaturas y resistente a la oxidación.

### Objetivos

En el proyecto de investigación Flow-induced anisotropy in metallic glasses se simula un vidrio

metálico similar al que se ha analizado experimentalmente para comparar los resultados obtenidos mediante simulación numérica de Dinámica Molecular con los resultados experimentales obtenidos mediante radiación Sincrotrón.

La principal diferencia entre las medidas experimentales y la simulación mediante dinámica molecular proviene de las diferentes escalas temporales. Las medidas experimentales se realizan en tiempos de algunos segundos o minutos, mientras que mediante dinámica molecular se pueden llegar a simular tiempos del orden de algunos nanosegundos. Por esta razón, la dinámica molecular solo se puede comparar cualitativamente con los resultados experimentales.

Experimentalmente se obtienen velocidades de deformación entre  $10^{-2}$  s<sup>-1</sup> y  $10^{-4}$  s<sup>-1</sup>. Es decir, se requieren entre 100 s y 10000 s para obtener una deformación de la muestra del 100 %. Las deformaciones máximas estudiadas son del 5 %. Hasta el momento, mediante dinámica molecular se han simulado velocidades de deformación entre 10<sup>12</sup> y 10<sup>10</sup> s; la deformación del 100 % de la muestra se conseguiría en tiempos entre 0,001 ns y 0,1 ns. En estas simulaciones se ha observado la aparición de anisotropía con deformaciones de hasta el 10 % de la muestra. Para deformaciones superiores se observa la creación de bandas de cizalla (shear bands), ampliamente documentadas en la bibliografía.

El objetivo concreto del proyecto realizado en CénitS fue acercarse a las condiciones experimentales reduciendo la velocidad de deformación y la deformación máxima. Para ello, se estudiaron velocidades de deformación menores, de 10<sup>8</sup> s, equivalentes a una deformación del 100% de la muestra en tiempos de 10 ns. Las deformaciones máximas a estudiar fueron del 2 %, 5 % y 10 %, dado que no estamos interesados en el estudio de las bandas de cizalla.

### Metodología

La simulación se realizó utilizando el software lammps, y potenciales tipo embedded atom method, que han demostrado ser adecuados para el estudio de metales, tanto en fase cristalina como amorfa. Lamentablemente, no se dispone de potenciales para el Fósforo, por lo que se simuló la composición Pd<sub>53</sub>Ni<sub>34</sub>Cu<sub>13</sub>, con la misma proporción entre los elementos metálicos.

## IFMIF-EVEDA España

**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.

## Medidas de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia

**Juan Ignacio Lagares. Unidad de Aplicaciones Médicas del CIEMAT. Francisco Sánchez Doblado y María Teresa Romero Expósito. Departamento de Fisiología Médica y Biofísica/Servicio de Radio-física 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.

## Novel genomic regions associated to specific complex chromatin marks

**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.

## Química computacional

**José Carlos Corchado Martín-Romo. Dpto. 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.
- Estudiar propiedades fisico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.

## Simulación de procesos químicos

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

Simulación de sistemas y procesos de interés químico, biológico e industrial haciendo uso de mecánica molecular para su estudio tanto en fase gas como en disolución.

## Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con Euterpe

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

### Objetivos

- Simulación 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 estudiaron inestabilidades ITG en el stellarator TJ-II.
- Estudio del 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).

## Metodología

Se han usado simulaciones en régimen lineal en la configuración estándar (100\_44\_64), para plasmas con  $\beta = 0\%$ , además de caracterizar las tasas de crecimiento de estas inestabilidades en esta

configuración. Cambiando los perfiles de densidad y temperatura se encontraron regímenes con diferentes grados de inestabilidad ITG y diferentes espectros, lo que fue analizado en el régimen no lineal y caracterizado desde el punto de vista topológico.

# Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

## Accesibilidad web

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

El imparable avance de las TIC (Tecnologías de la Información y las Comunicaciones), así como el contexto sociocultural y económico bajo el cual están sustentadas, exige una serie de conocimientos y habilidades, tanto instrumentales como cognitivas, que permitan poner en práctica nuevas formas de comunicación, con las cuales los ciudadanos podrán adaptarse a la Sociedad de la Información mediante el uso de la información relevante.

### Objetivos

El proyecto “Evaluación de la accesibilidad web” fue uno de los tres proyectos enmarcados en CENITAL-2015, que propuso la aportación de soluciones para la reducción de la brecha digital y el aumento de la alfabetización tecnológica en la región, haciendo especial hincapié en la disposición de la tecnología web a las personas con todo tipo de discapacidad, especialmente en zonas rurales, donde la tecnología está aún más desligada de los ciudadanos. En definitiva, este proyecto se propuso como un servicio para analizar y evaluar la accesibilidad de un conjunto de portales web que proveen distintos tipos de servicios a los extremeños. Para la selección de los sitios web que se analizarían se tuvieron en cuenta los tres principales sectores productivos (primario, secundario y terciario), así como la relevancia de los mismos para los ciudadanos de la región extremeña.

### Metodología

El trabajo contempló los aspectos relacionados con la accesibilidad web, entre los que se encuentran las pautas o el grado de cumplimiento de la normativa para, a partir de la recomendación WCAG 2.0 (Web Content Accessibility Guidelines 2.0) del W3C (World Wide Web Consortium), a través de las pautas de accesibilidad de contenido web 2.0, llevar a cabo una selección y análisis de un conjunto de muestras de más de 40 sitios web, escogidos convenientemente entre los sectores productivos

más importantes. Finalmente, estas muestras fueron analizadas con distintas herramientas de evaluación de la accesibilidad web como WAVE y AChecker.

### Resultados

En cuanto al código fuente de los sitios web del ámbito nacional, los criterios de éxito no satisfechos en un mayor número de ocasiones fueron los siguientes: aquellos relacionados con la falta de alternativas textuales a contenido multimedia, como imágenes, y los que indicaban que no se podía identificar el propósito de un enlace mediante únicamente su texto.

En cuanto al ámbito regional, los requisitos más incumplidos fueron los mismos que se han indicado en el anterior punto, aunque los sitios analizados también presentaban un número significativo de etiquetas, en las cuales el usuario debe introducir información, sin instrucciones que faciliten el proceso.

Tras analizar las distintas muestras de páginas web de los principales sectores productivos en Extremadura y España, se dedujo que con la herramienta WAVE las páginas web de los tres sectores seguían un patrón de accesibilidad parecido, alcanzando unos porcentajes de errores de Nivel A en el ámbito nacional en torno al 88% y de Nivel AA en torno al 12%. Por otro lado, en Extremadura ocurría un hecho parecido; el porcentaje de errores de Nivel A para las muestras analizadas ascendía al 88%, siendo aproximadamente el 12% restante debido a errores referentes al Nivel AA.

En cuanto al grado de satisfacción de las pautas de la WCAG 2.0 en los sitios analizados, se concluyó que, independientemente del sector económico y del ámbito geográfico del sitio web, el porcentaje de criterios de éxito no cumplidos, necesario para la validación del grado A, fue significativamente más alto que el porcentaje de los criterios no cumplidos referentes al grado AA.

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

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Desde el 30 de diciembre de 2015, Extremadura cuenta con un nuevo supercomputador, LUSITANIA II, alojado en Cáceres. Esto supuso una destacable ampliación de los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, aumentando considerablemente la potencia de cálculo de la que ya disponía en sus instalaciones de Trujillo, con el primer supercomputador LUSITANIA.

Se trató de un proyecto (FCYA10-1E-157) cofinanciado con fondos FEDER por el Ministerio de Economía y Competitividad, dentro del subprograma de Proyectos de Infraestructura Científico-Tecnológica (2010-2011), del Plan Nacional de Investigación Científica, Desarrollo e Innovación Tecnológica, 2008-2011.

