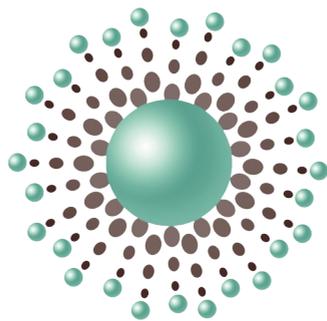


COMPUTAEX

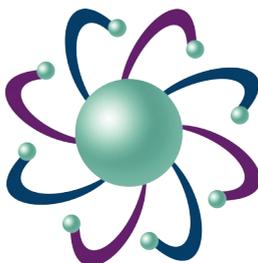
MEMORIA ANUAL 2015





COMPUTAEX

MEMORIA
2015



CÉNITS

© Fundación COMPUTAEX

EDICIÓN: Fundación COMPUTAEX
DISEÑO: Fundación COMPUTAEX

Impreso en España
Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-608-9629-6
DEPÓSITO LEGAL:



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

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

CONTENIDO

2015. Supercomputación para la efiCencia.....	7
1. Fundación COMPUTAEX.....	13
Objeto y fines.....	15
Patronato.....	15
Equipo Cénits 2015.....	15
Organizaciones colaboradoras.....	17
Agradecimientos.....	18
2. Proyectos de investigación de Cénits.....	19
TaxonomTIC 2015.....	20
ConSumar.....	22
Accesibilidad web.....	24
Smart Green Data Center.....	26
FI4VDI - Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo.....	28
MITTIC - Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales.....	30
Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para Cénits.....	33
Estudio de olas de calor en Extremadura: clima actual y futuro.....	34
3. Proyectos de investigación soportados.....	35
Ciencias de la Tierra.....	36
Ciencias de la Vida.....	42
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.....	54
4. Proyectos de innovación tecnológica.....	57
Plan de Innovación en la PYME RIS3-AGROTECH.....	58
INRETEL - Investigación para la obtención de una nueva metodología y un prototipo TIC para el tratamiento y procesamiento de reclamaciones de servicios de telecomunicaciones.....	60
S4I - Software Sensor for Smart Infrastructures.....	62
Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación.....	63
Unidad Interactiva 3D.....	64
5. Proyectos concluidos.....	67
Ciencias de la Tierra.....	68
Ciencias de la Vida.....	72
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.....	77
6. Resultados de investigación.....	91
Publicaciones en congresos.....	92
Publicaciones en revistas.....	95
Libros / Capítulos de libros.....	103
Tesis doctorales.....	103
Trabajos finales de Máster.....	105

7. Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión.....	107
Convenios de colaboración.....	108
Derecho tecnológico e informática forense.....	111
Colaboración en los másteres TIC de la Universidad de Extremadura.....	111
Becas de formación.....	111
Noche europea de los investigadores 2015.....	115
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos.....	116
Portal web.....	118
Redes sociales.....	120
Difusión y divulgación.....	121
8. Recursos tecnológicos.....	123
LUSITANIA II.....	124
LUSITANIA.....	127
Consumo de recursos.....	130
Usuarios.....	134
Software.....	135
9. Notas de prensa.....	137



2015

Supercomputación para la eficiencia

En la memoria de 2014 nos propusimos un ambicioso conjunto de aspiraciones para el siguiente ejercicio y, por ello, en 2015 se ha seguido trabajando con tesón para intentar alcanzar tres importantes anhelos como son: en primer lugar, la renovación y fortalecimiento del supercomputador LUSITANIA que comienza a estar amortizado técnicamente; segundo, la incorporación de COMPUTAEX a la Red Española de Supercomputación (RES) y que CénitS sea reconocido como Instalación Científica y Técnica Singular (ICTS) y; en tercer lugar, disponer de una sede propia donde ubicar los trabajadores y los equipos técnicos para poder acometer todos los proyectos de envergadura que, actualmente, no pueden ser atendidos por no contar con las adecuadas instalaciones.

2015 ha sido un año realmente intenso y productivo, en el que se han alcanzado importantes resultados recogidos en esta memoria anual de actividades. Contamos desde finales de año con el nuevo supercomputador extremeño, LUSITANIA II, que aporta a CénitS recursos muy necesarios que estábamos necesitando desde 2011, cuando solicitamos, y el MICCIN (Ministerio de Ciencia e Innovación) nos concedió en concurrencia competitiva, la potenciación de LUSITANIA, cofinanciada con fondos europeos. Desafortunadamente, no se ha podido acometer la adquisición hasta que ha sido la propia Fundación COMPUTAEX la que ha aportado la necesaria cofinanciación del supercomputador con fondos propios obtenidos por la prestación de servicios a organizaciones públicas y privadas.

Hemos diseñado LUSITANIA II para alcanzar una potencia de cómputo y de almacenamiento muy superior a LUSITANIA, además de poder contar con una arquitectura de memoria distribuida que viene a complementar la de memoria compartida con que cuenta LUSITANIA. No es evidente la comparación de los dos supercomputadores pero, para tener una aproximación, podemos decir que LUSITANIA es un singular supercomputador de memoria compartida capaz de dar respuesta en una memoria de 2 TB a las necesidades de cómputo de 256 trabajos simultáneamente y con una capacidad de procesamiento de 1,63 Tflops. Ahora LUSITANIA II aporta un *cluster* de memoria distribuida de 800 núcleos y 25,05 Tflops pero, además cuenta con lo que se denomina un *fat node* de memoria centralizada de 1,8 Tflops. Obviando algunas magnitudes, podríamos decir que, con menos del 10% del coste de LUSITANIA, el nuevo supercomputador es unas 15 veces más potente, aunque las instalaciones de LUSITANIA y LUSITANIA II no son directamente comparables y, por tanto, sus costes tampoco. Tiene sentido, no obstante, rescatar la conocida cita de Robert X. Cringely en la que destacaba que *"Si la industria automovilística hubiera seguido el mismo desarrollo que los ordenadores, un Rolls-Royce costaría hoy 100 dólares y circularía un millón de millas con 3,7 litros..."*.

Lograr la financiación, el diseño, la adquisición y la puesta en marcha de un supercomputador no es tarea sencilla. Pero, lo importante viene a continuación: afinar su funcionamiento y conseguir que esté a pleno rendimiento, resolviendo las necesidades de la sociedad actual. Para contar con este nuevo supercomputador, hemos intentado hacer virtud de la necesidad y predicar con el ejemplo en un aspecto tan importante como es la eficiencia energética en medio de esta dichosa crisis que nos

azota. No tenemos constancia de otro supercomputador que, como LUSITANIA II, se encuentre ubicado en un contenedor exterior, lo que nos está sirviendo para investigar, de la forma más pragmática y empírica, sobre aspectos tecnológicos como el *smart building*, *smart cooling* y *smart computing*. El nuevo supercomputador está confinado en el menor espacio posible, habiendo puesto en práctica las lecciones aprendidas de nuestro proyecto SGDC (*Smart Green Data Center*) que puede ser consultado en esta memoria.

La solución *High Performance Computing* (HPC) obtenida es de propósito general, lo que quiere decir que podemos dedicar el supercomputador a, prácticamente, cualquier tarea de cómputo, pero nuestra intención es emplearlo, principalmente, en los siguientes campos de actividad:

- *Big Data* y *Open Data*.
- Ultrasecuenciación genética.
- Eficiencia energética.
- Redes definidas por software.
- Paralelización automática y paralelismo cuántico.
- Química computacional.
- Cambio climático.

La confluencia o convergencia de HPC con la mayoría de los mantras tecnológicos de los últimos años es ya una realidad. Si hace algunos años sólo unos pocos investigábamos las posibilidades del *High Performance Cloud Computing*, hoy es más que evidente la relación de HPC con *Big Data*, al igual que la palabra *Smart* se ha extendido a prácticamente todos los ámbitos del Internet de las cosas (IoT). No consideramos que sea cuestión de modas, sino de la verdadera y necesaria convergencia de paradigmas tecnológicos que buscan dar respuesta a las necesidades que las organizaciones y los ciudadanos tenemos en la vida profesional y personal.

La feliz coincidencia de que la palabra ciencia esté contenida en una de las aspiraciones que cualquier centro de supercomputación persigue, como es la eficiencia, puede servirnos para poner de relieve que la supercomputación es probablemente la herramienta que más eficiencia, eficacia y efectividad aporta a la ciencia en, prácticamente, todo sus campos. Citamos tres grandes proyectos científicos que han tenido una gran relevancia en 2015:

- Primera detección del Bosón de Higgs, una partícula cuya vida media es de 1 zeptosegundo, que es la miltrillonésima parte de un segundo, (10^{-21} s.). En un segundo hay mil trillones de zeptosegundos, lo que refleja la complejidad de detectar estas partículas para lo que se usaron más de 300.000 núcleos de computación de 300 organizaciones distribuidas en 40 países.
- Primera detección de onda gravitatoria en un experimento que ha permitido constatar la fusión de dos agujeros negros a unos 1.312 millones de años luz de la Tierra, todo ello compatible con las predicciones de la relatividad general que Einstein enunció un siglo antes. La onda fue recogida por los dos detectores LIGO en la costa este y oeste de Estados Unidos con 7 milisegundos de retardo y la señal, que duró 0,2 segundos, se produjo hace 1.312 millones de años luz, cuando dos agujeros negros binarios se fusionaron, dando lugar a un nuevo agujero negro que ha sido percibido y medido ahora, gracias a la supercomputación.
- Medicina de precisión y personalizada gracias a la secuenciación genética, que está permitiendo luchar contra las enfermedades más indeseadas de la humanidad. Dotaciones presupuestarias de 215 millones de dólares anuales con la aspiración de secuenciar un millón de genomas humanos en Estados Unidos.

En estos tres proyectos juega un papel fundamental el HPC, ya sea de forma directa o como herramienta para miles de científicos, que encuentran en la supercomputación una herramienta imprescindible para sus investigaciones. Si entendemos la eficiencia como la capacidad de disponer de algo para conseguir un efecto determinado, y no lo simplificamos sólo con la visión economicista de producir el máximo de resultados con el mínimo de recursos, energía y tiempo, tal vez la eficiencia podríamos verla muy ligada a la supercomputación como un modo de alcanzar el efecto deseado lo antes posible y con el menor consumo de recursos disponibles.

Pero no sólo son los anteriores proyectos los que están relacionados con la supercomputación. Cada vez que recurrimos a Internet, usamos las redes sociales, buscamos información de cualquier tipo, usamos productos bancarios, se invierte en bolsa, se realizan intervenciones quirúrgicas y un largo etcétera de actividades cotidianas, intervienen, en un momento u otro, los grandes centros de procesos de datos o los supercomputadores.

Big data, smart cities, internet de las cosas, open data, ciberseguridad, cloud computing o supercomputación son sólo algunos de los paradigmas tecnológicos que cada día se extienden más, poniendo de relieve que cualquier sociedad que no quiera tener dependencias del exterior debe tenerlos controlados. En todos ellos el concepto HPC juega un papel protagonista porque es el que ofrece el soporte a todo ese conjunto de servicios avanzados que necesitamos casi a diario. La sociedad que no invierta en estos recursos tendrá, como poco, tres carencias futuras: la de las propias infraestructuras; la de los ingenieros debidamente cualificados; y lo que es peor, la de la administración, el procesamiento y la custodia de sus propios datos y del conocimiento que aportan.

Este tipo de proyectos son los que se están llevando ya a cabo en CénitS, así como en el resto de centros que forman parte de la RES (Red Española de Supercomputación) a la que COMPUTAEX pertenece desde el 29 de abril de 2015. Una red distribuida que está a la espera de ser reconocida como una de las 29 ICTS existentes en España.

Desde CénitS se ha participado de forma directa en 2015 en un total de 13 proyectos financiados por diferentes convocatorias competitivas (SUDOE, POCTEP, FEDER, INNTERCONECTA, Coinvestiga, PRI, vales tecnológicos, contratos, convenios, etc.), con notables resultados. A estos se unen los 16 proyectos de investigadores e innovadores que utilizan los recursos del Centro. En total se han consumido 1.039.756 horas de CPU y se han requerido 44 máquinas virtuales y 3 unidades aceleradoras de cómputo específicamente configuradas para ajustarse a los requisitos concretos de cada proyecto. Los trabajos de cómputo masivo han usado 12.428 GB de memoria principal y consumido 21,7 TB de memoria secundaria para almacenar los resultados obtenidos históricamente por todos los proyectos.

Aunque COMPUTAEX y CénitS son principalmente supercomputación, no sólo son supercomputación. Tenemos también el encargo de promover el sector TIC en Extremadura que demuestra tener muy buena salud (como puede comprobarse en el proyecto TaxonomTIC, que elaboramos desde hace varios años a modo de observatorio del sector de la Informática y de las Comunicaciones). Con una aportación al PIB regional superior al 2% y empleando de forma directa a casi 3.000 personas, entendemos que tiene aún mucho recorrido y es necesario apoyarlo para fortalecerlo. Destacamos además que 2015 ha sido nuevamente un ejercicio en el que el sector productivo ha recurrido nuevamente a CénitS.

Los ingenieros del Centro han logrado gestionar todos sus recursos técnicos y, a la vez, emprender innovaciones e investigaciones que les han permitido continuar con su cualificación técnica y con su formación científica, presentando los resultados obtenidos en revistas y congresos internacionales

de impacto. Uno de los trabajadores del Centro ha presentado su tesis doctoral y se han defendido dos Trabajos Final de Máster, además de realizar varias colaboraciones formativas de ámbito universitario.

Como Fundación pública sin afán de lucro, COMPUTAEX ha recibido de los presupuestos regionales de 2015 para sus gastos de funcionamiento idénticas transferencias nominativas que los tres ejercicios precedentes. Mediante la firma de contratos y convenios con empresas; con la participación en proyectos de concurrencia competitiva; y mediante la prestación de servicios a empresas y organismos, se han captado unos fondos propios adicionales del 40,29 % de lo percibido por transferencias nominativas de los presupuestos regionales. Esto ha permitido presentar unas cuentas anuales que al cierre del ejercicio 2015 han arrojado un resultado positivo de 117.006,44 € antes de impuestos.

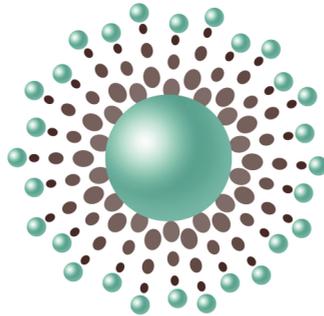
Pendiente queda el disponer de una sede propia en la que CénitS pueda desarrollarse plenamente con el potencial que el proyecto de la supercomputación en Extremadura viene demostrando desde su puesta en funcionamiento en 2009. Este año ha pasado, de apoyarse en un trípode, a hacerlo en un más estable cuadrípode formado por COMPUTAEX, CénitS, LUSITANIA y LUSITANIA II, y todo ello conjuntamente aporta a nuestra sociedad una oportunidad para la imaginación y, sobre todo, para la superación.



Fdo. José Luis González Sánchez



Fundación COMPUTAEX



COMPUTAEX

La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX), fue constituida en 2009 por la Junta de Extremadura como organización de naturaleza fundacional sin ánimo de lucro, e inscrita en el Registro de Fundaciones de Extremadura el 27 de abril del mismo año, dependiendo de la Dirección General de Telecomunicaciones y Sociedad de la Información de la Consejería de Economía, Comercio e Innovación.

En julio de 2011 se produjo la reestructuración del Gobierno de la Comunidad Autónoma de Extremadura, pasando la Fundación COMPUTAEX a depender de la Dirección General de Modernización en Innovación Tecnológica perteneciente a la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación.

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

En agosto de 2013, de acuerdo al decreto 135/2013 de 30 de julio, la Fundación COMPUTAEX se adscribe a la Secretaría General de Ciencia y Tecnología.

El decreto 262/2015 de 7 de agosto, asignó a la Consejería de Economía e Infraestructuras las competencias que se encontraban asignadas a la anterior Consejería de Economía, Competitividad e Innovación de la Junta de Extremadura, quedando la Fundación COMPUTAEX adscrita a la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación.

