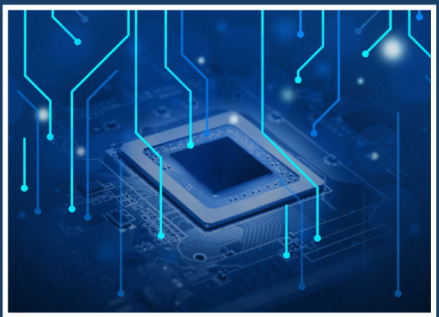
COMPUTAEX



memoria anual 2018

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

JUNTA DE EXTREMADURA

COMPUTAEX

MEMORIA
2018

CÉNITS

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

JUNTA DE EXTREMADURA

© Fundación COMPUTAEX

Edición: Fundación COMPUTAEX
Diseño: Fundación COMPUTAEX
Autores: Juan Francisco Bermejo Martín , Jesús Calle Cancho, Javier Corral García, David Cortés Polo, José Luis González Sánchez, Luis Ignacio Jiménez Gil, Felipe Lemus Prieto, María Jesús Martínez Polo y Blanca Pérez Mariño.

Impreso en España
Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-09-12810-5
Depósito Legal: BA-414-19

Reconocimiento – NoComercial – SinObraDerivada (by-nc-nd)
No se permite un uso comercial de la obra original ni la generación de obras derivadas.

CONTENIDO

2018. *"Si quieres ir rápido ve solo. Si quieres llegar lejos, ve acompañado"*..... 6

1. Fundación COMPUTAEX..... 8

Objeto y fines..... 8
Patronato..... 9
Equipo CénitS 2018..... 9
RES (Red Española de Supercomputación) 12
Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)..... 13
Organizaciones colaboradoras..... 14
Agradecimientos..... 15

2. Proyectos de investigación e innovación tecnológica de CénitS..... 17

HeritaGen..... 18
CultivData..... 20
Predictibilidad de enfermedades oncológicas mediante ultrasecuenciación..... 22
Identificación de patrones de comportamiento en aerogeneradores..... 24
PIT: Programa de Innovación y Talento..... 26
Optimización de algoritmos y aplicaciones paralelas..... 28
Red de excelencia RES..... 29
RUMIMETA..... 30
SCINAP..... 30
Red-Integra..... 31
SCioT..... 31
TaxonomTIC 2018..... 32

3. Proyectos de investigación soportados 35

Ciencias de la Tierra 36
Ciencias de la Vida 38
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones..... 43

4. Resultados de investigación 45

Publicaciones en revistas 46
Publicaciones en congresos 51
Trabajos Finales de Grado 52

5. Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión 57

Convenios de colaboración 58
Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC 60
Derecho tecnológico e Informática forense 60
Semana de la administración abierta 61
Jornada de presentación del proyecto HeritaGen 61
Noche Europea de los Investigadores 62
Semana de la Ciencia 62
Jornadas de puertas abiertas 63
Becas de formación 64
Portal web 66
Redes sociales 68
Difusión y divulgación 68
CénitS-COMPUTAEX en los medios 69
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos 70

6. Recursos tecnológicos 73

CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA II 74
Consumo de recursos 77
Usuarios 79
Software 80

7. Proyectos concluidos 83

2018

"Si quieres ir rápido, ve solo. Si quieres llegar lejos, ve acompañado"
(Proverbio africano)

La Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS han percibido este ejercicio el apoyo nacional y regional que han supuesto la consecución de dos importantes aspiraciones. En primer lugar, el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación (dependiente del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades) aprobó el nuevo Mapa de Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares (ICTS) de España, reconociendo al Supercomputador LUSITANIA como miembro de una de las 29 ICTS españolas, y convirtiéndose CénitS, de este modo, en una de las dos ICTS de Extremadura. En segundo lugar, se confirmó la resolución definitiva del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de la convocatoria de concesión de ayudas para la adquisición de equipamiento científico-técnico del subprograma estatal de Infraestructuras de equipamiento científico técnico para el proyecto CénitS-CPD: Consolidación de Infraestructuras de Supercomputación para el Progreso de la Investigación Científico-Técnica, financiado con 1 millón de euros y con el apoyo de cofinanciación desde la Secretaría General de Ciencia Tecnología e Innovación de la Junta de Extremadura para la creación de CénitS-CPD en el Edificio de la Bioincubadora de Cáceres. Podremos de este modo disponer de un centro de proceso de datos (CPD) con el que proveer de recursos y servicios con alta disponibilidad, fiabilidad, criticidad y con la calidad de servicio que merecen nuestros usuarios, ya sean regionales, nacionales o internacionales.

Si 2017 fue el año de la consolidación de los equipos de cómputo, 2018 ha sido el del apoyo a la trayectoria de CénitS por parte de los gobiernos nacional y regional. También la fructificación de la colaboración con otros centros de supercomputación nacionales, con centros tecnológicos extremeños y con empresas, organismos e investigadores multidisciplinares. La infraestructura con que contamos en el CPD de CénitS nos ha permitido soportar proyectos con necesidades de memoria distribuida y memoria centralizada; ofrecer servicios virtualizados y de cloud; y ejecutar proyectos big data, HPC, de secuenciación genética, de modelización climática o de eficiencia energética, entre otros.

La infraestructura de computación de CénitS ha aportado este año 3.048.781 horas de CPU (frente a las 937.816 horas de 2017). Los 14 trabajos de cómputo masivo ejecutados han usado 4.415 TB (1.759 TB en 2017) de memoria principal y consumido 8,8 TB de memoria secundaria para almacenar los resultados obtenidos por los proyectos. Además, se han resuelto un total de 99 consultas de asesoramiento técnico que han propuesto 32 usuarios en los proyectos de investigación, desarrollo e innovación. Se ha dispuesto de 66 máquinas virtuales y 4 unidades aceleradoras de cómputo específicamente adaptadas a los requisitos de proyectos concretos. Se han resuelto también 16 incidencias hardware.

CénitS ha continuado con su Observatorio del sector TIC a través del proyecto TaxonomTIC que sigue constatando la carencia de profesionales, debida al escaso número de egresados TIC de nuestra Universidad que ha sido en 2018 prácticamente el mismo que en el año 1995, todo ello con lo que ha evolucionado nuestra sociedad tecnológica. Contrasta esto con la elevada demanda de profesionales del sector TIC y de nuevos perfiles que escasean en todos los países desarrollados del mundo. Aunque el número de empresas TIC crece en Extremadura mucho más que el de cualquier otro sector, los datos de TaxonomTIC demuestran que es necesario actuar antes de que sea demasiado tarde. Convencidos de la importancia de la necesidad de formación especializada hemos continuado con el patrocinio de dos becas de estudiantes de Ingenierías Informáticas en la Escuela Politécnica de Cáceres y el Centro Universitario de Mérida que imparten esos grados universitarios. Además, hemos acogido a cuatro estudiantes que han realizado en CénitS sus prácticas de empresa. Se han codirigido cuatro Trabajos Final de Grado y se ha continuado codirigiendo cuatro tesis doctorales.

La Fundación ha recibido este ejercicio transferencias de los presupuestos regionales por importe de 505.000 € y ha captado, de forma individual y conjuntamente con otros socios, un total de 1.277.442 € en convocatorias competitivas plurianuales. Por la prestación de servicios y recursos ha obtenido 70.602 € y las Cuentas Anuales de 2018 reflejan, a pesar de la morosidad de varios contratos con empresas, un resultado positivo de 37.296 €.

En 2018 constituimos el grupo de investigación CénitS, que forma parte del catálogo de grupos de investigación de la Junta de Extremadura, con su actividad centrada en seis líneas de investigación muy prometedoras que han permitido este año continuar con 10 proyectos de investigación; y participar en 21 convocatorias competitivas de las cuales se confirmaron 9 proyectos (2 nacionales y 7 regionales). Los miembros del grupo han impartido 13 ponencias invitadas; presentado 2 ponencias en congresos y realizado varias publicaciones de impacto. El equipo humano de la Fundación es, sin duda, su principal motor que demuestra cada día su profesionalidad y compromiso donde la colaboración multidisciplinar constata la importancia de caminar juntos ingenieros en informática, ingenieros en telecomunicación, biólogos, físicos, veterinarios, abogados y economistas.

Con el paso del tiempo la Fundación se consolida como organismo que colabora y apoya la celebración de actividades científicas o de divulgación en Extremadura, dando respuesta a otro de los encargos que tiene. Por ello, este ejercicio la Fundación ha patrocinado siete eventos (jornadas, congresos, retos y concursos) que han ayudado a emprender y divulgar actividades de ámbito regional, nacional e internacional.

Queremos dejar constancia del gran apoyo recibido del Presidente de la Fundación y Consejero de Economía e Infraestructuras, D. José Luis Navarro Ribera, que durante tres años estuvo siempre atento a las necesidades de la Fundación y que en 2018 emprendió un nuevo reto cediendo el testigo a nuestra actual Presidenta y Consejera de Economía e Infraestructuras, Dña. Olga García García, a quien agradecemos su compromiso y colaboración con la Fundación.

La innovación no se apoya únicamente en el conocimiento científico ni necesita imprescindiblemente de cambios tecnológicos, pero, sin lugar a dudas, la ciencia, la investigación y la tecnología, unidas a la educación y al carácter emprendedor e innovador de los ciudadanos, son las herramientas más potentes para enfrentarse a los retos sociales y lograr con éxito el liderazgo y la mejor transición económica. En esencia, así es como entendemos la labor que ha de desempeñar CénitS como infraestructura científica y técnica que pone sus herramientas y recursos a disposición de la sociedad para que ésta pueda llegar más lejos, más rápido y en buena compañía.

José Luis González Sánchez
D. G. Fundación 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 socieconómico 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

PATRONATO

DÑA. OLGA GARCÍA GARCÍA
Presidenta de la Fundación COMPUTAEX
Ilma. Sra. Consejera de Economía e Infraestructuras

D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ
Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX
Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación

DÑA. ANA VEGA FERNÁNDEZ
Ilma. Sra. Directora General de Empresa y Competitividad
Patrona de la Fundación COMPUTAEX

D. ANTONIO RUÍZ ROMERO
Ilmo. Sr. Secretario General de Economía y Comercio
Patrón de la Fundación COMPUTAEX

D. JOSÉ LUIS ANDRADE PIÑANA
Ilmo. Sr. Director General de Infraestructuras
Patrón de la Fundación COMPUTAEX

DÑA. CARMEN GONZÁLEZ RAMOS
Ilma. Sra. Directora General de CICYTEX
Patrona de la Fundación COMPUTAEX

DÑA. INÉS MARÍA DEL PUERTO GARCÍA
Profesora Titular de la Universidad de Extremadura
Patrona de la Fundación COMPUTAEX

D. JOSÉ MANUEL PÉREZ MORALES
Director del Departamento de Tecnología del CIEMAT
Patrón de la Fundación COMPUTAEX

D. MANUEL ADOLFO GONZÁLEZ LENA
Vicerrector de Investigación, Transferencia e Innovación de la UEx
Patrón de la Fundación COMPUTAEX

D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ
Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX
Secretario del Patronato

DIRECCIÓN GENERAL

D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ
Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX
Secretario del Patronato

COMISIÓN PERMANENTE

D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ
Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX
Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación

DÑA. ANA VEGA FERNÁNDEZ
Ilma. Sra. Directora General de Empresa y Competitividad
Patrona de la Fundación COMPUTAEX

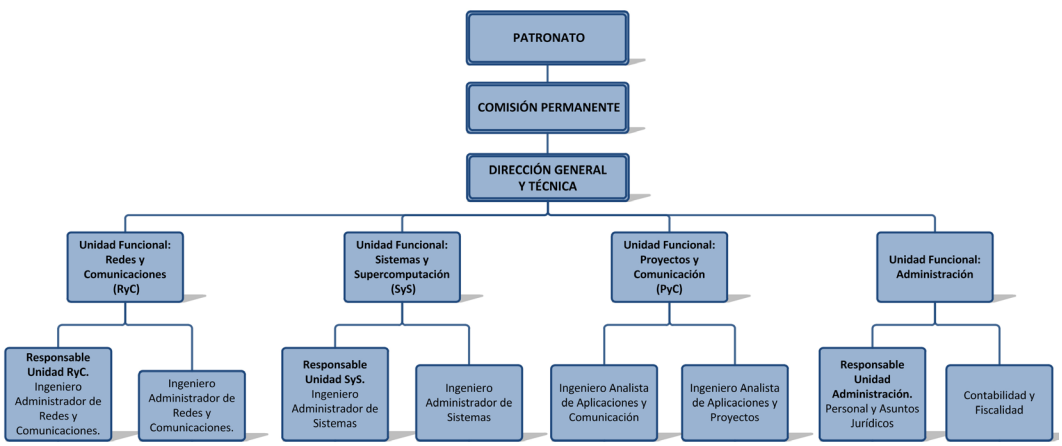
DÑA. CARMEN GONZÁLEZ RAMOS
Ilma. Sra. Directora General de CICYTEX
Patrona de la Fundación COMPUTAEX

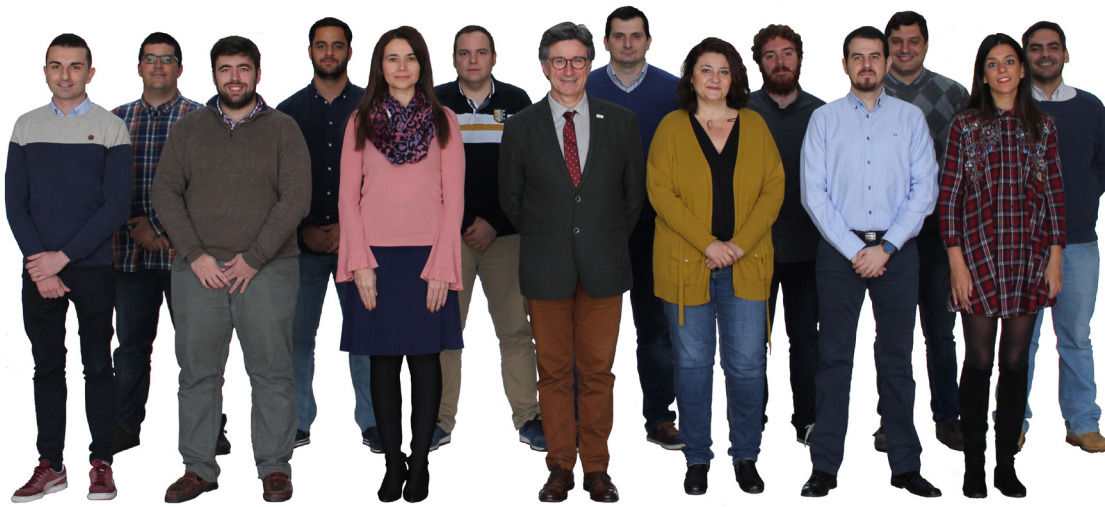
D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ
Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX
Secretario del Patronato

CONSEJO ASESOR

EQUIPO CénitS 2018

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

María Jesús Martínez
Responsable de personal y asuntos jurídicos

María Antonia Viniegra
Responsable de personal y asuntos jurídicos

Jesús Calle
Responsable de la Unidad Funcional de sistemas y supercomputación

David Cortés
Responsable de la Unidad Funcional de redes y comunicaciones

Javier Corral
Analista de aplicaciones y comunicación

Luis Ignacio Jiménez
Administrador de sistemas y supercomputación

Felipe Lemus
Administrador de redes y comunicaciones

Juan Francisco Bermejo
Analista de aplicaciones y proyectos

Blanca Pérez
Técnico contable y fiscal

Manuel Alfonso López
Analista de aplicaciones
y proyectos

Rubén Borrasca
Técnico de apoyo a la I+D+i

Ana María Núñez
Técnico de apoyo a la I+D+i

Bernabé Diéguez
Técnico de apoyo a la I+D+i

Alberto Salas
Técnico de apoyo a la I+D+i

José Javier Rico
Becario de investigación

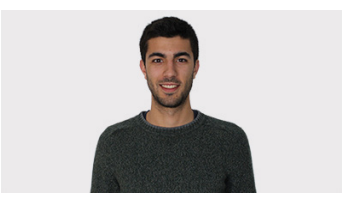
Sofía Gallardo
Alumna en formación del
Programa de Innovación y Talento
de la Junta de Extremadura

Teresa Ballinote
Alumna en formación del
Programa de Innovación y Talento
de la Junta de Extremadura

José Manuel Mendoza
Alumno en formación del
Programa de Innovación y Talento
de la Junta de Extremadura

Alba Díaz
Estudiante en prácticas del
Grado en Biotecnología de
la Universidad de Extremadura

Daniel González
Estudiante en prácticas del
Grado en Ingeniería Telemática de
la Universidad de Extremadura



Manuel José Casillas
Estudiante en prácticas del
Grado en Ingeniería Informática en
Ing. de Computadores de la UEx

Sergio Pérez
Estudiante en prácticas del
Grado en Ingeniería Informática en
Ing. del Software de la UEx

Adolfo Morán
Estudiante en prácticas del CFGS de
Admón. de Sistemas Informáticos
en Red del IES Augustóbriga

RES (RED ESPAÑOLA DE SUPERCOMPUTACIÓN)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS) distribuida por toda la geografía española, consistente en la interconexión de 12 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica.

La RES gestiona estos recursos con el fin 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.

El tiempo de cómputo en las máquinas de la RES es concedido a través de convocatorias competitivas. Las propuestas recibidas son evaluadas cada cuatro meses por el Comité de Acceso, que es asesorado por un Panel de Expertos formado por reconocidos investigadores.

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.

RED ESPAÑOLA DE SUPERCOMPUTACIÓN

Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)

Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares

El Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación aprobó el 6 de noviembre de 2018 el nuevo Mapa de Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares de España, reconociendo al Supercomputador LUSITANIA como nuevo nodo.

Aunque el Supercomputador extremeño ya era de facto una ICTS desde que en 2015 pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES), el mapa no había sido actualizado desde 2014, dada la complejidad que supone el proceso de evaluación para formar parte del mismo, en el que se tienen en cuenta exigentes criterios de calidad científica, tecnológica y de innovación. Cabe destacar asimismo que el nuevo Mapa está integrado por 29 ICTS que aglutinan un total de 62 instalaciones distribuidas por todo el territorio nacional.

Las ICTS son infraestructuras que prestan servicios para desarrollar investigación de vanguardia y de máxima calidad, así como para la transmisión, intercambio y preservación del conocimiento, la transferencia de tecnología y el fomento de la innovación.

Su objetivo es la puesta a disposición de la comunidad científica, tecnológica e industrial nacional e internacional de infraestructuras científico-técnicas de vanguardia, indispensables para el desarrollo de una investigación científica y tecnológica competitiva y de calidad. Se entiende por tales aquéllas que son únicas o excepcionales en su género, con un coste de inversión y/o mantenimiento y operación muy elevado y cuya importancia y carácter estratégico justifica su disponibilidad para todo el colectivo de I+D+i.

Se trata, por tanto, de un importante reconocimiento para Extremadura que, de este modo, cuenta con dos centros extremeños en el mapa de ICTS, colaborando y promoviendo la competitividad científica y tecnológica de las infraestructuras españolas en el escenario internacional.

CénitS se alinea así con la Hoja de Ruta de Infraestructuras Europeas de Investigación (ESFRI, European Strategy Forum on Research Infrastructures) y con otros planes estratégicos internacionales de ámbito específico, entre los que destacan las agendas de las Plataformas Tecnológicas Europeas, las Iniciativas Tecnológicas Conjuntas (JTI; Joint Technology Initiatives), e Iniciativas Programáticas Conjuntas (JPI, Joint Programming Initiatives), entre otros.

Este hecho refleja además el compromiso con la I+D+i que la Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS mantienen desde su creación en el año 2009, promoviendo 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, habiendo dado ya respuesta a más de 130 proyectos de investigación y recibiendo varios reconocimientos regionales, nacionales e internacionales.

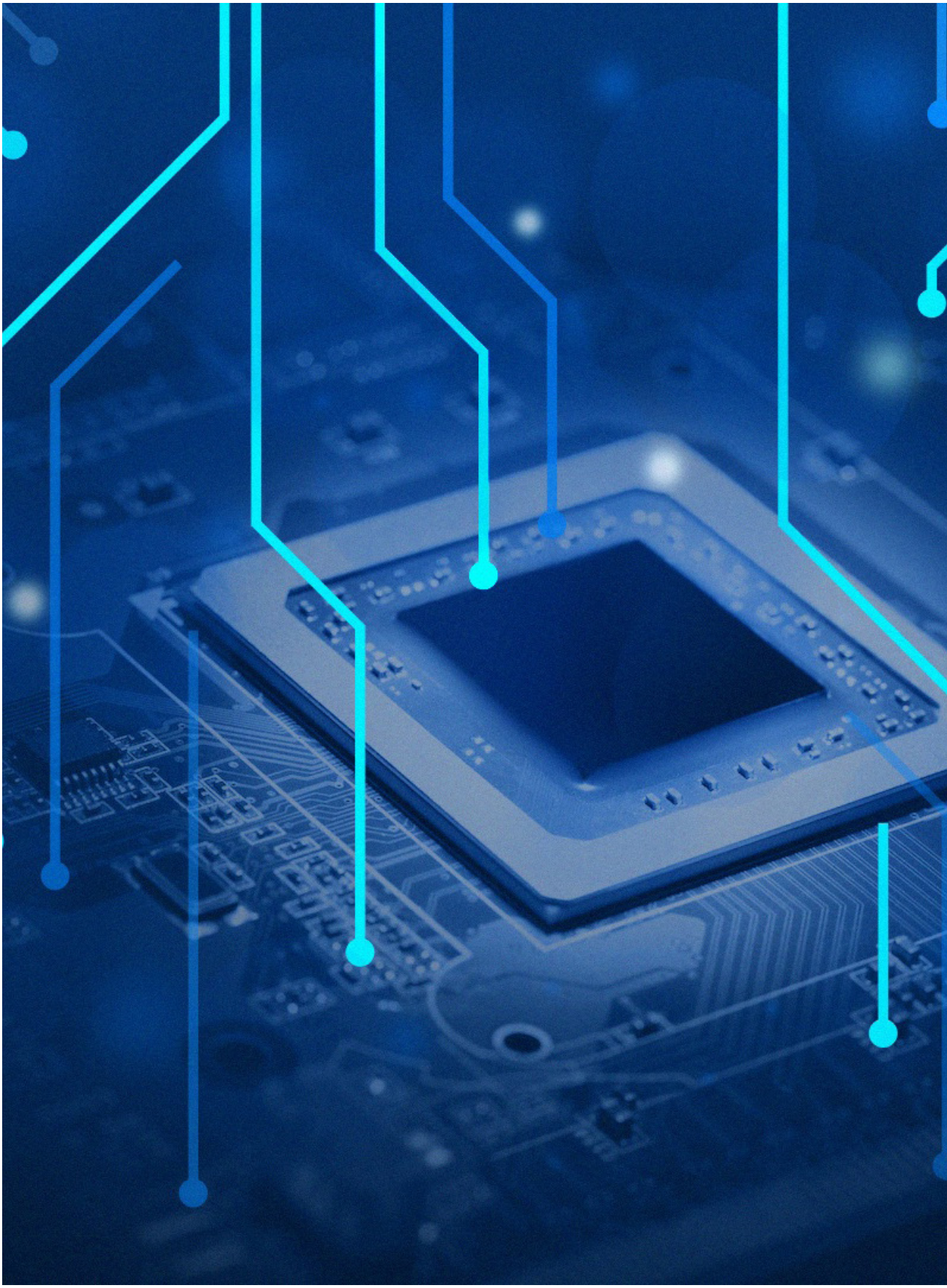
ORGANIZACIONES COLABORADORAS

AGRADECIMIENTOS

2018 ha sido un año muy intenso para el personal de CénitS que se ha volcado con toda su energía y esfuerzo para sacar adelante un ejercicio de consolidación tecnológica, procurando afectar lo mínimo indispensable a nuestros usuarios.