Se financió, a través de esta convocatoria, la adquisición e instalación de equipamiento científico-tecnológico: en particular se consideraba la financiación equipos que se solicitasen para uso compartido de varios investigadores y proyectos, de coste superior a 60.000 €, sin perjuicio de que, en casos excepcionales y dada la naturaleza de la solicitud en cuestión, pudieran financiarse equipos de coste inferior.

Así, el nuevo supercomputador fue financiado tanto por el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO), como por la propia Fundación COMPUTAEX, que aportó el 20 % del coste total a partir de sus fondos propios.

## Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal

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

### Objetivos

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

## Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (Aldealab c3)

El Centro de Conocimiento de Cáceres AldeaLab C3 surgió 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 en la ciudad de Cáceres.

### Objetivos

- Fomento de 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.
- Generación de dinámicas de trabajo para que emerja el talento.
- Contribución 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.
- Promoción del aprendizaje de los ciudadanos y de las empresas en nuevas prácticas, de modo transversal e informal, para que aprendan haciendo.

## Análisis de imágenes en profundidad en terapias de rehabilitación supervisadas por robots autónomos.

**Eva María Mógena Cisneros. Trabajo Final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.**

En este Trabajo Fin de Máster se diseñó, desarrolló e implementó un sistema que permite realizar una sesión de terapia jugando al popular juego Simon Dice, pero con la particularidad de que quien dirige el juego es un robot que indica los movimientos que se han de realizar. Este sistema está especialmente diseñado para las personas mayores, ya que se trata de un grupo poblacional muy numeroso y que necesita realizar ejercicios supervisados de cara a mejorar su calidad de vida.

Con la finalidad de entrenar y validar el sistema, se creó una Base de Datos con datos en 3D de 20 personas realizando una serie de ejercicios específicos, así como las diferentes características extraídas de los mismos. Los resultados experimentales obtenidos muestran que es posible el reconocimiento de los distintos tipos de ejercicios realizados por el paciente, lo cual es fundamental para el desarrollo del juego.

## **CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial)**

### **CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)**

- CEDIN era un proyecto de innovación tecnológica que surgió 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.

#### Objetivos

El proyecto CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial) nació con el objetivo de 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 buscaba era 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.

## **COM.INFO.COM: Predictibilidad de infraestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPv6 y FTTH**

**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) de la Universidad de Extremadura, en convenio con la empresa Aplicaciones Integrales e Industriales Grupo G5.**

#### Objetivos

- Simulación de redes reales mediante supercomputación, mediante el desarrollo de una extensión de la herramienta gephi para la generación de escenarios paralelos en NS2.
- 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, y se añade Mobiwan para NS2.
- Evaluación de resultados y extrapolación para predicción de las necesidades, mediante la

realización de pruebas sobre escenarios reales (RedIris, Geant y AT&T) utilizando NS2 con el complemento PDNS en LUSITANIA y el análisis de los datos generados por el supercomputador.

## **Colaboración con el observatorio tecnológico UEX-HP**

COMPUTAEX firmó un acuerdo con la multinacional HP mediante el cual la Fundación albergó la infraestructura de productos hardware que HP aportará 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 la 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.

## **ConSumar**

### **Equipo de CénitS - COMPUTAEX.**

El consumo energético es uno de los principales gastos que deben afrontar, tanto los ciudadanos como las empresas. Las nuevas tecnologías juegan un papel principal a la hora de establecer sistemas de control y seguimiento con vistas a gestionar el consumo y la sostenibilidad energética. La adecuada planificación de los equipos con gran consumo puede suponer un ahorro importante. El proyecto ConSumar buscó el desarrollo de herramientas que, basadas en técnicas de Big Data, permitiera a los consumidores una mejor planificación del gasto energético a través de la predicción de los costes, relacionando el precio de la energía con los datos climáticos.

#### Metodología

Tras la realización de un estudio detallado de la normativa que rige el sector eléctrico y de las necesidades y del ecosistema disponible para aplicar el paradigma de Big Data al sector energético, se desarrolló una plataforma abierta para la obtención

de los datos y su análisis centrado, principalmente, en el coste de la energía.

Estos datos eran analizados por las herramientas de análisis para encontrar patrones de comportamiento entre el coste eléctrico y las diferentes variables independientes a medir, como la información climática, la capacidad para generación de energías renovables, etc.

Para ello, se diseñó un conjunto de herramientas que realizasen las siguientes labores:

- Recogida de datos fijos. Para el análisis se debe disponer tanto de los costes energéticos, como de los datos climáticos.
- Herramienta de visualización de las diferentes tarifas eléctricas.
- Plataforma de satisfacción del servicio eléctrico.
- Herramientas de análisis de datos.

Objetivos alcanzados

- Lograr eficiencia energética, tanto en el ámbito doméstico como empresarial.
- Aplicación de técnicas de Big Data al análisis de los datos de consumo energético.
- Búsqueda de la sostenibilidad económica y ecológica a través de las nuevas tecnologías.
- Un producto software que actúe como prospector de las diversas tarifas eléctricas en cada momento.

### **Consumo energético de operaciones colectivas MPI en plataformas multicores**

**Álvaro Cortés Fácil y Juan Carlos Díaz Martín del grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios) del DACC (Departamento de Arquitectura de Computadores y Comunicaciones) de la Universidad de Extremadura.**

El uso de gran cantidad de nodos de supercomputación en aplicaciones paralelizadas ha suscitado el interés en estudiar cómo optimizar el uso de los recursos utilizados, minimizando al mismo tiempo el impacto energético de esas aplicaciones. MPI (estándar de comunicación en la programación paralela en supercomputadores) dispone de operaciones colectivas susceptibles de poder implementarse con distintos esquemas. Ya que estos tipos de operaciones son las más utilizadas en aplicaciones científicas, se propone la evaluación de los esquemas de implementación disponibles, para aumentar el rendimiento de las mencionadas aplicaciones, así como el consumo energético asociado a su ejecución.

Metodología

El ámbito del estudio se restringirá a Open MPI, que es una de las implementaciones más conocidas y usadas de MPI. Las operaciones colectivas bajo estudio serán: MPI\_bcast, MPI\_alltoall y MPI\_allgather. En Open MPI, estas operaciones colectivas tienen 4 esquemas diferentes de implementación, las cuales describen distintas formas de realizar las comunicaciones intermedias. Se pretende estudiar el impacto energético de estos esquemas, mediante la realización de pruebas concretas en el supercomputador LUSITANIA.

Objetivos alcanzados

- Se ha desarrollado un servicio que permite la monitorización remota de las mediciones de la pinza amperimétrica, facilitando así la visualización del consumo eléctrico con este instrumento de medición en tiempo real.
- Se ha investigado la relación que tiene el consumo energético de distintas operaciones colectivas respecto a procesos asociados a esa comunicación, así como la influencia, en el consumo eléctrico, del tamaño del mensaje enviado entre nodos, del grado de uso del hardware y del tiempo de finalización de la operación colectiva ejecutada.

### **Creación de un ecosistema de negocio en cloud computing. Gestión automatizada de la infraestructura**

**Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.**

Objetivos

- 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 de un ciclo de vida estructurado.
- Investigación y comparación de las diferentes alternativas para la construcción del portal para el ecosistema de negocio.
- Aprender a trabajar con 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.
- Desarrollar un portal web que constituye el front-end del ecosistema de negocio cloud.

## Eco-traffic

### Equipo de CéniS - COMPUTAEX.

Estudios previos sobre el transporte sostenible, o sea, la capacidad de satisfacer la demanda del transporte actual sin comprometer la capacidad de satisfacer las necesidades de futuras generaciones, demuestran que es posible ahorrar tiempo, dinero y emisiones de CO<sub>2</sub> si se controlan adecuadamente los flujos de tráfico, los cruces, los semáforos, las rotondas, etc.