Objeto y fines

La Fundación COMPUTAEX tiene personalidad jurídica propia y plena capacidad de obrar, pudiendo realizar, en consecuencia, todos aquellos actos que sean necesarios para el cumplimiento de los fines para los que fue creada: todos aquellos que promuevan el desarrollo de las tecnologías de la información, el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas como instrumentos para el desarrollo socioeconómico sostenible, estimulando la participación de la sociedad civil movilizándolo 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	DIRECCIÓN GENERAL
<p>D. JOSÉ LUIS NAVARRO RIBERA Ilmo. Sr. Consejero de Economía e Infraestructuras Presidente de la Fundación COMPUTAEX</p>	<p>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato</p>
<p>D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX</p>	<p>COMISIÓN PERMANENTE</p>
<p>DÑA. CONSUELO CERRATO CALDERA Ilma. Sra. Secretaria General de Economía e Infraestructuras Patrona de la Fundación COMPUTAEX</p>	<p>D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX</p>
<p>DÑA. ANA VEGA FERNÁNDEZ Ilma. Sra. Directora General de Empresa y Competitividad Patrona de la Fundación COMPUTAEX</p>	<p>DÑA. CONSUELO CERRATO CALDERA Ilma. Sra. Secretaria General de Economía e Infraestructuras Patrona de la Fundación COMPUTAEX</p>
<p>DÑA. CARMEN GONZÁLEZ RAMOS Ilma. Sra. Directora General de CICYTEX Patrona de la Fundación COMPUTAEX</p>	<p>DÑA. CARMEN GONZÁLEZ RAMOS Ilma. Sra. Directora General de CICYTEX Patrona de la Fundación COMPUTAEX</p>
<p>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato</p>	<p>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato</p>

Equipo CénitS 2015

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



César Gómez
 Jefe de equipo de
 supercomputación



Jesús Calle
 Administrador de sistemas
 de supercomputación



David Cortés
 Administrador de redes y
 comunicaciones



Felipe Lemus
 Administrador de
 redes y comunicaciones



Javier Corral
 Analista de aplicaciones y
 comunicación



Manuel Alfonso López
 Analista de aplicaciones y
 proyectos



Blanca Pérez
 Técnico contable
 y fiscal



Juan Manuel Vaca
 Técnico de apoyo
 a la I+D+i



Eva Mogena
 Becaria de investigación



Laura Amarilla
 Becaria de investigación



Laura Pozueco
 Investigadora visitante

Agradecimientos

Para un centro de supercomputación es fundamental disponer de los equipos técnicos más avanzados y potentes, pero en muchos casos es posible conseguir más con menos, sobre todo si se cuenta con un equipo humano como el de CénitS. Para poder alcanzar los logros que se recogen resumidamente en este anuario de 2015 tenemos muy presente la valiosa colaboración de muchas personas, de entre las cuáles queremos destacar:

- Los usuarios de CénitS.
- El personal del CCMI en Cáceres.
- El personal del CETA-CIEMAT en Trujillo.
- El personal de GPEx que nos ayuda en las tareas administrativas.
- El personal de la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación que colabora estrechamente en tareas burocráticas y administrativas.
- El personal de la Consejería de Economía e Infraestructuras.
- Los técnicos del Protectorado de Fundaciones de Extremadura.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones que han colaborado en proyectos comunes.
- Los Patronos de la Fundación, que nos ayudan con su apoyo y compromiso.



2

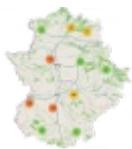
**Proyectos de
investigación de CénitS**



Proyectos de investigación de CénitS

Durante 2015, el equipo CénitS ha liderado y colaborado en múltiples proyectos de investigación y desarrollo tecnológico, conseguidos mediante convocatorias públicas competitivas, con el fin de aportar soluciones en ámbitos tan heterogéneos como el consumo eléctrico, big data, cloud computing o la innovación tecnológica en sectores más tradicionales.

TaxonomTIC 2015



El proyecto TaxonomTIC dio comienzo en el año 2013 y su objetivo principal consistía en la creación de un observatorio del Sector TIC en la región. Este observatorio permitiría identificar qué son las TIC, los elementos que las componen, describirlos y clasificarlos, para poder estudiar su impacto en Extremadura y generar una fuente de información adicional, que permita conocer qué profesionales, empresas u organismos se encuentran relacionados con este sector y cuáles se apoyan en dichas entidades para ofrecer servicios TIC.

El trabajo realizado durante 2015 ha supuesto la consolidación del proyecto, extendiendo el análisis realizado en la región y el estudio del Sector TIC nacional y europeo y profundizando en las TIC desde un punto de vista diferente, el punto de vista del usuario.

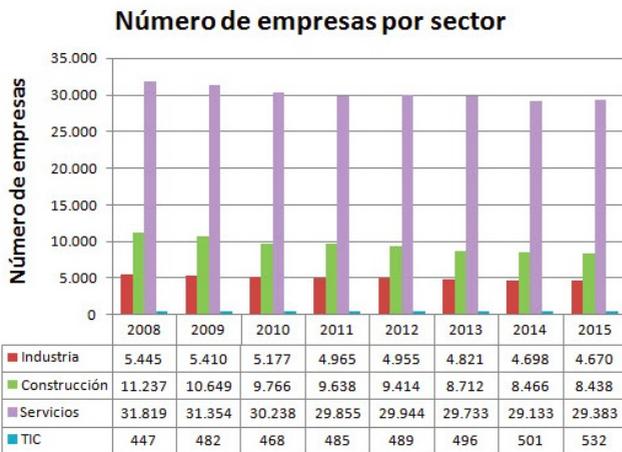
Objetivos

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

taxonomía del Sector TIC y su proyección para el futuro. Participación en eventos organizados por el propio sector para actuar como dinamizadores del mismo.

Metodología

La primera fase del proyecto consistió en la actualización de los datos recopilados en los años anteriores. Para ello, utilizando como fuente los datos del proyecto de 2013 y 2014 y principalmente del INE, se extrajeron las estadísticas económicas y de sociedades del sector en Extremadura. Para una adecuada identificación de las empresas del sector, se utilizó la clasificación de actividades desarrollada por el equipo CénitS en 2013.



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

Posteriormente, se actualizó la información disponible respecto a la formación TIC en Extremadura a partir de los datos suministrados por el Observatorio de Indicadores de la UEx. El siguiente paso del proyecto consistió en analizar exhaustivamente un gran número de estadísticas extraídas del INE

y del EUROSTAT referentes al sector TIC en España y Europa, respectivamente. Esto, unido a la información extraída y analizada del sector en Extremadura, ha permitido la realización de una comparativa del sector TIC en cada uno de los ámbitos.

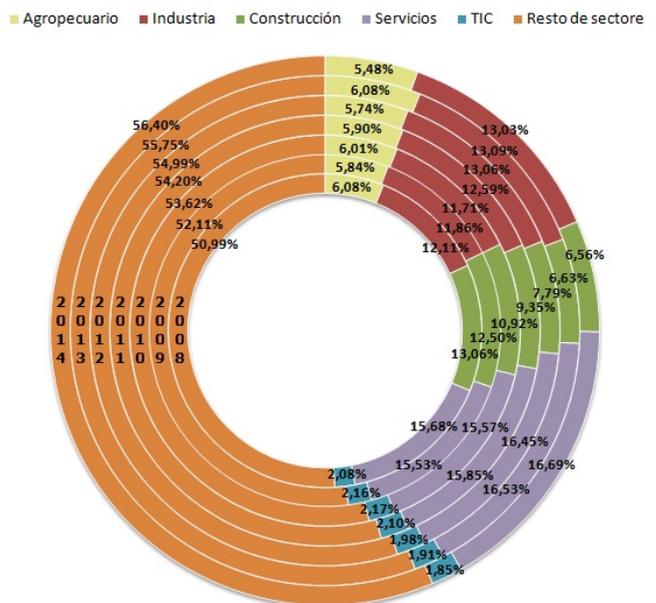
Con la finalidad de entender la importancia y penetración de las TIC en la sociedad extremeña se elaboró un estudio del equipamiento TIC en los hogares extremeños y el uso que se hace del mismo.

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

Resultados

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

Aportación al PIB regional por rama de actividad



- Estudio y análisis del equipamiento TIC y su uso en Extremadura.
- Actualización y mantenimiento de la plataforma web que permite acceder a la información recopilada por el equipo CénitS en los últimos 3 años.
- La memoria de este proyecto puede ser consultada en la siguiente dirección web: http://www.cenits.es/sites/cenits.es/files/noticias/taxonomtic_2015_memoria.pdf

ConSumar

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

Objetivos

En este proyecto se han alcanzado los siguientes objetivos:

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

Metodología

Tras la realización de un estudio detallado de la normativa que rige el sector eléctrico y de las necesidades y del ecosistema disponible para aplicar el paradigma de Big Data al sector energético, se ha desarrollado una plataforma abierta para la obtención de los datos y su análisis centrado, principalmente, en el coste de la energía.

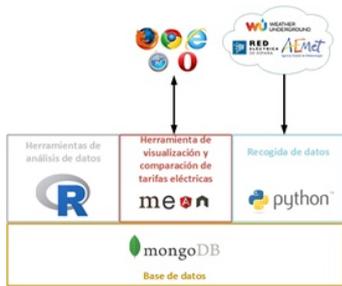
Estos datos son analizados por las herramientas de análisis para encontrar patrones de comportamiento entre el coste eléctrico y las diferentes variables independientes a medir, como la información climática, la capacidad para generación de energías renovables, etc.

Para ello, se ha diseñado un conjunto de herramientas que realice las siguientes labores:

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

Resultados

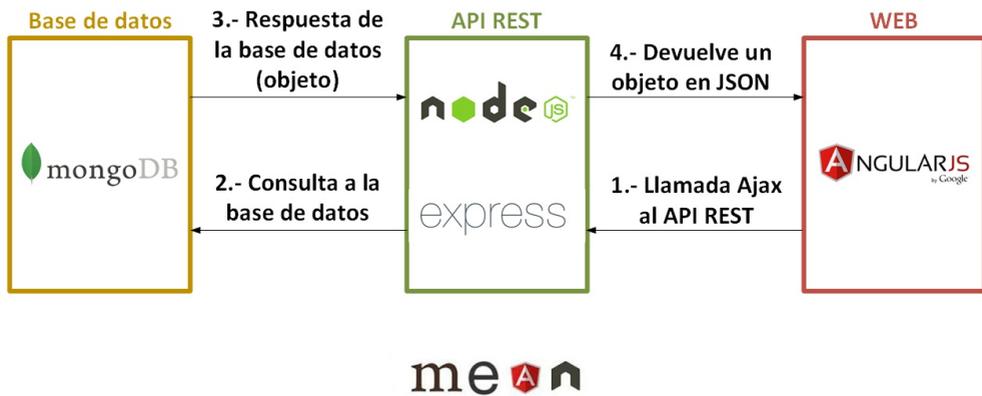
La gestión inteligente de la energía no sólo ayuda a tomar decisiones a los consumidores del momento en el que deben programar el funcionamiento de los equipos que mayor cantidad de energía consumen. Este hecho permite una mayor planificación dependiendo de diferentes factores



como los económicos, o, incluso, la implicación con el medio ambiente.

Las líneas de trabajo en este ámbito son muy amplias y permiten abarcar muchos campos de acción. En este proyecto se han desarrollado un buen número de herramientas que permiten, no sólo la recolección de los datos de fuentes heterogéneas, sino que se clasifican y se disponen para la consulta de manera sencilla a los consumidores.

Para el desarrollo de la herramienta de visualización de tarifas y la plataforma de satisfacción del servicio eléctrico, se ha basado el desarrollo de ambas en la pila de aplicaciones MEAN. Este acrónimo está formado por las iniciales de las cuatro tecnologías principales que entran en juego: MongoDB, Express, AngularJS y Node.js.



La estructura de ambas aplicaciones se puede ver en las siguientes imágenes:

Tarifa elegida para el día
26-02-2016

Tarifa Diurna - 2.0A

Hora	Precio kwh
0 - 1	0.089 €
1 - 2	0.085 €
2 - 3	0.084 €
3 - 4	0.083 €

Tarifa General
Tarifa Nocturna
Tarifa Vehículo Eléctrico

Consulta de la calidad de las comercializadoras

Consulta

Qué le parece la comercializadora:
Endesa

Por favor seleccione una de las siguientes opciones:

- Buenas tarifas
- Buen servicio técnico
- Mala gestión energética
- Mal servicio técnico
- Buen servicio en general

Comentarios

Introduzca los comentarios

← Volver a la lista de comercializadoras
Votar »

Además de las herramientas de recolección y visualización de las diferentes fuentes de datos del proyecto, se ha desarrollado una herramienta de análisis de datos para el estudio de los costes de la energía a través de técnicas de Big Data.

Para el análisis de los datos almacenados en mongoDB, se han desarrollado diversos scripts usando el lenguaje de programación R bajo el paradigma de Machine Learning, aplicando técnicas de redes neuronales y de regresión lineal múltiple.

Los nuevos datos, calculados a través de los scripts, son almacenados de nuevo en la base de datos de mongoDB para ser también incorporados, tanto a la aplicación que muestre los resultados, como al propio sistema de Big Data.

Esta aplicación, desarrollada para tal efecto bajo el paradigma MEAN, dispone los valores horarios de la predicción eléctrica como se muestra en la figura.



Accesibilidad web

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

Objetivos

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

Metodología

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

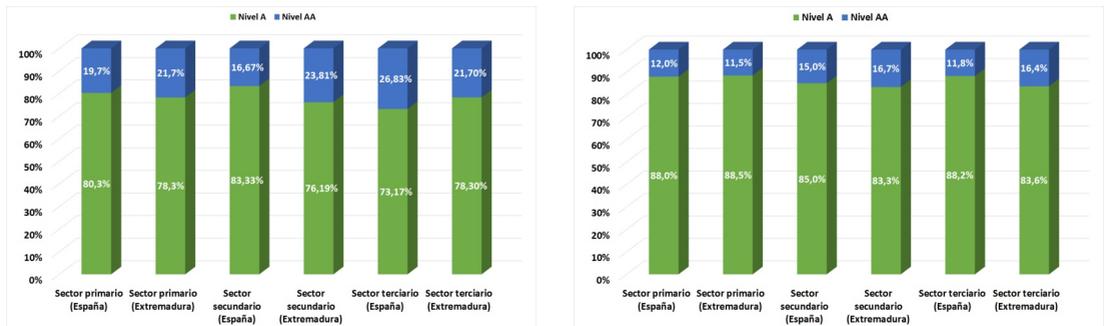


muestras han sido analizadas con distintas herramientas de evaluación de la accesibilidad web como son WAVE y AChecker, destacando los resultados obtenidos.

Resultados

Se ha seleccionado una serie de muestras de más de 40 sitios web, escogidos entre los sectores económicos principales: primario, secundario y terciario, para analizar el grado de accesibilidad de su contenido. Se ha aplicado la metodología WCAG-EM para analizar el grado de cumplimiento de las pautas WCAG 2.0 (A o AA) en cada uno de los sitios web.

La accesibilidad de cada sitio ha sido analizada escogiendo una muestra representativa y aplicando la metodología WCAG-EM mediante las herramientas WAVE y AChecker. Las siguientes figuras muestran el grado de accesibilidad comparado con el resto de España:



1. Grados de accesibilidad (A o AA) en Extremadura y el resto de España. Resultados obtenidos con WAVE.
2. Grados de accesibilidad (A o AA) en la región y el resto de España. Resultados obtenidos con AChecker.

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

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

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

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

Smart Green Data Center



Hoy en día, los Datacenters o Centros de Proceso de Datos (CPD) se han convertido en elementos indispensables para el uso cotidiano de las nuevas tecnologías y los servicios que se despliegan sobre ellas.