Los logros y satisfacciones que recoge esta memoria de actividades no hubieran sido posibles sin el trabajo en equipo de nuestro personal con el de otras organizaciones entre las que destacan:

- Los Patronos de la Fundación que colaboran en la toma de decisiones.
- El Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesus Usón con el que compartimos la sede social.
- Los propios usuarios de CénitS para los cuales buscamos la máxima calidad de servicio.
- Los técnicos de GPEx que nos asisten en la gestión diaria.
- El personal de la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación y de la Consejería de Economía e Infraestructuras que colabora en tareas administrativas.
- Los técnicos del Protectorado de Fundaciones de Extremadura.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones regionales y nacionales que han colaborado en proyectos comunes.
- Los investigadores, tecnólogos, empresas, socios, medios de comunicación y todos aquellos con los que hemos tenido la oportunidad de cooperar.



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN TECNOLÓGICA DE CénitS

Durante 2018, el equipo de CénitS ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, aportando soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.

Destacan *CultivData*, centrado en la aplicación de las TIC al sector agropecuario, y *HeritaGen*, que persigue la unificación del patrimonio genealógico y genético extremeño.

Especialmente destacable es también el trabajo desarrollado en un proyecto sobre el comportamiento de aerogeneradores en parques eólicos mediante técnicas basadas en Big Data; y otro centrado en el análisis de datos genéticos, ambientales y de comportamiento para la predictibilidad de enfermedades oncológicas mediante ultrasecuenciación genética, aplicando en este caso paradigmas HPC, Cloud Computing, Big Data y Open Data.

HeritaGen: Ultrasecuenciación y supercomputación para la unificación del patrimonio genealógico y genético extremeño. Aplicación al estudio de enfermedades hereditarias

Se estima que las enfermedades monogénicas tienen una prevalencia aproximada del 1% de la población. Detectar las variantes genéticas que originan estas, mediantes técnicas de secuenciación masiva (Next Generation Sequencing), será de vital importancia para el desarrollo de terapias enmarcadas en el concepto de Medicina de Precisión.

La información sobre las variantes con una patogenicidad desconocida y de significado incierto (VUS, Variant of Uncertain Significance) son imprescindibles para el diagnóstico de estas enfermedades, pero en la mayoría de los casos dicha información se encuentra dispersa. Una de estas fuentes de información es la genealógica, que resulta de gran utilidad en consultas de consejo genético, para el estudio de la incidencia de enfermedades hereditarias en el seno de una familia.

Entidades participantes

Fundación COMPUTAEX-CénitS, 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).

Objetivos

El objetivo del proyecto es estudiar los beneficios de la unificación de fuentes de información heterogéneas en el estudio de enfermedades hereditarias (patrimonio genealógico e información genética), lo que servirá para reducir la ratio de variantes de significado incierto detectadas en estudios de secuenciación masiva. Para ello, basándonos en los resultados de un cribado previo, se llevará a cabo la secuenciación del genoma de una muestra significativa de población, y posteriormente, se unificará con su información genealógica, obtenida mediante distintas procedencias y registros (iglesias, registro civil, etc).

Metodología

Para gestionar y analizar la información obtenida de la secuenciación genética (NGS), se plantea el uso de recursos de supercomputación en combinación con técnicas de big data. Así, mediante técnicas de HPC (High Performance Computing), se procesarán los datos y secuencias genéticas en el menor tiempo posible, garantizando a su vez el almacenamiento, la seguridad y la alta disponibilidad de la información con la que se trabaja.

Por otra parte, se tendrá en cuenta el uso de formatos estandarizados de información, así como aspectos éticos derivados de la realización de tratamientos relacionados con la salud. La información de alto nivel generada seguirá la filosofía Open Data, cumpliendo siempre con la legislación vigente en materia de seguridad y protección de la información. Asimismo, los datos se pondrán a disposición de los usuarios a través de servicios desplegados mediante el paradigma del cloud computing.

El proyecto HeritaGen sigue dos líneas de investigación paralelas. Por un lado, se trata de unificar datos genealógicos de una población relevante para el proyecto, con el fin de estudiar la relación de parentesco entre sus habitantes. Para ello, se recopilan datos de los residentes en la zona elegida. Estos datos se obtienen de diferentes fuentes y con formatos desiguales, por lo que es necesario el uso de la supercomputación para poder representar posteriormente todos estos datos de una manera organizada y estructurada.

Para la segunda línea de investigación se procederá a la obtención de los datos genéticos de muestras que resulten significativas. Se realizarán análisis para un cribado previo de las muestras de los participantes y se seleccionarán las muestras relevantes para el estudio, procediendo a su secuenciación genética. Se relacionarán estos datos obtenidos con los genealógicos obtenidos en la anterior línea de investigación.

Objetivos alcanzados

Una vez decidida la población sobre las que se va a desarrollar el estudio (Valle del Jerte) y tras varias reuniones, en base a la experiencia y el conocimiento de expertos del Hospital San Pedro de Alcántara y de FundeSalud, se ha optado por realizar el estudio sobre la componente hereditaria que afecta a las Inmunodeficiencias Primarias, concretamente, las relacionadas con alteraciones en el Sistema del Complemento y las de déficit de Inmunoglobulinas (G, A y M). Para ello, se está realizando un cribado mediante la determinación de C3 y C4 y la cuantificación de inmunoglobulinas, mediante nefelometría.

Se ha presentado el proyecto en varias ocasiones y se ha puesto en marcha el funcionamiento de recogidas de muestras de los participantes. También se ha realizado el cribado de todas las muestras recopiladas hasta el momento.

Así mismo, se ha creado una base de datos con información clínica y personal de los participantes y una aplicación web para facilitar la consulta de los datos anteriores.

Está en proceso el desarrollo de una aplicación para la creación del pedigrí de los participantes a los que se les realice la secuenciación; así como otra aplicación para el análisis genético de las muestras que sean secuenciadas.

Fuentes de financiación

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) de Extremadura al 80 %, dentro del Objetivo Temático 01 “Refuerzo de la investigación, el desarrollo tecnológico y la innovación”, a través de la convocatoria de ayudas destinadas a la realización de proyectos de investigación, orientados hacia las áreas estratégicas de la economía regional contempladas en el V Plan Regional de I+D+i (2014-2017), en los centros públicos de I+D+i de la Comunidad Autónoma de Extremadura, al amparo del Decreto 68/2016 de 6 de junio.

CultivData

Extremadura es reconocida como una región que aporta productos agrícolas y ganaderos de gran calidad. Además, los últimos años se han caracterizado por el notable esfuerzo que ha realizado la región para no perder la revolución tecnológica y así, las TIC se han incorporado a todos los ámbitos de la sociedad. Aún así, el desarrollo del sector agropecuario y la adopción de nuevas técnicas, comparado con otras áreas, se encuentra retrasado y avanza lentamente. Este hecho, unido al reto que se le plantea para los próximos años, en los que necesitará abastecer a una población mundial en crecimiento, al mismo tiempo que se disminuyen las hectáreas cultivables por persona, hace necesario un avance significativo en sus procedimientos. Partiendo de estas premisas, es evidente que se deben unir los esfuerzos del ámbito tecnológico y agrario para aumentar considerablemente la productividad, sin que ello suponga una merma en la calidad, reconocida internacionalmente a los productos de la región. CultivData pretende aportar esa eficiencia, así como eficacia, productividad, sostenibilidad y calidad al sector agropecuario extremeño.

La propuesta presenta una investigación de carácter transversal de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones, y su aplicación en la sociedad, que conlleva la interacción con áreas del conocimiento como la agricultura, la eficiencia en la utilización de los recursos naturales y la optimización de la calidad de los productos derivados de las explotaciones agrícolas.

Entidades participantes

Fundación COMPUTAEX - CénitS.

Objetivos

El objetivo general del proyecto está centrado en el análisis, diseño y pilotaje de un prototipo de plataforma informática denominada CultivData para el “cultivo” de datos abiertos y públicos, aspirando a la excelencia en el sector agrario extremeño. La plataforma capta datos de muy diversas fuentes y formatos para, una vez obtenidos, aplicar técnicas de Big Data con el fin de crear modelos de datos que permitan obtener conocimiento que pueda resultar de utilidad para los grupos de interés del sector agroalimentario. Este conocimiento permitirá tomar decisiones fundamentales para mejorar la calidad de los productos, ampliar la productividad de las explotaciones y encontrar la eficiencia en la comercialización. Aunque el objetivo general del proyecto es la industria agropecuaria, CultivData se centrará específicamente en el sector de la fruta de hueso, dada la importancia que tiene en el ámbito agropecuario en Extremadura. Las lecciones aprendidas en este sector concreto podrán ser extrapoladas y aplicadas a otros sectores de la industria agropecuaria, desarrollando nuevos proyectos entroncados con CultivData.

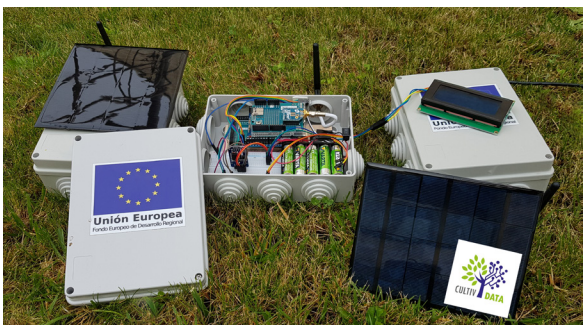
Metodología

La metodología para cumplir los objetivos del proyecto aborda una realización cíclica de las tareas planteadas para cada actividad. Ello es consecuencia, por una parte, del carácter plurianual del proyecto, y por otra, de la necesidad de que los entregables reflejen al máximo la visión experta que las entidades del sector agropecuario tienen del problema al que se enfrenta el proyecto.

Con el fin de obtener una herramienta lo más útil posible para los grupos de interés del sector agroalimentario extremeño, se propone un desarrollo ágil de la plataforma CultivData. Se trata de un desarrollo cíclico en el que en cada iteración se incluyen todas las fases de un desarrollo tradicional: planificación, análisis de requisitos, diseño, codificación, pruebas y documentación. Esta metodología apuesta por el desarrollo rápido de versiones del producto o servicio, las cuales se presentan a los usuarios finales, de forma que, a partir del feedback proporcionado por éstos, se inicia una nueva iteración del desarrollo.

La ventaja de este tipo de metodologías radica en un producto final mejor orientado al usuario y en una reducción de costes de desarrollo, debido a que los cambios en el software suelen ser menores que en las tradicionales metodologías en cascada. Así, se obtendrá un prototipo en el que las técnicas analíticas de Big Data serán un requerimiento muy importante, dados los grandes volúmenes de datos y variantes de formatos. La velocidad de respuesta y las simulaciones casi en tiempo real requerirán de la potencia de procesamiento HPC (High Performance Computing) que el supercomputador LUSITANIA II puede aportar al proyecto.

Además, se configurarán servicios de cómputo bajo demanda a los potenciales usuarios (agentes decisores, agricultores, distribuidores y consumidores) a través de Cloud, los cuales estarán a su disposición en el centro de proceso de datos de CénitS, para ahorrarles costes y ofrecer la alta disponibilidad y seguridad de un CPD diseñado para la computación de altas prestaciones.



Objetivos alcanzados

Durante la primera anualidad del proyecto, uno de los trabajos que se han llevado a cabo ha consistido en el estudio, análisis y captación de los datos de las diferentes fuentes y organismos que presentan cierta relevancia para los objetivos del proyecto. Dentro de estas fuentes se han estudiado los datos ofrecidos de forma abierta por entidades como la Agencia Estatal de Meteorología (AEMET), la Red de Asesoramiento al Regante de Extremadura (REDAREX) o el Instituto Nacional de Estadística (INE), entre otros.

Además, dada la importancia de contar con datos más específicos para formar los futuros modelos de datos, los objetivos del proyecto también recogen la sensorización de diversas explotaciones colaboradoras. Para ello, se ha desarrollado un dispositivo de sensorización que, mediante la utilización de hardware abierto y siguiendo la filosofía de DIY (Do it Yourself o hágalo-usted-mismo), actualmente es capaz de recoger el valor de once magnitudes físicas y transmitirla a los servidores del proyecto. En las siguientes etapas de desarrollo, se procederá a aplicar técnicas de Big Data y Machine Learning sobre todos los datos recogidos, para obtener los modelos que sirvan de apoyo a la toma de decisiones del sector.

También, en la primera fase de desarrollo del proyecto, se ha realizado el diseño e implementación de un primer prototipo de la plataforma CultivData, no accesible públicamente aún, pero que ya es capaz de consultar datos de diversas fuentes de las seleccionadas, así como recoger los datos de las redes de sensorización desarrolladas. Esta plataforma será la encargada de poner a disposición de los grupos de interés del proyecto, la información obtenida por CultivData.

ANÁLISIS DE DATOS GENÉTICOS, AMBIENTALES Y DE COMPORTAMIENTO PARA LA PREDICTIBILIDAD DE ENFERMEDADES ONCOLÓGICAS MEDIANTE ULTRASECUENCIACIÓN GENÉTICA Y APLICANDO PARADIGMAS HPC, CLOUD COMPUTING, BIG DATA Y OPEN DATA

El cáncer abarca realmente un complejo grupo de enfermedades con una gran variedad de causas posibles, las cuales incluyen factores genéticos, estilo de vida (como el tabaquismo, la alimentación, el ejercicio y la depresión), infecciones (como la del virus del papiloma humano, detrás del 10% de los cánceres de mujeres), y factores ambientales (como la exposición a ciertas sustancias químicas y radiaciones como el radón, un gas natural que emana de las rocas, responsable entre el 3% y el 14% de las muertes por cáncer de pulmón, según la OMS).

Alrededor del 10-15% de los cánceres son causados por mutaciones germinales hereditarias. Por ello, el análisis genético y la epigenética se han convertido en la prioridad y el objetivo de diversos estudios e investigaciones para conseguir un diagnóstico precoz de la enfermedad, mejorar el pronóstico del paciente y acertar con el tratamiento más efectivo, aumentando la supervivencia.

El presente proyecto pretende aprovechar las Tecnologías de la Información y la Comunicación para ofrecer, a los especialistas en oncología, nuevas herramientas para aplicar a sus pacientes medicina de precisión que garantice la seguridad y eficacia en sus tratamientos, potenciando a su vez la utilización de las nuevas tecnologías para el uso clínico y el servicio asistencial. Los paradigmas Cloud computing, Big Data y Open Data, abren un esperanzador futuro, tanto para la medicina de precisión, como para nuevos modelos de negocio, los cuales deben ser explorados puesto que ello redundará positivamente en la salud de los ciudadanos. Así, la aplicación de estos paradigmas, permitirá acercar al servicio asistencial clínico de forma masiva terapias mucho más efectivas, al tiempo que se generarán los necesarios repositorios de información que podrían ser utilizados para aplicar técnicas de Big Data que, a través de servicios Cloud, acerquen el potencial que toda la información guardada puede poner a disposición de los oncólogos, pacientes, laboratorios, investigadores y empresas de prestación de servicios que, a través de Open Data, encontrarán en este proyecto una clara aplicación de modelo de economía circular.

Se persigue permitir que empresas expertas en Big Data y Cloud Computing puedan afrontar nuevos modelos de negocio donde la supercomputación, las fuentes de datos abiertas y las ciencias de la salud puedan ofrecer a los ciudadanos la esperada medicina de precisión. De este modo, el proyecto permitirá desarrollar un conjunto de innovaciones, servicios y propuestas que beneficien a los sectores productivo, sanitario e investigador, favoreciendo a todos los ciudadanos.

Entidades participantes

Fundación COMPUTAEX - CénitS y Cloudex, S.L.

Objetivos

El objetivo principal del proyecto es crear un novedoso modelo de prestación de servicios que, a través de tecnologías de Cloud Computing y con técnicas Big Data y Open Data, permita a especialistas en oncología aplicar medicina de precisión gracias a la ultrasecuenciación genética y a la supercomputación (HPC - High Performance Computing).

Metodología

Se aplicarán técnicas de supercomputación para realizar el análisis de los datos de secuenciación genética masiva garantizando el almacenamiento seguro con acceso restringido a la información generada.

Mediante el uso de técnicas de cloud computing, Big Data y Open Data, se generarán y harán accesibles repositorios de datos genéticos y clínicos a través de plataformas webs que den soporte a doctores e investigadores durantes sus análisis, promoviendo la medicina de precisión.

Se realizará un estudio de incidencia de los diferentes tipos de cáncer en Extremadura para crear un mapa extremeño del cáncer que será accesible a través de una herramienta web que muestre los resultados obtenidos limitando distintas zonas en la región en función de las diferencias observadas en la incidencia de los diferentes cánceres.

Objetivos alcanzados

Se ha diseñado y validado el workflow para el análisis de datos de secuenciación genética masiva y se ha desarrollado una plataforma para facilitar el análisis clínico de las variantes identificadas tras la secuenciación, que dispone de herramientas de filtrado y de soporte para la priorización de las variantes potencialmente patogénicas y/o con significado incierto.

Además, se ha unificado en una base de datos información clínica y genética Open Data dispersa relacionada con oncogenes, que se verá incrementada con los factores ambientales y de conducta que incrementan el riesgo de cáncer en humanos de acuerdo a los últimos informes publicados por el Programa Nacional de Toxicología (Departamento de Salud de EEUU) y la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (Organización Mundial de la Salud). Los datos son accesibles a través de una herramienta informática que se ha desarrollado.

Fuentes de financiación

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura, Consejería de Educación y Empleo-SEXPE y el Fondo Social Europeo, a través de la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura (Orden de 12 de marzo de 2018). Se encuentra encuadrado en la línea estratégica de Salud, definida en el VI Plan Regional de Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación 2017-2020, aprobado mediante Decreto 91/2017, de 20 junio (DOE n.o 121, de 26 de junio).

IDENTIFICACIÓN DE PATRONES DE COMPORTAMIENTO EN EL FUNCIONAMIENTO ORDINARIO DE AEROGENERADORES DE UN PARQUE EÓLICO MEDIANTE TÉCNICAS DE ADVANCED ANALYTICS BASADAS EN BIG DATA

El objetivo principal del proyecto es analizar la información extraída del conjunto de equipos que conforman los parques eólicos, extrayendo aquellos datos que afectan de forma directa a su funcionamiento ordinario, para identificar y analizar todas las variables que pueden afectar de manera real a la vida útil de los aerogeneradores, así como a las causas de sus averías. De este modo, se persigue identificar patrones de comportamiento en el funcionamiento de equipos que, a su vez, ayuden en la toma de decisiones para la reducción de fallas, favoreciendo el aumento de vida útil de los equipos evaluados, dentro de los principios de economía sostenible y circular.

Así, el proyecto tiene como primera fase, la identificación y análisis de todas las variables que pueden afectar de manera real, tanto a la vida útil de los aerogeneradores, como a las causas de sus averías. Este primer análisis permitirá identificar el conjunto de variables que afectan a su funcionamiento ordinario, con el objetivo de enfocar adecuadamente el estudio.

Tras esto, y una vez superado el análisis de riesgos, el proyecto persigue la identificación de patrones de comportamiento que inducen al fallo en dichos equipos. La identificación de estos patrones engloba, tanto la validación de variables, como la ponderación de las mismas, en base a su importancia en los fallos producidos en los equipos.

De este modo, la utilización de técnicas basadas en Analítica Avanzada y Big Data, permitirá tratar de manera eficiente y en el tiempo apropiado, el gran volúmen de datos que se pretende analizar, considerando lecturas diezminutales en temporalidades de varios meses. Así, el empleo de estas técnicas permitirá desarrollar análisis de variables que, de otro modo, sería imposible realizar.

Por ello, el proyecto persigue analizar si efectivamente es posible extraer patrones de comportamiento en el funcionamiento de equipos, que a su vez ayuden en la toma de decisiones para la reducción de fallas, favoreciendo el aumento de vida útil de los equipos evaluados, dentro de los principios de economía sostenible y circular.

ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación COMPUTAEX-CénitS y Canalyticals Big Data Experts, S.L.

OBJETIVOS

La detección de fallos en el comportamiento ordinario y la obtención de patrones de funcionamiento, para poder predecir la potencia de los mismos a corto plazo, son los dos objetivos principales del proyecto. Ambos se realizarán en fases diferentes y no hay vínculos entre ellos.

El primero se trata de un estudio de analítica de un conjunto de datos históricos del parque y de extraer conclusiones sobre el mismo y el segundo radica en la utilización de algoritmos de machine learning con objeto de realizar predicciones a corto plazo.

Metodología

El punto de partida es un conjunto histórico de datos en forma de serie diezminutal para cada aerogenerador del parque de un conjunto de variables. La metodología sigue distintas etapas, tal que la consecución de la primera es necesaria para el comienzo de la siguiente:

1. En primer lugar se hará un preprocesado de los datos, eliminando outliers u otros datos que no sean significativos debido a fallos de sensores y comprometan el resultado final.

2. Análisis de la información procesada, con la consecuente obtención de fallos y análisis de riesgos.

3. Una vez realizado el estudio anterior, y utilizando parte de las series de datos anteriores como datos test, se implementarán algoritmos de Machine Learning para la obtención de predicciones de las mismas a corto plazo de diferentes variables.