En ese sentido, dentro del ámbito de las smart cities se presentan iniciativas para la mejora de la eficiencia energética en el tráfico mediante el cloud computing, la supercomputación, la alta disponibilidad y la seguridad de la información, centrado en las posibilidades del big data y open data, se puede conseguir una gestión del tráfico urbano mucho más sostenible.

#### Objetivos

- Mejorar la gestión del tráfico mediante sistemas de control en las vías de comunicación extremeñas, que garanticen la fiabilidad y seguridad de los desplazamientos.
- Minimizar la huella de carbono, disminuyendo los tiempos de desplazamiento de los ciudadanos y el consumo de combustibles fósiles.
- Adaptar las infraestructuras para que absorban picos puntuales de tráfico.
- Salvaguardar la movilidad, la seguridad y la accesibilidad de los ciudadanos.

#### Metodología

Se desarrolló un modelo para el estudio del tráfico en una de las intersecciones más frecuentadas de la ciudad de Cáceres, donde confluyen los flujos de entrada y salida de la ciudad por la carretera de Trujillo (Avda. de la Universidad), el tráfico desde el centro de la misma que rodea la ciudad monumental y el vial de acceso a los residenciales de "La Mejostilla" en un cruce regulado por semáforos. Ese modelo permitió confrontar el estudio de tiempo y velocidad media por trayecto, así como número de paradas, con los datos obtenidos en la simulación del tráfico en una rotonda.

#### Objetivos alcanzados

De las simulaciones realizadas para un flujo total de 26.000 vehículos y teniendo en cuenta el consumo medio al ralentí de un vehículo a motor (~0,5 litros por hora), se puede destacar:

- Con la construcción de una rotonda en la intersección se pueden ahorrar un total de 108 litros de combustible al día (sumando el ahorro de los 26.000 vehículos).
- Las emisiones de CO<sub>2</sub> se reducirían 270 Kg por día.
- Los 26.000 usuarios se ahorrarían 79.083 horas al año si utilizaran la rotonda a diario.

#### Financiación

Eco-Traffic formó parte de CENITAL, un proyecto de innovación e investigación desarrollado bajo el Programa Operativo FEDER Extremadura 2007-2013, dentro del Eje 1 "Desarrollo de la Economía del Conocimiento".

## Despliegue de un testbed de redes definidas por software para la gestión de recursos de red en un CPD.

### Laura Amarilla Cardoso. Trabajo final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.

El objetivo general de este trabajo Fin de Máster fue llevar a cabo la implementación y evaluación de una red SDN (Software Defined Network). Para ello se realizaron las siguientes actividades:

- Estudio profundo de los principios básicos de SDN.
- Conocer diferentes controladores SDN para tomar una decisión sobre cuál de ellos es el más apropiado para usar en el desarrollo del proyecto.
- Evaluación de la funcionalidad y el rendimiento del controlador.
- Desarrollo e implementación de una SDN en un entorno virtual y en uno real.
- Evaluación de las implementaciones mencionadas anteriormente.

Este proyecto permitió verificar que las redes SDN proporcionan una nueva forma de utilizar las redes. Aunque las redes definidas por software pueden tener una estructura similar a las redes tradicionales, la diferencia radica en el hecho que es en el controlador donde se toman las decisiones relacionadas con el tráfico de red mientras que en las redes tradicionales estas decisiones se toman en los dispositivos de red.

## Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects

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

### Objetivos

- 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.

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

**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.**

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.

### Objetivos

- Extending 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.
- 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.

### 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 CémitS, 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 nanoantenas 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).

### 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 Symposium 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.

## ENGAGE. Banda ancha de alta velocidad en zonas rurales.

La Estrategia Europa 2020 resaltó el objetivo de llevar banda ancha básica a todos los europeos para el año 2013 y pretendió garantizar que, en 2020, todos los europeos tengan acceso a Internet de mayor calidad. No obstante, ello acarrea dificultades en cuanto a la evolución de la tecnología de red y a las inversiones y despliegue que deberían realizarse.

El proyecto Engage fue un Interreg IVC en el que participaron 12 socios de 10 países de la Europa de los 27, entre ellos Francia, Alemania, Irlanda, Reino Unido, España y Portugal.

### Objetivos:

- Estudiar "cómo construir una red de banda ancha de alta velocidad (HSB) a coste eficiente en las zonas rurales" para asegurar que se cumplen los requisitos para mantener o fortalecer las poblaciones locales y las actividades económicas.
- Compartir conocimientos y desarrollar políticas públicas 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 resultados entre posibles usuarios, ofreciendo una red 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. Difusión de los resultados a través de una red sostenible de expertos en HSB.

## Estudio y evaluación de los mecanismos de gestión de la movilidad en redes de próxima generación

### Jesús Calle Cancho. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática.

With the continuous development of mobile communications and Internet technology, one of the major challenges is to achieve efficient mobility

management in Wireless networks. IP mobility management is a key function that allows mobile nodes to continue their communications even when their point of attachment to the IP network changes. Internet protocols do not support mobility and wireless networking does not provide reliable connections to mobile users for real-time communications. For this reason, the Internet Engineering Task Force (IETF) developed various protocols for IP mobility management such as Mobile IPv6 (MIPv6) and Proxy Mobile IPv6 (PMIPv6). These protocols employ a centralized mobility management scheme where all intelligence is concentrated in one end-point system, rather than being distributed through the internet. However, centralized mobility solutions are prone to several problems and limitations: longer (sub-optimal) routing paths, scalability problems, signaling overhead,... This motivates Distributed Mobility Management (DMM) whose purpose is to overcome the limitations of the traditional centralized mobility management. We focus on DMM approach that is currently being considered by the IETF: PMIPv6 based DMM. The possibility of testing scenarios for these latest technologies is essential to analyze and implement proposals to optimize and verify the results of researches. An analysis of distributed mobility management has been carried out with this project: designing and configuring testbeds, configuring protocols and devices, analyzing critical process (handover) and analyzing exchange messages. Moreover, a proposal has been developed for improving tunneling management in Distributed Mobility Management called TE-DMM (Tunneling Extension to Distributed Mobility Management), based in the improvement of control plane (signaling). In conclusion, TE-DMM will conduct an efficient management of control plane.

## Evaluación de AzequiaMPI

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

Las implementaciones actuales de MPI 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) (sistema híbrido). En ese sentido, AzequiaMPI es la primera implementación completa del estándar MPI-1 basada en hilos.

## Objetivos

- Evaluar la implementación actual en cuanto a rendimiento, escalabilidad y soporte para aplicaciones científicas, mediante la comparación de los resultados con otras implementaciones bien conocidas como MPICH2, Intel MPI o HP-MPI.
- Mejorar su comportamiento en grandes supercomputadores de memoria compartida.

## 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 del estándar MPI.
- Se ha iniciado el estudio de disminución de consumo energético de las diferentes implementaciones del estándar MPI.
- Se ha compilado y ejecutado una implementación del estándar MPI-1.3 desarrollada en la Universidad de Extremadura denominada AzequiaMPI. Tiene dos modos de ejecución: bloqueante (AzequiaMPI-BLK) y no bloqueante (AzequiaMPI-LFQ).
- Se han ejecutado benchmarks 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.
- Se ha estudiado y desarrollado un modelo de estimación de coste de algoritmos paralelos, que se aplica a operaciones colectivas MPI.