Correo electrónico, vídeo bajo demanda, banca electrónica, son algunos de los servicios que actualmente están siendo desplegados sobre estos centros de proceso de datos que tienen una gran capacidad de cómputo y de almacenamiento, así como una interconexión rápida a Internet.

Todos estos servicios son desplegados en grandes espacios adaptados para alojar servidores que los mantengan 24 horas al día, 365 días al año. Esto conlleva unos requerimientos muy altos en cuanto a costes de mantenimiento y consumo eléctrico. Se estima que en 2013, sólo los Datacenters de Estados Unidos consumieron el equivalente a la generación anual de 34 grandes plantas de energía.

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

Entidades participantes

Cobra Instalaciones y Servicios, S.A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS, CETIEX e INTROMAC.

Objetivos

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



Metodología

Mediante la realización de simulaciones energéticas informáticas se han detectado las mejores soluciones de diseño a adoptar en el demostrador y esto ha influido en el diseño y construcción del mismo. Se han implementado herramientas de monitorización y control de las variables mediante sensores que permiten actuar y medir en continuo sobre el sistema de refrigeración, sobre la envolvente del edificio que alberga el CPD, y sobre el procesamiento y computación de los datos, para alcanzar la eficiencia energética.



El demostrador del proyecto Smart Green Data Center es un prototipo de data center que permite experimentar con la distribución de todos los elementos del CPD para lograr la disposición más eficaz energéticamente.

A partir de los estudios realizados del efecto que tienen diferentes condiciones climáticas sobre el demostrador, se pueden utilizar resultados para adaptar su diseño, su climatización y el procesamiento de los datos. Del mismo modo, se analiza el efecto que el CPD provoca en el edificio que lo alberga, para encontrar soluciones que minimicen los impactos que éste produce (ruido, vibraciones, radiaciones, calor, etc).



Resultados

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

Financiación



Proyecto financiado por el programa FEDER ININTERCONECTA, para la creación de proyectos integrados de desarrollo experimental, con carácter estratégico, gran dimensión y que tengan como objetivo el desarrollo de tecnologías novedosas en áreas tecnológicas de futuro con proyección económica y comercial a nivel internacional, suponiendo al mismo tiempo un avance tecnológico e industrial relevante para las regiones destinatarias de las ayudas del "Programa Operativo de I+D+i por y para el beneficio de las empresas, Fondo Tecnológico".

Financiación total: 1.292.423 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 211.051 €

FI4VI - Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo



Las TIC son herramientas de trabajo imprescindibles en el ámbito empresarial y académico, tanto privado como público. Se ha detectado que el acceso a la Sociedad de la información en las Regiones SUDOE es todavía inferior al necesario para permitir una mejora de los sistemas de producción y de gestión en el sector empresarial y un aumento en la calidad y la excelencia en el académico.

El acceso a las TIC se ha concebido siempre a través de puestos de trabajo físicos mediante la utilización de hardware individualizado por parte de cada uno de los usuarios. Frente a este paradigma, un modelo innovador, cada vez más generalizado, es el que permite realizar este acceso proporcionando servicios de escritorio virtual y Cloud Computing. Este tipo de servicios no están siendo implantados con suficiente agilidad, tanto en empresas como en instituciones públicas, debido fundamentalmente a la falta de conocimiento suficiente y, como consecuencia, a la falta de confianza. Por esto, se hace necesario demostrar a proveedores y usuarios la eficiencia de los servicios basados en escritorios virtuales y Cloud.

FI4VDI propone una infraestructura basada en el paradigma del cloud computing privado mediante los modelos PaaS (Platform as a Service) y SaaS (Software as a Service), utilizando los recursos disponibles en diferentes centros de supercomputación ubicados en distintas regiones SUDOE, con el objetivo de asegurar a los usuarios la protección de datos y el cumplimiento de las normas, relativas a la seguridad de información y de los SLAs (Service Level Agreements) establecidos, permitiendo una mejora de la competitividad y un ahorro de costes en los sectores destinatarios del mismo.

Además, los clústeres empresariales sin ánimo de lucro tienen como misión integrar en su Cartera de Servicios/productos la Virtualización de Puestos de Trabajo TIC para sus clientes y usuarios (ya sean públicos o privados) desarrollando una «Red de Brokering de puestos de trabajo virtuales» sostenida en los recursos del Grupo de Partners.

Entidades participantes

El proyecto FI4VDI ha sido realizado por los siguientes socios además de la Fundación COMPUTAEX: Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL), Universitat de Lleida (UdL), Université Montpellier 2 Sciences et Techniques (UM2), Agrupación Empresarial Innovadora para la Seguridad de las Redes y los Sistemas de Información (AEI Seguridad), Inova-ria – Associação de Empresas para uma Rede de Inovação em Aveiro Associação empresarial (Inova-Ria) y Consorcio Parc Científic i Tecnològic Agroalimentari de Lleida (PCITAL).

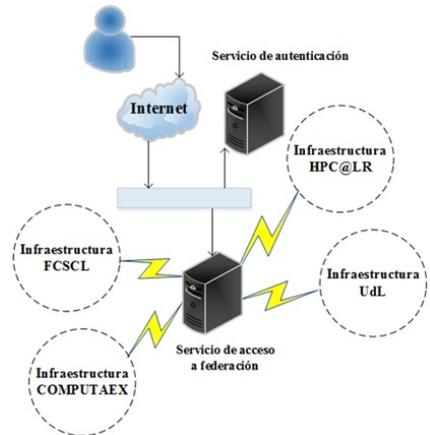
Objetivos

- Transferir desde los Centros de I+D+i y servicios, participantes en este proyecto, la experiencia y conocimiento de las tecnologías Cloud y escritorios virtuales a los Clústeres de empresas TIC, proporcionando un servicio diferenciador en sus portafolios de productos y contribuyendo de este modo al desarrollo de la economía y de la sociedad.
- El proyecto incluye el desarrollo de una Infraestructura Tecnológica basada en Cloud Computing transfronteriza, destinada a generar servicios empresariales altamente innovadores mediante

despliegues PaaS (Platform as a Service) y SaaS (Software as a Service) que permitan la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo TIC para usuarios de regiones periféricas a precios altamente competitivos.

Metodología

La metodología ha consistido en el establecimiento, en colaboración con el tejido empresarial público y privado, de las herramientas que permitirán optimizar sus estructuras productivas. Para ello, primero se diseñó la arquitectura del sistema de modo que permitiese el cumplimiento de los objetivos establecidos en el proyecto. La solución propuesta fue una infraestructura basada en una tecnología cloud privada, utilizando los recursos disponibles en diferentes centros de supercomputación ubicados en distintas regiones SUDOE. A continuación se realizó un análisis de los recursos tecnológicos necesarios y de los sistemas de información envueltos, así como del software disponible para desplegar la federación, desembocando en el diseño de la federación de infraestructuras de los centros de Supercomputación. Una vez establecido el diseño, se realizó la implementación del mismo en cada uno de los centros para, posteriormente, desplegar los servicios y ponerlos a disposición de los usuarios finales de la plataforma, los cuales disponen de acceso a los prototipos de puestos de trabajo virtualizados.



Resultados

- Diseño, desarrollo y establecimiento de una red federada de recursos de cloud computing, procedentes de Centros de Supercomputación situados en los países participantes en el proyecto. Selección de entornos y aplicaciones a desplegar en la infraestructura federada, así como adaptación de los mismos al paradigma del cloud computing.
- Virtualización de una serie de puestos de trabajo, entre los cuales se encuentra el destinado a que genetistas puedan obtener información de alto nivel, de forma semiautomática, a partir de las secuencias de un estudio de resecuenciación, obtenidas mediante plataformas de ultra-secuenciación genética.
- Establecimiento de un entorno de trabajo en el que se pueda desplegar soluciones de cloud computing, a través de la infraestructura federada, destinada a que entidades puedan optimizar su trabajo.

Financiación



Proyecto financiado por el Programa de Cooperación Territorial del Espacio Sudoeste Europeo, SUDOE INTERREG IV B. El principal objetivo de este programa es consolidar el Sudoeste europeo como un espacio de cooperación territorial en los ámbitos de la competitividad y la innovación, el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la ordenación del territorio, que contribuya a asegurar una integración armoniosa y equilibrada de sus regiones, dentro de los objetivos de cohesión económica y social de la UE.

Financiación total: 859.403 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 124.850 €

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



El Proyecto MITTIC, Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales, surgió de la necesidad de generar crecimiento económico y empleo mediante el aumento de la competitividad en sectores tradicionales y estratégicos de la región Extremadura-Centro-Alentejo; proponiendo e implementando modelos y procesos innovadores de organización y producción, basados en la aplicación de Tecnologías de la Información y la Comunicación.

Estos sectores están basados en recursos y capacidades propias, que ahora se enfrentan al reto de apoyarse en la innovación como principal fuente de diferenciación y mejora competitiva con el fin de poder ampliar su mercado potencial y dinamizar la economía y el empleo en la región.

Dentro del proyecto MITTIC, la Fundación COMPUTAEX ha desarrollado actividades en dos ámbitos bien diferenciados. En relación a las acciones de modernización y desarrollo tecnológico con base TIC en sectores productivos se ha desarrollado una herramienta de gestión integral de la trazabilidad en las industrias corchera y de la piedra natural, con el objetivo de asegurar la identificación del origen del producto y garantizar su procedencia. Por otro lado, en el marco de las acciones de intercambio de conocimiento para la innovación y el emprendimiento se ha creado una herramienta virtual para dar a conocer las dehesas y montados en la Eurorregión Extremadura-Centro-Alentejo.

Entidades participantes

El proyecto está desarrollado por los siguientes socios: Junta de Extremadura, Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal (ICMC), Instituto de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción (INTROMAC), Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón (CCMIJU), Institución Ferial de Extremadura (FEVAL), Fundación COMPUTAEX, Fundación para el Desarrollo de la Ciencia y la Tecnología y Fundación Parque Científico y Tecnológico de Extremadura (FUNDECYT-PCTEx), Centro Tecnológico Agroalimentario Extremadura (CTAEX), Universidade de Évora, Instituto Politécnico de

Portalegre (IPP), Centro de Biotecnología Agrícola e Agro-Alimentar do Alentejo (CEBAL), Centro Tecnológico para o Aproveitamento e Valorização das Rochas Ornamentais e Industriais (CEVALOR), y Associação Centro de Apoio Tecnológico Agro-Alimentar (CATAA).

Objetivos

El objetivo principal del proyecto es estimular el incremento de la competitividad de los sectores estratégicos y tradicionales, con miras al incremento de la creación de empleo, proponiendo nuevos modelos de organización de la actividad económica y desarrollo de la innovación y la I+D, apoyándose, por un lado en la aplicación de las Tecnologías de la Información y Comunicación y, por otro, en la transferencia de conocimiento.

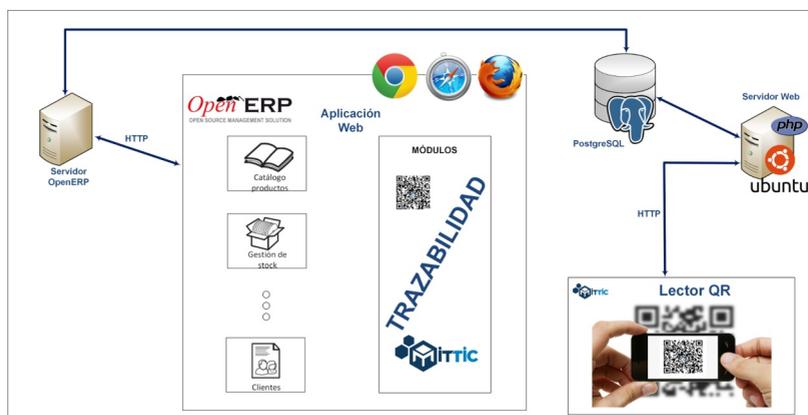
Como objetivos específicos:

- Incrementar la capacidad innovadora en materia de Tecnologías de la Información y la Comunicación de los actores presentes en el desarrollo económico mediante una mejor gestión del conocimiento basada en estructuras compartidas que optimicen la utilización de los recursos en I+D+i y que permita la detección de necesidades y oportunidades conjuntas.
- Modernización tecnológica de la cadena de producción de los sectores tradicionales basados en la utilización de recursos naturales y otros sectores estratégicos, a través de la estimulación de factores de competitividad y de creación de empleo mediante la aplicación de nuevos modelos de negocio o mejora de los existentes basados en el conocimiento y la aplicación de las TIC.
- Intercambiar con los sectores productivos y la sociedad nuevas aplicaciones, procesos o métodos de valorización de productos mediante el uso de herramientas TIC generadoras de nuevas oportunidades de negocio y fomentar la innovación empresarial en los ya existentes.

Metodología

En primer lugar, se llevó a cabo una prospección sobre las tecnologías empleadas en sectores estratégicos y tradicionales y se realizó un diagnóstico del equipamiento y uso de las TIC en dichos sectores.

A partir del diagnóstico efectuado en la primera fase del proyecto se establecieron una serie de acciones para modernizar y desarrollar tecnológicamente, utilizando una base TIC, los sectores productivos analizados (agroganadero, forestal e industria agroalimentaria). En esta segunda fase COMPUTAEX participó en el desarrollo de un sistema de cadena de custodia y trazabilidad para industrias forestales, corcheras y de la piedra natural; basado en códigos QR (Quick Response) y ERP (Enterprise Resource Planning).



Paralelamente al estudio y desarrollo de las soluciones tecnológicas, se realizaron acciones de difusión e innovación tecnológica para potenciar el intercambio de conocimiento con el fin de promover la innovación y el emprendimiento en sectores tradicionales. En este sentido, COMPUTAEX participó activamente en el diseño y desarrollo de la herramienta virtual de dehesas y montados en la Eurorregión Extremadura-Centro-Alentejo, cuyo objetivo es dar a conocer las dehesas y montados, así como todos los recursos, productos y servicios que ofrecen, la industria y el empleo que generan.



A. MATERIA PRIMA



ALTA PRODUCTOS

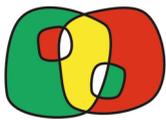


ALTA INCIDENCIAS

Resultados

- Diagnóstico de los sectores tradicionales y estratégicos de Extremadura, Centro y Alentejo sobre el uso, la introducción y penetración de las Tecnologías de la Información y Comunicaciones (TIC) en sus procesos de producción y comercialización.
- Implantación de un sistema que asegure la trazabilidad en la industria corchera y de la roca ornamental.
- Mejora en los sistemas de gestión de las empresas del sector corcho-taponero y de la roca ornamental.
- Herramienta interactiva innovadora sobre las dehesas de la Eurorregión Extremadura-Centro-Alentejo, que fusione tecnología de vídeos e imágenes para dar información viva, lúdica e interactiva para que sea divulgado.

Financiación



PROGRAMA
COOPERACIÓN TRANSFRONTERIZA
ESPAÑA ~ PORTUGAL
COOPERAÇÃO TRANSFRONTEIRIÇA
2007 - 2013

Proyecto financiado por el Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España – Portugal, FEDER-POCTEP. Aprobado por la Comisión Europea el 25 de octubre de 2007, el Programa de Cooperación Transfronteriza España-Portugal 2007-2013 promueve el desarrollo de las zonas fronterizas entre España y Portugal, reforzando las relaciones económicas y las redes de cooperación existentes entre las cinco Áreas definidas en el Programa. Este Programa permite aprovechar las amplias

redes de cooperación existentes que se han venido desarrollando desde 1989, con ejecución de proyectos de infraestructuras materiales, a las que se han incorporado progresivamente otros sectores como el turismo, servicios sociales, medio ambiente, innovación tecnológica, sanidad, educación o cultura.