4. El último paso del proyecto trata sobre la documentación y divulgación del trabajo realizado.

Fuentes de financiación

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura, Consejería de Educación y Empleo-SEXPE y el Fondo Social Europeo, a través de la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura (Orden de 12 de marzo de 2018).

Se encuentra encuadrado en la línea estratégica de Energías Limpias, definida en el VI Plan Regional de Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación 2017-2020, aprobado mediante Decreto 91/2017, de 20 junio (DOE n.o 121, de 26 de junio).

PIT: Programa de Innovación y Talento

El programa de Innovación y Talento (PIT), promovido por la Consejería de Educación y Empleo de la Junta de Extremadura, y destinado a la contratación de desempleados menores de 30 años, combina la formación de tecnólogos con las prácticas profesionales en empresas privadas. Su objetivo es facilitar la inserción laboral y potenciar las capacidades del talento en las siguientes áreas: agroalimentaria, tecnologías de la información y la comunicación, turismo, salud, energías limpias, investigación básica, humanidades y ciencias sociales, economía verde, economía circular y bioeconomía. La duración de cada proyecto concedido es de 9 meses, de los cuales, el 25% consiste en un proceso formativo impartido y tutorizado en CénitS, mientras que el 75% restante se destina al desarrollo de trabajo en las empresas privadas correspondientes. La formación en CénitS tiene por objeto la mejora y adquisición de competencias y capacidades, para el desempeño posterior de actividades como tecnólogos en las empresas seleccionadas, incluyendo además formación específica en competencias colaborativas. Se muestran a continuación los cuatro proyectos principales:

Análisis y consultoría del proyecto OncoGenTIC: Tecnologías Informáticas y de las Comunicaciones al servicio asistencial de especialistas y pacientes de enfermedades oncológicas

Entidades participantes: CLOUDEX, S.L. y CénitS.

Los paradigmas Cloud computing, Big Data y Open Data abren un esperanzador horizonte para la medicina de precisión y también para nuevos modelos de negocio, que es necesario explorar, porque ello redundará, tanto en la salud de los ciudadanos, como en la economía. La incorporación de estos nuevos mecanismos permitiría llevar al servicio asistencial clínico, de forma masiva, terapias mucho más efectivas, a la vez que se generarían los necesarios repositorios de información que podrían ser usados para aplicar técnicas de Big Data que, a través de servicios Cloud, acerquen el potencial que toda la información almacenada puede poner a disposición de los oncólogos, pacientes, laboratorios, investigadores y empresas de prestación de servicios que, mediante Open Data, encontrarán una clara aplicación de modelo de economía circular. Así, la actual carencia de información dejará de ser un inconveniente en poco tiempo, si se comienza ya a trabajar en proyectos como este. Así, el objetivo general de OncoGenTIC es analizar la viabilidad de creación de un modelo de prestación de servicios que, a través de Cloud y con mecanismos Big y Open Data, permita a los oncólogos aplicar medicina de precisión gracias a la ultrasecuenciación genética y a la supercomputación.

IoTAgro 4.0

Entidades participantes: SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L, y CénitS

El objetivo general del proyecto IoTAgro 4.0 es desarrollar un prototipo con una arquitectura hardware y de comunicaciones adaptable a los sistemas de producción basados en sensores/actuadores. Se busca 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. La propuesta se centrará en el diseño y desarrollo del prototipo centrado en el manejo del suelo. En general, ésta resulta aún una labor costosa en tiempo e inversión. Es preciso el desarrollo de sistemas distribuidos a los que se puedan conectar sensores de diferentes tipos, capaces de generar de forma precisa, rápida y económica la información necesaria, ya elaborada para su aplicación. De este modo, el proyecto se centra en disponer de una solución que aborde el problema de la adquisición de datos y su volcado de forma útil para el agricultor. Este aspecto es fundamental para que la agricultura de precisión pueda ser practicada de forma generalizada.

Prospéctica: Big Open Data para el análisis y estudio de la influencia del entorno en enfermedades oncológicas

Entidades participantes: CLOUDEX, S.L. y CénitS.

Entendiendo que la prospectiva es el conjunto de análisis y estudios realizados con el fin de explorar o predecir el futuro en una determinada materia, el objetivo general del proyecto Prospéctica será aplicar las tecnologías informáticas con carácter prospectivo para enfrentarse a la influencia que las condiciones del entorno tienen en la aparición y prevalencia de ciertas enfermedades oncológicas, y el papel que desempeña el sistema inmunológico.

Nos enfrentamos a este reto desde dos perspectivas bien diferentes: por un lado, la ingente cantidad de información existente en el campo de la investigación oncológica que la hace realmente inmanejable; y por otro, la dificultad para contar con información de calidad en torno a los pacientes que sufren estas enfermedades a la que, por diferentes motivos (legales, humanitarios, privacidad, etc.), no es posible acceder de forma sencilla.

En todo caso, es sabido que la epigenética demuestra que existen factores de entorno que juegan un papel fundamental para la aparición de algunas enfermedades oncológicas y es nuestra intención aplicar Big data, Machine Learning y Open Data, entre otras tecnologías informáticas, a la información existente para analizarla y estudiarla con la intención de explorar las posibilidades de predicción de ciertas enfermedades en función de los hábitos, costumbres, alimentación, zonas geográficas, nivel cultural, nivel económico, herencia genética, etc. Un factor importante es la edad, ya que con su aumento, se incrementa la predisposición a desarrollar un cáncer, donde juega un papel primordial el sistema inmunológico. Cabe mencionar el trabajo de un biocurator, el cual abarca al control de calidad de la información de datos biológicos, y su organización.

El sistema inmunológico es la defensa natural del cuerpo, lo que hace es atacar los organismos o células extrañas presentes en el organismo. Dicho sistema con la edad, empieza a degenerarse, este declive ocurre más despacio en mujeres que en hombres. Importante mencionar el avance en inmunoterapia para vencer el cáncer.

Para llevar a cabo parte de Prospéctica, se contempla la incorporación de un alumno trabajador, teniendo en cuenta la mejora y adquisición de competencias y capacidades para el desempeño, como tecnólogo, de las actividades descritas en el presente proyecto, comprendidas en el área estratégica de las tecnologías informáticas y de las comunicaciones unidas al campo de ciencias de la salud.

Publicidad, marketing digital y diseño web

Entidades participantes: Synopsis 103 y CénitS.

Este proyecto pretende impulsar el área de publicidad y marketing de la empresa Synopsis 103 con la incorporación de un nuevo trabajador especializado en comunicación audiovisual, publicidad y márketing, con importantes conocimientos en nuevas tecnologías, con el fin principal de producir una importante innovación que supondrá destacables mejoras en la capacidad competitiva de la empresa. Synopsis 103 ofrece servicios en el ámbito de la televisión, la publicidad y la VR/AR (Realidad Virtual / Realidad Aumentada). Gracias a este proyecto, se pretende ampliar la calidad de los servicios ofertados, más allá de la generación de audiovisuales y elementos gráficos, con el objetivo de generar campañas innovadoras y altamente competitivas para la propia empresa y sus clientes.

Optimización de algoritmos y aplicaciones paralelas en sistemas heterogéneos mediante el uso combinado de modelos formales de cómputo y comunicaciones

Las aplicaciones que ejecutan computación paralela de altas prestaciones lo hacen usualmente en una secuencia de fases de computación y comunicación. El código de las mismas está compuesto por una serie de patrones o kernels como, por ejemplo, una multiplicación de matrices o una trasformada de Fourier. Estos kernels son ejecutados de forma paralela por procesos que ejecutan sobre hardware heterogéneo y, por tanto, con diferentes capacidades de cómputo.

En el actual estado del arte, el tiempo de ejecución del kernel se optimiza mediante una distribución no uniforme de la carga de cómputo, asignando a cada proceso el trabajo que pueda realizar de forma que la carga global quede equilibrada, a fin de que todos los procesos lleguen a la vez a la fase de comunicación de resultados, evitando que los más rápidos esperen a los más lentos. En los sistemas heterogéneos que encontramos en las instalaciones actuales de supercomputación, el criterio de equilibrado basado en la carga es necesario pero insuficiente, siendo ésta la cuestión que acomete el proyecto. La distribución no uniforme de la carga de trabajo no solo produce diferencias en el volumen de datos que cada proceso transmite, sino que también determina la utilización de los diferentes canales de comunicación del sistema.

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-CénitS.

Objetivos

El objetivo del proyecto consiste en desarrollar una herramienta de usuario que proponga una distribución de carga de cómputo en los sistemas heterogéneos que encontramos en las 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 también en simuladores y algoritmos de optimización.

Metodología

La propuesta parte del trabajo realizado por el investigador principal en el desarrollo de su tesis doctoral. Cuenta con un equipo multidisciplinar que incluye expertos de diferentes campos, y trabaja habitualmente con investigadores nacionales e internacionales para afrontar un proyecto con dos hitos principales, el desarrollo de un modelo formal mixto de asignación de carga, y su posterior aplicación en forma de una herramienta software usable por el usuario final de un centro de supercomputación.

El modelo se denomina τ-Lop. Evaluado en clusters multi-core con redes de altas prestaciones, τ-Lop ha sido publicado en dos revistas de reconocido prestigio (primer cuartil y primer decil), y ha sido objeto de una tesis doctoral con mención europea en la UEx. La propuesta busca financiación para extenderlo a plataformas heterogéneas.

Se considera que la aproximación basada en τ-Lop posibilitará automatizar el proceso de asignación óptima de carga en arquitecturas heterogéneas, evitando el consumo intensivo de recursos que requieren los tests, y obteniendo una mejora significativa del rendimiento durante la ejecución de la aplicación. Ello redundará en el ahorro apreciable de costes, tanto computacionales, como energéticos en las instalaciones de supercomputación.

Fuentes de financiación

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) de Extremadura al 80 %, dentro del Objetivo Temático 01 “Refuerzo de la investigación, el desarrollo tecnológico y la innovación”, a través de la convocatoria de ayudas destinadas a la realización de proyectos de investigación, orientados hacia las áreas estratégicas de la economía regional contempladas en el V Plan Regional de I+D+i (2014-2017), en los centros públicos de I+D+i de la Comunidad Autónoma de Extremadura, al amparo del Decreto 68/2016 de 6 de junio.

Red de Excelencia RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una infraestructura distribuida consistente en la interconexión de 12 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica.

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 dichos 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.

Entidades participantes

BSC (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación), CESGA (Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), IFCA (Instituto de Física de Cantabria), UMA (Universidad de Málaga), UV (Universitat de València), BIFI (Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos), CSUC (Consorci de Serveis Universitari de Catalunya), SCAYLE (Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León), UAM (Universidad Autónoma de Madrid), y CénitS-COMPUTAEX.

Fuentes de financiación

MINECO (Ministerio de Economía y Competitividad), Acciones de Dinamización “Redes de Excelencia”, Convocatoria 2015, Ref. TIN2015-69511-REDI.

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

Existe una preocupación creciente por el bienestar animal en los sistemas productivos. Cualquier cambio que se introduzca en el modelo de producción: manejo, alimentación, sanitario, etc., debe ser evaluado, teniendo en cuenta las posibles repercusiones sobre el bienestar de los animales. La actividad planteada en este trabajo centra la atención en la ganadería de precisión o Precision Livestock Farming (PLF) como herramienta para investigar y evaluar, a través de la aplicación de las TIC, el bienestar de los animales con una interferencia mínima o nula en su espacio vital.

Entidades participantes

Copreca (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-CénitS.

Fuentes de financiación

Proyecto financiado por el programa del Decreto 40/2016 de la Junta de Extremadura, para la financiación de proyectos de investigación industrial y desarrollo experimental a empresas de la Comunidad Autónoma de Extremadura.

SCINAP: Sistema Ciberfísico basado en la Inmótica, para su aplicación en Agricultura de Precisión

Proyecto de investigación industrial basado en la aplicación de Internet of Things (IOT) y del paradigma de Industria 4.0 en el vector tecnológico de Agricultura de precisión, para la generación de modelos que den respuesta a algunas de las principales cuestiones planteadas en la visión actual de la Política Agraria Comunitaria en materia de agricultura. Este proyecto pretende la mejora y optimización de las explotaciones de frutales, mediante la aplicación de la agricultura de precisión, orientada a la aplicación de nuevas tecnologías, para el seguimiento y evolución de los cultivos, de cara a la consecución de nuevos modelos eficientes y sostenibles de producción de frutales.

Entidades participantes

Domotys: asociación española para el impulso y la innovación en la domótica, la inmótica y las ciudades inteligentes, SET Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., Sinapse Energía S.L., Amaisys Technologies S.L., Albufera Energy Storage S.L. y CénitS.

Fuentes de financiación

Proyecto cofinanciado por el Ministerio de Economía, Industria y Competititvidad, dentro del Plan de ayudas establecidas para el apoyo a agrupaciones empresariales innovadoras 2016-2017.

Red-Integra

Resulta de especial importancia valorizar, divulgar y promover el patrimonio histórico, cultural y paisajístico disponibles, para así lograr su integración con el sector económico. En ese sentido, Triurbir se identifica con el nombre de Triángulo Urbano Ibérico Rayano, asociación formada por las ciudades españolas de Plasencia y Cáceres y por las ciudades portuguesas de Castelo Branco y Portalegre, cuyo objetivo es el desarrollo y la dinamización de los municipios aprovechando las ayudas y programas de desarrollo transfronterizo ofrecidos por la Unión Europea. Cáceres, como miembro de esa asociación, identifica dos ejes de gran importancia: el Turismo y la Innovación, a través de los cuales se afrontarán los desafíos del futuro y la elaboración de proyectos de financiación europea con el horizonte del año 2020.

Entidades participantes

Ayuntamiento de Cáceres (coordinador), Câmara Municipal de Portalegre, Município de Castelo Branco, Fundación COMPUTAEX-CénitS, Ayuntamiento de Plasencia, Triángulo Urbano Ibérico Rayano Triurbir AEIE (Agrupación Europea de Interés Económico) y Universidad de Extremadura.

SCioT

Principales agencias nacionales e intergubernamentales, como la FAO, coinciden en que las tendencias de consumo apuntan a que la demanda mundial del consumo de carne se incrementará en al menos un 40% en los próximos 15 años. Al mismo tiempo, aumenta la preocupación en la transferencia de enfermedades del ganado a los seres humanos, lo que hace que la salud y el bienestar animal sea uno de los principales temas a observar por parte de todos los actores.

Por otro lado, hay un amplio margen de mejora en el tratamiento de la salud como consecuencia de los problemas en las explotaciones ganaderas intensivas, por ejemplo, el uso de antibióticos, el cual es demasiado alto y debe ser reducido. Los ganaderos, que ya están sujetos a diversos reglamentos y leyes, no comparten los nuevos enfoques, ya que no ven claros los beneficios que derivados del enfoque actual, basado en la implementación de estas directivas, pero con las prácticas habituales.

Es preciso, por tanto, disponer de un marco que propicie un vector disruptivo del que se deriven nuevos modelos de explotación que resulten de la observación de sistemas de producción ganadera económicamente sostenibles y rentables, compatibles con una reducción del impacto de los sistemas de explotación ganadera.

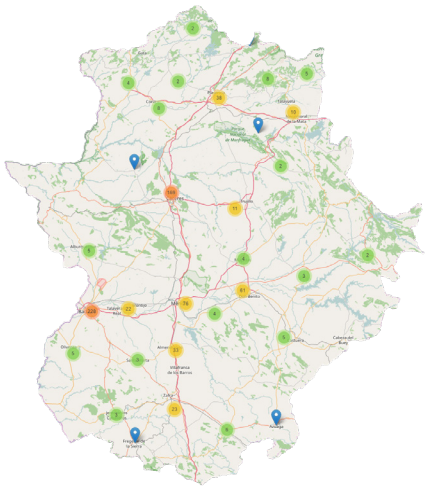
Entidades participantes

SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería y Fundación COMPUTAEX-CénitS.

Fuentes de financiación

Proyecto financiado por el programa del Decreto 40/2016 de la Junta de Extremadura, para la financiación de proyectos de investigación industrial y desarrollo experimental a las empresas de la Comunidad Autónoma de Extremadura.

TAXONOMTIC 2018



Las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (TIC) se han convertido en el principal motor de la emergente economía digital y, como tal, merecían ser analizadas en profundidad. El proyecto TaxonomTIC se inició en el año 2013 con el objetivo de visibilizar las TIC y a aquellas empresas y profesionales de Extremadura que prestan servicios relacionados con las mismas.

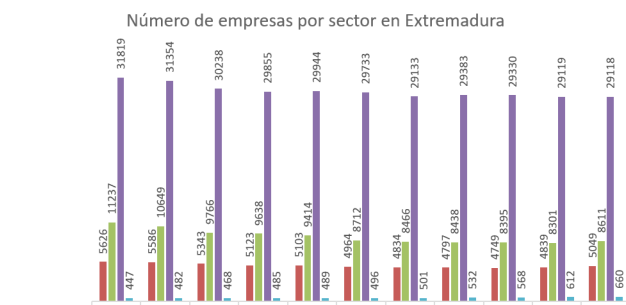
El trabajo realizado desde el año 2013 ha permitido el desarrollo de un observatorio del Sector TIC en la región, en el que se incluye información de las empresas y profesionales del sector, así como de la formación TIC profesional y universitaria.

Durante el año 2013 se identificaron y clasificaron aquellas actividades que, desde el punto de vista del equipo de CénitS, podrían ser consideradas TIC. Partiendo de dicha clasificación, se identificó y caracterizó el sector, analizando todas las posibles empresas cuyas actividades principales estuvieran entre las establecidas como TIC para, finalmente, analizar el sector en Extremadura desde un punto de vista interno y externo (comparándolo con otros sectores más tradicionales de la región).

En 2014 se analizó el sector TIC en España y Europa para ver las diferencias existentes con Extremadura. Además, se diseñó y desarrolló la plataforma OpenData OLISTIC (Observatorio regionaL de Información del Sector TIC) que contiene información de las empresas que componen el sector y las actividades TIC que desempeñan. Finalmente, con el fin de entender mejor el sector, se realizó un estudio desde el punto de vista de los directivos de las empresas TIC, con una encuesta y una serie de entrevistas a directivos de carácter regional y nacional.

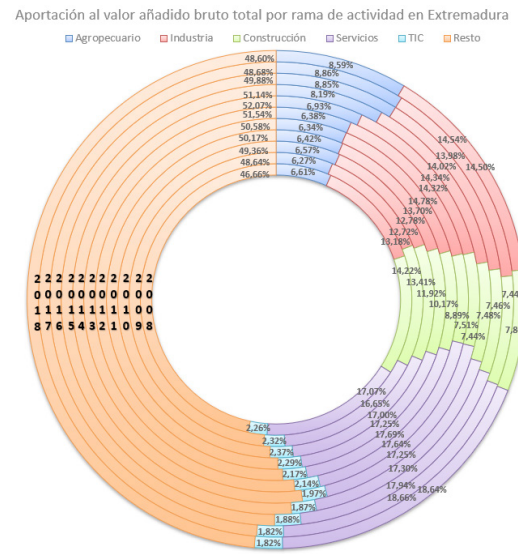
En 2015 se realizó la automatización de ciertas actividades asociadas al proyecto, como son la detección de constituciones y disoluciones de sociedades y se desarrollaron nuevas aplicaciones para la plataforma Opendata. De nuevo, con el fin de analizar el sector desde todos los puntos de vista posibles, se realizó un estudio del equipamiento y uso de las TIC en Extremadura, ofreciendo de este modo una visión de las TIC más orientada a sus usuarios finales.

Durante los años 2016 y 2017 se añadió a la plataforma OLISTIC información sobre los perfiles profesionales TIC y sus competencias asociadas. Para su elaboración se utilizó como referencia el e-CF (European e-Competence Framework) que en 2016 se transformó en un estándar europeo y que fue publicado oficialmente como la norma EN 16234-1.



	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018
Industrial	5626	5586	5343	5123	5103	4964	4834	4797	4749	4839	5049
Construcción	11237	10649	9766	9638	9414	8712	8466	8438	8395	8301	8611
Servicios	31819	31354	30238	29855	29944	29733	29133	29383	29330	29119	29118
TIC	447	482	468	485	489	496	501	532	568	612	660

El marco e-CF define 23 perfiles profesionales y 40 competencias. En el momento de la elaboración del proyecto no se contaba con ninguna traducción oficial del mismo al castellano y ésta fue realizada, en el marco del proyecto, por los propios técnicos de CénitS.



La Fundación COMPUTAEX considera que la información aportada por el proyecto es importante para Extremadura y, sobre todo, para el propio Sector TIC. Por ello, durante 2018, se ha continuado la labor de recopilación y análisis de toda la información relevante para el Sector TIC regional.

ENTIDADES PARTICIPANTES

Equipo de CénitS-COMPUTAEX.

OBJETIVOS

- Actualización de la información recopilada desde el comienzo del proyecto sobre el sector regional, nacional y europeo.
- Integración de la información del proyecto en una única plataforma (OLISTIC).
- Elaboración de informes y obtención de conclusiones de la taxonomía del Sector TIC y su proyección para el futuro.

METODOLOGÍA

En primer lugar, se procede a la actualización de la información del Sector TIC regional a con información extraída de la propia plataforma del proyecto (OLISTIC) y del Instituto Nacional de Estadística (INE). De este modo se obtienen estadísticas económicas y de sociedades del sector en Extremadura.

A continuación se actualiza la información relativa a la formación TIC en la región y en España. Los datos son extraídos principalmente del Observatorio de Indicadores de la Universidad de Extremadura y de las Estadísticas de la Educación del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte. Una vez recopilados los datos, se realiza un análisis de los datos económicos del Sector TIC en Extremadura mediante una comparativa económica con otros sectores productivos más tradicionales en la región. El análisis se completa con una comparativa del sector regional respecto al sector nacional y europeo.

RESULTADOS

- Disposición de información económica, empresarial y de formación actualizada del Sector TIC en Extremadura.
- Análisis actualizado del Sector TIC en España y Europa y comparativa con el sector en Extremadura.
- Actualización del contenido de la plataforma OLISTIC.

1010 0010 1001
0011 1110 0110
0110 0111 0001
1010 0011 1101
0011 1110 0110
0110 0111 0001
1010 0011 1101
0010 1001 0001
4.0
Service

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 2018.

Estos proyectos son llevados a cabo por universidades, centros de investigación, centros tecnológicos y todo tipo de organizaciones, que 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 son clasificados en tres categorías: Ciencias de la Tierra, Ciencias de la Vida y Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.