## FI4VDI - Desarrollo de una Red de Infraestructuras Federadas para la Generación de Servicios de Virtualización de Puestos de Trabajo

**FCSCCL (Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León), COMPUTAEX, UDL (Universitat de Lleida), Université Montpellier 2, Inova-ria y Consorcio PCiITAL (Parc Científic i Tecnològic Agroalimentari de Lleida).**

FI4VDI propone una infraestructura basada en el paradigma del cloud computing privado mediante los modelos PaaS (Platform as a Service) y SaaS (Software as a Service), utilizando los recursos disponibles en diferentes centros de supercomputación, para asegurar a los usuarios la protección de datos y el cumplimiento de las normas, relativas a la seguridad de información y de los SLAs (Service Level Agreements) establecidos,

permitiendo una mejora de la competitividad y un ahorro de costes en los sectores destinatarios del mismo.

#### Objetivos

Transferir desde los Centros de I+D+i participantes en este proyecto la experiencia y conocimiento de las tecnologías Cloud y escritorios virtuales a los Clusters de empresas TIC, incluyendo un servicio diferenciador en sus portfolios de productos y contribuyendo asimismo al desarrollo de la economía y de la sociedad.

#### Metodología

La metodología ha consistido en desarrollar una Infraestructura Tecnológica basada en Cloud Computing transfronteriza, destinada a generar servicios empresariales altamente innovadores, para generar servicios de virtualización de puestos de trabajo TIC para usuarios de regiones periféricas a precios altamente competitivos.

#### Objetivos alcanzados

- Diseño, desarrollo y establecimiento de una red federada de recursos de cloud computing, procedentes de Centros de Supercomputación del consorcio.
- Virtualización de puestos de trabajo (previa selección de aplicaciones y entornos), entre los que se encuentra el destinado a que genetistas puedan obtener información de alto nivel, de forma semi-automática, a partir de secuencias de un estudio de resecuenciación, generadas por plataformas de ultra-secuenciación genética.
- Establecimiento de un entorno de trabajo para desplegar soluciones de cloud computing, a través de la federación, para que entidades puedan optimizar su trabajo.

#### Fuentes de financiación

- INTERREG IV B Sudoeste Europeo

### **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 aporta su experiencia y sus recursos tecnológicos y humanos a la Red Temática FIERRO.

### **Gestión de la movilidad en redes de transporte de paquetes para la mejora de la calidad de servicio en la convergencia entre las redes fijas y móviles**

#### **David Cortés Polo. Tesis Doctoral.**

La gestión de la movilidad y la Calidad de Servicio (QoS) son dos de los objetivos más importantes en el presente y futuro desarrollo de las redes inalámbricas. En los últimos años, el incremento de los sistemas interconectados a la red de datos, y la aparición de nuevos dispositivos, servicios y aplicaciones han modificado la simplicidad y transparencia con la que se ideó Internet de manera progresiva, así como la organización tradicional de las redes. Además, se están desarrollando nuevos servicios y aplicaciones que requieren de una red de gran capacidad, no sólo en el dominio inalámbrico, sino también en la red que interconecta a los dispositivos móviles con Internet. Es por esto que tanto la industria como la comunidad científica están trabajando en la búsqueda de la convergencia fija/móvil (FMC). La principal motivación de esta convergencia es la integración y creación de una infraestructura unificada de redes fijas y móviles. En esta infraestructura convergente, los usuarios podrán moverse entre las diferentes redes y acceder a los servicios de manera transparente.

Para conseguir esta convergencia, diversas funciones de red deben ser implementadas de manera uniforme, independientemente del tipo de acceso que se utilice (fijo o móvil). Esto implica diversos retos como: optimizar la gestión del tráfico, mejorar la organización de los dispositivos para mantener la dirección IP entre la red fija y la móvil, así como mantener la QoS en la comunicación.

Por lo tanto, la integración de redes heterogéneas para la convergencia de los dos paradigmas fijo y móvil, de manera transparente, se consigue a través del despliegue de arquitecturas basadas en IP. Gracias a este despliegue, y al desarrollo de protocolos de gestión de la movilidad basados en IP como Mobile IP (MIP) o Proxy Mobile IP (PMIP) se consigue que la integración sea más sencilla al estar ambas redes basadas en el mismo protocolo de red, aunque todavía existen ciertos retos que deben ser

acometidos como la QoS o la optimización de la gestión del tráfico para que se reduzca la pérdida de paquetes y la señalización debido a la integración.

Para hacer frente a estos retos se ha propuesto una nueva arquitectura que unifica ambas redes y gestiona la QoS en la red fija y móvil usando un protocolo de gestión de la movilidad basado en IP, que se integra con el protocolo de la red fija basado en MPLS-TP (Multi-Protocol Label Switching Transport Profile), usado en las redes de transporte de paquetes (PTN). La arquitectura propuesta es llamada Integrated Proxy Mobile MPLS-TP (IPM-TP) y está diseñada para proporcionar el mayor nivel de convergencia y gestionar la QoS de las comunicaciones, favoreciendo el despliegue de una red fija/móvil completamente integrada, aun cuando la movilidad del nodo móvil sea alta.

Además, se presenta un estudio de los avances recientes y trabajos relacionados en los protocolos de gestión de la movilidad, describiendo su interacción con la red de acceso, en el que se realiza un estudio cualitativo de los mismos.

Para evaluar la propuesta se han realizado análisis y simulaciones que miden el rendimiento de los protocolos en términos de costes de movilidad, latencia de handover y parámetros de QoS.

## Green code

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Green Computing (también conocido como Green IT o Tecnologías Verdes) es el término utilizado para referirse a un nuevo paradigma de trabajo que se centra en el ahorro energético en el ámbito del software y el hardware, lo que tiene especial interés para la sostenibilidad económica y ecológica de los centros de procesos de datos, en particular de cara a la computación de alto rendimiento.

En particular, este proyecto abrió una nueva línea de investigación en COMPUTAEX, que persigue el desarrollo de código fuente eficiente.

#### Objetivos

- Análisis del estado del arte desde el marco teórico existente.
- Estudio de los distintos métodos de optimización de código fuente de ámbito general, dentro del desarrollo de código para computadores de altas prestaciones.
- Presentación de resultados que pongan de manifiesto los beneficios que aporta la programación de código optimizado.

#### Objetivos alcanzados

- Se presentó un extenso recorrido sobre el estado del arte actual de la optimización de código fuente de ámbito general dentro del desarrollo del código para computadores de altas prestaciones.
- Los resultados obtenidos permitieron obtener distintas conclusiones sobre la influencia de parámetros como la velocidad de ejecución, la legibilidad del código o la eficiencia de su ejecución en cuanto a la eficiencia energética se refiere.

#### Financiación

Green Code forma parte de CENITAL, un proyecto de innovación e investigación desarrollado bajo el Programa Operativo FEDER Extremadura 2007-2013, dentro del Eje 1 "Desarrollo de la Economía del Conocimiento".

## Implementación del modelo cloud computing en un centro de supercomputación.

### Jaime Rivero Ramos. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC.

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 (Infraestructure 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.

### **INRETEL - Investigación para la obtención de una nueva metodología y un prototipo TIC para el tratamiento y procesamiento de reclamaciones de servicios de telecomunicaciones.**

**Trecone, Grupo Área de Derecho S.L.P., Solucionex Consultoría y Desarrollo S.L., CETA-Cie-mat, Feval, CénitS, y la Unión de Consumidores de Extremadura.**

El proyecto INRETEL, enmarcado en el Programa Coinvestiga, y destinado a financiar la realización de proyectos de I+D por agrupaciones de empresas, en las áreas estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i (2014-2017), surgió para investigar cómo se ejecutan los procesos de reclamación de servicios de telecomunicaciones actuales, y cuáles son los tipos de incidencias más comunes, a través del análisis masivo de usuarios de telecomunicaciones mediante técnicas de Big Data, con el fin de aportar nuevos métodos y procesos que faciliten la gestión de las reclamaciones a los consumidores.