Financiación total: 1.521.964,84 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 48.000 €

Aquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS

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

Financiación



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

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

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

Importe financiado: 517.253,99 €

Financiado a COMPUTAEX: 517.253,99 €



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

GOBIERNO DE EXTREMADURA

Consejería de
Empleo, Empresa e Innovación
Secretaría General de Ciencia y Tecnología

Proyecto financiado por el V Plan Regional de I+D+i, para el estudio de las series de temperaturas disponibles en la región extremeña, eligiendo aquellas más largas y con menos lagunas. El objetivo principal es el cálculo de los niveles de retorno de temperatura extrema en una situación de cambio climático, y analizar la variabilidad

espacio-temporal de los eventos de olas de calor a partir de salidas de modelos climáticos globales y regionales para periodos actuales y futuros.

Las entidades participantes en el proyecto son: la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX, que aporta recursos humanos y técnicos.

Financiación total: 59.950 €



3

**Proyectos de
investigación soportados**

Proyectos de investigación soportados

CénitS ofrece su infraestructura, sus recursos y apoyo técnico para acometer proyectos (científicos, técnicos o empresariales). En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2015.

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

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

Ciencias de la Tierra



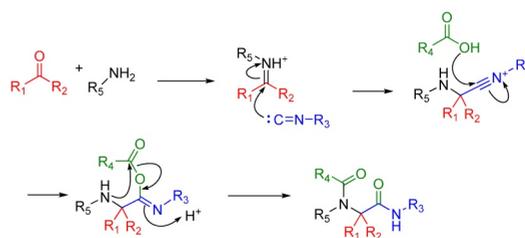
Estudios computacionales en reacciones multicomponentes

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

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

En estas reacciones se combinan simultáneamente 3 o más reactivos con una gran eficiencia atómica, para dar lugar a un nuevo producto que incluye la mayoría de los átomos de partida. Ejemplos clásicos de RMCI son las condensaciones de Ugi y Passerini, que han encontrado múltiples aplicaciones en la industria farmacéutica. Estas reacciones están gobernadas por una serie de

equilibrios reversibles e irreversibles, que pueden verse afectados por sutiles modificaciones en los reactivos de partida o en la condiciones de reacción. Los métodos computacionales son una herramienta muy útil para explicar y fundamentar los resultados experimentales, así como para hacer previsiones con un alto grado de fiabilidad.



Objetivos

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

Metodología

El proyecto consta de una parte experimental en síntesis orgánica y una parte de cálculos computacionales. La investigación sintética se realizará en los laboratorios del grupo en Cáceres. Los cálculos computacionales se llevarán a cabo utilizando el programa Gaussian y constarán de tres etapas diferenciadas:

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

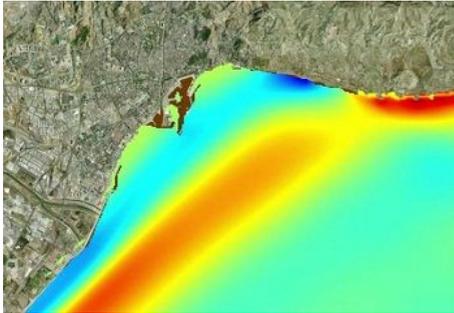
Estas fases serán aplicadas a las distintas líneas de trabajo.

Publicaciones y congresos

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

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

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



El interés en modelar tsunamis se ha incrementado en los últimos años a raíz de las terribles consecuencias del tsunami del océano Índico del 2004 y posteriormente del tsunami ocurrido en 2011 en Japón. Los tsunamis pueden producir efectos catastróficos por medio de olas de gran amplitud y fuertes corrientes que rompen contra la línea de costa. A raíz de la agencia española de cooperación internacional se desarrolló un modelo numérico de propagación de tsunamis para las aguas de Marruecos y el sur de la península ibérica, ambas zonas

sísmicamente activas puesto que la placa africana y la eurásica confluyen en esta zona. A consecuencia de ello, a lo largo de la historia han ocurrido varios tsunamis en la zona. El modelo desarrollado ha sido probado con las simulaciones de los tsunamis históricos de 1755 de Lisboa y de 1856 y 2003 de Algeria para los que existen registros históricos y simulaciones previas. El principal inconveniente de estos modelos es el elevado tiempo de cómputo para obtener resultados acerca de las posibles situaciones de emergencia.

Objetivos

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

Metodología

Para realizar el proyecto se parten de tsunamis conocidos de los que se dispone además de registros históricos de los problemas y catástrofes producidas. Para acelerar la ejecución de las simulaciones se va a proceder a realizar una implementación del código Fortran utilizando MPI y OpenMP. Como primera aproximación al desarrollo del código, se van a evaluar por separado implementaciones puramente basadas en OpenMP y en MPI por separado, para identificar las ventajas e inconvenientes de cada una de ellas en el código. Una vez identificados los puntos de unión de ambas librerías se procederá a realizar una versión híbrida de MPI y OpenMP para mejorar al máximo posible el rendimiento del código.

Magnetic connectivity through the Solar Partially Ionized Atmosphere

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

Being the closest star, the Sun is the only one whose surface can be spatially resolved. Solar astronomers are lucky to obtain information about their object of research at spatial and temporal resolutions impossible in other fields of astrophysics. The state-of-art techniques in modern observational solar physics make it possible to reach a spatial resolution of 0.1 arc seconds, meaning that we can “see” details on the Sun as small as 70 km (the size of the island of Tenerife). To increase our understanding, the models describing the physical processes are forced to be one step ahead in

their degree of realism over the field of stellar astrophysics. This makes the Sun a threshold star. Many stars are similar to the Sun in their magnetic activity cycles, presence of starspots on their surface, or active phenomena such as jets. Understanding the magnetic activity of the Sun can be extended to other stars, guiding theories of stellar structure and evolution.

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

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

Objetivos

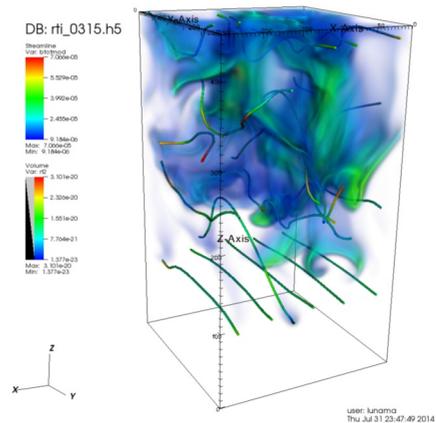
Exploración de una descripción novedosa del plasma de la atmósfera solar que incluye una aproximación multi-fluido.

Metodología

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

Publicaciones y congresos

- "Rayleigh-Taylor instability in prominences from numerical simulations including partial ionization effects", Khomenko, E.; Díaz, A.; de Vicente, A.; Collados, M.; Luna, M., *Astronomy & Astrophysics*, Volume 565, id.A45, 15 pp.
- "Rayleigh-Taylor instability in partially ionized prominence plasma", Khomenko, E.; Díaz, A.; de Vicente, A.; Collados, M.; Luna, M., *Nature of Prominences and their role in Space Weather*. Edited by Brigitte Schmieder, Jean-Marie Malherbe and S.T Wu. *Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium*, Volume 300, pp. 90-93
- "Fluid description of multi-component solar partially ionized plasma", Khomenko, E.; Collados, M.; Díaz, A.; Vitas, N., *Physics of Plasmas*, accepted on 6/08/2014
- "Observations and Implications of Large-amplitude Longitudinal Oscillations in a Solar Filament", Luna, M.; Knizhnik, K.; Muglach, K.; Karpen, J.; Gilbert, H.; Kucera, T. A.; Uritsky, V., *The Astrophysical Journal*, Volume 785, Issue 1, article id. 79, 13 pp.
- "Rayleigh-Taylor instability in partially ionized compressible plasmas: One fluid approach", Díaz, A. J.; Khomenko, E.; Collados, M., *Astronomy & Astrophysics*, Volume 564, id.A97, 16 pp.



- "Prominence Mass Supply and the Cavity", Schmit, Donald J.; Gibson, S.; Luna, M.; Karpen, J.; Innes, D., The Astrophysical Journal, Volume 779, Issue 2, article id. 156, 7 pp.
- "Propagating Waves Transverse to the Magnetic Field in a Solar Prominence", Schmieder, B.; Kucera, T. A.; Knizhnik, K.; Luna, M.; Lopez-Ariste, A.; Toot, D., The Astrophysical Journal, Volume 777, Issue 2, article id. 108, 11 pp.
- "Properties of oscillatory motions in a facular region", Kostik, R.; Khomenko, E., Astronomy & Astrophysics, Volume 559, id.A107, 10 pp.
- "Dislocations in Magnetohydrodynamic Waves in a Stellar Atmosphere", López Ariste, A.; Collados, M.; Khomenko, E., Physical Review Letters, vol. 111, Issue 8, id. 081103
- "Properties of convective motions in facular regions", Kostik, R.; Khomenko, E., Astronomy & Astrophysics, Volume 545, id.A22, 9 pp.
- "Heating of the Magnetized Solar Chromosphere by Partial Ionization Effects", Khomenko, E.; Collados, M., The Astrophysical Journal, Volume 747, Issue 2, article id. 87, 11 pp.

Simulación del clima mediante el modelo WACCM

José Agustín García. Departamento de Física de la Universidad de Extremadura. Guadalupe Saenz García, Francisco Javier Acero Díaz y María Cruz Gallego Herrezuelo.

Objetivos

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

Objetivos alcanzados

- Se han realizado dos simulaciones del clima, una con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y la otra con el modelo CESM (Community Earth System Model). La primera se ha realizado para complementar una realizada el año anterior pero con un forzamiento externo de 8.5 W/m^2 en 2100. La segunda se ha realizado para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional.

- Se está trabajando también en la simulación mediante un modelo regional. Esta segunda integración se espera que será útil entre otros proyectos, al proyecto RITECA, en el que se encuentra involucrado el propio CénitS.
- Se puso a punto y se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Así mismo, se realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Community Earth System Model)..
- La idea de este proyecto es analizar la posibilidad de la realización de simulaciones climáticas mediante el supercomputador LUSITANIA. Los modelos anteriores son modelos desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, USA) y están especialmente adaptados para uso en sus ordenadores.
- Resulta del máximo interés conocer si estos programas, convenientemente compilados, se pueden ejecutar en otro tipo de máquinas y si los resultados obtenidos en éstas son comparables a los obtenidos en el NCAR.
- Un análisis de los datos obtenidos indica que, efectivamente, los resultados son comparables a los obtenidos en los ordenadores del NCAR.

Publicaciones y congresos

- A. García, G. Sáenz, M.G. Chamorro, D. Barriopedro, J. Añel y R. García. "A comparison of dynamical tropopause pressure from WACMM and ERA-40". 14th Annual CCSM Workshop, Breckenridge, Colorado, 15-18 Junio de 2009.
- "A comparison of dynamical and thermal tropopause pressure from ERA-40 reanalysis data". The Extra-Tropical UTLS: Observations, concepts and future directions. Community workshop at NCAR, Boulder, CO, October 19-22, 2009.
- Estudio de la tropopausa extratropical mediante el modelo WACCM. Presentación en Ibergrid 2010.

Ciencias de la Vida



Estudio de efectos estereoelectrónicos en heterociclo saturados hidroxilados

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

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

Metodología

Cálculos de energías relativas de los compuestos estudiados

Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas

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

Objetivos

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

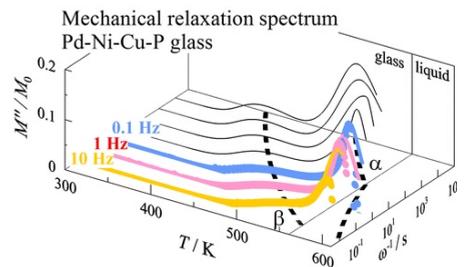
Metodología

Utilización del paquete de programas Gaussian para abordar el estudio.

Flow-induced anisotropy in metallic glasses

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

Se denominan vidrios metálicos a los materiales amorfos compuestos mayoritariamente por elementos metálicos. Los vidrios metálicos fueron descubiertos en 1960, y desde entonces han sido objeto de gran interés científico a causa de sus peculiares propiedades. La falta de estructura cristalina permite obtener materiales con resistencia mecánica superior a aleaciones cristalinas de composición similar, y también se han obtenidos excelentes aleaciones magnéticas blandas, que se utilizan en transformadores de muy bajas pérdidas.



Los vidrios metálicos se producen por enfriamiento rápido, de forma similar a los vidrios tradicionales basados en óxido de Silicio. Durante el enfriamiento la viscosidad del líquido aumenta varios órdenes de magnitud, y cuando la viscosidad supera un valor crítico el líquido sobreenfriado queda cinemáticamente “congelado”. Es decir, el material conserva la estructura atómica del líquido del que procede. Este proceso se conoce como transición vítrea, y es uno de los problemas abiertos en la investigación de la física de materiales. Se trata de un problema complejo de mecánica estadística no estacionaria, y por este motivo la simulación numérica mediante Dinámica Molecular es una técnica muy valiosa en su estudio, complementando la información experimental.

La dinámica de los vidrios por debajo de la transición vítrea es también objeto de intensa investigación. Dado que se trata de materiales fuera del equilibrio termodinámico sufren procesos de relajación hacia estructuras termodinámicamente más estables, en tiempos de relajación que van desde segundos hasta cientos de años. La comprensión de estos procesos es esencial para comprender su respuesta en condiciones de servicio, y por lo tanto para definir sus posibles aplicaciones tecnológicas.

Experimentos recientes han mostrado que la aplicación de esfuerzos mecánicos sobre un vidrio metálico puede generar anisotropía atómica. De este modo, tras la aplicación del esfuerzo se generan direcciones privilegiadas en el vidrio, y las propiedades mecánicas del material en las diferentes direcciones se ven afectadas. Para analizar este fenómeno, el grupo de investigación ha realizado un experimento utilizando radiación Sincrotrón en ESRF (European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Francia), en el que se ha analizado la respuesta estructural de la aleación amorfa Pd₄₂Ni_{7.5}Cu₃₀P₂₀. Se escogió este material porque se trata de un vidrio metálico dúctil, estable en un amplio rango de temperaturas y resistente a la oxidación.

Objetivos

En el proyecto de investigación Flow-induced anisotropy in metallic glasses se simula un vidrio metálico similar al que se ha analizado experimentalmente para comparar los resultados obtenidos mediante simulación numérica de Dinámica Molecular con los resultados experimentales obtenidos mediante radiación Sincrotrón.

La principal diferencia entre las medidas experimentales y la simulación mediante dinámica molecular proviene de las diferentes escalas temporales. Las medidas experimentales se realizan en tiempos de algunos segundos o minutos, mientras que mediante dinámica molecular se pueden

llegar a simular tiempos del orden de algunos nanosegundos. Por esta razón, la dinámica molecular solo se puede comparar cualitativamente con los resultados experimentales.

Experimentalmente se obtienen velocidades de deformación entre 10^{-2} s^{-1} y 10^{-4} s^{-1} . Es decir, se requieren entre 100 s y 10000 s para obtener una deformación de la muestra del 100 %. Las deformaciones máximas estudiadas son del 5 %. Hasta el momento, mediante dinámica molecular se han simulado velocidades de deformación entre 1012 y 1010 s; la deformación del 100 % de la muestra se conseguiría en tiempos entre 0,001 ns y 0,1 ns. En estas simulaciones se ha observado la aparición de anisotropía con deformaciones de hasta el 10 % de la muestra. Para deformaciones superiores se observa la creación de bandas de cizalla (shear bands), ampliamente documentadas en la bibliografía.

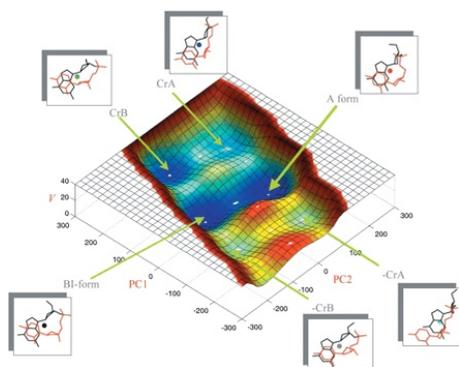
El objetivo concreto del proyecto que se está realizando en CénitS es acercarse a las condiciones experimentales reduciendo la velocidad de deformación y la deformación máxima. Para ello, se están estudiando velocidades de deformación menores, de 108 s, equivalentes a una deformación del 100% de la muestra en tiempos de 10 ns. Las deformaciones máximas a estudiar serán del 2 %, 5 % y 10 %, dado que no estamos interesados en el estudio de las bandas de cizalla.