CIENCIAS DE LA TIERRA

ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (Phase II)

Santiago González de la Hoz. Instituto de Física Corpuscular, centro mixto CSIC - Universitat de València. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]

This project needs CPUs to run simulations of the proton-proton collision events in their detector, and supercomputers have spare CPUs. The possible usage of HPC resources by ATLAS is now becoming viable due to the changing nature of these systems and it is also very attractive due to the need for increasing amounts of simulated data. In recent years the architecture of HPC systems has evolved, moving away from specialized monolithic systems, to a more generic linux type platform. This change means that the deployment of non HPC specifc codes has become much easier. The timing of this evolution perfectly suits the needs of ATLAS and opens a new window of opportunity. The ATLAS experiment at CERN will begin a period of high luminosity data taking in 2022. This high luminosity phase will be accompanied by a need for increasing amounts of simulated data.

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. El grupo de investigación que desarrolla el proyecto está interesado 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 útiles para explicar y fundamentar los resultados experimentales, así como para hacer previsiones con un alto grado de fiabilidad.

El objetivo principal es el estudio teórico de nuevas RMCI y, en concreto, el estudio computacional de dos tipos de reacciones: reacciones tipo Ugi con enoles y procesos tándem de cicloadición de isonitrilos para la obtención de aminas aromáticas. El proyecto consta de una parte de cálculos computacionales, que 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, y 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.

Reactions of complex organic molecules at the low temperatures of interstellar media

Octavio Roncero. Instituto de Física Fundamental, Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]

Quantum simulations of reaction rates of complex organic molecules (COMs), like methanol and formaldehide, with OH, for temperature in the 10-100K range to determine the reaction mechanism and the reaction rates under single collision conditions. Quantum effects will be accounted for by the semi-classical Ring polymer Molecular Dynamic approach based on Path Integrals. These simulations will serve to validate or not the available experimental data, since they may be due to formation of dimers as recently proposed. The rate obtained will be implemented in astrophysical models to determine the abundance of different COMs under the different physical conditions of different astrophysical objects.

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.

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. Se trata de analizar el papel que juega la estratosfera en el estudio del cambio climático. Se han realizado simulaciones climática, con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y con el modelo CESM (Community Earth System Model). La primera se ha realizado para complementar una anterior pero con un forzamiento externo de 8.5 W/m^2 en 2100. La segunda, para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional. También se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Asimismo, se realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Community Earth System Model). De igual modo, se pretende analizar la posible realización de simulaciones climáticas mediante supercomputación. Modelos anteriores fueron desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Colorado, USA) especialmente adaptados para sus ordenadores. Resulta del máximo interés conocer si estos programas, convenientemente compilados, se pueden ejecutar en otro tipo de máquinas. Un análisis de los datos obtenidos indica que, efectivamente, los resultados son comparables a los obtenidos en los ordenadores del NCAR.

CIENCIAS DE LA VIDA

Ab-initio simulation of the electronic and magnetic properties in iridate-based oxide heterostructures

Juan Ignacio Beltrán (I.P.). Universidad Complutense de Madrid. [Proyecto soportado en CéntiS procedente de la Red Española de Supercomputación]

Oxide heterostructure (OH) with spin-orbit-coupling like SrIrO3/SrTiO3 have the potential to be designed as topological insulators, either band or Mott types. This roots on the properties exhibited by the iridates family of Ruddlesen-Proper series since the members with n=1,2,∞ are antiferromagnetic (AFM) Mott insulator, AFM band insulator and paramagnetic semimetal phases respectively. There is a number of works relating the RPS properties and thin film configurations of strain and oxygen vacancies which could provide an atomic engineering path towards topological phases and transitions, however the topic is still at its infancy. This project aims to tackle this issue using simulation techniques efficient of providing an experimentally realistic scenario of the quantum mechanisms such as the octahedral distortion and bandwidth in OH.

DFT simulations on the study of the dielectric function of novel nanostructured materials

Francesca Peiró. Universitat de Barcelona. [Proyecto soportado en CéntiS procedente de la Red Española de Supercomputación]

In the present work, the anisotropic electrical conductivity of GaInP CuPtB type ordered layers will be assessed by using in-situ biasing in a Transmission Electron Microscopy (TEM). The electrical conductivity of GaInP thin films with different degree of order (controlled by the amount of Sb flux during the growth) will be measured in the orthogonal [110] and [1-10] directions. The anisotropy will be evaluated as a function of the density of ordered domains and antiphase boundaries and the results will be discussed in the light of DFT simulations.

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.

Estudio, desde un punto de vista teórico, de 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.

Estudios teóricos cinéticos y dinámicos usando superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos

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. Grupo de investigación GCYDEX, 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. 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, 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 una Tesis Doctoral.
- Investigaciones sobre el sistema Cl+NH3, con una complicada topologia en la superficie de energia potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH3, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremanera la construcción de la superficie.

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 de investigación QUOREX, Universidad de Extremadura.

QUOREX está integrado por docentes e investigadores cuyas líneas de trabajo se encuentran financiadas a través de proyectos nacionales y regionales. 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; y modelización de las interacciones de glicolípidos y sustancias anfipáticas derivadas de carbohidratos con superficies metálicas. Entre los objetivos alcanzados en este proyecto destacan los siguientes:

- Una de las líneas de investigación se ha centrado en la síntesis y estudio estructural de bases de Schiff generadas por condensación de aldehídos aromáticos con aminas de diferente naturaleza (aromáticas, alifáticas, aminopolioles y aminoheterociclos). El estudio estructural, basado en experiencias de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear, se ha completado con estudios teóricos llevados a cabo a nivel DFT, en fase gaseosa y en disolución, que han permitido realizar un completo análisis de los equilibrios imina-enamina en disolución y en estado sólido.
- Se ha realizado el estudio de los equilibrios tautoméricosimina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioltris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G* y M06-2X/6-311++G** se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la tranformaciónimina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación (< 8 kcal.mol-1). A través de un 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 encaja 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. El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. 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. 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.

High-throughput search of dopants for efficient ferroelectric oxide based solar cells

Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla. [Proyecto soportado en CéntiS procedente de la Red Española de Supercomputación]

Photovoltaics, PV, devices performance are based on 3 main features: a) efficient light absorption, b) effective charge separation and c) fast transport and charge extraction. Conventional solar cells are good light harvesters but are limited by the Shockley-Queisser limit because carriers are separated by the internal electric field at the p-n junction. Ferroelectric materials, on the other hand, present a spontaneous electric polarization, providing an alternative way to separate excited carriers. Ferrolectric oxide perovskites also present hindrances that should be overcome. Reducing the bandgap from 2-3 eV to 1.5 eV is the main goal, being doping or substitution of the A and B sites, the most common strategy. In this activity, we strive to use high-throughput techniques to tune the bandgap of ferroelectric oxides by doping.

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.

The mechanism of the two-step spin-transition of a thiazyl-diradical-based material presenting geometrical frustration.

Juan Jose Novoa Vide. Facultat de Química. Universitat de Barcelona. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]

Recent years have witnessed a growing interest in the research of molecular materials that can be switched between two different states through the application of an external stimulus (e.g. heat, light) because these materials have a great potential for application in sensors, displays and in information technology.

The main goal of this Activity is to understand the mechanisms underlying the two-step spin transition of a recently-prepared material made of bis-dithiadiazolyl diradicals and to decipher the origin of the geometrical frustration of one of its phases. Our results will provide useful insights on how to properly harness labile pi-pi interactions in stacks of diradicals in order to develop new diradical-based switchable materials.

CIENCIAS INFORMÁTICAS Y DE COMUNICACIONES

Factoría de Innovación / Aldealab

Excmo. Ayuntamiento de Cáceres.

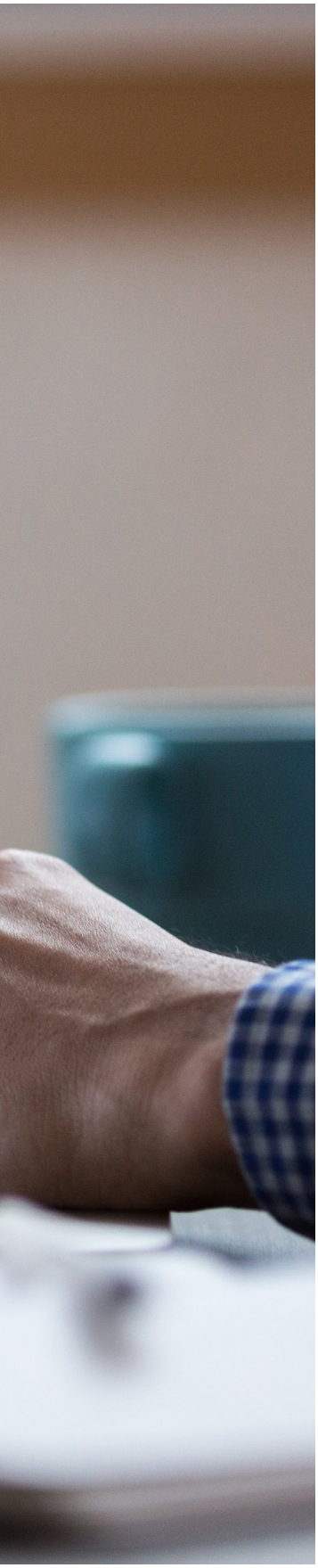
Aldealab, Centro del Conocimiento del Ayuntamiento de Cáceres, está integrado por los edificios municipales Embarcadero y Garaje 2.0. Se concibió como un espacio-laboratorio que recoge la huella de la revolución industrial y de la explotación minera en la ciudad durante los siglos XIX y XX, y la proyecta hacia la vocación innovadora del siglo XXI, sustituyendo la extracción de minerales por la de talento y conocimiento.

La Factoría de Innovación es una comunidad virtual de emprendedores, que busca conectar innovación y talento para generar nuevas oportunidades de negocio.

Se trata de un lugar de encuentro y reunión en el que se puede encontrar información sobre lo último en innovación, creactividad, tecnológica, modelos de negocio, y posibilidades para pymes y emprendedores. Principalmente, agrupa a miembros de la región de Extremadura y la zona del Alentejo portugués, aunque se encuentra abierta a más regiones españolas.

Objetivos

- Creación de una comunidad virtual de empresas y empresarios que apuestan por la innovación denominada “Factoría en Red”.
- La internacionalización de la estructura y el concepto.
- La puesta en funcionamiento de un canal de información del conocimiento que se genera en la Factoría de Innovación.
- Un punto de cooperación entre los diferentes actores, anulando los costes para ello y permitiendo la colaboración entre empresas de distintos sectores y países.
- Un generador y difusor de los procesos de innovación abierta (Open Innovation).
- Sin olvidar el factor de rentabilidad: directamente son los usuarios quienes actualizan la información y los contenidos, permitiendo a la estructura estar siempre al tanto de tendencias y novedades.



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

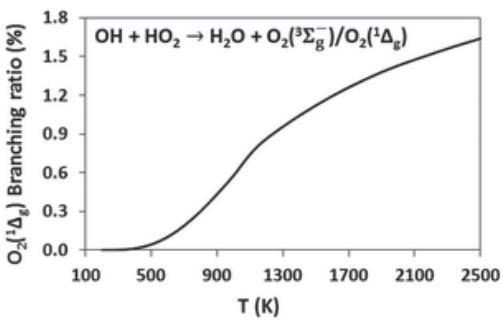
La obtención de resultados de investigación es esencial para un centro de investigación e innovación tecnológica como CénitS, que permite a un destacado número de investigadores e innovadores acometer sus actividades. Muchos de estos proyectos alcanzan una notable visibilidad con publicaciones de diverso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

Esta sección presenta los resultados más destacables que han sido publicados en congresos y revistas durante el año 2018, además de los Trabajos Finales de Grado desarrollados.

PUBLICACIONES EN REVISTAS

Ab initio and transition state theory study of the OH + HO_2 → H_2O + $O_2(^3\Sigma_g^-)$/$O_2(^1\Delta_g)$ reactions: yield and role of $O_2(^1\Delta_g)$ in H^2O^2 decomposition and in combustion of H_2

Monge-Palacios, M., & Sarathy, S. M. (2018). Ab initio and transition state theory study of the OH+ HO_2→ H_2O+ $O_2(^3\Sigma_g^-)$/ $O_2(^1\Delta_g)$ reactions: yield and role of $O_2(^1\Delta_g)$ in H_2O_2 decomposition and in combustion of H_2. Physical Chemistry Chemical Physics, 20(6), 4478-4489. DOI:10.1039/c7cp05850k



Reactions of hydroxyl (OH) and hydroperoxyl (HO_2) are important for governing the reactivity of combustion systems. We performed post-CCSD(T) ab initio calculations at the W3X-L//CCSD = FC/cc-pVTZ level to explore the triplet ground-state and singlet excited-state potential energy surfaces of the OH + HO_2 → H_2O + $O_2(^3\Sigma_g^-)$/$O_2(^1\Delta_g)$ reactions. Using microcanonical and multistructural canonical transition state theories, we calculated the rate constant for the triplet and singlet channels over the temperature range 200-2500 K, represented by $k(T) = 3.08 \times 10^{12}T^{0.07} \exp(1151/RT) + 8.00 \times 10^{12}T^{0.32} \exp(-6896/RT)$ and $k(T) = 2.14 \times 10^{6}T^{1.65} \exp(-2180/RT)$ in cm^3 mol^{-1} s^{-1}, respectively. The branching ratios show that the yield of singlet excited oxygen is small (<0.5% below 1000 K). To ascertain the importance of singlet oxygen channel, our new kinetic information was implemented into the kinetic model for hydrogen combustion recently updated by Konnov (Combust. Flame, 2015, 162, 3755-3772). The updated kinetic model was used to perform H2O2 thermal decomposition simulations for comparison against shock tube experiments performed by Hong et al. (Proc. Combust. Inst., 2013, 34, 565-571), and to estimate flame speeds and ignition delay times in H_2 mixtures. The simulation predicted a larger amount of $O_2(^1\Delta_g)$ in H_2O_2 decomposition than that predicted by Konnov's original model. These differences in the $O_2(^1\Delta_g)$ yield are due to the use of a higher ab initio level and a more sophisticated methodology to compute the rate constant than those used in previous studies, thereby predicting a significantly larger rate constant. No effect was observed on the rate of the H_2O_2 decomposition and on the flame speeds and ignition delay times of different H_2-oxidizer mixtures. However, if the oxidizer is seeded with O_3, small differences appear in the flame speed. Given that $O_2(^1\Delta_g)$ is much more reactive than $O_2(^3\Sigma_g^-)$, we do not preclude an effect of the singlet channel of the titled reaction in other combustion systems, especially in systems where excited oxygen plays an important role.

Computational Screening of New Orthogonal Metal-Free Dipolar Cycloadditions of Mesomeric Betaines

de la Concepción, J. G., Ávalos, M., Cintas, P., & Jiménez, J. L. (2018). Computational Screening of New Orthogonal Metal Free Dipolar Cycloadditions of Mesomeric Betaines. Chemistry–A European Journal 24(29),7507-7512. DOI: 10.1002/chem.201800869

Computational strategies have gained increasing impact in the de novo design of large molecular sets targeted to a desired application. Herein, DFT-assisted theoretical analyses of cycloadditions, involving mesoionic dipoles and strained cycloalkynes, unveil a series of unexplored mesomeric betaines as vastly superior candidates for orthogonal applications. Thus, isosydnones; thiosydnones; and a six-membered homolog, 6-oxo-1,3-oxazinium-4-olate, exhibit enhanced reactivity with respect

to sydnone, which is the archetypal mesoionic ring employed so far in orthogonal chemistry. These compounds were found by assessing energy barriers and transition structures, which are largely governed by electron fluxes from dipolarophile to dipole and noncovalent interactions. Charge-transfer analysis also accounts for previous experimental and theoretical results gathered in the literature, and provides a rationale for further substitution variations. The above naked dipoles release only CO_2 as a byproduct through retro-Diels–Alder of the resulting cycloadducts. These results should invite practitioners to look at such underestimated dipoles and could also help to minimize the number of experiments.

Discovery of nonnucleoside inhibitors of polymerase from infectious pancreatic necrosis virus (IPNV)

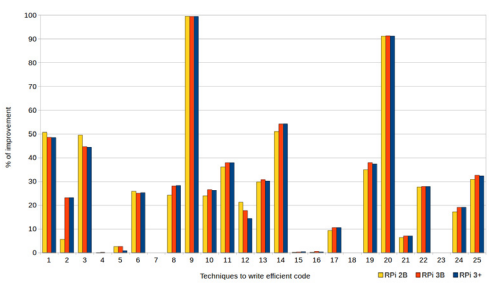
Bello-Pérez, M., Falcó, A., Galiano, V., Coll, J., Perez, L., & Encinar, J. A. (2018). Discovery of nonnucleoside inhibitors of polymerase from infectious pancreatic necrosis virus (IPNV). Drug design, development and therapy, 12, 2337.DOI: 10.2147/DDDT.S171087

Infectious pancreatic necrosis virus (IPNV) causes serious losses in several fish species of commercial interest. IPNV is a non-enveloped double-stranded RNA virus with a genome consisting of two segments A and B. Segment B codes for the VP1 protein, a noncanonical RNA-dependent RNA polymerase that can be found both in its free form and linked to the end of genomic RNA, an essential enzyme for IPNV replication. We take advantage of the knowledge over the allosteric binding site described on the surface of the thumb domain of Hepatitis C virus (HCV) polymerase to design new non-nucleoside inhibitors against the IPNV VP1 polymerase. Molecular docking techniques have been used to screen a chemical library of 23,760 compounds over a defined cavity in the surface of the thumb domain. Additional ADMET (absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity) filter criteria has been applied. We select two sets of 9 and 50 inhibitor candidates against the polymerases of HCV and IPNV, respectively. Two non-toxic compounds have been tested in vitro with antiviral capacity against IPNV Sp and LWVRT60 strains in the low µM range with different activity depending on the IPNV strain used.

Evaluation of Strategies for the Development of Efficient Code for Raspberry Pi Devices

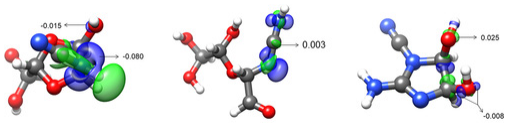
Javier Corral-García, José-Luis González-Sánchez and Miguel-Ángel Pérez-Toledano. Evaluation of Strategies for the Development of Efficient Code for Raspberry Pi Devices. Sensors 2018, 18(11), 4066. doi:10.3390/s18114066.

The Internet of Things (IoT) is faced with challenges that require green solutions and energy-efficient paradigms. Architectures (such as ARM) have evolved significantly in recent years, with improvements to processor efficiency, essential for always-on devices, as a focal point. However, as far as software is concerned, few approaches analyse the advantages of writing efficient code when programming IoT devices. Therefore, this proposal aims to improve source code optimization to achieve better execution times. In addition, the importance of various techniques for writing efficient code for Raspberry Pi devices is analysed, with the objective of increasing execution speed. A complete set of tests have been developed exclusively for analysing and measuring the improvements achieved when applying each of these techniques. This will raise awareness of the significant impact the recommended techniques can have.



Formation of Cyanamide-Glyoxal Oligomers in Aqueous Environments Relevant to Primeval and Astrochemical Scenarios. A Spectroscopic and Theoretical Study

Lavado, N., García de la Concepción, J., Babiano, R., & Cintas, P. (2018). Formation of Cyanamide–Glyoxal Oligomers in Aqueous Environments Relevant to Primeval and Astrochemical Scenarios: A Spectroscopic and Theoretical Study. Chemistry–A European Journal, 24(16), 4069-4085. DOI:10.1002/chem.201705747

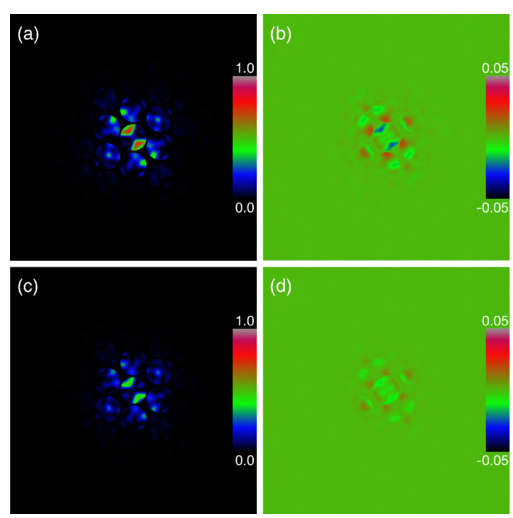


The condensation of cyanamide and glyoxal, two well-known prebiotic monomers, in aqueous phase has been investigated in great detail, demonstrating the formation of oligomeric species of varied structure, though consistent with generalizable patterns. This chemistry involving structurally simple substances also illustrates the ability of building molecular complexity under prebiotically plausible conditions, not only on Earth but also on extraterrestrial scenarios. We show that cyanamide-glyoxal reactions in water lead to mixtures comprising both acyclic and cyclic fragments, largely based on fused five- and six-membered rings, which can be predicted by computation. Remarkably, such a mixture could be identified using high-resolution electrospray ionization (ESI) mass spectrometry and spectroscopic methods. A few mechanistic pathways can be postulated, most involving the intermediacy of glyoxal cyanoimine and further chain growth, thus increasing the diversity of observed products. This rationale is supported by theoretical analyses with clear-cut identification of all the stationary points and transition structures. The properties and structural differences of oligomers obtained under thermodynamic conditions in water versus those isolated by precipitation in organic media are also discussed.

Mechanistic studies of 1,3-dipolar cycloadditions of bicyclic thioisomünchnones with alkenes. A computational rationale focused on donor-acceptor interactions

de la Concepción, J. G., Ávalos, M., Cintas, P., Jiménez, J. L., & Light, M. E. (2018). Organic & biomolecular chemistry, 16(18), 3438-3452. Doi: 10.1039/c8ob00683k.

This paper describes a mechanistic study, with the interplay of experiment and theory, on the cycloadditions of a bicyclic mesoionic 1,3-dipole versus a series of representative symmetrical (1-phenyl-1H-pyrrole-2,5-dione and dimethyl maleate) and asymmetrical [(E)-(2-nitrovinyl)benzene, acrylonitrile, and but-3-en-2-one] olefinic dipolarophiles. These results allow a comparative analysis with monocyclic dipoles and open further avenues to structurally diversified heteroatom-rich rings. The unichiral version of the bicyclic dipole leads to adducts containing up to five chiral centers, whose formation proceeds with high levels of facial stereoinduction in reactions involving bulky dipolarophiles. The second and largest part of this study provides a theoretical interrogation on the pericyclic mechanism with DFT-methods [M06-2X/6-311++G(d,p)]. In order to get further mechanistic insights, we have also explored charge transfers between reaction partners using NBO analysis, which satisfactorily justifies the stereochemical outcome.