INRETEL propuso el desarrollo de nuevos procesos para la detección, comprobación, validación y tratamiento de incidencias en los servicios de telecomunicaciones (fallos en servicio, errores en cobros, ofertas incompletas, mermas de calidad del servicio, etc.). Estos procesos permiten la gestión conjunta de reclamaciones de usuarios a través una solución de software, fomentando la reclamación masiva de usuarios. Con esta solución, se espera superar las limitaciones de los sistemas actuales, que desincentivan la reclamación de los usuarios al implicarlos en procesos técnico-legales complejos, suponiendo un exceso de esfuerzo y tiempo en la realización de esta tarea.

#### Objetivos

- Crear un prototipo TIC que permitiese a los usuarios detectar y generar reclamaciones para que otros usuarios puedan unirse “en un solo click”, haciéndose responsable del resto del

proceso de reclamación sin exigir más esfuerzo del usuario.

- Obtener una metodología que permitiese la integración de procesos de “concentración granular” de manera que se consolide en una misma reclamación, a múltiples usuarios par (iguales), con el objeto de fomentar que se produzca el “efecto manada” en las reclamaciones.
- Modelizar los tipos de incidencias y creación de protocolos que permitan generar “evidencias irrefutables” que puedan ser opuestas ante los operadores de telefonía para asegurar la procedencia de las reclamaciones.
- Integrar los algoritmos obtenidos del proceso de investigación en una solución de software prototipo, que consta de Apps, plataforma de gestión y plataforma de superadministrador, incluyendo los procesos completos e impulsándolos.
- Crear un repositorio de información con el que experimentar con usuarios que interactúen a partir del prototipo TIC con las incidencias seleccionadas, para la evaluación de los procesos.

#### Objetivos alcanzados

El resultado final de este proyecto permitió la puesta en funcionamiento de potentes procesos de inteligencia colectiva donde los individuos actúan de manera simbiótica para conseguir objetivos inalcanzables a nivel individual. Por su parte, COMPUTAEX participó en el desarrollo de un prototipo TIC que consta de una plataforma web de gestión de reclamaciones y de administración, así como de una aplicación móvil. Este prototipo permite a los usuarios detectar y generar reclamaciones para que otros usuarios puedan unirse en un click, generando así reclamaciones masivas. El propio sistema se hace responsable del resto del proceso de reclamación, modelando tipos de incidencias y creando protocolos que generen evidencias para asegurar la procedencia de las reclamaciones y la gestión de las mismas, para finalmente lograr un reembolso económico para los usuarios afectados, que podrán quedarse o bien donar a una ONG.

### **Medianell Virtual Press**

Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L. es una empresa de base tecnológica que tiene como objetivo comercializar 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.

## **Metodología y framework para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos HPC.**

**Javier Corral García. Diploma de Estudios Avanzados.**

Este proyecto 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. 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.

## **MITTIC - Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales**

Gobierno de Extremadura, ICMC (Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal), INTROMAC (Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción), CCMIJU (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón), FEVAL (Institución Ferial de Extremadura), COMPUTAEX, FUNDECYT-PC-TEX, CTAEX (Centro Tecnológico Agroalimentario Extremadura), Universidade de Évora, IPP (Instituto Politécnico de Portalegre), CEBAL (Centro de Biotecnología Agrícola e Agro-Alimentar do Alentejo), CEVALOR (Centro Tecnológico da Pedra Natural de Portugal), ADR-IPP y CATAA (Associação Centro de Apoio Tecnológico Agro-Alimentar de Castelo Branco).

El proyecto MITTIC, Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales, surge de la necesidad de generar crecimiento económico y empleo mediante el aumento de la competitividad en sectores tradicionales y estratégicos de la región Extremadura-Centro-Alentejo. El objetivo es proponer e implementar modelos y procesos innovadores de organización y producción, basados en la aplicación de Tecnologías de la Información y la Comunicación, para diferenciarse y mejorar su

competitividad para ampliar su mercado potencial y dinamizar la economía y el empleo en la región.

### **Objetivos**

Estimular el incremento de la competitividad de los sectores estratégicos y tradicionales, con miras al incremento de la creación de empleo, proponiendo nuevos modelos de organización de la actividad económica y desarrollo de la innovación y la I+D, apoyándose en la aplicación de las Tecnologías de la Información y Comunicación y en la transferencia de conocimiento.

### **Objetivos alcanzados**

- Se ha desarrollado una herramienta de gestión integral de la trazabilidad en las industrias corcheras y de la piedra natural, para asegurar la identificación del origen del producto y garantizar su procedencia.
- Se ha desarrollado una herramienta virtual para dar a conocer las dehesas y montados en la Euroregión Extremadura-Centro- Alentejo.

### **Fuentes de financiación**

FEDER/POCTEC. Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España – Portugal

## **NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología**

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

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 no solo un amplio abanico de nuevas aplicaciones (como la fabricación de nuevos detectores con capacidad de observar objetos con precisiones por debajo de la longitud de onda de la luz), sino la capacidad para realizar nuevas investigaciones en el marco de la naturaleza plasmónica del comportamiento electromagnético de los metales de las nanoantenas, para mejorar sus prestaciones.

### **Objetivos**

- Diseño de nanoantenas formadas por nanotubos de oro y optimizadas para mejorar sus prestaciones.
- Analizar los efectos de las imperfecciones en las

nanoantenas.

- Estudiar el comportamiento electromagnético de nanomateriales.

#### Metodología

Se han utilizado herramientas testeadas 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, lo que ha requerido la aplicación de formulaciones basadas en ecuación integral, puesto que facilitarían el análisis de los mismos con mayor precisión.

#### Publicaciones y congresos

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

### **Optimización de la red de acceso conmutada para provisión de QoS a dispositivos móviles mediante programación lineal**

**David Miguel Cortés Polo. Trabajo Final de Máster universitario en investigación.**

La gestión del movimiento y la calidad de servicio (QoS) son dos de los puntos claves en el desarrollo tanto presente como futuro de las redes

inalámbricas. Estas tareas no sólo involucran al dominio de la red inalámbrica sino que la red de acceso que interconecta los nodos móviles con Internet también tiene capacidad para mejorar las comunicaciones. Este campo de investigación es conocido como Convergencia Fija-Móvil (FMC). El objetivo de esta convergencia es la integración y la creación de una infraestructura unificada de las redes cableadas e inalámbricas. En esta infraestructura convergente, los usuarios pueden moverse y saltar de una red a otra sin interrupción. En este Trabajo Final de Máster, se ha presentado un estudio de los avances recientes y campos de investigación abiertos en los protocolos de movilidad en conjunción con redes de acceso basadas en MPLS (Multi-Protocol Label Switching), los cuales se plantean ser integrados en una única arquitectura como infraestructura convergente. También se describe una nueva aproximación para optimizar los recursos de la red de acceso. Este algoritmo de optimización permite organizar los nodos móviles que van a permanecer estáticos durante largos periodos de tiempo y planificar el resto de la red de acceso para atender las peticiones del resto de nodos móviles que se están moviendo. Para ello se han usado trazas de movimientos de usuarios reales analizando un periodo de diez horas.

### **Optimization of the diffused matrix format for heterogeneous parallel computing**

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

#### Objetivos

Optimizar 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.

#### Metodología

La estructura DMF se basa 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 han realizado algoritmos de procesamiento básicos de imágenes multispectrales sobre la nueva estructura, para que las unidades de procesamiento

más rápidas pueden hacerse cargo de las hojas con más mediciones, y las más lentas (aquellas 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 aislado 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.
- Inclusión de parte de los resultados de la investigación 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).