Metodología

La simulación se realiza utilizando el software lammps, y potenciales tipo embedded atom method, que han demostrado ser adecuados para el estudio de metales, tanto en fase cristalina como amorfa. Lamentablemente, no se dispone de potenciales para el Fósforo, por lo que se está simulando la composición Pd53Ni34Cu13, con la misma proporción entre los elementos metálicos.

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

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



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

Objetivos

- Construir superficies de energía potencial analíticas en sistemas poliatómicos basados en cálculos ab initio de alto nivel.
- Realizar estudios cinéticos y dinámicos de las reacciones en fase gaseosa.

Metodología

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

Objetivos alcanzados

- Cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de la Tesis Doctoral de Manuel Monge-Palacios.
- Investigaciones sobre el sistema Cl+NH₃, el cual presenta una complicada topología en la superficie de energía potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH₃, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremedida la construcción de la superficie.

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.

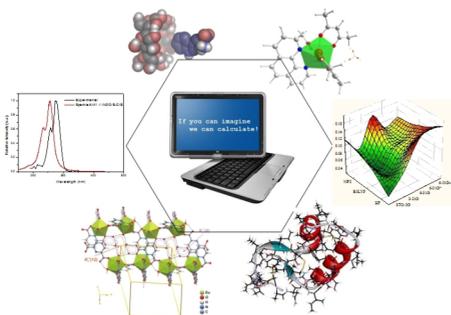
En este proyecto de investigación se pretende sintetizar moléculas anfífilas y bolaanfífilas de distinta geometría, fundamentalmente por reacción de aldosas con moléculas que posean las funcionalidades apropiadas; en este caso, hidrazidas derivadas de diácidos.

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

Química computacional

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



Objetivos

- Desarrollar metodologías para la simulación de procesos de reactividad química en fase gaseosa y en disolución.
- Estudio de propiedades físico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.

Metodología

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

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

QUOREX. Utilización de hidratos de carbono para la preparación de nuevas sustancias de valor añadido.

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

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

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

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

Metodología

- Optimización de las estructuras de moléculas mediante cálculos teóricos.

Objetivos alcanzados:

- Una de las líneas de investigación se ha centrado en la síntesis y estudio estructural de bases de Schiff generadas por condensación de aldehídos aromáticos con aminas de diferente naturaleza (aromáticas, alifáticas, aminopolioles y aminoheterociclos). El estudio estructural, basado en experiencias de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear, se ha completado con estudios teóricos llevados a cabo a nivel DFT, en fase gaseosa y en disolución, que han permitido realizar un completo análisis de los equilibrios imina-enamina en disolución y en estado sólido.
- Se ha realizado el estudio de los equilibrios tautoméricos imina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioletris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G* y M06-2X/6-311++G** se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación ($< 8 \text{ kcal.mol}^{-1}$). A través de un complejo y costoso protocolo computacional se ha modelado la estructura cristalina, lo que ha puesto de manifiesto la mayor estabilidad de la forma enamínica en el retículo cristalino, hecho que concuerda totalmente con los datos obtenidos a través de difracción de rayos X de monocristal.
- Se ha estudiado también la tautomería imina-enamina en derivados de anilinas y o-hidroxinaftaldehídos, tanto en estado sólido como en disolución. Se han realizado cálculos DFT (a nivel B3LYP/6-31G** y M06-2X/6-311++G**) que han permitido obtener las energías relativas de las formas imínicas, enamínicas y de los estados de transición implicados en su transformación. En este caso se ha encontrado que las diferencias de energía entre iminas y enaminas es mucho menor, tanto en estado sólido como en disolución. También se ha cuantificado la proporción de imina presente en todos los equilibrios, mostrando una buena concordancia con las proporciones obtenidas experimentalmente mediante resonancia magnética nuclear. La simulación de la estructura cristalina de un derivado del naftaldehído ha puesto de manifiesto que la estructura imínica es ligeramente más estable que la enamínica, lo cual vuelve a estar de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.
- Se ha estudiado, además de los equilibrios tautoméricos, los perfiles conformacionales de varias hidrazonas derivadas de naftaldehídos y N-aminoheterociclos. Se ha analizado la variación de energía en función del ángulo diedro C-N-N-C a nivel DFT (B3LYP/6-31G* y M06-2X/6-311++G**) incluyendo el efecto del disolvente mediante el método SMD. Con independencia del disolvente, las formas imínicas son en todos los casos las más estables. Sin embargo, la presencia de dos grupos metilo en posiciones orto en el anillo de anilina implica una menor diferencia de energía entre ambos tautómeros. Además, en todos los casos, ha quedado demostrado que la presencia del par de electrones del nitrógeno adyacente al grupo imino es clave en la estabilización de dicha forma tautomérica.
- Simulación de la reactividad química en el interior de cápsulas moleculares. En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método para catalizar reacciones químicas. Se trata de los denominados "matraces" o "cápsulas" moleculares. Éstos consisten en estructuras moleculares que forman una cavidad en su interior, donde se alojan los reactivos y tienen lugar las transformaciones, de forma similar a lo que ocurre en la naturaleza en el caso de las reacciones biocatalizadas por enzimas. El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. Sin embargo, su estudio a través de métodos computacionales no se había abordado hasta el momento debido al elevado número de átomos que son necesarios para la modelización, lo que

hace que el coste computacional sea demasiado elevado. Los cálculos realizados han permitido modelar por primera vez una reacción química en el interior de una de estas macromoléculas. Concretamente, se ha estudiado la cicloadición de alquinos con azidas, que da lugar a triazoles, compuestos muy valiosos desde el punto de vista biomédico.

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

Publicaciones y congresos

- Luciana Dalla-Vechia, Vanessa G. Santos, Marla N. Godoi, David Cantillo, C. Oliver Kappe, Marcos N. Eberlin, Rodrigo O. M. A. de Souza and Leandro S. M. Miranda: On the mechanism of the Dakin–West reaction. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Agosto, 2012. DOI: 10.1039/C2OB26560E.
- Markus Damm, Christoph Nusshold, David Cantillo, Gerald N. Rechberger, Karl Gruber, Wolfgang Sattler, C. Oliver Kappe: Can electromagnetic fields influence the structure and enzymatic digest of proteins? A critical evaluation of microwave-assisted proteomics protocols. *Journal of Proteomics*. 2012. 1874-3919. doi: 10.1016/j.jprot.2012.07.043.
- Noelia Araújo, Sarah F. Jenkinson, R. Fernando Martínez, Andreas F. G. Glawar, Mark R. Wormald, Terry D. Butters, Shinpei Nakagawa, Isao Adachi, Atsushi Kato, Akihide Yoshihara, Kazuya Akimitsu, Ken Izumori, and George W. J. Fleet. Synthesis from d-altrose of (5R,6R,7R,8S)-5,7-dihydroxy-8-hydroxymethylconidine and 2,4-dideoxy-2,4-imino-d-glucitol, azetidine analogues of swainsonine and 1,4-dideoxy-1,4-imino-d-mannitol, *Org. Lett.*, 2012, 14, 4174–4177. doi: 10.1021/ol301844n
- Cantillo, D., Ávalos, M., Babiano, R., Cintas, P., Jiménez, J. L. and Palacios, J. C. (2012): On the Prebiotic Synthesis of D-Sugars Catalyzed by L-Peptides: Assessments from First-Principles Calculations. *Chemistry: A European Journal*. 18: 8795–8799. doi: 10.1002/chem.201200466.
- David Cantillo, Hassan Sheibani, and C. Oliver Kappe. Christian Doppler Laboratory for Microwave Chemistry (CDLMC) and Institute of Chemistry, Karl-Franzens-University Graz, Heinrichstrasse 28, A-8010 Graz, Austria: Flash Flow Pyrolysis: Mimicking Flash Vacuum Pyrolysis in a High-Temperature/High-Pressure Liquid-Phase Microreactor Environment. *The Journal of Organic Chemistry* 77 (5), pp 2463–2473. Febrero de 2012.

- David Cantillo, Bernhard Gutmann, and C. Oliver Kappe: Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst. *The Journal of Organic Chemistry*. 7 Marzo, 2011.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, Mark E. Light, José L. Jiménez, Juan C. Palacios, Esther M.S. Pérez, Vicenta Rastrojo: Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: Structure and stereodynamics. *Tetrahedron*. Marzo de 2011, 67, 2025–2034.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Abril de 2011, 7, 1850–1857.
- David Cantillo: Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage. *European Journal of Inorganic Chemistry*. Mayo de 2011, 3008–3013.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, Juan C. Palacios: Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarene-carbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution. *European Journal of Organic Chemistry*. Mayo de 2011, 3137–3145.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of salicylaldehydes and hydroxyl naphthaldehydes investigated in solution and the solid state. XVI Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica, Universidad de Burgos, 19-24 junio, 2011.
- David Cantillo, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez and Juan C. Palacios: On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks. A theoretical rationale. *Organic and Biomolecular Chemistry*. Agosto de 2011, 7638–7642.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar: Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Septiembre de 2011, 7, 3694–3701.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Septiembre de 2011, 9, 8268–8275
- Luciana Dalla-Vechia, Vanessa G. Santos, Marla N. Godoi, David Cantillo, C. Oliver Kappe, Marcos N. Eberlin, Rodrigo O. M. A. de Souza and Leandro S. M. Miranda: On the mechanism of the Dakin–West reaction. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Agosto, 2012. DOI: 10.1039/C2OB26560E.
- Markus Damm, Christoph Nussold, David Cantillo, Gerald N. Rechberger, Karl Gruber, Wolfgang Sattler, C. Oliver Kappe: Can electromagnetic fields influence the structure and enzymatic digest of proteins? A critical evaluation of microwave-assisted proteomics protocols. *Journal of Proteomics*. 2012. 1874–3919. doi: 10.1016/j.jprot.2012.07.043.
- Noelia Araújo, Sarah F. Jenkinson, R. Fernando Martínez, Andreas F. G. Glawar, Mark R. Wormald, Terry D. Butters, Shinpei Nakagawa, Isao Adachi, Atsushi Kato, Akihito Yoshihara, Kazuya Akimitsu,

Ken Izumori, and George W. J. Fleet. Synthesis from d-altrose of (5R,6R,7R,8S)-5,7-dihydroxy-8-hydroxymethylconidine and 2,4-dideoxy-2,4-imino-d-glucitol, azetidine analogues of swainsonine and 1,4-dideoxy-1,4-imino-d-mannitol, *Org. Lett.*, 2012, 14, 4174–4177. doi: 10.1021/ol301844n

- Cantillo, D., Ávalos, M., Babiano, R., Cintas, P., Jiménez, J. L. and Palacios, J. C. (2012): On the Prebiotic Synthesis of D-Sugars Catalyzed by L-Peptides: Assessments from First-Principles Calculations. *Chemistry: A European Journal*. 18: 8795–8799. doi: 10.1002/chem.201200466.
- David Cantillo, Hassan Sheibani, and C. Oliver Kappe. Christian Doppler Laboratory for Microwave Chemistry (CDLMC) and Institute of Chemistry, Karl-Franzens-University Graz, Heinrichstrasse 28, A-8010 Graz, Austria: Flash Flow Pyrolysis: Mimicking Flash Vacuum Pyrolysis in a High-Temperature/High-Pressure Liquid-Phase Microreactor Environment. *The Journal of Organic Chemistry* 77 (5), pp 2463–2473. Febrero de 2012.
- David Cantillo, Bernhard Gutmann, and C. Oliver Kappe: Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst. *The Journal of Organic Chemistry*. 7 Marzo, 2011.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, Mark E. Light, José L. Jiménez, Juan C. Palacios, Esther M.S. Pérez, Vicenta Rastrojo: Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: Structure and stereodynamics. *Tetrahedron*. Marzo de 2011, 67, 2025-2034.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Abril de 2011, 7, 1850–1857.
- David Cantillo: Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage. *European Journal of Inorganic Chemistry*. Mayo de 2011, 3008-3013.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, Juan C. Palacios: Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarene-carbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution. *European Journal of Organic Chemistry*. Mayo de 2011, 3137-3145.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of salicylaldehydes and hydroxyl naphthaldehydes investigated in solution and the solid state. XVI Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica, Universidad de Burgos, 19-24 junio, 2011.
- David Cantillo, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez and Juan C. Palacios: On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks. A theoretical rationale. *Organic and Biomolecular Chemistry*. Agosto de 2011, 7638–7642.
- Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar: Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Septiembre de 2011, 7, 3694-3701.
- R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state. *Organic & Biomolecular*

Chemistry. Septiembre de 2011, 9, 8268–8275

- M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. *Theoretical Chemistry Accounts*. Octubre de 2011, 128, 783-793.
- Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín: Study on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution by using the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics methodology. *The Journal of Chemical Physics* 135, 194502. Noviembre de 2011.
- Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Radiative and Nonradiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore. *Journal of Chemical Theory and Computation*. Noviembre de 2011.
- M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. *Theoretical Chemistry Accounts*. Octubre de 2011, 128, 783-793.
- Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín: Study on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution by using the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics methodology. *The Journal of Chemical Physics* 135, 194502. Noviembre de 2011.
- Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Radiative and Nonradiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore. *Journal of Chemical Theory and Computation*. Noviembre de 2011.

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

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

Air pollution is attracting an increasing attention through-out the world. SO₂, mainly emitted from fossil-fuel combustion, is one of the main air pollutants. Besides, SO₂ is also an important and useful source for many intermediates in chemical synthesis. Thus, to develop efficient techniques to control the emissions of SO₂ would have a pivotal role for the use of fossil fuels from an environmental point of view. Nowadays, the most effective methods to control SO₂ emissions from fossil fuel combustion are based on flue gas desulphurization (FGD) using several technologies such as water scrubbing, metal ion solution, catalytic oxidation, activated carbon adsorption, wet lime or limestone scrubbing, double alkali process, ammonia scrubbing, NH₃ gas injection, and organic solvent absorption.

However, most of these methods show several problems. For example, thus methods need a large amount of water and subsequent treatment of the resultant waste, or they produce calcium sulfate, between others. One of the most interesting techniques for the capture of a concrete compound from a mixture of gases in a gas stream is selective absorption into a liquid. In this sense, ionic liquids (ILs) have received an increasing attention in the field of acid gases (for example CO₂ or SO₂) capture owing to their unique properties such as negligible vapor pressures, high thermal stability, wide liquid temperature ranges, and the possibility of tailoring their properties for and specific applications through the judicious combination of suitable ions.⁶ So far, ILs have been demonstrated

to be very useful to absorb CO₂ from mixed gases or flue gases with high absorption capacity and selectivity and they can be easily regenerated (see review works by Brennecke et al. and Ramdin et al., and references therein, for an analysis of the state-of-the-art for CO₂ capture using ILs). Unfortunately, researches about ILs for SO₂ capture are scarcer in comparison with CO₂.^{2,3,5,6} To design new ILs with improved / concrete features for SO₂ capture, or acid gases capture, in general, we need a deeper knowledge from a molecular point of view about those factors which govern absorption process and their relationship with the molecular structure. Often, the properties of this kind of systems are due to the contribution of several complex factors, which are not completely described for the quantum chemical methods. Even if, these have been prove to be a powerful tool to obtain better insights into interactions between ILs and CO₂. To our knowledge, there are few works dealing with SO₂ capture from a quantum chemical perspective.

Objetivos

Therefore, this work is devoted to a predictive study of those properties related with interactions between ILs and SO₂ from a molecular point of view through a quantum methodology, mainly Density Functional Theory (DFT) calculations (see 3.4 section). The obtained results will allow understanding the relationships between molecular structure and properties and proposing new ILs or modifications of those existing to obtain systems with improved features for SO₂ capture.