Neural-network-based depth-resolved multiscale structural optimization using density functional theory and electron diffraction data

Pennington, R. S., Coll, C., Estradé, S., Peiró, F., & Koch, C. T. (2018). Neural-network-based depth-resolved multiscale structural optimization using density functional theory and electron diffraction data. Physical Review B, 97(2), 024112. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.024112

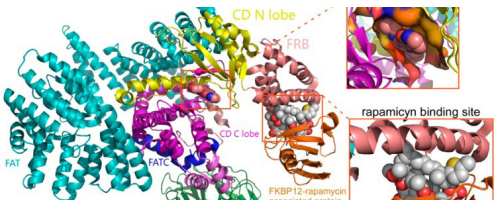
Iterative neural-network-based three-dimensional structural optimization of atomic positions over tens of nanometers is performed using transmission electron microscope (TEM) diffraction data simulated from density functional theory (DFT) all-electron densities, thus retrieving parameter variations along the beam direction. We first use experimental data to show that the GPAW DFT code's all-electron densities are considerably more accurate for electron diffraction calculations compared to conventional isolated-atom scattering factors, and they also compare well to Wien2K DFT simulations.

This DFT-TEM combination is then integrated into an iterative neural-network-optimization-based algorithm (PRIMES, parameter retrieval and inversion from multiple electron scattering) to retrieve nanometer-scale ferroelectric polarization domains and strain in theoretical bulklike specimens from TEM data. DFT and isolated-atom methods produce substantially different diffraction patterns and retrieved polarization domain parameters, and DFT is sufficient to retrieve strain properties from a silicon specimen simulated using experimentally derived structure factors.

Thus, we show that the improved accuracy, fast computation, and intuitive integration make the GPAW DFT code well suited for three-dimensional materials characterization and demonstrate this using an iterative neural-network algorithm that is verifiable on the mesoscale and, with DFT integration, self-consistent on the nanoscale.

New Mammalian Target of Rapamycin (mTOR) Modulators Derived from Natural Product Databases and Marine Extracts by Using Molecular Docking Techniques

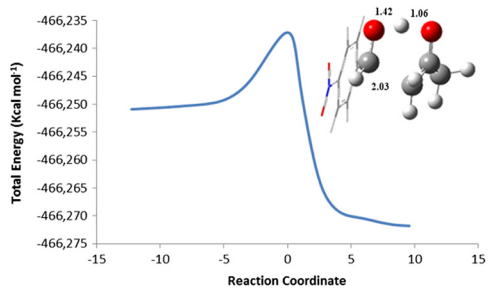
Ruiz-Torres, V., Losada-Echeberría, M., Herranz-López, M., Barrajón-Catalán, E., Galiano, V., Micol, V., & Encinar, J. (2018). Marine drugs, 16(10), 385. Doi: 10.3390/md16100385



Mammalian target of rapamycin (mTOR) is a PI3K-related serine/threonine protein kinase that functions as a master regulator of cellular growth and metabolism, in response to nutrient and hormonal stimuli. mTOR functions in two distinct complexes—mTORC1 is sensitive to rapamycin, while, mTORC2 is insensitive to this drug. Deregulation of mTOR's enzymatic activity has roles in cancer, obesity, and aging. Rapamycin and its chemical derivatives are the only drugs that inhibit the hyperactivity of mTOR, but numerous side effects have been described due to its therapeutic use. The purpose of this study was to identify new compounds of natural origin that can lead to drugs with fewer side effects. We have used computational techniques (molecular docking and calculated ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity) parameters) that have enabled the selection of candidate compounds, derived from marine natural products, SuperNatural II, and ZINC natural products, for inhibitors targeting, both, the ATP and the rapamycin binding sites of mTOR. We have shown experimental evidence of the inhibitory activity of eleven selected compounds against mTOR. We have also discovered the inhibitory activity of a new marine extract against this enzyme. The results have been discussed concerning the necessity to identify new molecules for therapeutic use, especially against aging, and with fewer side effects.

On the asymmetric autocatalysis of aldol reactions: The case of 4 nitrobenzaldehyde and acetone. A critical appraisal with a focus on theory

Romero Fernández, MP, Babiano, R, Cintas, P. Chirality. 2018; 30: 445– 456. https://doi.org/10.1002/chir.22805



Under neutral conditions, spontaneous mirror symmetry breaking has been occasionally reported for aldol reactions starting from achiral reagents and conditions. Chiral induction might be interpreted in terms of autocatalysis exerted by chiral mono-aldol or bis-aldol products as source of initial enantiomeric excesses, which may account for such experimental observations. We describe here a thorough Density Functional Theory (DFT) study on this complex and otherwise difficult problem, which provides some insights into this phenomenon. The picture adds further rationale to an in-depth analysis by Moyano et al, who showed the isolation and characterization of bis-aldol adducts and their participation in a complex network of reversible steps. However, the lack of enantiodiscrimination (ees vanish rapidly in solution) suggests, according to the present results, a weak association in complexes formed by the catalysts and substrates. The latter would also be consistent with almost flat transition states having similar heights for competitive catalyst-bound transition structures (actually, we were unable to locate them at the level explored). Overall, neither autocatalysis as once conjectured nor mutual inhibition of enantiomers appears to be operating mechanisms. Asymmetric amplification in early stages harnessing unavoidable enantiomeric imbalances in reaction mixtures of chiral products represents a plausible interpretation.

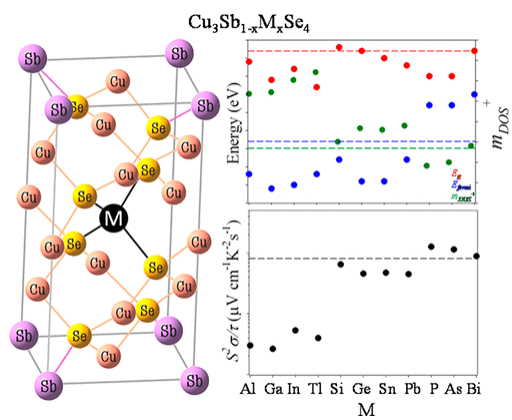
On the dual reactivity of a janus-type mesoionic dipole: Experiments and theoretical validation

de la Concepción, J. G., Ávalos, M., Cintas, P., Jiménez, J. L., & Light, M. E. (2018). On the dual reactivity of a Janus-type mesoionic dipole: experiments and theoretical validation. Organic & biomolecular chemistry, 16(26), 4778-4783. DOI: 10.1039/c8ob01195h

A mesoionic bicycle, easily synthesized from a proteinogenic amino acid, l-leucine, behaves as both thiazolium-olate and diazolium-olate dipoles, as unveiled by its dipolar cycloadditions. This chameleonic reactivity has been thoroughly interpreted by dissecting the mechanistic landscape aided by the distortion-interaction model.

Thermoelectric Properties of Doped-Cu3Sb-Se4 Compounds: A FirstPrinciples Insight

García, G., Palacios, P., Cabot, A., & Wahnón, P. (2018). Thermoelectric Properties of Doped-Cu3SbSe4 Compounds: A First-Principles Insight. Inorganic chemistry, 57(12), 7321-7333. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.8b00980



This work reports the first systematic study of the effects of substitutional doping on the transport properties and electronic structure of Cu3SbSe4. To this end, the electronic structures and thermoelectric parameters of Cu3SbSe4 and Cu3Sb1−xMxSe4 (M = Al, Ga, In, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, P, As, Bi) were systematically

investigated by using density functional theory and the Boltzmann semiclassical transport theory. Substitutional doping at Sb site with IIIA (M = Al, Ga, In, Tl) and IVA (M = Si, Ge, Sn, Pb) elements considerably increases the hole carrier concentration and consequently the electrical conductivity, while doping with M = Bi would be adequate to provide high S values. Changes in calculated thermoelectric parameters are explained based on the effects of the dopant element on the electronic band structure near the Fermi level. We also present an extensive comparison between thermoelectric parameters here calculated and available experimental data. Our results allow us to infer significant insights into the search for new materials with improved thermoelectric performance by modifying the electronic structure through substitutional doping.

Publicaciones en congresos

A New Role for Supercomputing Centers in Open Science

Luis Ignacio Jiménez, Jesús Calle-Cancho, David Cortés-Polo and José Luis González Sánchez. A New Role for Supercomputing Centers in Open Science. IBERGRID 2018. Lisbon, Portugal. October 2018.

The ever demanding scientific community aims for new platforms and services up to date in order to diminish the inconveniences that have arisen due this same growth. The guidelines provided by the Open Science (OS), despite being a concept already discuss for some time, set out the perfect framework for the creation of new applications and platforms in which the research centers might take over from the responsibility exercised so far by the publishers to allocate resources for disclosure and distribution without replace them. In particular Open Access (OA), Open Data (OD) and Open Methodologies (OM) are the guidelines that can fit the most in the current tasks performed by supercomputing and research centers where availability, reliability and security are concepts well implemented already and can be very powerful skills to them in order to step in the spotlight in this new framework which is OS. In this paper it is proposed a path to follow by the supercomputing centers, within the framework of European Open Science, to share resources with the aim of providing an adequate infrastructure for the development of scientific research, adding to their current competences the ability to become neutral ground for scientific disclosure.

Compilador source-to-source, para la paralelización automática de códigos secuenciales, orientado a la gestión eficiente de recursos en centros de Computación de Alto Rendimiento

Javier Corral García, José Luis González Sánchez y Miguel Ángel Pérez Toledano. Avances en arquitectura y tecnología de computadores, actas de las Jornadas SARTECO 2018. Teruel, España. 12-14 septiembre, 2018. ISBN: 978-84-09-04334-7. pp 321-328.

La Computación de Alto Rendimiento supone una potente herramienta para dar solución a proyectos de elevada complejidad que de otra forma no podrían ser afrontados. Sin embargo, desarrollar programas paralelos que aprovechen sus beneficios, haciendo un uso adecuado y eficaz de los recursos de cómputo disponibles, resulta complejo para investigadores, de diversas ramas de la ciencia, que no presentan experiencia previa en la programación paralela.

Por ello, se ha desarrollado un transcompilador que, mediante aprendizaje supervisado, entrenado con la ayuda de un sistema de apoyo a la toma de decisiones, persigue equilibrar el uso eficiente de los recursos en este tipo de centros, con la necesidad de sus usuarios de obtener resultados en tiempos adecuados, mediante la paralelización automática de códigos secuenciales enfocada a la formación de nuevos usuarios en el ámbito de la programación paralela.

TRABAJOS FINALES DE GRADO

Estudio y análisis de nuevos mecanismos para redes inalámbricas de próxima generación haciendo uso de técnicas de computación de altas prestaciones.

José Javier Rico Palomo. TFG en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.

Se están realizando avances en la infraestructura de red existente para dar cobertura a la creciente demanda de capacidad que se producirá en un futuro cercano. Además, están apareciendo numerosos mecanismos para incrementar la capacidad de la red. No todos estos mecanismos son rentables desde el punto de vista económico. Conseguir un equilibrio entre el despliegue eficiente de las estaciones base y los costes asociados a dicho despliegue no es una tarea sencilla, por lo que aparece la necesidad de elevada capacidad de cómputo como la que proporcionan los centros de supercomputación.

Este proyecto se propone un estudio y un análisis del despliegue de mecanismos de nivel físico, considerando cuál es el grado de influencia sobre los niveles superiores, desde el punto de vista del rendimiento y de los costes económicos asociados a los despliegues. El principal objetivo es analizar el comportamiento de distintos mecanismos de nivel físico propuestos para las redes de próxima generación, para incrementar la capacidad y rendimiento.

Para ello, se plantean los siguientes objetivos específicos: estudiar la geometría de celdas propuesta para 5G; diseñar e implementar un despliegue de celdas lo más cercano a la realidad posible, para redes de próxima generación; estudiar y analizar la integración entre el despliegue de nivel físico y la propia red troncal; integrar los mecanismos de nivel físico en un entorno de computación de altas prestaciones para analizar y comparar dichos mecanismos de manera eficiente.

Para conseguir los citados objetivos, se propone la implementación de un framework que permita configurar los parámetros clave relacionados con el nivel físico en redes 5G, además de generar una topología de nivel físico capaz de emular un canal de propagación real con sus respectivos radioenlaces, pérdidas y distorsión, permitiendo llevar a cabo pruebas de rendimiento, sacar resultados y probar todas aquellas modificaciones que se deseen a los mecanismos propuestos.

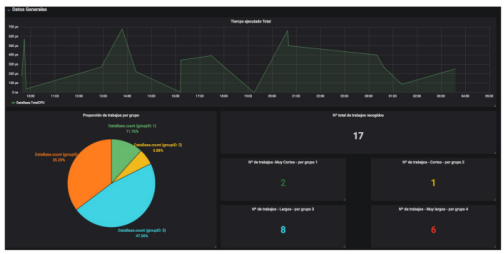
Dicho framework, también ofrece la posibilidad de generar todo lo necesario para lanzar ejecuciones de los mecanismos implementados sobre el supercomputador LUSITANIA II, haciendo uso del gestor de recursos para clústeres SLURM. Para ello se han implementado una serie de funcionalidades que permiten a la máquina local, con conexión a Internet, lanzar los ficheros de ejecución en el sistema remoto de LUSITANIA II.

Las conclusiones obtenidas reflejan la utilidad de las simulaciones software ante problemas con gran cantidad de variables que, junto con el uso de sistemas de computación de altas prestaciones, permite reducir el tiempo de ejecución, así como la posibilidad de utilizar más variables para las simulaciones. Además, según las pruebas realizadas, los modelos de canal de propagación propuestos para redes de próxima generación tienen un comportamiento estable y cercano a la realidad.

El estudio y la comparativa de dichos modelos permite clasificarlos y darle distinto uso según el escenario simulado (in-door, UMi, UMa, etcétera) modificando los parámetros de los mismos, sin necesidad de recurrir a otro estudio del canal de propagación para modelar distintas situaciones. Las pruebas ejecutadas sugieren también un aumento de los costes económicos, asociados al despliegue y el mantenimiento de la infraestructura de la tecnología de próxima generación con respecto a la tecnología actual.

Implementación de un sistema para el control de consumos energéticos en entornos HPC

Manuel José Casillas Ramos. TFG en Ingeniería Informática en Ingeniería de Computadores, Universidad de Extremadura



La eficiencia energética es cada vez más importante en la administración de recursos, debido principalmente a los costes ambientales que implica su uso. Sectores como el del automóvil, la edificación, o la planificación urbanística, entre otros, persiguen el uso inteligente de los recursos que, junto con avances tecnológicos y la monitorización de diversos parámetros, permitan minimizar el consumo de recursos necesario para su funcionamiento.

Los sistemas de cómputo avanzado son herramientas muy valiosas en la actualidad, ya que proveen servicios de todo tipo, siendo el apoyo a la investigación quizás el más destacable. Estos sistemas también se ven afectados por esta necesidad de reducir los recursos necesarios para su funcionamiento, ya que su uso implica enormes requerimientos energéticos, principalmente condicionados por la refrigeración de los componentes que los conforman.

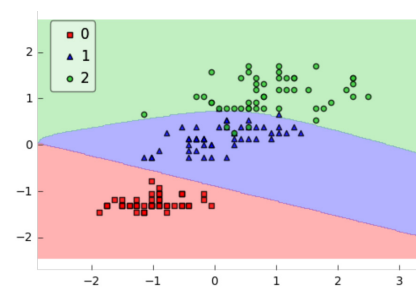
Conseguir la capacidad de gestionar esos recursos de forma inteligente, se convierte en una tarea interesante a la par que necesaria, tanto para reducir y ajustar el consumo energético que implica, así como mejorar la eficiencia de su funcionamiento.

El objetivo fundamental de este proyecto es la implementación de un sistema de registro de diversos datos de los trabajos lanzados en un supercomputador, mediante el uso de herramientas como Slurm o Grafana. La finalidad de los datos almacenados es la elaboración de estadísticas, así como la implementación de una capa de aprendizaje automático, la cual servirá como plataforma para el impulso de proyectos y avances futuros sobre la materia.

Este objetivo general se desglosa en los siguientes objetivos específicos:

- Creación de un dataset con los datos de los trabajos lanzados en el supercomputador, mediante el uso de diversos scripts desarrollados con el lenguaje de programación Python.
- Almacenamiento de los datos capturados en dos sistemas, el primero para su monitorización mediante la representación gráfica de diversos factores y el segundo destinado al tratamiento de los mismos mediante técnicas de Machine Learning.
- Visualización de los datos recopilados para facilitar la monitorización por los responsables de la infraestructura.
- Aplicación de algoritmos de Machine Learning a los datos recopilados.
- Desarrollar diferentes herramientas que faciliten la gestión de los recursos mediante la visualización de información relevante para la optimización de la eficiencia y el consumo de recursos.

Tras el análisis de los resultados obtenidos, se comprueba que gracias a la información que facilitan, se puede utilizar un planificador de cola, que consiga la optimización del uso del supercomputador mediante la ordenación de los trabajos según su tipo, pudiendo reducir así su consumo.



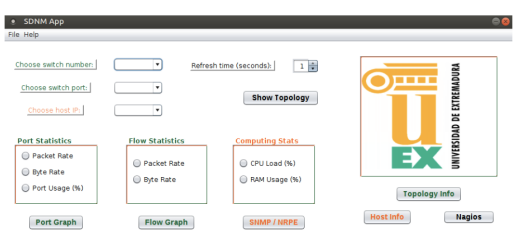
Mecanismos de monitorización y análisis de tráfico en redes de próxima generación

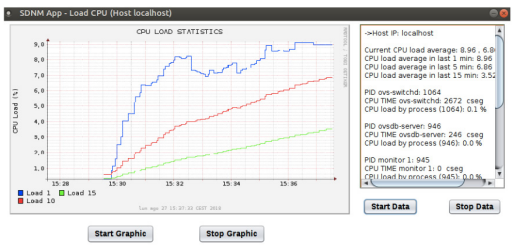
Daniel González Sánchez

El objetivo principal de este proyecto es investigar nuevos mecanismos de monitorización y análisis de flujo, así como desarrollar una nueva herramienta que posibilite la monitorización del tráfico y de cómputo, representando gráficamente los datos en un entorno de redes de próxima generación de tipo programables SDN (Software Defined Networking). La monitorización del tráfico deberá de ser detallada, hallando métricas o estadísticas en base a datos recogidos directamente de las entradas de flujo en los dispositivos de la infraestructura de red (plano de datos) y en relación a la información que fluya por sus respectivos nodos. El análisis de cómputo se realizará sobre los dispositivos finales de la infraestructura de red, centrándonos sobre todo en la carga de recursos y uso de memoria. La información monitorizada de la red será analizada y representada en tiempo real.

Se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Estudio del funcionamiento de tecnologías SDN y OpenFlow.
- Estudio de mecanismos de monitorización clásicos y nuevos mecanismos para redes de próxima generación.
- Investigación de distintas soluciones para la monitorización de tráfico y cómputo en redes SDN.
- Desarrollo de aplicación de monitorización y visualización de datos para redes SDN.
- Simulación de monitorización de la red, emulando la topología de red SDN.
- Estudio práctico del sistema de monitorización en un entorno más sofisticado.
- Análisis de las métricas o resultados de monitorización obtenidos.





La aplicación desarrollada SDNM consigue extraer información significativa de redes SDN, combinando métodos tradicionales de monitorización con las facilidades que aporta el protocolo OpenFlow a los controladores SDN para administrar el plano de datos o datapath de la red. Además, presenta una innovadora técnica de monitorización que extrae información sobre diferentes niveles de agregación para redes SDN: tráfico de datos obtenido a través de los puertos y tablas de flujo de los switches datapath y consumo computacional sobrecarga de CPU y utilización de memoria RAM en los dispositivos terminales o hosts de la red.

Utilizando una API REST, que permite conectar la aplicación de gestión SDNM con el controlador SDN, se obtiene en tiempo real información estadística o métricas sobre el tráfico de datos generado en el plano de datos de la red. Estas métricas son calculadas a partir de los datos o contadores extraídos directamente desde los switches de la infraestructura de red y obtenidos desde el controlador SDN gracias al protocolo OpenFlow.

Tras los análisis de resultados realizados, se comprueba que la herramienta SDNM responde a diferentes situaciones o escenarios de topología de red SDN y permite determinar y representar en tiempo real el tráfico de datos producido entre los switches datapath y el consumo computacional existente en los equipos terminales de la red. Esto permite al administrador de red gestionar parámetros óptimos sobre el tráfico de datos y el consumo de recursos en los dispositivos de la infraestructura de red para analizar el estado de la red SDN en tiempo real.

Sistema ciberfísico para la optimización de una explotación agropecuaria

Juan Francisco Bermejo Martín

El presente TFG desarrolla un sistema ciberfísico que mediante el uso de sensores, dispositivos y una aplicación informática, permitirá obtener información detallada del cultivo del suelo y de variaciones climáticas más específicas que las técnicas de agricultura tradicional. El sistema forma parte del proyecto CultivData, para aumentar la eficiencia agraria en la Comunidad Autónoma de Extremadura. El objetivo general es la obtención de datos del medio en el que se desarrollan explotaciones agropecuarias para que pasen a formar parte de las fuentes de datos abiertos y públicos necesarios para la puesta en marcha de la plataforma CultivData. Estos persiguen que los actores involucrados en la industria agroalimentaria extremeña puedan tomar decisiones mejor informados y que conlleven una optimización de la calidad, productividad y comercialización de sus explotaciones y productos derivados de las mismas.