### **Pedigreeex: gestión automatizada de pedigrís humanos en consejo genético**

#### **Noelia Alonso Sánchez. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática.**

Tras identificar las necesidades de los propios genetistas de nuestra región se han analizado diferentes herramientas, ya desarrolladas, para trabajar con Pedigrís tanto de carácter privativo como libre (Cyrillic, Progeny Clinical, GRAMPS, Madeline 2.0 PDE, GenoPro, PED, PELICAN, etc.), y ninguna de ellas integra totalmente las necesidades de los especialistas. Para solventar esta carencia y mejorar la eficiencia en su trabajo diario de Consejo Genético, se ha desarrollado una herramienta de software libre y de escritorio, la

cual:

- Da soporte para la elaboración de los diagramas de Pedigrí de los pacientes, de manera sencilla, siendo lo más fiel posible a la notación estándar para su representación (PSWG, Pedigree Standardization Work Group) y permitiendo el estudio de varias patologías en un mismo diagrama.
- Permite su almacenamiento y gestión, dentro del marco legal de la Ley Orgánica 15/1999, de 13 de diciembre, de protección de datos de carácter personal (LOPD), debido a los datos clínicos que se van a tratar.
- Se ha estudiado la posibilidad de incluir algunos aspectos de análisis de Pedigrí, como el cálculo de probabilidades de que se desarrollen patologías.

### **Propuesta y análisis de viabilidad de un servicio asistencial para la disposición de ultrasecuenciación genética en un centro de supercomputación**

#### **Manuel Alfonso López Rourich. Trabajo Final de Máster en dirección TIC.**

La motivación para el desarrollo del trabajo vino dada principalmente por la capacidad de aportar valor (en forma de servicios) a ciertos sectores de la región de Extremadura, gracias al desarrollo de las tecnologías de secuenciación de siguiente generación (NGS), y con el apoyo de infraestructuras de supercomputación dadas por el supercomputador LUSITANIA. Gracias a ello, se consiguió la capacidad de poder llevar a cabo un flujo de trabajo general que permitiera la aportación de valor a los usuarios de los servicios propuestos, por el uso de los experimentos que un secuenciador de esas características puede realizar. También se realizó un análisis de viabilidad para comprobar la posibilidad de implantar los servicios propuestos para la región.

### **Propuesta y análisis de viabilidad de un sistema automatizado de diagnóstico e investigación aplicado a la tecnología de ultra-secuenciación genética en un centro de supercomputación.**

#### **Manuel Alfonso López Rourich. Máster universitario en investigación**

Dentro de toda la gama de experimentos de secuenciación genética que la tecnología actual permite llevar a cabo, el más utilizado por los genetistas es el de resecuenciación genética. Es en

sus dos últimas fases donde la bioinformática puede ser de gran ayuda, ya que se requiere la correcta orquestación de una serie de elementos software para la obtención de información genética de alto nivel, que sea útil para el diagnóstico e investigación de enfermedades cuyo origen es genético. Con el desarrollo de este trabajo se ha llevado a cabo un estudio de viabilidad, con el objetivo de saber:

- La tecnología necesaria para que un especialista que secuencie una muestra biológica logre obtener todos los datos requeridos para su investigación o diagnóstico.
- La organización y los requisitos necesarios.
- El coste derivado del proceso.

Desde el punto de vista del procesamiento de la información:

- Se han analizado aquellos tratamientos de secuencias genéticas que permitan un automatismo y una mejora de la eficacia en los análisis de estas, utilizando HPC (High Performance Computing).
- Se ha proporcionado a los especialistas el nivel de aplicabilidad requerido para su trabajo.
- Se ha tenido en cuenta el tratamiento personalizado que debe aplicarse a las secuencias genéticas en materia de seguridad de la información.

### Proyecto SEDE

La vigilancia estratégica en las empresas es una herramienta de gestión que proporciona, mediante el análisis temprano de la información, la capacidad de toma de 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 puso 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 fue desarrollada por la empresa SET Informática, Comunicación e Ingeniería ubicada en Extremadura e INFOCENTER.

Tras su puesta en marcha, permite dar respuesta a las necesidades de Vigilancia Estratégica de las

empresas, aportando un sistema que proporciona ventaja competitiva, calidad de la información y usabilidad.

### Proyecto SysGobEx

El SysGobEx, incluido como proyecto dentro del Plan de reordenación del Entorno tecnológico de la administración regional (Plan RETO), es un documento técnico que tenía como objetivos: conseguir una foto fija sobre el entorno tecnológico de la administración; trazar los objetivos de desarrollo futuro que permita ir tomando las decisiones más oportunas de adaptación y nuevas incorporaciones de soluciones tecnológicas para la Administración.

Aunque el documento aborda el estado actual y las perspectivas de futuro de la administración pública solamente, el Gobierno de Extremadura, en su apuesta por la transparencia y el fomento de la calidad empresarial, presentó el Plan estratégico a los empresarios y profesionales del sector para que tuvieran conocimiento de a dónde se dirige la política tecnológica de la Administración regional.

### Redes inalámbricas MIMO de última generación en zonas rurales

**Francisco Luna Valero. Departamento de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos de la Universidad de Extremadura.**

Los sistemas inalámbricos que plantean múltiples entradas y múltiples salidas de la señal (MIMO), se basan en convertir la propagación multicamino, inicialmente considerada un problema, en la solución a las limitadas capacidades de transmisión, al posibilitar el empleo de canales de transmisión en paralelo mediante el aumento del número de antenas de transmisión y/o recepción.

Objetivos

La meta principal de este proyecto consistía en extender Internet de alta velocidad a todas las zonas rurales de Extremadura. Para ello, se propuso un cambio de las comunicaciones inalámbricas rurales existentes hasta ahora mismo, pasando del modelo punto a punto a un modelo que implementase tecnología MIMO. El proyecto fue concebido para ejecutarlo de manera secuencial:

- El primer objetivo fue la caracterización de los canales de propagación MIMO para zonas rurales. En este objetivo se incluyó la caracterización de los nuevos canales para los

sistemas MIMO distribuidos (sistemas MIMO en los que las distintas partes del sistema están separadas entre sí). Conociendo las características del canal se podrán diseñar más eficientemente las antenas, tanto en la estación base como en el terminal móvil, al tiempo que se podrá abordar el diseño de sistemas radiantes que permitan salvar transición outdoor-indoor.

- Además, el Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de la Construcción (INTROMAC) integraría los sistemas radiantes en materiales de construcción. Estas mejoras en el diseño de los sistemas radiantes fueron el segundo objetivo del proyecto.
- Una vez realizado el cambio de modelo, el tercer objetivo consistió en que estas redes fueran muy eficientes energéticamente hablando.
- Por último, las futuras redes de comunicaciones deberán implementar MIMO con un número alto de antenas, lo que se ha denominado “MIMO Massive”. La caracterización del canal y el diseño de sistemas radiantes que tengan baja correlación entre elementos, y por tanto una alta capacidad, suponen un reto científico muy ambicioso, que constituyó el cuarto objetivo de este proyecto. Para poder realizar este reto fue necesaria una gran capacidad de cómputo, para lo cual se contó con el centro tecnológico CénitS.