Metodología

This project is devoted to obtain a deeper knowledge about the SO₂ capture and its relation with the molecular structure from a quantum chemistry perspective. Most of the works about acid gases capture through DFT calculations are referred to CO₂ absorption, which mostly employ B3LYP functional along Pople's basis sets (such as 6-311+G** or 6-31+G**) in gas phase.⁹ About SO₂ capture, theoretical works are still scarce, and most also use B3LYP functional.⁶ When the acid gas capture occurs through a physical sorption process (physisorption), we could classify the interaction in our system into two groups: i) ionic interactions between cation and anion forming the IL; and ii) Dispersion interaction between acid gas and ILs. Due to the nature of these interactions, the first step in the study of SO₂ capture from a DFT perspective should have been to analyze the effect of the employed functional about SO₂ capture related properties, such as geometries and interactions energies (between ionic pairs of the IL and absorbate and the gas and the IL). This study will allow us obtain information, between others, about the effect of the employed functional (pure, hybrid, meta-GGA, % Hartree-Fock, HF, contribution) about the calculated properties. For such purpose, the first step in this study is to choose a set of several functionals, such as: pure functional (PBE, BLYP), hybrid and meta-GGA functional with different % HF (B3LYP: 20%, PBE0: 25% and M06: 27%, M06-2X: 54%, M06-HF: 100%), range separated hybrid functional with an asymptotically %HF (LC-PBE, CAM-B3LYP, ω B97X). Due to the possible dispersion interactions between the gas and the ionic liquids, we will also use dispersion corrected functionals according the semiempirical model proposed by Grimme: PBE-D, PBE0-D, B3LYP-D, ω B97XD, which use Grimme's D2 dispersion model.

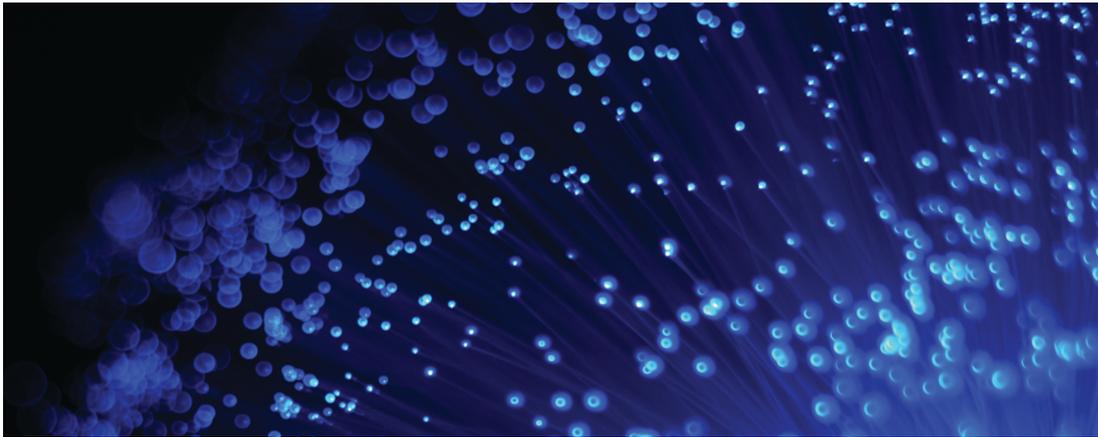
Finally, pure HF and MP2 calculations will also carried out. The Pople's 6-31+G** and 6-311+G** basis sets have been selected. Thus, we can also test the effect of the basis sets. Due to the high computational cost, MP2 would be done over B3LYP geometries, and obtained MP2/6-311+G** energies will be considered as reference energies. From this systematic work, we should be also able to select a suitable functional based on calculated properties and computational cost. For this purpose a set of common alkyl-imidazolium cation based ILs amply used to capture acid gases have been selected. Although this project is devoted to SO₂ capture, this kind of study is also required for CO₂ capture. For our calculations, our model is constituted by the anion and the cation corresponding to the IL and the absorbed molecule. At the beginning all calculation will be done in

gas phase. Actually, sulfonated gases from fossil-fuel combustion are mixture of several gases besides SO₂, such as CH₄, H₂, or N₂. In this sense, obtain information about the selectivity of the ILs is also important. Therefore, the next step in our work is considered a molecule of another gas (CH₄, H₂, or N₂) along and without SO₂ to obtain information about the selectivity of a concrete ILs from a molecular point of view. So far, all proposed computational works would be due in gas-phase. However, once know the dielectric constant of a given IL (obtained from experimental measures or Molecular Dynamics Simulations carried out in our laboratory), we could also study the SO₂ capture in a most realistic liquid environment through continuum solvation model (CPCM).

Publicaciones y congresos

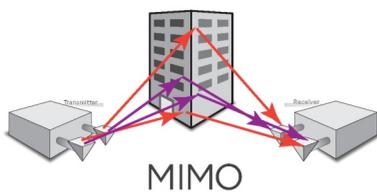
- S. Aparicio, M. Atilhan. Molecular Dynamics Study of Carbon Nanostructures in N-Methylpiperazinium Lactate Ionic Liquid. *J. Phys. Chem. C* 2013, 117, 22046.
- S. Aparicio, M. Atilhan. On the Properties of CO₂ and Flue Gas at the Piperazinium-Based Ionic Liquids Interface: A Molecular Dynamics Study. *J. Phys. Chem. C*, 2013, 117, 15061.
- F. Karadas, B. Köz, j. Jacquemin, E. Deniz, D. Rooney, J. Thompson, C. T. Yavuz, M. Khraisheh, S. Aparicio, M. Atilhan. High Pressure CO₂ Absorption Studies on Imidazolium-Based Ionic Liquids: Experimental and Simulation Approaches. *Fluid Phase Equilibr.*, 2013, 351, 74.
- J. Y. Jung, F. Karadas, S. Zulfiqar, E. Deniz, S. Aparicio, M. Atilhan, C. T. Yavuz, S. M. Han. Limitations and High Pressure Behavior of MOF-5 for CO₂ Capture. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2013, 15, 13319.
- S. Aparicio, M. Atilhan. A Computational Study on Choline Benzoate and Choline Salicylate Ionic Liquids in the Pure State after CO₂ Adsorption. *J. Phys. Chem. B*, 2012, 116, 9171.

Ciencias Informáticas y de Comunicaciones



Redes inalámbricas MIMO de última generación en zonas rurales

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



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

han recibido una tremenda atención científica en los últimos años, precisamente porque las primeras formulaciones ergódicas preveían incrementos de las capacidades que eran linealmente proporcionales al número de antenas empleadas, lo que provocaba eficiencias espectrales inauditas y de enorme impacto potencial. Sin embargo, el increíble número de publicaciones científicas sobre MIMO que se observan en los últimos años ha ido mejorando el conocimiento de estos sistemas, que se han revelado recientemente como bastante más complejos de lo que en principio podría parecer.

Esta técnica ha sido implementada con éxito en zonas urbanas, mediante sistemas de hasta 4x4 o incluso 8x8 en algunos casos. Sin embargo, todavía quedan muchos problemas por resolver, como la integración de las antenas en un terminal móvil con espacio reducido, la extensión de los modelos de propagación a entornos rurales, el uso de elementos multipolarizados para incrementar la capacidad, y la falta de cobertura en interiores al producirse una pérdida de señal en la transición outdoor-indoor. Además, algunos trabajos han comenzado a describir la necesidad de incorporar muchos más elementos (100 o más), para que la próxima generación de comunicaciones móviles pueda alcanzar las tan ansiadas velocidades de Gigabits por usuario. Este estado del arte hace que exista ahora mismo un nicho de investigación en los sistemas MIMO, a pesar de ser un “hot topic” en los últimos años.

Objetivos

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

- El primer objetivo es la caracterización de los canales de propagación MIMO para zonas rurales. En este objetivo se incluye la caracterización de los nuevos canales para los sistemas MIMO distribuidos (sistemas MIMO en los que las distintas partes del sistema están separadas entre sí). Conociendo las características del canal se podrán diseñar más eficientemente las antenas, tanto en la estación base como en el terminal móvil, al tiempo que se podrá abordar el diseño de sistemas radiantes que permitan salvar transición outdoor-indoor.
- Además, el Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de la Construcción (INTROMAC) integrará los sistemas radiantes en materiales de construcción. Estas mejoras en el diseño de los sistemas radiantes son el segundo objetivo del proyecto.
- Una vez realizado el cambio de modelo, el tercer objetivo es que estas redes sean muy eficientes energéticamente hablando, para lo que se abordará la mejora de la eficiencia en las redes de comunicaciones desde diversos y complementarios puntos de vista: primero la mejora de los algoritmos de enrutamiento en función del canal de propagación estudiado en el objetivo 1, segundo la implementación de algoritmos de estimación de la dirección de llegada (Direction of Arrival (DoA) en inglés), y finalmente, de algoritmos de apuntamiento selectivo o conformadores de haz (Beamforming en inglés), para que la zona radiada por las antenas sea lo más precisa posible y por tanto se reduzcan las emisiones.
- Por último, las futuras redes de comunicaciones [Samsung 2013] deberán implementar MIMO con un número alto de antenas, lo que se ha denominado "MIMO Massive". La caracterización del canal y el diseño de sistemas radiantes que tengan baja correlación entre elementos, y por tanto una alta capacidad, suponen un reto científico muy ambicioso, que constituirá el cuarto objetivo de este proyecto. Para poder realizar este reto se hará necesario una gran capacidad de cómputo, para lo cual se cuenta con el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CenitS).

Metodología

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



4

**Proyectos de
innovación tecnológica**



Proyectos de innovación tecnológica

Desde su creación, CénitS ha colaborado activamente en el desarrollo de proyectos de innovación tecnológica. En esta sección se relacionan los correspondientes al año 2015. Cabe destacar que aunque estos proyectos se caracterizan principalmente por aportar innovaciones tecnológicas a empresas y organismos que pueden utilizar los resultados obtenidos para mejorar sus métodos y su productividad, también presentan una importante carga investigadora.

Plan de Innovación en la PYME RIS3-AGROTECH

El Programa Bonos de Innovación y Vales Tecnológicos del Plan de Innovación en la Pyme RIS3 – AGROTECH, diseñado y desarrollado por Extremadura Avante Servicios Avanzados a Pymes, es una actuación encaminada a apoyar a las empresas extremeñas de pequeño tamaño (autónomos, microempresas y pequeñas empresas) y a las del medio rural en la puesta en marcha de microproyectos innovadores que les permitan acceder a los mercados en condiciones de igualdad con empresas de mayor tamaño y de entornos urbanos más desarrollados, afrontando los desafíos regionales de alto impacto y las líneas de especialización de Extremadura, según su Estrategia Regional de Investigación e Innovación para la Especialización Inteligente (RIS3 de Extremadura).

Con los Vales Tecnológicos las empresas pueden acceder a servicios de asesoramiento y asistencia técnica prestados por entidades de I+D+i, de manera que puedan adquirir conocimientos técnicos e incorporar tecnologías que les proporcionen innovaciones de rápida ejecución, bajo coste y alto impacto en su capacidad competitiva, en las áreas de excelencia para la especialización inteligente de RIS3 – AGROTECH y su relación con los dominios científico-tecnológicos transversales identificados en el análisis del Patrón de Especialización Inteligente de Extremadura.

De este modo, la Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS fueron homologados por Extremadura Avante como proveedores de servicios de innovación tecnológica en el área de las TIC.

Los servicios ofrecidos constaron de tres fases: auditoría, diseño del proyecto y desarrollo del mismo.

Primera fase: durante esta primera fase, de vital importancia, se efectuó un exhaustivo análisis de la

demanda tecnológica de la empresa y se identificaron las posibles soluciones a ejecutar posteriormente en el desarrollo del proyecto. Esto permitió a COMPUTAEX conocer los antecedentes, situación actual y el proceso a seguir para poder tomar la mejor decisión con respecto a la estrategia de innovación y a la determinación de un proyecto de I+D+i concreto y de bajo coste, pero con un importante impacto en la mejora competitiva de la empresa.

Segunda fase: durante esta fase se definieron el alcance, los objetivos y los resultados. Se llevó a cabo una definición de actividades, la secuencia y duración de las mismas, el desarrollo del calendario, la planificación de los recursos, la planificación organizativa, la adquisición y asignación de recursos, junto con la planificación de comunicación. Esto quedó reflejado en un documento que incluía la descripción del proyecto, objetivos y actividades a desarrollar. Concretamente, se definió un plan de trabajo que consideraba los siguientes puntos: identificación, objetivos, persona responsable, componentes del equipo, memoria descriptiva, alcance y plan de actividades. Además, se identificaron necesidades tecnológicas y demandas, al mismo tiempo que se determinaron debilidades y aspectos de mejora en los procesos productivos de la cadena de valor, tratando no sólo de ajustar el sistema al momento actual, sino poder crear la estructura necesaria para determinar escenarios futuros.

Tercera fase: durante la tercera y última fase, COMPUTAEX llevó a cabo la ejecución del proyecto diseñado, orientado fundamentalmente al desarrollo de procesos y productos innovadores a través de avances y mejoras de los rendimientos de fabricación o prestación de servicios, teniendo en cuenta los siguientes tipos de actuación:

- Asistencia tecnológica que cubre aspectos como el control de calidad, análisis y ensayos, homologaciones, diseño y solución de problemas puntuales de rápida ejecución.
- Licencia tecnológica: COMPUTAEX autorizó a cada empresa a utilizar su tecnología de conformidad con ciertos términos y condiciones previamente acordados.
- Asesoramiento en la adopción de una tecnología innovadora, incluyendo técnicas, herramientas y metodologías de conocimiento e innovación, para que en el futuro se puedan implantar otros proyectos innovadores que permitan generar nuevas oportunidades de negocio y productos innovadores dentro del campo de ARRANZERAMICA.
- Asesoramiento en el uso de normas para la adopción de medidas o mejoras derivadas de necesidades concretas de innovación.
- Seguimiento y control de la innovación durante el desarrollo del proyecto.

ARRANZERAMICA S.L.



Se detalla a continuación el vale tecnológico desarrollado por la Fundación COMPUTAEX para la empresa ARRANZERÁMICA S.L., dedicada a la venta de cerámicas, sanitarios, griferías, mamparas, mobiliario de baño, accesorios de baño y cocinas, y que necesitaba mejorar el sistema de etiquetado de sus productos, utilizado en su establecimiento. Para ello, se desarrolló un estudio previo sobre la tipología de pantallas a utilizar para visualizar correctamente la información de los distintos productos. Del mismo modo, fue necesario identificar adecuadamente la tecnología que permitiese el intercambio de datos con el sistema de Planificación de Recursos Empresariales (ERP, Enterprise Resource Planning) utilizado para gestionar el negocio.

EXPOSITOR 2/BODEGON 3	SERIE SERENITY	BEIGE - MARRON
210363	CEN. 9.5X60.5 SERENITY BEIGE	17.13 €/UND
0281	REV. 20X60.5 SERENITY BEIGE	26.59 €/M2
210361	DEC. 20X60.5 SERENITY BGMR	31.08 €/UND
210365	L. 4.5X60.5 SERENITY BGMR	10.48 €/UND
0282	REV. 20X60.5 SERENITY MARRON	26.59 €/M2
210409	L. 2X60.5 YANG BLANCO	11.22 €/UND
210407	L. 2X60.5 YANG BLANCO	11.22 €/UND
210413	DEC. 20X60.5 QUO BEIGE	28.46 €/UND
210423	DEC. 20X60.5 EDEN MARRON	26.43 €/UND
I.V.A. INCLUIDO		
		2402/2014

Así, en relación a la asesoría sobre el sistema de etiquetado, se estudió el estado actual del mercado, identificando aquellas empresas de etiquetado electrónico que ofrecían servicios completos y funcionales, cumpliendo los estándares y requisitos buscados. Posteriormente, se seleccionaron aquellas empresas dedicadas al etiquetado que mejor se adaptaban al sistema actual y a las necesidades de ARRANZRAMICA. Partiendo de esa selección, se elaboró un informe con las empresas más adecuadas para la adquisición e implantación de sistemas de etiquetado. Finalmente, se comenzaron a realizar las gestiones para la implantación de un sistema de

etiquetado electrónico, mediante el intercambio de información con las empresas que COMPUTAEX consideraba que ofrecían la mejor solución, de acuerdo a los requisitos establecidos. A partir de estas gestiones se elaboró la documentación correspondiente, incluyendo, como no podría ser de otro modo, un presupuesto final detallado, en base a los servicios ofrecidos por cada empresa.