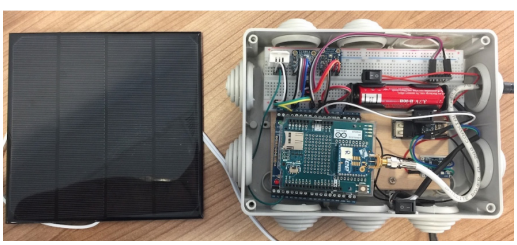
El proyecto se puede desglosar en los siguientes objetivos específicos:

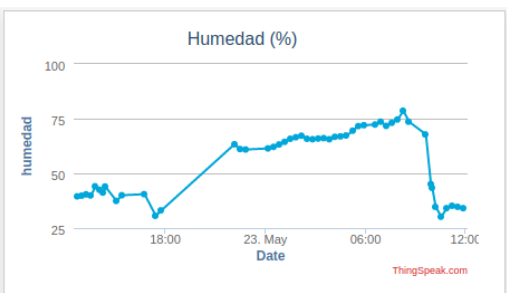
- Medir magnitudes que puedan afectar a la eficiencia de la explotación agropecuaria, siendo flexible y adaptable a las características de cada localización.
- Poner los datos recogidos a disposición de la plataforma CultivData para aplicar las técnicas necesarias para la obtención de información.
- Construir nodos con tal entidad y resistencia física que puedan instalarse en el exterior, donde pueden estar sometidos a agentes atmosféricos o físicos que puedan alterar su funcionamiento. Mediante la instalación de los componentes en elementos que los recojan y que aporten esa resistencia necesaria para garantizar su funcionamiento.
- Obtener la mayor independencia posible de los nodos en lo que refiere a instalaciones físicas, como pueden ser las de energía para su alimentación o las de redes de comunicaciones para el envío de datos.
- Construir un nodo de sensores con un coste bajo, marcado en los requisitos del proyecto CultivData.

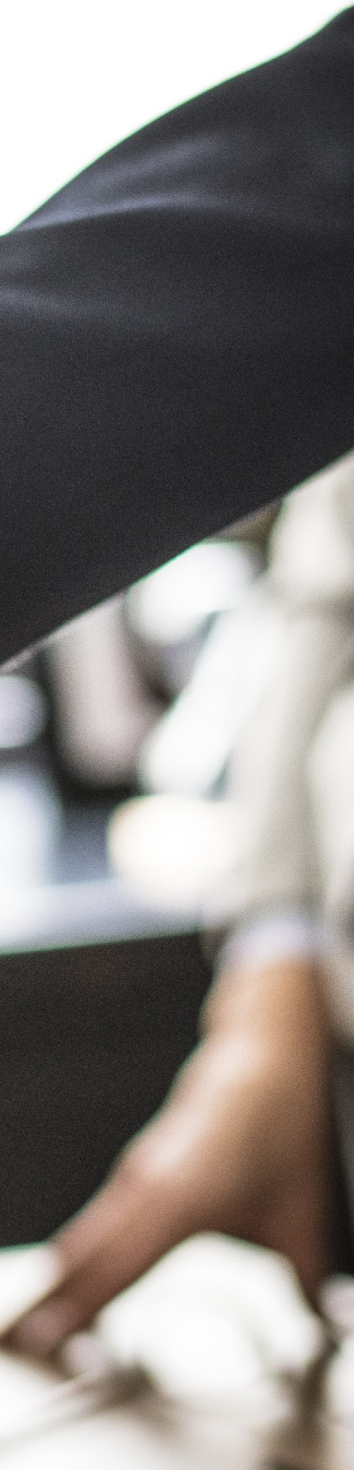
Con la realización de este proyecto se ha comprobado en primer lugar la flexibilidad que proporcionan las plataformas de hardware abierto. Éstas cuentan con amplia documentación y componentes de uso muy extendido que proporcionan una utilidad muy amplia, cuyo límite es la imaginación.

También se ha comprobado cuán fácil es conseguir datos del medio, y la importancia que éstos, con unos tratamientos sencillos para su análisis, pueden llegar a tener en la toma de decisiones.

Estos datos, obtenidos, estudiados y transformados en información con herramientas y algoritmos adecuados de Minería de Datos, al ser almacenados en una Base de Datos, todo ello en unos períodos de tiempo tales que permitan la obtención de relaciones entre los mismos y los resultados de las cosechas, pueden llegar a potenciar un sector que es fundamental para la sociedad y que se encuentra menos desarrollado técnicamente.







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 2018 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación, destacando las jornadas de puertas abiertas celebradas.

CONVENIOS DE COLABORACIÓN

La **Universidad de Guadalajara** es una institución heredera de una tradición educativa de más de doscientos años de historia que actualmente cuenta con más de 270.000 matriculados, 120.000 de nivel superior y 150.000 de nivel medio superior. El convenio marco de colaboración con la Fundación COMPUTAEX permite la cooperación de ambas entidades en proyectos de investigación, incluyendo acciones específicas conjuntas relacionadas con la supercomputación.

Appentra Solutions es una spin-off de la Universidade da Coruña centrada en el desarrollo de herramientas software de alta calidad que permitan un uso extensivo de las técnicas de computación de alto rendimiento. 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.

El **CCMIJU** (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón) es una institución multidisciplinar dedicada a la investigación, formación e innovación en el ámbito sanitario. Posee una dilatada experiencia en investigación traslacional, en diversos campos de especialización. La Fundación COMPUTAEX y la Fundación CCMI llegaron 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.

El **CESGA** (Centro de Supercomputación de Galicia) 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). Se trata de uno de los principales referentes nacionales en el campo de la supercomputación. CESGA y CénitS firmaron un convenio de colaboración para la realización de acciones específicas conjuntas en diversos ámbitos de sus actividades.

El **CESGA** (Centro de Supercomputación de Galicia) 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). Se trata de uno de los principales referentes nacionales en el campo de la supercomputación. CESGA y CénitS firmaron un convenio de colaboración para la realización de acciones específicas conjuntas en diversos ámbitos de sus actividades.

FUNDESALUD (Fundación para la Formación en Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura) formalizó un convenio con la Fundación COMPUTAEX que permitirá la colaboración de ambas entidades en proyectos de investigación, incluyendo acciones específicas conjuntas como planes de formación complementarios, y de difusión y divulgación de la aplicación de la supercomputación como apoyo a las ciencias de la salud, entre otras.

INTROMAC, el Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción, tiene como objetivo mejorar la competitividad de las empresas, sobre todo de las PYME, en sectores de construcción y piedras naturales de Extremadura, a través de la I+D y actividades de innovación. INTROMAC y CénitS mantienen una fluida relación y cooperación en numerosos ámbitos comunes de actividad, entre los que destaca la colaboración en el desarrollo de proyectos de I+D+i.

COMPUTAEX forma parte de **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 Economía, Industria y Competitividad. Esta afiliación permite a COMPUTAEX acceder a un gran número servicios que provee RedIRIS para la comunidad científica.

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

En 2015, CénitS comenzó a formar parte de la **RES** (Red Española de Supercomputación). 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.

SCAYLE, la Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León, es una entidad pública creada por la Junta de Castilla y León y la Universidad de León, que tiene por objeto la mejora de las tareas de investigación de la universidad, los centros de investigación y las empresas de Castilla y León. 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.

CONVENIO CON LA UEX Y COLABORACIÓN EN LOS MÁSTERES TIC

COMPUTAEX y la **Universidad de Extremadura** firmaron un convenio en el año 2011, por el cual colaboran ofreciendo su experiencia y sus recursos, con el fin de dinamizar y fomentar el sector tecnológico de nuestra región.

Desde su creación, CénitS ha dado servicio a más de 50 investigadores de 20 grupos de investigación de la Universidad de Extremadura, ofreciendo su infraestructura para la ejecución de proyectos de investigación y desarrollando otros en colaboración con estos grupos.

Los Másteres TIC impartidos por la UEx surgieron para dar respuesta a la demanda, por parte de empresas y organizaciones, de profesionales especializados en el sector TIC. COMPUTAEX y CénitS colaboran impartiendo docencia en la asignatura “Computación de Altas Prestaciones” del Máster en Ingeniería Informática.

Además, desde el año 2009, se han concedido 25 becas de formación a estudiantes de distintas titulaciones de la Universidad de Extremadura, directamente relacionadas con las Tecnologías de la Información y la Comunicación. Estas becas tienen como objetivo la colaboración en proyectos de investigación desarrollados en CénitS.

COMPUTAEX ofrece también la posibilidad de la realización de prácticas externas extracurriculares, unas actividades de naturaleza formativa realziadas por los estudiantes de Grado o Máster de la Universidad de Extremadura durante su periodo de formación académica, que favorecen la adquisición de competencias que les preparan para el ejercicio de actividades profesionales, faciliten su empleabilidad y fomenten su capacidad de emprendimiento.

DERECHO TECNOLÓGICO E INFORMÁTICA FORENSE

La Fundación COMPUTAEX participa en la impartición del curso universitario de Experto Profesional en Derecho Tecnológico e Informática Forense (DTIF), de 30 créditos (300 horas). 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 usan los profesionales de estos sectores, y profundicen en las de su propio campo de conocimiento.

El primer bloque del curso está orientado principalmente hacia la informática forense, los procedimientos de extracción y conservación de la prueba, y la redacción y defensa de los informes periciales. A continuación se tratan aspectos de derecho tecnológico y digital, y se profundiza en la búsqueda de las evidencias. La última parte se dedica a aspectos de ciberinteligencia y ciberseguridad, incluyendo IoT, Big Data, etc.. Se presenta además jurisprudencia especiífica tecnológica, así como legislación específica relacionada con la protección de datos o normativa comunitaria.

SEMANA DE LA ADMINISTRACIÓN ABIERTA

Entre el 7 y el 11 de mayo, se celebró en toda España la Semana de la Administración Abierta, una iniciativa para organizar eventos en torno a los principios del Gobierno Abierto: transparencia, participación, rendición de cuentas y colaboración. La semana se enmarcó dentro de las acciones de formación, sensibilización y educación del Tercer Plan de Acción de Gobierno Abierto, respondiendo a la Alianza por el Gobierno Abierto que está siendo impulsada a nivel mundial.

CénitS se sumó a esta iniciativa organizando el evento ***Jornada de puertas abiertas de CénitS-CPD***, gracias al cual fue posible visitar las instalaciones del Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación.

Además, los asistentes tuvieron la oportunidad de participar en una mesa redonda colaborativa en la que se debatió la importancia de los Centros de Procesamiento de Datos (CPD) como repositorios de datos abiertos de alta disponibilidad, seguros, fiables y libres, abordando aspectos relacionados con Open Data, Big Data, Gobierno Abierto, o el almacenamiento de datos de alta disponibilidad, entre otros.

JORNADA DE PRESENTACIÓN DEL PROYECTO HERITAGEN

El miércoles 10 de octubre tuvo lugar, en la Casa de la Cultura de Piornal, la Jornada de presentación del proyecto HeritaGen sobre el estudio de enfermedades hereditarias y la reducción de la ratio de variables de significado incierto mediante técnicas de secuenciación masiva. Se pretende seleccionar un conjunto de personas de poblaciones relevantes, con objeto de realizar un primer estudio informaciones genealógicas, y posteriormente, llevar a cabo secuenciaciones genéticas relativas a aquellas personas que sean susceptibles de portar la enfermedad.

Entre los objetivos de la Jornada destacaron la exposición de los objetivos y el alcance del proyecto, así como la presentación de las entidades participantes en el mismo: el Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres, la Fundación para la Formación e Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura (FundeSalud), y la Fundación COMPUTAEX.

NOCHE EUROPEA DE LOS INVESTIGADORES

La Noche Europea de los Investigadores se celebra anualmente de forma simultánea en más de 300 ciudades y que tiene como objetivo demostrar que la investigación y los avances científicos y tecnológicos están al alcance de todos los públicos. Así, la Universidad de Extremadura ofrece 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 cerca de 100 actividades dirigidas a personas de todas las edades, interesadas en descubrir cuál es el impacto de los avances científicos en nuestra vida diaria.

CénitS estuvo presente, por séptimo año consecutivo, ofreciendo el taller ***Construye tu propio Supercomputador con piezas de LEGO***. Como novedad, en esta ocasión se ofrecieron sesiones prácticas de 20 minutos para un máximo de 10 personas. En ellas los asistentes aprendían a construir un supercomputador compuesto por pequeños ordenadores del tamaño de una tarjeta de crédito y ensamblado con piezas de LEGO. El principal objetivo es aprender a utilizar un clúster doméstico de ordenadores de bajo coste, sobre el que se ejecutarán distintos problemas que típicamente son resueltos gracias a la supercomputación.

SEMANA DE LA CIENCIA

Del 5 al 16 de noviembre se celebró la Semana de la Ciencia en Extremadura, con el objetivo es fomentar el interés de la sociedad extremeña por la ciencia y la tecnología, mediante la realización de actividades en centros de Educación Primaria y Secundaria de la región, centros tecnológicos y de la Universidad de Extremadura. COMPUTAEX ofreció varias visitas guiadas a sus instalaciones, a más de 120 asistentes, presentando, tanto la Fundación, como CénitS y sus supercomputadores. Durante las charlas se expusieron los múltiples beneficios que la supercomputación aporta a la sociedad, principalmente en el ámbito de la investigación, y se mostraron algunos de los proyectos de I+D del Centro.

JORNADAS DE PUERTAS ABIERTAS

Los días 12 y 13 de diciembre se celebraron las jornadas de puertas abiertas ***Proyecto de la Supercomputación en Extremadura: COMPUTAEX, CénitS, LUSITANIA***.

Estuvieron dirigidas a empresas, centros tecnológicos, investigadores y estudiantes interesados en la actualidad y el trabajo diario del centro de supercomputación, las tecnologías de vanguardia y los proyectos de I+D+i de CénitS, así como la evolución del sector TIC en Extremadura.

El acceso fue libre, sin necesidad de inscripción previa y durante la misma se realizaron varias visitas al Centro de Procesamiento de Datos (CPD), donde los asistentes pudieron conocer la infraestructura de CénitS.

El evento contó con la presencia, en el acto de apertura, de D. Francisco Sánchez Margallo, Director Científico del Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús, y con las ponencias de D. Félix Rodríguez Profesor de la Universidad de Extremadura en la Escuela Politécnica de Cáceres, y D.ª Silvia Romero, de la Unidad de Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres.

Gracias al convenio de colaboración firmado en julio de 2018 con la Universidad de Guadalajara en México, también ofrecieron una conferencia D.ª Edna Barba, Secretario de la CGTI (Coordinación Gral. de Tecnologías de Información) de dicha Universidad; D.ª Lizette Robles, Jefa de la Unidad de Diseño de Sistemas y Arquitectura de Software de la CGTI; D.ª Monica Estrada, Responsable de Contabilidad y Finanzas de la CGTI, y D. Hugo Dassaef, Administrador de Servidores y Respaldos.

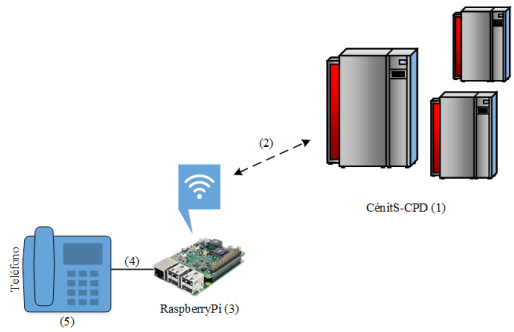
Del mismo modo, el equipo de CénitS ofreció diversas ponencias, realizadas por D. José Luis González, Director General de la Fundación COMPUTAEX; D. Jesús Calle y D. Luis Ignacio Jiménez, de la Unidad Funcional de sistemas y supercomputación de CénitS; D. David Cortés y D. Felipe Lemus, de la Unidad Funcional de redes y comunicaciones de CénitS; D. Javier Corral, de la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación; y D. Juan Francisco Bermejo, becario de investigación de CénitS.

BECAS DE FORMACIÓN

José Javier Rico Palomo

Estudiante del Grado de Ingeniería en Telemática en el Centro Universitario de Mérida. Durante el período de beca en la Fundación realizó diversos trabajos de apoyo a las distintas unidades funcionales.

Concretamente, colaboró en la Unidad Funcional de Sistemas y Supercomputación desarrollando una herramienta para complementar la monitorización del CénitS-CPD.



Mediante la utilización de una Raspberry Pi y un smartphone Android, el sistema comprueba las temperaturas de trabajo de los equipos en funcionamiento, de forma que si se detectan valores anómalos avisa a los técnicos responsables. La principal característica de este sistema es que está totalmente aislado de la propia infraestructura por lo que, aún en caso de que esta interrumpa su funcionamiento normal, este sistema de monitorización puede igualmente alertar de su estado.

También, dentro del trabajo de la beca, se desarrolló un visor de proyectos para el sistema de gestión de colas de trabajo utilizado en el supercomputador LUSITANIA II. Esta aplicación permite, de forma gráfica, consultar los trabajos lanzados por un usuario, así como el estado en que se encuentran.

En relación a la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación, colaboró en la recepción de visitas a las instalaciones de CénitS, incluyendo la ofrecida a la Delegación del Estado de Colima (México), así como en la celebración de las jornadas de puertas abiertas que CénitS realiza cada año.

Además, durante su beca, desarrolló el Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Telemática, titulado *Estudio y análisis de nuevos mecanismos para redes inalámbricas de próxima generación haciendo uso de técnicas de computación de altas prestaciones*.

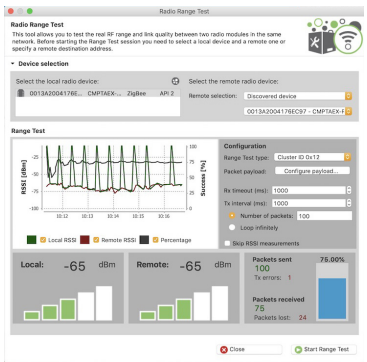
Entre los objetivos marcados para esta beca destacaban los siguientes:

- Desarrollo de un sistema de monitorización con infraestructura independiente.
- Desarrollo de un sistema visor de trabajos para LUSITANIA II.
- Realización y defensa del Trabajo de Fin de Grado.
- Apoyo de las actividades cotidianas realizadas en CénitS.

A continuación se muestran los objetivos más importantes alcanzados gracias a esta beca:

- Puesta en marcha de un sistema de monitorización de funcionamiento de infraestructuras independiente, con sistema de alertas mediante la red de telefonía móvil.
- Desarrollo y despliegue de una herramienta para la visualización de los trabajos lanzados por los usuarios en LUSITANIA II.
- Investigación relacionada con su Trabajo de Fin de Grado de Ingeniería en Telemática
- Participación en eventos realizados por la Fundación.

Juan Francisco Bermejo Martín



Estudiante del Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software en la Escuela Politécnica de Cáceres. Durante el período de beca en la Fundación colaboró en el proyecto CultivData, formándose en el ámbito del Internet de las cosas y el desarrollo de dispositivos de sensorización.

Su trabajo consistió en el diseño y desarrollo de dispositivos de sensorización, utilizando hardware abierto, para la monitorización de diversas magnitudes que se incorporarán a las fuentes de datos con las que ya se está trabajando. Para ello se implementó un prototipo inicial que incluye la toma de medidas de varios sensores y su comunicación mediante radio frecuencia, así como el envío de los datos a los servidores de almacenamiento. De igual modo, se trabajó en otros aspectos determinantes para el prototipo, como el ensamblado de los componentes y la alimentación solar del dispositivo.

Además, colaboró con la captación de datos de fuentes abiertas, así como en la redacción de la documentación del proyecto. Se incluyen también trabajos de difusión del mismo.

De forma paralela, realizó trabajos de investigación en el uso de dispositivos IoT, así como plataformas de captación de datos y herramientas de transmisión de los mismos, junto con técnicas de desarrollo de dispositivos electrónicos.

Respecto a su colaboración con la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación de CénitS, participó en la recepción de visitas a las instalaciones de CénitS, incluyendo la ofrecida a la Delegación del Estado de Colima (México), así como en la celebración de las jornadas de puertas abiertas que CénitS realiza anualmente. Destaca igualmente su colaboración en la impartición del taller *Construye tu propio Supercomputador con piezas de LEGO*, ofrecido con motivo de la Noche Europea de los Investigadores 2018.

En el ámbito académico, desarrolló su Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software, titulado *Sistema ciberfísico para la optimización de una explotación agropecuaria*, como parte del proyecto CultivData, desarrollado por CénitS.

Entre los objetivos marcados para esta beca se encontraban los siguientes:

- Desarrollo de dispositivos de sensorización utilizando hardware abierto.
- Trabajo con fuentes de datos abiertas útiles para el sector agropecuario.
- Realización y defensa del Trabajo de Fin de Grado.
- Apoyo de las actividades cotidianas realizadas en CénitS.

Entre los objetivos alcanzados destacan principalmente los siguientes:

- Diseño y ensamblaje de un primer prototipo de dispositivo de sensorización utilizando hardware abierto, que incorpora comunicaciones por radio frecuencia y alimentación solar.
- Desarrollo de diversas API's que permiten la consulta de datos de fuentes abiertas y su agregación en una plataforma informática.
- Investigación relacionada con su Trabajo de Fin de Grado.
- Participación en eventos realizados por la Fundación.

PORTAL WEB

El Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación y la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura disponen de un portal web corporativo accesible y conforme a los estándares de la W3C, basado en software libre: **www.cenits.es**.

Funciones

- Ofrecer información relativa a la identidad corporativa, actividades desempeñadas, eventos organizados, formación impartida y servicios prestados por el Centro y la Fundación.
- Divulgar noticias y eventos de interés referentes a la supercomputación, investigación e innovación tecnológica.
- Transferir resultados de 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.

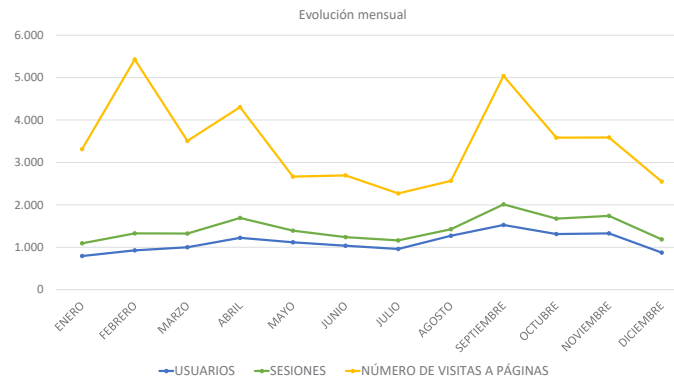
Contenidos

- Canal de noticias relacionadas con la actualidad de CénitS y COMPUTAEX.
- La Fundación: información relativa a COMPUTAEX, el patronato de la Fundación, el perfil del contratante, las memorias anuales editadas por la Fundación desde su creación, los premios y reconocimiento recibidos, así como los casos de éxito publicados y la identidad corportativa. Cabe destacar especialmente nuestro compromiso con la transparencia, a través del correspondiente portal, entendida desde su doble vertiente, como publicidad activa y como acceso a la información pública.
- CénitS: información sobre el Centro y los servicios que ofrece, con especial atención a su infraestructura, entre la que destacan los Supercomputadores LUSITANIA y LUSITANIA II, ofreciendo la posibilidad de solicitar acceso a sus recursos mediante formularios *online*.
- I+D+i: recoge los proyectos a los que ha dado respuesta Cénits desde su creación, así como los resultados de investigación obtenidos en sus proyectos.
- Formación: contiene información sobre las Jornadas de Supercomputación de CénitS, por las que desde el año 2009 han pasado multitud de expertos de reconocido prestigio nacional e internacional. Además, recoge los cursos especializados ofrecidos por el Centro.