#### **S4I - Software Sensor for Smart Infrastructures**

**Set Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., Grupo OHL: Obrascon Huarte Lain S.A., Auditoriza Diagnóstico de Sistemas S.L.P., Grupo Hypercomp (UEx) y CénitS.**

El proyecto S4I, enmarcado en el Programa Coinvestiga, destinado a financiar la realización de proyectos de I+D por agrupaciones de empresas en las áreas estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i (2014-2017), se situó en el contexto de la correcta gestión de las infraestructuras de construcción mediante la utilización de sistemas de monitorización y telemetría sofisticados, capaces de evaluar el estado de salud estructural de las infraestructuras de forma continuada durante toda su vida útil. Este proyecto propuso el desarrollo de un sistema basado en el concepto de Software Sensor, que analiza y optimiza las operaciones de construcción, gestión, explotación y mantenimiento, durante todo el ciclo de vida de una infraestructura, aportando información que permite desplegar diferentes estrategias, con el fin de alargar su vida útil y garantizar su seguridad durante el tiempo que ofrezca servicio.

#### **Objetivos**

- Realizar un estudio de mercado y proyección del escenario de aplicación. Este punto pretendía aclarar la permanencia de la necesidad detectada en el tiempo, de forma que se analizó no sólo la coherencia del mismo, sino la sincronización temporal aspecto que requiere el mercado a corto, medio y largo plazo, proveyendo al Consorcio información muy útil de cara a la previsión de las inversiones futuras a acometer.
- Realizar un estudio del estado del arte de la ingeniería civil aplicada a la auscultación mediante la recopilación de las variables ingenieriles monitorizadas y un recorrido por las diferentes tecnologías, secuenciándolas en función de su estado de maduración.
- Proponer una nueva metodología orientada a la gestión bajo un enfoque preventivo en lugar de correctivo a lo largo de todo el ciclo de vida de la infraestructura, que elimine la necesidad de ensayos destructivos.
- Desarrollar sistemas de auscultación robustos y tecnológicamente novedosos (Software Sensor) que permitan la monitorización inteligente de infraestructuras mediante la aplicación de tecnologías de redes neuronales, sensoriales y algoritmos de aprendizaje aplicados en la medida de variables de control.
- Adquirir capacidad de monitorización continua y concentración de datos que permitan el seguimiento de los Indicadores Estructurales Clave de las Infraestructuras a monitorizar.
- Adquirir capacidad de diagnóstico del estado de la Infraestructura a lo largo de todo su ciclo de vida mediante el análisis de los Indicadores Estructurales Clave, aumentando la precisión de la auscultación y optimizando la eficacia de las operaciones de explotación y mantenimiento y por ende en la mejora de la gestión.
- Adquirir capacidad de detección/predicción temprana de anomalías y/o daños estructurales que afecten al comportamiento especificado en el diseño de la Infraestructura o al nivel de exigencias del servicio.
- Seleccionar la estrategia más adecuada a desplegar en una estructura real atendiendo a criterios técnicos, económicos y de mercado.

#### **Objetivos alcanzados**

COMPUTAEX participó en el diseño y desarrollo del sistema que permite la monitorización inteligente de infraestructuras mediante la utilización de tecnologías tales como redes de sensores inalámbricos y redes neuronales artificiales. El objetivo fue el de detectar y predecir tempranamente anomalías o daños estructurales en infraestructuras y poder aplicarlo a estructuras reales.

## SIBE

---

### **CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).**

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.

### **Simulación de dispositivos ópticos integrados**

---

#### **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 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

Analizar y diseñar dispositivos y sistemas de comunicaciones ópticas ha requerido resolver ecuaciones diferenciales. Para dispositivos integrados se han usado métodos numéricos. 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.

### **Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio**

---

#### **Manuel Domínguez-Dorado. UEx.**

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 entre PCE (Path Computation Elements) adyacentes cuyo rendimiento se desea evaluar.

#### Objetivos

- Reducción del coste temporal y de recursos de memoria requeridos por OpenSimRIPCA.

#### Objetivos alcanzados

- Se ha utilizado OpenSimRIPCA 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 ha evaluado 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.

### **Sistema de vigilancia tecnológica para un centro de supercomputación.**

---

#### **Javier Lázaro Jareño. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC.**

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. En este trabajo fin de máster se presenta una pequeña introducción enfocada a comprender qué es un sistema de 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 de la Fundación COMPUTAEX para diseñar e implantar un sistema de vigilancia tecnológica que permita mejorar sus capacidades de innovación y competitividad. Este estudio finalizará 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 de CénitS.

## Smart Green Data Center

**Cobra Instalaciones y Servicios, S.A., ASEL-COM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS, CETIEX e INTROMAC.**

Hoy en día, los Datacenters o Centros de Proceso de Datos (CPD) se han convertido en elementos indispensables para el uso cotidiano de las nuevas tecnologías y los servicios que se despliegan sobre ellas. Sin embargo, también conllevan unos requerimientos muy altos en cuanto a costes de mantenimiento y consumo eléctrico.

Esto implica dos grandes problemas, por un lado, el coste económico para mantener la infraestructura y, por otro, la huella ecológica que se está dejando en el planeta debido a la contaminación que conlleva la generación de tal cantidad de energía. El proyecto Smart Green Data Center trataba de reducir la huella ecológica a través del desarrollo de un Datacenter experimental que permitiera la realización de pruebas pruebas y el desarrollo de tecnología tecnología que reduzca el consumo energético de estos grandes consumidores.

### Objetivos

El objetivo general del proyecto fue el de desarrollar, diseñar, fabricar, e implementar un novedoso demostrador de data center modular, monitorizable y móvil que permitiera testear y controlar todos los factores que influyen en su consumo energético para maximizar su eficiencia y minimizar los impactos que experimentan los edificios que albergan los CPD.

### Metodología

Mediante la realización de simulaciones energéticas informáticas se detectaron las mejores soluciones de diseño a adoptar en el demostrador y esto influyó en el diseño y construcción del mismo. Se implementaron herramientas de monitorización y

control de las variables mediante sensores que permiten actuar y medir en continuo sobre el sistema de refrigeración, sobre la envolvente del edificio que alberga el CPD, y sobre el procesamiento y computación de los datos, para alcanzar la eficiencia energética.

El demostrador del proyecto Smart Green Data Center es un prototipo de data center que permite experimentar con la distribución de todos los elementos del CPD para lograr la disposición más eficaz energéticamente. A partir de los estudios realizados del efecto que tienen diferentes condiciones climáticas sobre el demostrador, se pueden utilizar resultados para adaptar su diseño, su climatización y el procesamiento de los datos. Del mismo modo, se analiza el efecto que el CPD provoca en el edificio que lo alberga, para encontrar soluciones que minimicen los impactos que éste produce (ruido, vibraciones, radiaciones, calor, etc).

### Resultados

- Demostrador de Data Center (CPD) modular, monitorizable y móvil.
- Realización de pruebas de control de factores que influyen en el funcionamiento general de un CPD, así como en su consumo energético.
- Maximización de la eficiencia energética del demostrador, así como minimización de su impacto en materia de ruidos, vibraciones, radiaciones, etc.

## Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones

**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".

## Soporte en porting a usuarios del CIEMAT en la plataforma de LUSITANIA

**Antonio Muñoz Roldán perteneciente al Departamento de Informática del CIEMAT.**

## Objetivos

- Soporte, información, consultoría a usuarios del CIEMAT con el objetivo de portar sus códigos a la plataforma de LUSITANIA.
- Codificación de MCNPX en configuración paralela utilizando la librería de paso de mensajes MPI y el código EUTERPE.

## TaxonomTIC

---

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

El conjunto de empresas y profesionales que proveen las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) se posicionan como un sector importante en el presente y fundamental para el futuro. La correcta identificación de las empresas TIC en Extremadura y un estudio de la evolución e influencia económica del sector en la región, constituyen una herramienta valiosa para una adecuada toma de decisiones que potencie y fortalezca el futuro del mismo.

Merece la pena destacar que en el ámbito de la región extremeña el crecimiento y desarrollo de las TIC y de las infraestructuras sobre las que se sustentan ha fomentado un cambio social y económico muy profundo, que ha permitido a regiones como Extremadura minimizar los efectos de la brecha tecnológica.