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



El proyecto INRETEL, enmarcado en el Programa Coinvestiga, y destinado a financiar la realización de proyectos de I+D por agrupaciones de empresas, en las áreas estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i (20142017), surgió para investigar cómo se ejecutan los procesos

de reclamación de servicios de telecomunicaciones actuales, y cuáles son los tipos de incidencias más comunes, a través del análisis masivo de usuarios de telecomunicaciones mediante técnicas de Big Data, con el fin de aportar nuevos métodos y procesos que faciliten la gestión de las reclamaciones a los consumidores.

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

Entidades participantes

El proyecto, que fue liderado por Trecone, también contó con la participación de las empresas extremeñas Grupo Área de Derecho S.L.P. y Solucionex Consultoría y Desarrollo S.L., los centros tecnológicos CETA-Ciemat, Feval y CénitS, y la Unión de Consumidores de Extremadura como asociación colaboradora.

Objetivos

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

Objetivos alcanzados

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

Financiación

GOBIERNO DE EXTREMADURA

Consejería de
Empleo, Empresa e Innovación
Secretaría General de Ciencia y Tecnología

Proyecto financiado por el Programa Coinvestiga, destinado a financiar la realización de proyectos de de investigación industrial y/o desarrollo experimental por agrupaciones de empresas, con la participación efectiva de un Centro de I+D perteneciente al Sistema Extremeño de Ciencia y Tecnología e Innovación (SECTI), en las áreas

estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i.

Financiación total: 667.059 €

Financiación COMPUTAEX: 24.805 €

S4I - Software Sensor for Smart Infraestructures

El proyecto S4I, enmarcado en el Programa Coinvestiga, destinado a financiar la realización de proyectos de I+D por agrupaciones de empresas en las áreas estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i (2014-2017), se sitúa en el contexto de la correcta gestión de las infraestructuras de construcción mediante la utilización de sistemas de monitorización y telemetría sofisticados, capaces de evaluar el estado

de salud estructural de las infraestructuras de forma continuada durante toda su vida útil. Este proyecto ha propuesto el desarrollo de un sistema basado en el concepto de Software Sensor, que analiza y optimiza las operaciones de construcción, gestión, explotación y mantenimiento, durante todo el ciclo de vida de una infraestructura, aportando información que permite desplegar diferentes estrategias, con el fin de alargar su vida útil y garantizar su seguridad durante el tiempo que ofrezca servicio.



Entidades participantes

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

Objetivos

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



- Seleccionar la estrategia más adecuada a desplegar en una estructura real atendiendo a criterios técnicos, económicos y de mercado.

Objetivos alcanzados

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

Financiación

GOBIERNO DE EXTREMADURA

Consejería de
Empleo, Empresa e Innovación
Secretaría General de Ciencia y Tecnología

Proyecto financiado por el Programa Coinvestiga, destinado a financiar la realización de proyectos de de investigación industrial y/o desarrollo experimental por agrupaciones de empresas, con la participación efectiva de un Centro de I+D perteneciente al Sistema Extremeño de Ciencia y Tecnología e Innovación (SECTI), en las áreas

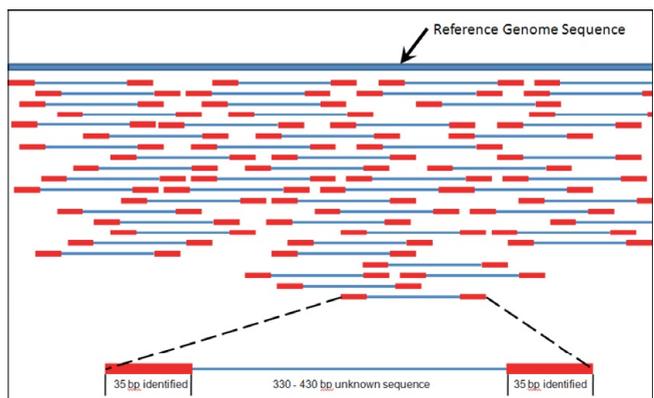
estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i.

Financiación total: 669.243 €

Financiación COMPUTAEX: 113.546 €

Utrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación

Este proyecto, asistencial y de investigación, está siendo desarrollado por el Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres (Servicio Extremeño de Salud) en colaboración con investigadores de la Fundación COMPUTAEX. Las nuevas técnicas de secuenciación masiva de ADN, cuyo uso se está imponiendo en el ámbito de la genética y la bioinformática, permiten secuenciar el genoma de un ser humano con una reducción en términos de tiempo y coste económico cada vez mayor. Por ello, se hace necesaria la utilización de supercomputadores como LUSITANIA, que además de procesar la ingente cantidad de datos generada, para poder estudiar la información contenida en el ADN, permite simular rasgos complejos de genes, estructuras subatómicas y tridimensionales, así como aminoácidos de las proteínas.



Investigadores

Luis Fernández Pereira, Silvia Romero Chala y José Antonio García Trujillo. Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara.

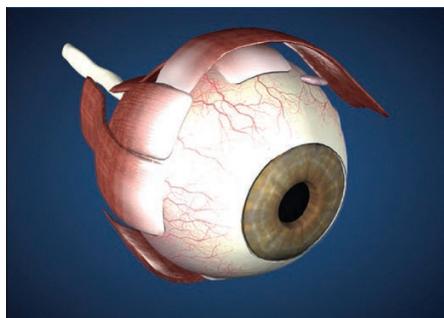
Objetivos

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

Objetivos alcanzados

- Se ha dispuesto la infraestructura necesaria, mediante un modelo de Cloud Computing, para llevar a cabo las diferentes tareas de procesamiento de la información obtenida al llevar a cabo las tareas del flujo de trabajo de un estudio de resecuenciación del ADN de cualquier paciente.
- Se ha colaborado de forma directa en el procesamiento de diversas muestras de ADN como ejemplos del modelo de procesamiento que estos sistemas ejecutan, a modo de entrenamiento y preparación técnica del personal de la Fundación COMPUTAEX.
- Se ha completado la secuencia del exoma de un paciente anónimo de forma autónoma e independiente, obteniendo datos para que los especialistas interpreten la predisposición de esa persona al desarrollo de determinadas enfermedades hereditarias.
- Se ha trabajado para desarrollar herramientas para la interpretación, de forma manual, de la información obtenida en el procesamiento de las secuencias genéticas procesadas en LUSITANIA.

Unidad Interactiva 3D



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

Investigadores

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

Objetivos

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



5

Proyectos concluidos



Proyectos concluidos

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

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

Ciencias de la Tierra

ABAQUS

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

Objetivos

Optimizar la geometría de andamiajes para ingeniería de tejido óseo, es decir, de estructuras biocerámicas y andamiajes híbridos bioactivos cerámico/polímero fabricados mediante la técnica de moldeo robotizado (robocasting), gracias a la simulación, usando el método de elementos finitos, de diversos ensayos mecánicos (compresión, tracción, etc.) y de permeabilidad en este tipo de estructuras.

Publicaciones y congresos

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

Aplicación de la supercomputación en el ámbito de los procesos energéticos y las energías renovables mediante elementos finitos.

Eduardo Sabio Rey. Universidad de Extremadura.

El Grupo de Investigación "Aprovechamiento Integral de Residuos Biomásicos. Energías Renovables" (GAIRBER) se creó en 2005. Centra su investigación en el aprovechamiento integral de

residuos biomásicos y la aplicabilidad a la producción de energía, así como a la producción de materiales de alto valor añadido como los carbones activados.

Objetivos

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

Metodología

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

Publicaciones y congresos

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

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

Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

El tráfico rodado es uno de los principales problemas a los que se enfrenta la mayoría de las ciudades. Las nuevas tecnologías (en particular el Cloud Computing y el Big Data) juegan un papel principal a la hora de establecer sistemas de control y seguimiento de los mismos con vistas a facilitar la movilidad y la sostenibilidad. La adecuada gestión del tráfico revierte en un mejor aprovechamiento

de las infraestructuras, en una reducción de las emisiones contaminantes a la atmósfera, en un menor consumo de carburante, en una mejor gestión del tiempo y en un incremento en la seguridad de los ciudadanos.

Objetivos

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

Metodología

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

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

Objetivos alcanzados

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

Fuentes de financiación

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

Cálculos ab-initio

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

Objetivos

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

Distribución de niveles electromagnéticos en determinados entornos geográficos

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

Objetivos

Calcular la propagación electromagnética en entornos reales en cierta banda de frecuencias, analizando la afección de diferentes obstáculos y accidentes geográficos en los niveles de campo detectados a distintas distancias de los transmisores.

Metodología

Se han implementado algoritmos basados en FDTD

(Finite-difference time-domain) para el cálculo de niveles de campo electromagnético en determinadas bandas de frecuencias y la obtención de resultados fiables de cara a computar la afección de radiaciones en el cuerpo humano. Sistematizar estos algoritmos para su extrapolación en la aplicabilidad a entornos de grandes dimensiones, con el apoyo de información derivada de Sistemas de Información Geográficos (SIG), hace que sea prometedor el uso de supercomputadores en esta materia, debido a la obtención de resultados muy precisos en puntos o áreas críticas de interés.

Evaluación de los recursos eólicos y solares en andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoscala (RENUOVA)

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

La revolución protagonizada por las energías renovables tiene en España a uno de sus mayores impulsores, al ser líder aprovechando la energía eólica y solar. Sin embargo, la variabilidad espacio-temporal de los recursos asociados afecta a su integración en el sistema energético. Además, la radiación y el viento están sujetos a variaciones naturales en un amplio rango de escalas espaciales y temporales, así como a los efectos del cambio climático.

Objetivos

- Estudiar la disponibilidad de los recursos solar y eólico mediante el uso de modelos de predicción numérica.
- Analizar la viabilidad de dichos modelos como herramientas para la predicción de estas fuentes de energía.
- Estudiar la complementariedad de ambos recursos.
- Estudiar la evolución en las próximas décadas de estos dos recursos en el contexto del cambio climático global.

Metodología

Ha estado basada en el uso del modelo Weather Research and Forecasting (WRF), uno de los Modelos Meteorológicos de Mesoscala más usados por la comunidad científica, el cual implementa las ecuaciones físicas que describen las interacciones entre los distintos elementos del sistema climático, dando en cada instante de tiempo una descripción

completa e integral del estado atmosférico en una determinada región.

Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre

Antonio Plaza Miguel de la Universidad de Extremadura.

Las técnicas de análisis de imágenes hiperespectrales, obtenidas a partir de sensores de observación remota de la tierra operados por organismos internacionales como NASA o la Agencia Europea del Espacio (ESA), han seguido una notoria evolución marcada por los avances en el diseño de sensores y en la disponibilidad creciente de arquitecturas de computación de altas prestaciones. El principal inconveniente de las técnicas de análisis es el excesivo coste computacional de las mismas.

Objetivos

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

Metodología

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

The impact of the 11 year cycle in WACCM simulations

Gabriel Chiodo del Departamento de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica 2 de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid. Natalia Calvo de la Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García de la Universidad de Extremadura, Katja Matthes de Helmholtz-Zentrum für Ozeanforschung Kiel GEOMAR (Kiel, Alemania) y Daniel R. Marsh del National Center for Atmospheric Research, Boulder (CO, EEUU).

Objetivos

Realizar integraciones climáticas con el modelo WACCM-3.1.9 (Whole Atmosphere Community Climate Model), el cual es capaz de simular reacciones químicas (como las del ozono estratosférico), y el transporte de una multitud de especies químicas.

Metodología

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

Objetivos alcanzados

- Se ha investigado la influencia del ciclo de 11 años de la radiación solar sobre el clima a través de simulaciones con el modelo climático WACCM.
- Se han llevado a cabo experimentos de sensibilidad forzando el modelo WACCM con la distribución espectral típica de la irradiancia solar en máximos y mínimos del ciclo de 11 años de la actividad solar.
- Se han realizado experimentos con un aumento artificial de 1 % en la UV cercana (300-400 nm), que representa la incertidumbre instrumental en esta banda espectral.

Publicaciones y congresos

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

- G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera, and N.Calvo. SPARC SOLARIS & HEPPA Intercomparison Activities: Sensitivity of the atmospheric response to idealized spectrally resolved solar forcing in WACCM3.5. WCRP Open Science Conference 2011.
- Ponencia de poster en la WCRP - Denver (EEUU) 24/10 - 28/10 de 2011 titulado "Impact of idealized spectral solar forcing in the WACCM-3.5 model", y con agradecimientos al CENITS. G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera and N.Calvo.
- Exposición oral en el congreso Space Climate 4 en Goa (India) Enero 2011. titulada "11-yr solar cycle effects in two coupled chemistry-climate models". G.Chiodo, N.Calvo, H.Schmidt and R.García-Herrera.
- Exposición oral en el congreso SCOSTEP 2010 en Berlín (Alemania) Julio 2010. intitulada "The 11-y solar cycle in transient WACCM-3.5 simulations". G.Chiodo, N.Calvo and R.García-Herrera.

Ciencias de la Vida

Análisis clínico, inmunológico y genético del déficit selectivo de IGA. Estudio longitudinal de los pacientes acumulados en un centro de referencia durante los últimos 18 años

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

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

Objetivos

Estudio de Exoma completo en 3 pacientes seleccionados:

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

B memoria como marcadores predictivos de evolución.

- Constituir un registro de pacientes asintomáticos dispuestos a donar sangre en caso de necesidad (Banco de Sangre "virtual").
- Creación de una genoteca y seroteca de pacientes.

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

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

Objetivos

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

Metodología

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

Objetivos alcanzados

El uso de LUSITANIA permitió calcular los coeficientes monoenergéticos asociados a la corriente de bootstrap en varias posiciones del plasma, teniendo en cuenta varios valores de la colisionalidad y el campo eléctrico, aplicando el código NEO-MC.

Consolider TECNO_FUS

José M^a Gómez Ros. CIEMAT.

Objetivos

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

Construcción de superficies de energía potencial

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

Objetivos

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

Metodología

Ejecución de programas escritos en lenguaje FORTRAN.

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

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

Objetivos

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

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

Francisco Javier Olivares del Valle (coordinador), Manuel Ángel Aguilar Espinosa, José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, María Elena Martín Navarro, Ignacio Fernández Galván, Aurora Muñoz Losa y Francisco Fernández García-Prieto. Investigadores del grupo de investigación QCAMM (Quantum Chemistry And Molecular Modelling) del Departamento de Ingeniería Química y Física de la Universidad de Extremadura.

Objetivos

- El estudio teórico de la espectroscopia y evolución temporal de estados excitados, mediante el desarrollo de un tratamiento teórico unificado para clarificar el papel que representa el disolvente en la desexcitación de estados excitados.
- Abordar la explicación y predicción de los espectros de emisión (fluorescencia y fosforescencia) de moléculas en disolución o el efecto del disolvente sobre procesos fotoquímicos en moléculas de interés biológico: retinal, GFP, etc.

Metodología

Empleo de cálculos teóricos mecanocuánticos de

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

Objetivos alcanzados

- Se han realizado estudios teóricos sobre el fenómeno de la doble fluorescencia en disolventes polares para dos compuestos afines, como son el 1-fenilpirrol y el fluoraceno.
- Se ha completado un estudio sobre los estados excitados de una molécula de interés biológico como el 11-cis-retinal.