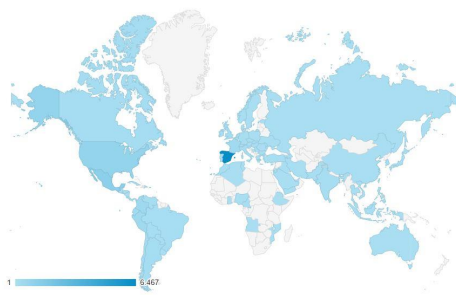
Datos estadísticos

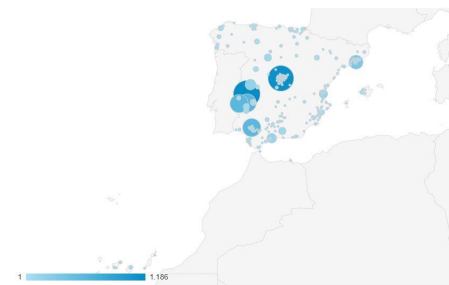
A continuación se muestran los datos estadísticos más relevantes del ecosistema web, relativos al año 2018, según Google Analytics.

Evolución mensual: en la gráfica que se muestra a la derecha, se observan los datos de acceso a la web corporativa organizados por meses, según el número de sesiones realizadas por los usuarios y según el número de visitas a páginas en cada mes.

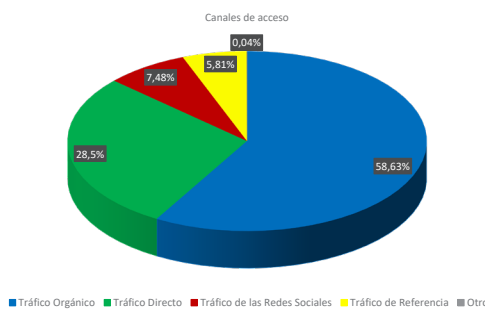


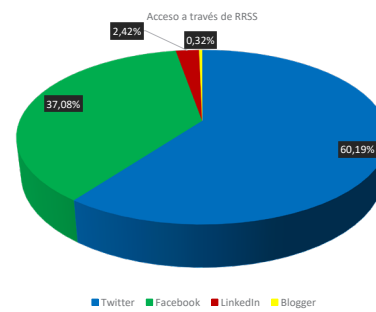
A continuación se muestran los datos relacionados con la ubicación geográfica de los visitantes, que confirman el interés generado a nivel nacional e internacional.





Las siguientes gráficas detallan 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. El esfuerzo de divulgación de noticias y actividades realizadas por la Fundación a través de las redes sociales, también ha contribuido notablemente, siendo Facebook y Twitter los dos motores principales que centralizan la visita a la web corporativa desde estas redes.





REDES SOCIALES

Se ha continuado trabajando en la presencia en las redes sociales, con el objetivo de difundir las noticias más relevantes en torno a Cénits y la Fundación COMPUTAEX, así como a sus proyectos cientítifcos, técnicos y empresariales. Se muestran a continuación las principales:

facebook.com/computaex
Este canal permite divulgar noticias publicadas en la página web, permitiendo que los usuarios participen aportando opiniones y compartiendo la información.

twitter.com/cenits
Posibilita notificiar cualquier evento de interés relacionado con CénitS y COMPUTAEX, manteniendo una relación con los usuarios rápida y flexible.

linkedin.com/company/cenits/
Página orientada a publicitar los servicios ofrecidos por el Centro a una audiencia más especializada.

CénitS COMPUTAEX
Canal para centralizar los vídeos relacionados con la actividad de CénitS, principalmente emitidos por distintos medios de comunicación.

vimeo.com/cenits
Centraliza vídeos de mayor duración, grabados durante los eventos organizados por Cénits, entre los que destacan sus Jornadas de Supercomputación.

issuu.com/cenits
Espacio destinado a la compartición de las publicaciones digitales editadas por el Centro, principalmente sus memorias anuales.

DIFUSIÓN Y DIVULGACIÓN

Durante el año 2018, CénitS ha recibido la visita de más de 600 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, y especialmente universitarios y estudiantes de educación primaria y secundaria. Desde su creación en el año 2009, muchas de 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. El efecto difusor de estas 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	2	4	99

TELEVISIÓN

Fecha	Titular	Fuente
07/03/2018	Rueda de prensa y firma de adenda al convenio de colaboración del proyecto DiPPI	Canal Extremadura Noticias, RTVE Noticias Extremadura

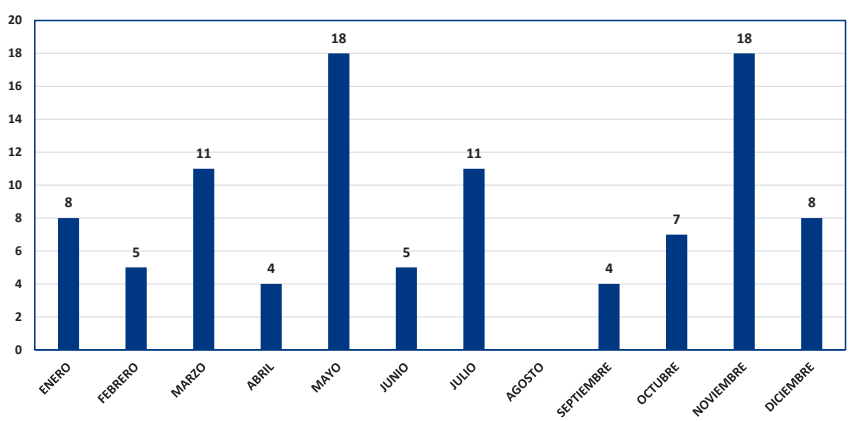
RADIO

Fecha	Titular	Fuente
07/03/2018	Rueda de prensa y firma de adenda al convenio de colaboración del proyecto DiPPI	Cadena COPE Extremadura, Cadena SER Extremadura

PRENSA ESCRITA

Fecha	Titular	Fuente
03/10/2018	Cáceres pilota un estudio sobre un nuevo tratamiento de hemodiálisis	El Periódico Extremadura
29/06/2018	Supercomputación para predecir el cambio climático	Diario Hoy Extremadura
27/08/2018	La Fundación COMPUTAEX oferta dos plazas a tiempo completo	Diario Hoy Extremadura, El Periódico Extremadura

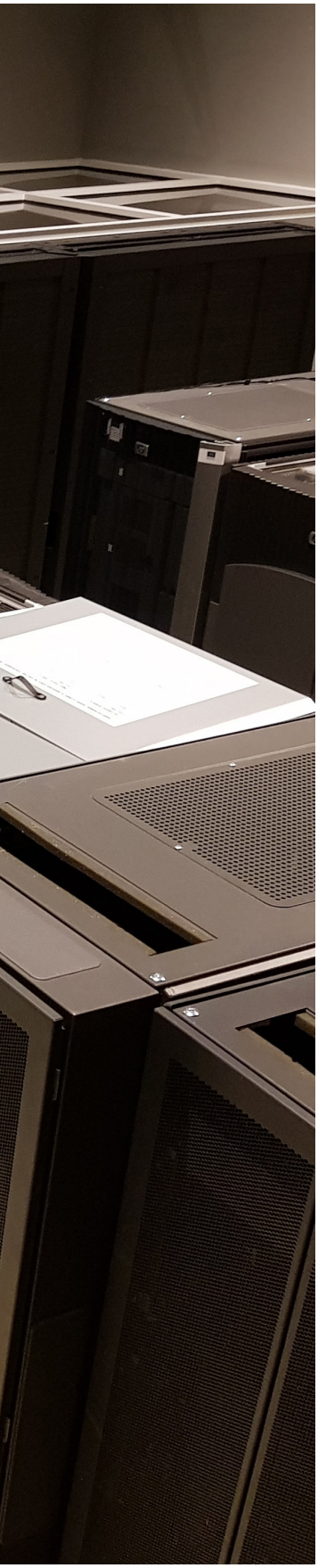
PRENSA DIGITAL



ASISTENCIA A CONGRESOS, JORNADAS, CURSOS Y EVENTOS

Fecha	Nombre	Lugar	Participación
14-15/02/2018	II Jornada docentes de bioinformatica	Facultad de Ciencias de Granada	Asistentes
14-15/02/2018	II Jornadas Docentes en Bio-informática	Facultad de Ciencias, Granada	Asistentess
22-25/02/2018	VII Jornadas de Formación RITSI	Cáceres y Jarandilla de la Vera	Ponentes
27/02/2018	Jornada de Ciberseguridad	Sevilla	Asistentes
05/03/2018	Jornadas informativas sobre la 2ª convocatoria del Programa Interreg V A España- Portugal (POCTEP)	Palacio de congresos de Merida	Asistentes
09/03/2018	Rueda de prensa y firma de adenda al convenio de colaboración del proyecto DiPPI	Palacio de Mayoralgo de Cáceres	Ponentes
16/03/2018	VI Feria Tecnológica	Escuela Politécnica de Cáceres	Ponentes
16/03/2018	7ª Reunión del Consejo de la Red Española de Supercomputación	Universidad Politécnica de Madrid	Asistentes
20/03/2018	Convocatoria para la contratación de Personal de Apoyo a la Investigación en Extremadura	Edificio de I. Universitarios de Investigación, Cáceres	Asistentes
05/04/2018	III Workshop Estudiar Ciencias: creando vocaciones científicas	CPR de Badajoz	Ponentes
26/04/2018	Jornada sobre HPC, Cloud Computing y Big Data	Centro Universitario de Mérida	Ponentes
07/05/2018	Jornada Hispano-Lusa sobre Redes Académicas y de Investigación & E-Ciencia	Universidad de Salamanca	Asistentes
08-10/05/2018	Jornadas técnicas de Red IRIS	Salamanca	Asistentes
11/05/2018	Jornada de puertas abiertas de CénitS-COMPUTAEX	CénitS, Cáceres	Organizadores y Ponentes
23/05/2018	Congreso Datacenter Dynamics	Madrid	Asistentes y Ponentes
24/05/2018	Evento sobre Hacking ético y ciberseguridad	Fundecyt-PCTEX Badajoz	Asistentes
08/06/2018	Jornada Supercomputación para la Competitividad	Junta de Castilla y León, Valladolid	Ponentes
28/06/2018	Reunión del Patronato de la Fundación COMPUTAEX	Mérida	Asistentes
11-12/09/2018	Congreso SARTECO 2018	Escuela Universitaria Politécnica de Teruel	Asistentes y Ponentes

13-14/09/2018	Congreso CincELA	Caixaforum, Madrid.	Asistentes
20-21/09/2018	Jornadas de la Red Española de Supercomputación (RES)	Valencia	Asistentes
10/10/2018	Jornada de presentación del proyecto HeritaGen	Casa de la Cultura de Piornal	Organizadores y Ponentes
11/10/2018	Congreso IBERGRID 2018	Lisboa	Asistentes y Ponentes
16-17/10/2018	Congreso NanoGateway 2018 sobre Nanotecnología	Forum Braga, Portugal	Asistentes
16/10/2018	Jornada Universitaria de Supercómputo	Universidad de Guadalajara, México	Ponentes
22-24/10/2018	IBM Quantalab Quantum Computing School 2018	Braga	Asistentes
06/11/2018	I Jornada de Agroindustria 4.0	Palacio de congresos de Villanueva de la Serena	Asistentes
13/11/2018	Workshop Agricultura de precisión con imágenes satélite, sensorización y Big Data	FEVAL, Don Benito	Asistentes y Ponentes
16/11/2018	Concurso Reto ADA Byron	Centro Universitario de Mérida (UEx)	Patrocinadores y Ponentes
20/11/2018	Jornada CDTICA sobre Transformación Digital en el Sector Energía Renovable	FUNDECYT-PCTEx, Badajoz	Ponentes
21/11/2018	Jornada Tecnología, Empresa y Objetivos de Desarrollo Sostenible - Agenda 2030	Escuela Politécnica de Cáceres	Ponentes
21/11/2018	Reunión del grupo de trabajo TIC de la RIS3	Extremadura Avante, Mérida	Asistentes
22/11/2018	Foro enerTIC: Grandes infraestructuras tecnológicas en la nueva era digital	Hotel Villa Magna, Madrid	Ponentes
22/11/2018	Foro Innova Extremadura 2018	C. de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, CC	Asistentes
27-29/11/2018	46 Grupos de Trabajo y XII Foro de Seguridad de RedIRIS	Ciudad Real	Asistentes
28/11/2018	Reunión de directores, responsables y coordinadores de ICTS de España	CSIC, Madrid	Asistentes
29/11/2018	Reunión del Patronato de la Fundación COMPUTAEX	Consejería de Economía e Infraestructuras, Mérida	Asistentes
04/12/2018	Jornada Oportunidades de financiación en Convocatorias ERA-NET.	Instituto de Salud Carlos III, Madrid.	Asistentes
11/12/2018	Jornada "Prepárate para el siguiente Ciberataque" (IaaS365)	Hotel Ilunion Mérida Palace	Asistentes
12-13/12/2018	Jornadas de Puertas Abiertas: Proyecto de la Supercomputación en Extremadura	CénitS, Cáceres	Organizadores y Ponentes



RECURSOS TECNOLÓGICOS

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 núcleo del Supercomputador, CénitS también dispone de otros recursos tecnológicos para dar servicios de Cloud Computing, Big Data, Machine Learning y Open Data, entre otros, a la comunidad investigadora.

CÉNITS-CPD Y SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA II

En 2009, CénitS comenzó a gestionar LUSITANIA, el primer supercomputador de Extremadura. Desde su puesta en marcha proporcionó 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.

Actualmente, la infraestructura y los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, alojados en su CénitS-CPD, alcanzan una capacidad de cálculo de 90,8 Teraflops. A continuación se detallan sus características técnicas.

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.
- 168 IBM System x iDataPlex dx360 M4 con 2 procesadores Intel E5-2670 SandyBridge-EP, de 8 cores cada uno, a 2.6GHz (16 cores por nodo, 2688 cores en total) 20 MB de caché y 32GB de RAM.
- 2 racks IBM iDPx con RDHX (water cooling) con capacidad para albergar 84 servidores cada uno.

Nodos de cloud computing

- 2 servidores 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 servidor 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 servidores 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.
- 2 servidores 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.
- 4 servidores 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.
- 4 servidores 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.

Nodos con aceleradoras de cómputo

- 1 servidor Fujitsu 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.
- 2 servidores HP ProLiant WS460c G6 Workstation Blade con procesadores HP BL460c G7 Intel Xeon E5645 (2.40GHz/6-core/12MB), 96 GB de memoria RAM por servidor, cuatro discos SAS de 300 GB y dos NVIDIA Tesla M2070Q (448 cuda cores y 6GB GDDR5).
- 2 NVIDIA Tesla M2070Q especializadas en cómputo con conexión PCI Express 2.0, 448 núcleos CUDA a 1150 MHz que disponen de 6GB GDDR5 SDRAM de memoria de vídeo, siendo el consumo operacional de cada una 225w.
- 1 Asus ROG Strix NVIDIA Geforce GTX 1080 Advanced especializada en el manejo de gráficos con conexión PCI Express 3.0, 2560 núcleos CUDA a 1695 MHz que disponen de 8GB GDDR5X de memoria de vídeo y soporte OpenGL®4.5, siendo el consumo operacional de 600w.
- 1 coprocesador Intel Xeon Phi 3120P.

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.
- 1 servidor IBM System x x3550 M4 con 1 procesador Intel SandyBridge-EP (8 cores a 2.6GHz y 20MB de caché); 16 GB RAM, 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.

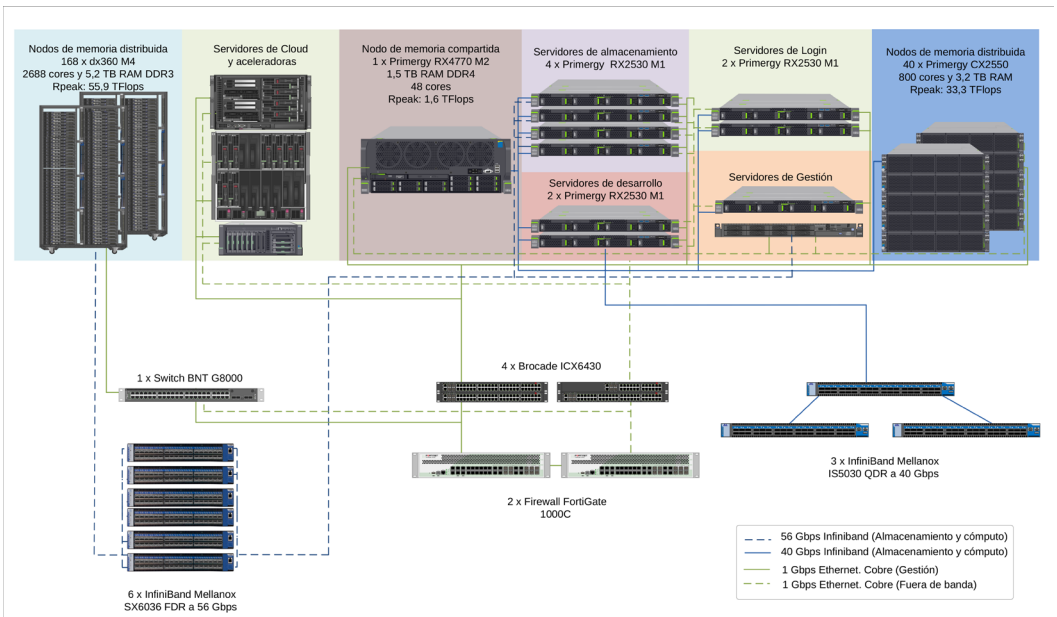
Almacenamiento

- 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 y 31 discos de 4TB NL-SAS) = 206 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. Internamente, la infraestructura de servicio y cálculo se vertebra sobre:

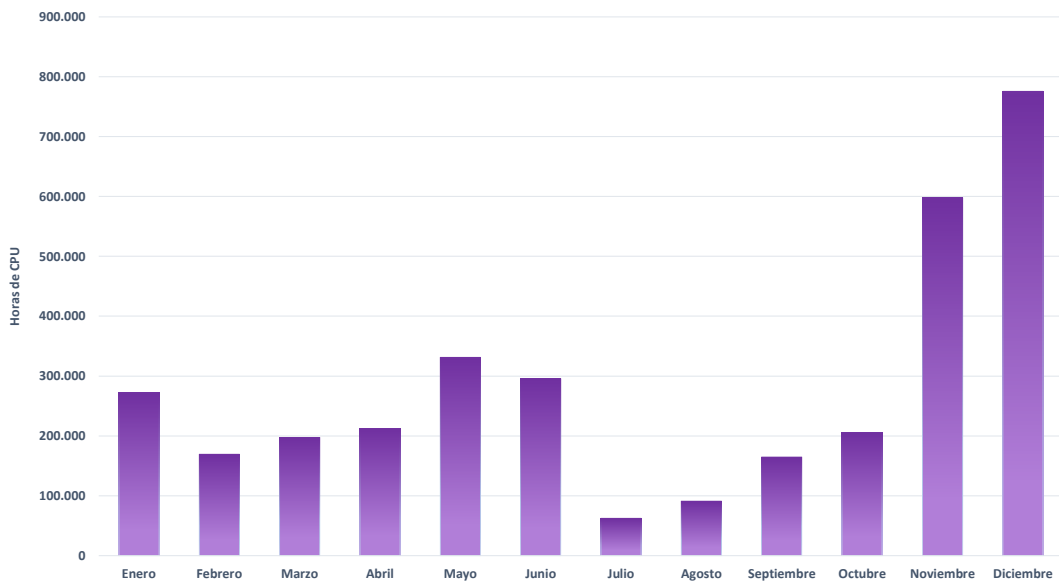
- Dos firewall Fortinet Fortigate 1000C como sistema de seguridad perimetral, capacidad de firewall, VPN, antivirus, detección de intrusiones y gestión de ancho de banda por conexión, configurados como un clúster redundante activo-pasivo de alto rendimiento y gran capacidad de procesamiento.
- 14 switches Infiniband Mellanox SX6036 de 36 puertos FDR a 56Gbps para red de cómputo.
- 4 switches BNT G8052F de 48 puertos y 1 switch BNT G8000 de 48 puertos.
- 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.



CONSUMO DE RECURSOS

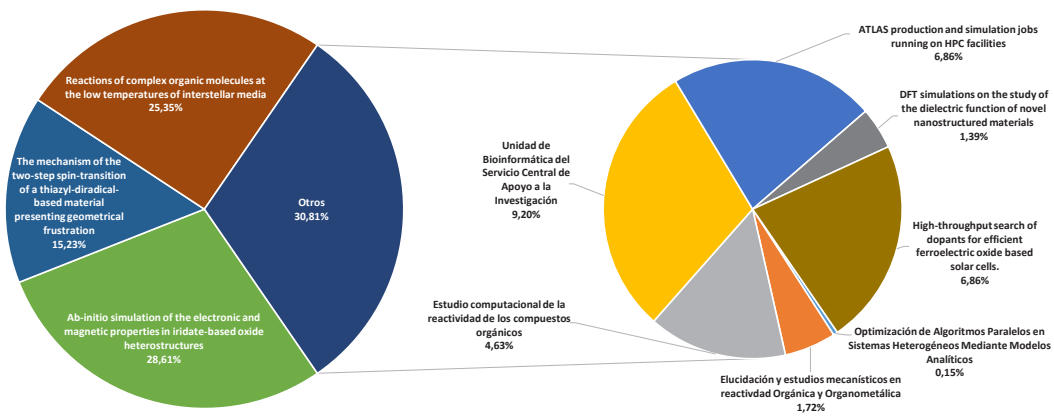
Uso de recursos

Durante el año 2018, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura de CénitS-CPD. En la gráfica que se representa a continuación se muestran los datos relacionados con el consumo de los recursos de los nodos de memoria distribuida y compartida. En ella se representa de manera detallada la relación mensual del número de horas de CPU computadas durante el ejercicio de 2018, obteniendo un total de 3.084.781 horas de cómputo.