## Objetivos

- Identificar qué son las TIC, los elementos que las componen, describirlos y clasificarlos, para estudiar su impacto en Extremadura y generar información para conocer qué profesionales, empresas u organismos están relacionados con este sector y cuáles se apoyan en dichas entidades para ofrecer servicios TIC.
- Establecer las bases para construir un sistema bajo el paradigma del open data que permita consultar la documentación generada durante el desarrollo del proyecto.

## Metodología

La metodología se ha sustentado sobre la base del entendimiento y definición del concepto TIC, para lo cual han sido de especial relevancia las opiniones de expertos en la materia, como la Universidad de Extremadura, el Colegio Profesional de Ingenieros en Informática de Extremadura y la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación.

Posteriormente, se han identificado las empresas que constituyen el sector TIC, filtrando, con ayuda de fuentes como el INE, BORME, SABI y CAVATRANS y los códigos CNAE-2009, un total de 1000 empresas candidatas, de las que se obtendrían un total de 558 empresas del sector TIC en la región (448 sociedades mercantiles, siendo autónomos las restantes).

La nueva clasificación de actividades TIC realizada a partir de las empresas obtenidas ha permitido estudiar, analizar y comparar la evolución de diversos sectores en los últimos años, desde el punto de vista económico y de la constitución y disolución de sociedades.

## Objetivos alcanzados

- Se han aportado datos que confirman el crecimiento del sector TIC en la región y su importante influencia económica.
- Desde el año 1999 se ha quintuplicado el número de empresas TIC en la región y, a pesar del reducido número de empresas que lo constituyen comparado con otros sectores, aporta en torno al 2% al PIB regional.
- El sector es muy atractivo para los futuros profesionales, suponiendo un incremento de la oferta de estudios TIC, tanto universitarios como de formación profesional.
- La evolución del sector TIC en la región es similar a la nacional, caracterizada por un crecimiento constante, aunque la influencia económica es más importante a nivel nacional donde el sector aporta aproximadamente un 4% al PIB.
- Se han detectado las necesidades del sistema de consulta que se desarrollará bajo la filosofía del open data.

## TaxonomTIC-2

---

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Como parte del proyecto CENITAL-2 se ha continuado con el subproyecto TaxonomTIC (cuyo objetivo fue la identificación de las TIC, los elementos que las componen, describirlos y clasificarlos, para estudiar su impacto en Extremadura y servir de fuente de información para conocer a los profesionales, empresas y organismos vinculados al sector), el cual está enmarcado específicamente en el área de excelencia TIC de la Estrategia RIS3 y cuyo objetivo principal era extender los trabajos realizados en el proyecto durante el año 2013.

## Objetivos

- Actualización de la información recopilada en el proyecto TaxonomTIC, el cual requiere un seguimiento de la evolución del sector, para detectar desviaciones en la misma que permita apoyar la toma de decisiones futuras.
- Aumento del conocimiento sobre el sector y en particular sobre la realidad del Sector TIC extremeño, con el apoyo de un seguimiento del mismo a escala nacional y europea.
- Desarrollo e implementación de una plataforma Open Data de empresas de servicios TIC.

## Metodología

La primera fase del proyecto consistió en la actualización de los datos recopilados el año anterior, usando los datos del proyecto en el año 2013 y el INE, así como clasificando las empresas y actividades usando la clasificación desarrollada por el equipo de CénitS en 2013.

Posteriormente, se actualizó la información sobre la formación TIC en Extremadura, a partir de los datos suministrados por organismos como el Observatorio de Indicadores de la UEx.

Gracias a los datos extraídos, así como los obtenidos del INE y EUROSTAT sobre las TIC en España y Europa, se pudo realizar una comparativa del sector en ambos ámbitos geográficos.

El último paso del proyecto, y quizás el más importante, fue el desarrollo de una plataforma de datos abiertos basada en Drupal que permite a los usuarios de la misma consultar y extraer todos los datos recogidos a lo largo de los años 2013 y 2014 en el proyecto.

### Objetivos alcanzados

- Disposición de información veraz y actualizada del sector TIC en Extremadura.
- Análisis del sector TIC en España y Europa y comparativa con el sector en Extremadura.
- Visión de los directivos del sector en la región.
- Piloto de la plataforma web en Drupal, homónima al proyecto, que permite acceder a la información recopilada por el equipo CénitS a lo largo de los años 2013 y 2014.

## TaxonomTIC 2015

### Equipo de CénitS - COMPUTAEX

El trabajo realizado durante 2015 supuso la consolidación del proyecto TaxonomTIC, extendiendo el análisis realizado en la región y el

estudio del Sector TIC nacional y europeo y profundizando en las TIC desde un punto de vista diferente, el punto de vista del usuario.

## Objetivos

- Actualización de la información recopilada durante los dos últimos años del sector regional, nacional y europeo, partiendo para ello de la base establecida en los dos años anteriores.
- Estudio sobre el uso de las TIC. Realización de un estudio de la evolución del uso de las TIC en Extremadura en los últimos años que permita entender el desarrollo del sector en la región.
- Mantenimiento y actualización de la plataforma web que ha implementado CénitS para dar acceso a información relativa a empresas del Sector TIC extremeño y que permite conocer los servicios que dichas empresas ofrecen a la sociedad. Esta plataforma puede ser de gran utilidad para las empresas del sector y para los potenciales demandantes de sus servicios.
- Documentación y divulgación. Elaboración de informes y obtención de conclusiones de la taxonomía del Sector TIC y su proyección para el futuro. Participación en eventos organizados por el propio sector para actuar como dinamizadores del mismo.

## Metodología

La primera fase del proyecto consistió en la actualización de los datos recopilados en los años anteriores. Para ello, se extrajeron las estadísticas económicas y de sociedades del sector en Extremadura. Para una adecuada identificación de las empresas del sector, se utilizó la clasificación de actividades desarrollada por el equipo CénitS en 2013.

El siguiente paso consistió en realizar una comparativa económica del sector TIC con otros sectores más tradicionales de la región pudiendo, de este modo, establecer una referencia clara del estado real del sector en Extremadura.

Posteriormente, se actualizó la información disponible respecto a la formación TIC en Extremadura a partir de los datos suministrados por el Observatorio de Indicadores de la UEx. El siguiente paso del proyecto consistió en analizar exhaustivamente un gran número de estadísticas extraídas del INE y del EUROSTAT referentes al sector TIC en España y Europa, respectivamente. Esto, unido a la información extraída y analizada del sector en Extremadura, ha permitido la realización de una comparativa del sector TIC en cada uno de los ámbitos.

Con la finalidad de entender la importancia y penetración de las TIC en la sociedad extremeña se elaboró un estudio del equipamiento TIC en los hogares extremeños y el uso que se hace del mismo.

Además, como parte del proyecto se continuó con la mejora, desarrollo y actualización de la plataforma

#### Resultados

- Disposición veraz y actualizada del sector TIC en Extremadura y comparativa con sectores más tradicionales de la región.

- Análisis del sector TIC España y Europa y comparativa con el sector en Extremadura.
- Estudio y análisis del equipamiento TIC y su uso en Extremadura.
- Actualización y mantenimiento de la plataforma web que permite acceder a la información recopilada por el equipo CénitS en los últimos 3 años.

Centro Extremeño  
de iNvestigación,  
Innovación Tecnológica  
y Supercomputación

📍 Carretera N-521, km 41,8  
10.071 - Cáceres

☎ +34 927 049 070

🌐 [www.cenits.es](http://www.cenits.es)



JUNTA DE EXTREMADURA



Unión Europea

Fondo Europeo  
de Desarrollo Regional

"Una manera de hacer Europa"