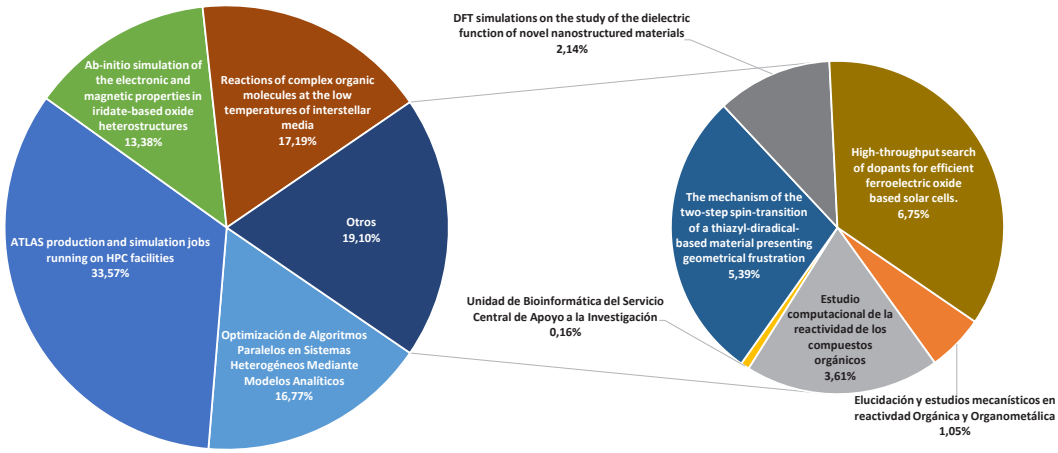
Uso de CPU

A continuación se disgrega el consumo total anual de CPU en relación a los consumos de los distintos proyectos ejecutados, siendo representativo que la mayor parte del consumo ha sido realizada por tres proyectos principalmente, alcanzando un 70% aproximadamente del consumo total.



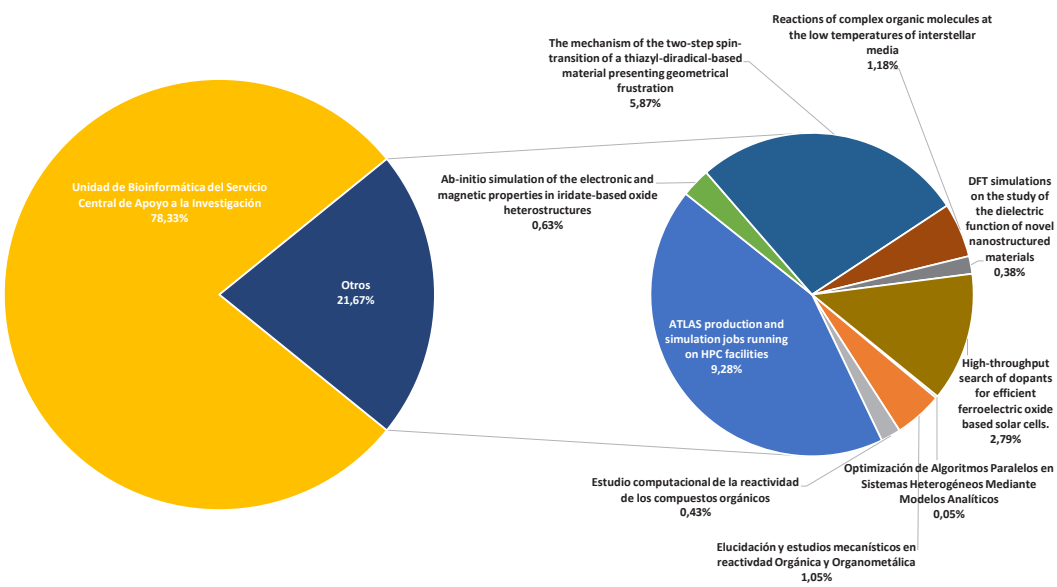
Uso de memoria principal

De la misma manera, se representa el consumo anual de memoria RAM referente a los proyectos de investigación ejecutados, que ha estado parcialmente repartida entre todos los proyectos siendo el proyecto *ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities* el principal consumidor con un casi 34% del total.



Uso de almacenamiento

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



USUARIOS

Durante el año 2018, 32 técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en el supercomputador LUSITANIA II.

Consultas de asesoramiento técnico

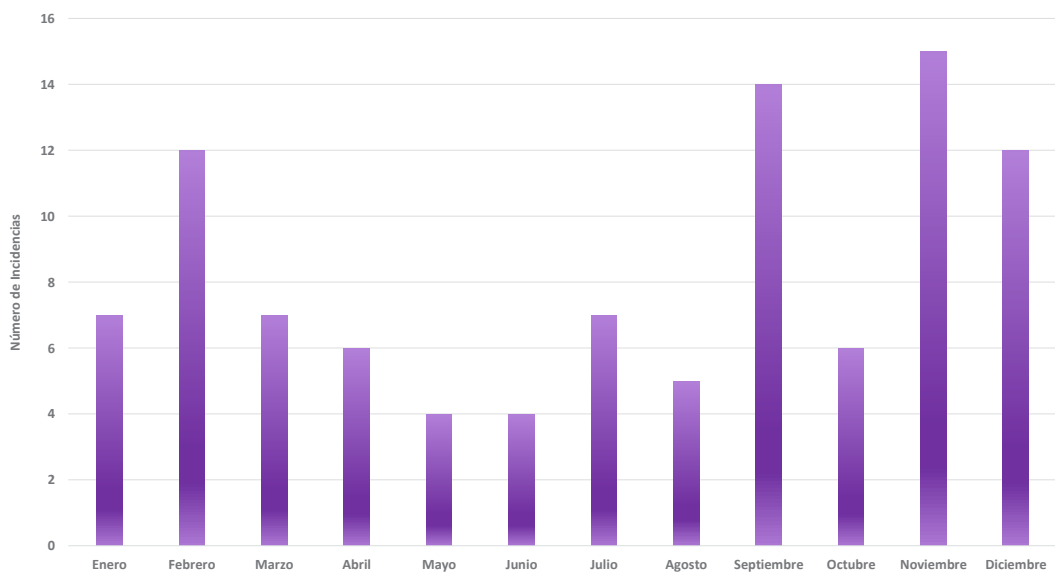
Las consultas y peticiones que realizan los usuarios se resuelven mediante un servicio de atención individualizado basado en la herramienta de gestión de tickets *osTicket*. Con esta herramienta se logra gestionar y controlar todas las peticiones de una manera ordenada. *osTicket* permite categorizarlas y gestionarlas 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 petición, muchos usuarios han seguido utilizando el correo electrónico y el teléfono para ponerse en contacto con el equipo CénitS y así agilizar aquellas 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 solicitud a continuación.

El número de consultas de los usuarios se ha incrementado con respecto al año anterior en aproximadamente un 50%, debido al aumento del número de usuarios y proyectos y, por consiguiente, del número de horas de CPU ofrecidas a los investigadores. Se han resuelto un total de 99 peticiones distribuidas entre los distintos meses de 2018, tal y como se muestra a continuación.



SOFTWARE

COMPUTACIÓN TÉCNICA
Biopython
Bowtie
BWA
COMSOL
CPMD
Cufflinks
Fastp
FastQC
GATK
Gaussian 16
GaussView 6
Hisat2
IDL
Jellyfish
Matlab
MIRA
netCDF
NWChem
Octave
Picard
Python
R
Ray
Salmon
SAMtools
Schrödinger
Singularity
SnpEff
Trinity
VASP
WIEN2k

COMPILADORES
GNU GCC
Intel C/C++ Compiler
Intel Fortran Compiler
Java JDK
PGI Compilers & Tools

SISTEMAS OPERATIVOS
CentOS
Debian
Red Hat Enterprise
Suse Linux Enterprise Server
Ubuntu

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 la Fundación COMPUTAEX.

Los proyectos se presentan divididos en las tres categorías en que estructura 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. Dpto. de Ingeniería Mecánica, Energética y de los Materiales. Universidad de Extremadura

Aplicación de la supercomputación en el ámbito de los procesos energéticos y las energías renovables mediante elementos finitos.
Eduardo Sabio Rey. Dpto. de Física Aplicada de la Universidad de Extremadura.

Aplicación de técnicas Big Data a la predictibilidad de flujos de tráfico urbano en Ciudades Inteligentes
CénitS-COMPUTAEX.

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 asignado a través de la Red Española de Supercomputación]

Cálculos ab-initio
Javier Sánchez Montero y Pedro L. de Andrés. Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja. CSIC.

Distribución de niveles electromagnéticos en determinados entornos geográficos
Jesús Manuel Paniagua Sánchez. Dpto. de Física Aplicada de la Universidad de Extremadura.

Estudio de olas de calor en Extremadura: clima actual y futuro
Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.

Evaluación de los recursos eólicos y solares en Andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoscala (RENUEVA)
Antonio David Pozo Vázquez y Vicente Lara Fanego. Dpto. de Física de la Universidad de Jaén.

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]

Implementación paralela de modelo matemático de Tsunamis en el Mediterráneo y Atlántico
David Valencia, Laboratorio de Radiactividad Ambiental de la Universidad de Extremadura.

Magnetic connectivity through the Solar Partially Ionized Atmosphere
Ángel de Vicente. Dpto. de Física Solar del Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC).

Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre
Antonio Plaza Miguel. Dpto. de las Tecnología de Computadores y de Comunicaciones de la de la Universidad de Extremadura.

SIATDECO: Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones en Energías Ecológicas
Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal (ICMC), CETIEX, Fundecyt y CénitS-COMPUTAEX.

The impact of the 11 year cycle in WACCM simulations
Gabriel Chiodo del Dpto. 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).

Supercomputing and e-science.
Gabriel Chiodo. Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica, Universidad Complutense de Madrid.

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.

Activación molecular mediante complejos organometálicos con enlaces múltiples heterometálicos
Miguel Angel Ruiz Alvarez (IP), Daniel García-Vivó, Mª Esther García Díaz, Mª Angeles Alvarez Fidalgo. Área de Química Inorgánica, Universidad de Oviedo.

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-COMPUTAEX.

Atomistic Simulations to Investigate Phosphocholine Micelle Self-assembly and Degradation
Christian Lorenz (I.P.). King's College London. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación].

Cálculo de la corriente de bootstrap en el Stellarator TJ-II
José Luis Velasco Garasa. Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

Consolider TECNO_FUS
José Mª Gómez Ros. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

Construcción de superficies de energía potencial
Eloísa González Lavado, Dpto. de Ingeniería Química y Química Física (GCYDEX) de la Universidad de Extremadura.

Desarrollo de nuevas reacciones multicomponentes de isonitrilos
Carlos Fernández Marcos. Dpto. de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad de Extremadura.

Dinámica fuera del equilibrio del modelo de Heisenberg tridimensional en presencia de un campo magnético
Juan Jesús Ruiz Lorenzo, Dpto. de Física de la Universidad de Extremadura. Antonio Gordillo Guerrero, Dpto. de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Automática de la Universidad de Extremadura.

Efect of oxygen vacancies in bismut oxide Energy-Loss Near-Edge Structure spectra by ab initio simulations
Francesca Peiró (I.P.), Javier Blanco Portals, Sonia Estrade Albiol and Catalina Coll Benejam. Universitat de Barcelona.

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. Grupo de investigación QCAMM (Quantum Chemistry And Molecular Modelling), Dpto. de Ingeniería Química y Física, Universidad de Extremadura.

Electronic and Thermoelectric Properties of doped-Cu3SbSe4 based compounds from First Principles.
Pablo Palacios Clemente. Dpto. de Física Aplicada a las Tecnologías Aeronáutica y Naval, Universidad Politécnica de Madrid.

Estudio de efectos estereoelectrónicos en heterociclos saturados hidroxilados
Juan Manuel Garrido Zoido. Grupo de investigación QUOREX (Química Orgánica), Universidad de Extremadura.

Estirpex
CénitS-COMPUTAEX.

Estirpex-2
CénitS-COMPUTAEX.

Estudio cinético de reacciones poliatómicas mediante el método RPMD
Joaquín Espinosa García. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.

Estudio teórico de la fotofísica y fotoquímica de complejos cromóforo-ciclodextrina y cromóforo-proteínas PYP y GFP
Manuel Ángel Aguilar Espinosa. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.

Expedición Shelios 2009
Instituto de Astrofísica de Canarias, Astronomía 2009, AGH Consultores, Hispaweb, Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid y CénitS-COMPUTAEX.

Flow-induced anisotropy in metallic glasses
Daniel Crespo, Eloi Pineda y Jorge E. Velasco. Dpto. de Física de la Universidad Politécnica de Catalunya. Amadeu Concustell. Centro de proyección térmica de la Universidad de Barcelona.

Grupo Operativo APMEF: Agricultura de precisión aplicada para la mejora de explotaciones frutales.
Grupo Fruvaygo Machuca, Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, ADEVICE, Cellnex Telecom, Agrodrone, Tepro Consultores Agrícolas, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Sevilla Escuela Técnica Superior de Ingeniería (Telecomunicaciones) y CénitS-COMPUTAEX.

Grupo Operativo GAPTER (Ganadería de precisión para terneros, sostenibilidad y bienestar animal)
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 CénitS-COMPUTAEX.

IFMIF-EVEDA España
Fernando Mota García y Ángela García Sanz. Laboratorio Nacional de Fusión. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

Mechanisms of Molecular Motion in Polymers with Nonuniform Stiffness
Jorge Ramírez García. Universidad Politécnica de Madrid. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].

Medidas de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia
Juan Ignacio Lagares, Unidad de Aplicaciones Médicas del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas). Francisco Sánchez Doblado y María Teresa Romero Expósito, Dpto. de Fisiología Médica y Biofísica/Servicio de Radio-física de la Facultad de Medicina, Universidad de Sevilla.

Novel genomic regions associated to specific complex chromatiin marks
Ángel Carlos Román. Instituto Cajal - CSIC. Dpto. Systems Circuits Group.

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), Universidad de Extremadura.

Pedigreex: gestión automatizada de pedigrís humanos en consejo genético
Noelia Alonso Sánchez. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática.

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.

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. Trabajo Final de Máster universitario en investigación, Universidad de Extremadura.

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

Química computacional
José Carlos Corchado Martín-Romo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.

Quorex
Pedro Cintas Moreno, Martín Ávalos González, Reyes Babiano Caballero, José Luis Jiménez Requejo, Rafael Fernando Martínez Vázquez, Juan Carlos Palacios Albarrán, Abraham Rodríguez Cano. Grupo de investigación Química Orgánica (QUOREX), Universidad de Extremadura.

Simulación de procesos químicos
Santiago Tolosa Arroyo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.

Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con Euterpe
Edilberto Sánchez González, Francisco Castejón Magaña, Iván Calvo Rubio. Unidad de Teoría del Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

Simulaciones moleculares de docking (acoplamiento molecular) para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus
Vicente Galiano, José Villalaín, Emmanuel Fajardo. Departamento de Física y Arquitectura de Computadores, Universidad Miguel Hernández de Elche.

Sistema Ciberfísico para la Optimización de una Explotación Agropecuaria
Juan Francisco Bermejo y José Luis González (CénitS-COMPUTAEX) y Félix R. Rodríguez (Escuela Politécnica de Cáceres, Universidad de Extremadura). Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software.

Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional
Santiago Aparicio. Dpto. de Química de la Universidad de Burgos.

Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación
Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres y CénitS-COMPUTAEX.

Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

Accesibilidad web
CénitS-COMPUTAEX.

Adecuación de la red de comunicaciones para CénitS
CénitS-COMPUTAEX.

Adecuación del CPD de LUSITANIA II
CénitS-COMPUTAEX.

Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS
CénitS-COMPUTAEX.

Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal
David Valencia Corrales. Dpto. Tecnologías de los computadores y de las comunicaciones de la Universidad de Extremadura.

Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (Aldealab c3)
CénitS-COMPUTAEX.

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.

Análisis de un sistema de gobierno para federaciones de centros de procesamiento de datos con computación de alto rendimiento.
Javier Rubio Bravo. Trabajo Final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.

Cálculos de eficiencia condicionada con datos internacionales
José Manuel Cordero Ferrera. Departamento de Economía, Universidad de Extremadura.

CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial)
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)

COM.INFO.COM: Predictibilidad de infoestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPV6 y FTTX
Alfonso Gazo Cervero, José Luis González Sánchez, Francisco Javier Rodríguez Pérez y Javier Carmona Murillo. Grupo de investigación GÍTACA (Grupo de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas), Universidad de Extremadura, en convenio con la empresa Aplicaciones Integrales e Industriales Grupo G5.

Colaboración con el observatorio tecnológico UEX-HP
Universidad de Extremadura, Hewlett Packar y CénitS-COMPUTAEX.

ConSumar
CénitS-COMPUTAEX.

Consumo energético de operaciones colectivas MPI en plataformas multicores
Álvaro Cortés Fácila y Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Dpto. de Arquitectura de Computadores y Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

Contribución al desarrollo de discretizaciones y optimización eficientes para el análisis y diseño de filtros, antenas y agrupaciones de antenas.
Jesús Rubio Ruiz, Rafael Gómez Alcalá, Juan F. Izquierdo León y Yolanda Campos Roca. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

Creación de un ecosistema de negocio en cloud computing. Gestión automatizada de la infraestructura
Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.

Eco-trafic
CénitS-COMPUTAEX.

Deployment of next generation services in the Scientific and Technological Network of Extremadura
Jesús Calle Cancho. Trabajo Final de Máster Universitario en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.

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.

Diseño de un sistema de gestión por procesos de negocio en CénitS/COMPUTAEX
Felipe Lemus Prieto. Trabajo Final de Máster.

EISTER - e-Infranet Sustainability Training and Educational Resource
University College of West Flanders (Howest, Bélgica), University College Dublin (Dublin, Irlanda), Leeds Metropolitan University (Leeds, Reino Unido) y Technical University of Lisbon (Lisboa, Portugal), Riga Technical University (Riga, Letonia) y Open Universiteit (Países Bajos), Kajaani University of Applied Sciences (Kajaani, Finlandia) y CénitS-COMPUTAEX.

Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects
Levent Gürel. Director, Computational Electromagnetics Research Center (BiLCEM)

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. Dpto. de Computadores y de las Comunicaciones,Universidad de Extremadura.

Estudio y análisis de nuevos mecanismos para redes inalámbricas de próxima generación haciendo uso de técnicas de computación de altas prestaciones.
José Javier Rico Palomo. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.

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, Universidad de Extremadura.

Evaluación de AzequiaMPI
Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Universidad de Extremadura.

Evaluación de la movilidad IP y posibilidades de integración en redes programables 5G
José Manuel Mendoza Rubio. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.

FI4VDI - Desarrollo de una Red de Infraestructuras Federadas para la Generación de Servicios de Virtualización de Puestos de Trabajo
FCSCL (Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León), CénitS-COMPUTAEX, UDL (Universitat de Lleida), Université Montpellier 2, Inovaria y Consorcio PCiTAL (Parc Científic i Tecnològic Agroalimentari de Lleida).

Future Internet: eficiencia en las redes de altas prestaciones
Red Temática Fierro (incluyendo CénitS-COMPUTAEX).

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, Universidad de Extremadura.

Green code
CénitS-COMPUTAEX.

Implementación de un Sistema para el Control de Consumos Energéticos en Entornos HPC.
Manuel José Casillas, José Luis González (CénitS-COMPUTAEX) y Miguel Ángel Vega (Universidad de Extremadura). Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Computadores de la Universidad de Extremadura.

Implementación del modelo Cloud Computing en un centro de supercomputación.
Jaime Rivero Ramos. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC.

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-Ciemat, Feval, CénitS, y la Unión de Consumidores de Extremadura.

Mecanismos de Monitorización y Análisis de Tráfico en Redes de Próxima Generación
Daniel González Sánchez. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería en Telemática, Universidad de Extremadura.

Mecanismos para la distribución de contenidos a través de redes móviles
Javier Carmona Murillo. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.

Medianell Virtual Press
Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L.

Metodología y framework para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos HPC.
Javier Corral García. Diploma de Estudios Avanzados.

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), CénitS-COMPUTAEX, Fundecyt-PCTEX, CTAEX (Centro Tecnológico Agroalimentario Extremadura), Universidade de Évora, IPP (Instituto Politécnico de Portalegre), CEBAL (Centro de Biotecnologia 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).

NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología
Luis Landesa y José Manuel Taboada. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

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.

Optimization of the diffused matrix format for heterogeneus parallel computing
David Valencia Corrales y Alejandro Cristo García. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

Proyecto SEDE
SET Informática, Comunicación e Ingeniería, y CénitS-COMPUTAEX.

Proyecto SysGobEx
CénitS-COMPUTAEX.

Red NOVA sostenible
CénitS-COMPUTAEX.

Redes inalámbricas MIMO de última generación en zonas rurales
Francisco Luna Valero. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.

S4I - Software Sensor for Smart Infraestructures
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-COMPUTAEX.

SIBE
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).

Simulación de dispositivos ópticos integrados
Rafael Gómez Alcalá. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio
Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.

Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD
CénitS-COMPUTAEX.

Sistema de vigilancia tecnológica para un centro de supercomputación.
Javier Lázaro Jareño. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.

Smart Green Data Center
Cobra Instalaciones y Servicios, S.A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS-COMPUTAEX, CETIEX e INTROMAC.

Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones
Luis Landesa y José Manuel Taboada. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

Soporte en porting a usuarios del CIEMAT en la plataforma de LUSITANIA
Antonio Muñoz Roldán. Dpto. de Informática del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

Supercomputación y Desarrollo GRID
Antonio Muñoz Roldán. Dpto. de Informática del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

TaxonomTIC 2013
CénitS-COMPUTAEX.

TaxonomTIC 2014
CénitS-COMPUTAEX

TaxonomTIC 2015
CénitS-COMPUTAEX

TaxonomTIC 2016
CénitS-COMPUTAEX

TaxonomTIC 2017
CénitS-COMPUTAEX

Unidad Interactiva 3D
Dr. Jesús Usón Gargallo, Mario Suárez, Alejandro Cristo y Alfonso Rodríguez. CCMIJU (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón)

Vale tecnológico Degusta San Juan S.L.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Instituto Stetica S.L.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Afimec Centro de Formación Profesional
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Bobimex S.L.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Isatex, CEE.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Network Languages Formación S.C.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Proigam Instalaciones S.L.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Omicrón Elevadores S.A.
CénitS-COMPUTAEX

Vale tecnológico Méntor e-Learning
CénitS-COMPUTAEX