Publicaciones y congresos:

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

Estirpex

Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

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

Objetivos

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

Metodología

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

Financiación

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

Estirpex-2

Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

Estirpex-2 persigue la continuidad del trabajo desarrollado en el proyecto Estirpex; concretamente el estudio, desarrollo y despliegue de un catálogo de servicios para sectores económicos relevantes en la región que puedan

beneficiarse de la tecnología de secuenciación genética masiva (NGS, Next-Generation Sequencing), apoyada en el uso de la supercomputación y garantizando la seguridad de la información tratada.

Objetivos

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

Metodología

La primera fase del proyecto ha consistido en un análisis pormenorizado de las implicaciones técnicas asociadas a cada una de las actividades del proyecto: conocer las técnicas y métodos bioquímicos para llevar a cabo un proceso de ultra-secuenciación genética, el equipamiento necesario para ello, los tipos de estudios de secuenciación masiva o el valor estratégico de los servicios propuestos destaca dentro de esta fase ejecutada en el proyecto.

Así mismo, se han implantado soluciones software para apoyar el despliegue de un servicio NGS del catálogo, donde destaca un prototipo en la plataforma OpenNebula, para el procesamiento automático de secuencias generadas por un servicio de resecuenciación, incluyendo herramientas manuales de interpretación.

Objetivos alcanzados

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

- Desarrollo de la herramienta PedigreeX, para facilitar, a los consejeros genéticos, la construcción de pedigríes de manera interactiva.

Fuentes de financiación

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

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

Manuel Ángel Aguilar Espinosa del departamento de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura. Francisco Javier Olivares del Valle, José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, María Elena Martín Navarro, Ignacio Fernández Galván, Aurora Muñoz Losa, Francisco Fernández García-Prieto, Ruth María Barata Morgado y Samuel Frutos Puerto.

Objetivos

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

Expedición Shelios 2009

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

Metodología

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

IFMIF-EVEDA España

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

Objetivos

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

Medidas de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia

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

Objetivos

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

Novel genomic regions associated to specific complex chromatin marks

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

Objetivos

- Detección computacional de regiones genómicas con patrones complejos en su cromatina

asociada.

- Análisis de su conservación (secuencia y vecindad) intra- e inter-especies.
- Análisis biológico de su función usando modelos transgénicos in vivo.

Química computacional

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

Objetivos

- Desarrollar metodologías para la simulación de procesos de reactividad química en fase gaseosa y en disolución.
- Estudiar propiedades físico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.

Simulación de procesos químicos

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

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

Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con Euterpe

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

Objetivos

- Simulación para estudiar la dependencia de la calidad de las simulaciones no lineales realizadas con EUTERPE con parámetros de entrada como paso de tiempo del integrador, número de marcadores y número de nodos en la malla espacial. Se estudiaron inestabilidades ITG en el stellarator TJ-II.
- Estudio del confinamiento de impurezas en plasmas turbulentos en simulaciones en geometría cilíndrica usando perfiles de densidad

y temperatura similares a los medios experimentales en el stellarator W7AS en modos de alto confinamiento (IC). Se encontraron inestabilidades numéricas que impidieron avanzar en estos regímenes.

Metodología

Se han usado simulaciones en régimen lineal en la configuración estándar (100_44_64), para plasmas

con $\beta = 0\%$, además de caracterizar las tasas de crecimiento de estas inestabilidades en esta configuración. Cambiando los perfiles de densidad y temperatura se encontraron regímenes con diferentes grados de inestabilidad ITG y diferentes espectros, lo que fue analizado en el régimen no lineal y caracterizado desde el punto de vista topológico.

Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal

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

Objetivos

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

Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (Aldealab c3)

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

Objetivos

- Fomento de la formación, la creatividad, la innovación, la participación ciudadana, la cultura y el patrimonio.
- Redefinición de los medios de comunicación locales y la creación de medios públicos.
- Generación de dinámicas de trabajo para que emerja el talento.
- Contribución al nacimiento de una nueva visión que permita articular nuevos nichos de desarrollo económico en la ciudad como polo de atracción cultural e innovador de futuro.

- Promoción del aprendizaje de los ciudadanos y de las empresas en nuevas prácticas, de modo transversal e informal, para que aprendan haciendo.

CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial)

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)

- CEDIN era un proyecto de innovación tecnológica que surgió tras observar las carencias de las empresas extremeñas tanto en herramientas de diseño como en medios para desarrollar nuevos productos o procesos.
- La principal innovación del proyecto está en la forma en que se utilizan los servicios de diseño, ya que mediante una herramienta colaborativa online se les permite a las empresas tener un papel fundamental y más participativo en el desarrollo de sus propios diseños.

Objetivos

El proyecto CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial) nació con el objetivo de aproximar una central de diseño mediante la creación de puestos combinados de diseño remoto y la sustentación de proyectos que impulsen la creatividad y la innovación en la industria extremeña así como su implicación con la sociedad de la información, y por lo tanto, lo que se buscaba era un planteamiento totalmente virtual de una herramienta de diseño que esté al alcance de cualquier empresario, o profesional que lo desee, con tan sólo una conexión a esta central de diseño.

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

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

Objetivos

- Simulación de redes reales mediante supercomputación, mediante el desarrollo de una extensión de la herramienta gephi para la generación de escenarios paralelos en NS2.
- Soporte y despliegue de MIPv6. Se ha llevado a cabo la instalación y configuración de Omnet++ y todas sus librerías en Lusitania y la compilación de XMIPv6, y se añade Mobicore para NS2.
- Evaluación de resultados y extrapolación para predicción de las necesidades, mediante la realización de pruebas sobre escenarios reales (RedIris, Geant y AT&T) utilizando NS2 con el complemento PDNS en LUSITANIA y el análisis de los datos generados por el supercomputador.

Colaboración con el observatorio tecnológico UEX-HP

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

Objetivos

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

Consumo energético de operaciones colectivas MPI en plataformas multicore

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

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

Metodología

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

Objetivos alcanzados

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

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

Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.

Objetivos

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

Eco-traffic

Equipo de Cénits - COMPUTAEX.

Estudios previos sobre el transporte sostenible, o sea, la capacidad de satisfacer la demanda del transporte actual sin comprometer la capacidad de satisfacer las necesidades de futuras generaciones, demuestran que es posible ahorrar tiempo, dinero y emisiones de CO₂ si se controlan adecuadamente los flujos de tráfico, los cruces, los semáforos, las rotondas, etc.

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

Objetivos

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

Metodología

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

Objetivos alcanzados

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

- Con la construcción de una rotonda en la intersección se pueden ahorrar un total de 108 litros de combustible al día (sumando el ahorro de los 26.000 vehículos).
- Las emisiones de CO₂ se reducirían 270 Kg por día.
- Los 26.000 usuarios se ahorrarían 79.083 horas al año si utilizaran la rotonda a diario.

Financiación

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

Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects

Levent Gürel, Director, Computational Electromagnetics Research Center (BILCEM)

Objetivos

- To employ this powerful electromagnetics code to analyze large-scale canonical and complicated objects with unprecedented levels of accuracy and detail.
- These problems will have important uses both in real-life and also as a scientific demonstration of the solution of (hopefully) world's largest problems.

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

Luis Landesa Porras, José Manuel Taboada Varela, Francisco Javier Rivero Campos, Luis Bote Curiel y Mario Fernández Manzano. Departamento de Computadores y de las Comunicaciones de la Universidad de Extremadura.

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

This new project can be seen as the natural continuation of the previous one in which the most efficient algorithms have been successfully combined with smart parallelizing strategies, resulting in highly efficient and scalable EM codes, having achieved the World Record in computational electromagnetics for several times. Now we confront a new challenge: to extend the use of

exact MoM solutions to nanoscience and nanotechnology fields.

Objetivos

- Extending the scope of applications of the SIE-MoM formulations and latest breakthroughs in fast and parallel integral-equation algorithms to the electromagnetic analysis of plasmonic nanostructures and artificial materials in visible and near-infrared frequency bands.
- The application of the implemented advanced techniques to the precise electromagnetic analysis of artificial materials and plasmonic nanostructures. Among the vast number of applications we will focus on those that are most promising, in the leading edge of nanoscience and nanotechnology, and where greater benefits can be taken from the proposed simulation tools.

Objetivos alcanzados

- Se ha extendido el método de los momentos basado en formulación integral superficial al análisis exacto de todo tipo de objetos penetrables arbitrarios en el contexto de las aplicaciones en nanociencia y nanotecnología.
- Se han aplicado los últimos avances en aceleración espectral a la resolución rápida, precisa y eficiente (bajo coste computacional) de este tipo de problemas.
- Utilizando las herramientas de simulación anteriores y las capacidades de cálculo del supercomputador LUSITANIA, del CénitS, se está acometiendo con gran éxito el diseño de distintas aplicaciones con gran impacto científico/tecnológico en el ámbito de la nanociencia y la nanotecnología.
- Diseño de nanoantenas plasmónicas directivas a frecuencias ópticas.
- Diseño de nanoenlaces directivos para comunicaciones intra/intercircuitales de gran interés para los futuros circuitos integrados ópticos en escalas nanométricas.
- Diseño de capas de invisibilidad para la ocultación de estructuras arbitrarias compuestas por materiales arbitrarios (PECs, dieléctricos, plasmónicos, metamateriales).
- Diseño de pócimas de invisibilidad para la ocultación de estructuras penetrables arbitrarias (dieléctricos, plasmónicos, metamateriales).

Publicaciones y congresos

- J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Surface Integral Equation Solvers for Large-Scale Conductors, Metamaterials and Plasmonic Nanostructures,"

- Appl. Comput. Electrom. (ACES) Journal, vol. 27, no. 2, pp. 189-197, 2012. Paper invitado.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, L. Landesa, "MLFMA-FFT parallel algorithm for the solution of extremely large problems in electromagnetics," to appear in Proceedings of the IEEE, Special issue on Large Scale Electromagnetic Computation for Modeling and Applications, Jan. 2013. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2194269. Paper invitado.
 - J. M. Taboada, M. G. Araújo, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Supercomputing solution of large electromagnetic problems with parallel MLFMA-FFT," 28th International Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics (2012 ACES Conference), Columbus, Ohio (USA), 10-14 de abril de 2012. Ponencia invitada.
 - J. M. Taboada, J. Rivero, L. Landesa, M. G. Araújo, and F. Obelleiro, "Optimization of invisibility cloaks by surface integral equation method", International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012. Ponencia invitada.
 - J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Fast Surface Integral Equation Formulations for Large-Scale Conductors, Metamaterials, and Plasmonic Problems", International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012. Ponencia invitada.
 - J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, "Optimization of invisibility cloaks by surface integral equation method", XXVII Simposium Nacional de la Unión Científica Internacional de Radio (URSI 2012), Elche (Alicante), 12-14 de septiembre de 2012.
 - J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, "Design of Invisibility Cloaks using Surface Integral Equation Method", Sixth International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials 2012), St. Petersburg, Russia, 17-22 September 2012.
 - J. Rivero, J.M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, F. Obelleiro, "Optimized design of multilayer invisibility cloaks for arbitrary geometries," 7th European Conference on Antennas and Propagation – EUCAP 2012, Gonthenburg, 8-12 april 2013.
 - J. M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, J. Rivero, D. M. Solís, L. Bote, F. Obelleiro, and J. L. Rodríguez, "Fast Surface Integral Equation Methods for Electromagnetic solution of Large-Scale Conductors, Metamaterials and Optical Nano-antennas," VI LEMA-EPFL Workshop on Integral Techniques for Electromagnetics

(INTELECT'2012), Sevilla, 19 octubre 2012. Ponencia invitada.

ENGAGE. Banda ancha de alta velocidad en zonas rurales.

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

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

Objetivos:

- Estudiar "cómo construir una red de banda ancha de alta velocidad (HSB) a coste eficiente en las zonas rurales" para asegurar que se cumplen los requisitos para mantener o fortalecer las poblaciones locales y las actividades económicas.
- Compartir conocimientos y desarrollar políticas públicas para infraestructuras HSB y servicios añadidos y promover la auténtica cooperación interregional.
- Adaptar y optimizar las políticas públicas locales a corto y medio plazo con las soluciones técnicas y económicas pertinentes en términos de HSB.
- Involucrar a todo aquel que participe en la toma de decisiones, así como a promotores de proyectos potenciales en la definición de un plan de implementación considerando como un plan consensuado y un mapa de ruta realista para los próximos 2 a 5 años.
- Difundir resultados entre posibles usuarios, ofreciendo una red de expertos en HSB.

Metodología

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

Evaluación de AzequiaMPI

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

Las implementaciones actuales de MPI no consiguen escalar adecuadamente en arquitecturas basadas en clusters multicore o NUMA. Las aplicaciones deben ser construidas de forma que exploten el paralelismo en dos niveles: memoria distribuida mediante MPI, y memoria compartida mediante hilos (Open MP o Pthreads) (sistema híbrido). En ese sentido, AzequiaMPI es la primera implementación completa del estándar MPI-1 basada en hilos.

Objetivos

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

Objetivos alcanzados

- Se ha desarrollado una nueva implementación de AzequiaMPI basada en una estructura de datos lock-free para explotar con más eficiencia las arquitecturas de memoria compartida del estándar MPI.
- Se ha iniciado el estudio de disminución de consumo energético de las diferentes implementaciones del estándar MPI.
- Se ha compilado y ejecutado una implementación del estándar MPI-1.3 desarrollada en la Universidad de Extremadura denominada AzequiaMPI. Tiene dos modos de ejecución: bloqueante (AzequiaMPI-BLK) y no bloqueante (AzequiaMPI-LFQ).
- Se han ejecutado benchmarks como HP-Linpack bajo la versión no bloqueante. El interés de ésta es que el procesador puede dedicarse a ejecutar otra aplicación MPI cuando la aplicación en curso está a la espera de recibir un mensaje. Otra posibilidad radica en detener el procesador para ahorrar energía.
- Se ha estudiado y desarrollado un modelo de estimación de coste de algoritmos paralelos, que se aplica a operaciones colectivas MPI.

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

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

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

Objetivos

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

Metodología

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

Objetivos alcanzados

- Diseño, desarrollo y establecimiento de una red federada de recursos de cloud computing, procedentes de Centros de Supercomputación del consorcio.
- Virtualización de puestos de trabajo (previa selección de aplicaciones y entornos), entre los que se encuentra el destinado a que genetistas puedan obtener información de alto nivel, de forma semi-automática, a partir de secuencias de un estudio de resecuenciación, generadas por

plataformas de ultra-secuenciación genética.

- Establecimiento de un entorno de trabajo para desplegar soluciones de cloud computing, a través de la federación, para que entidades puedan optimizar su trabajo.

Fuentes de financiación

INTERREG IV B Sudoeste Europeo

Future Internet: eficiencia en las redes de altas prestaciones

FIERRO es una red temática patrocinada por el Ministerio de Ciencia e Innovación y formada por 21 Grupos de investigación de Universidades, Centros de Investigación y Empresas españolas cuya finalidad consiste en estudiar las limitaciones actuales de las redes IP de altas prestaciones (redes de alta velocidad, metro y troncal) para diseñar la Internet del Futuro. Los retos principales surgen en todas las capas de red ante la esperada demanda de tráfico en cuestiones de volumen, granularidad, variabilidad y movilidad, y la necesidad de construir un sistema escalable que soporte dicha demanda.

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

Green code

Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

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

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

Objetivos

- Análisis del estado del arte desde el marco teórico existente.
- Estudio de los distintos métodos de optimización de código fuente de ámbito general, dentro del

desarrollo de código para computadores de altas prestaciones.

- Presentación de resultados que pongan de manifiesto los beneficios que aporta la programación de código optimizado.

Objetivos alcanzados

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

Financiación

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

Medianell Virtual Press

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

Objetivos

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

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

Gobierno de Extremadura, ICMC (Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal), INTROMAC (Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción), CCMIJU (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús

Usón), FEVAL (Institución Ferial de Extremadura), COMPUTAEX, FUNDECYT-PCTEX, CTAEX (Centro Tecnológico Agroalimentario Extremadura), Universidade de Évora, IPP (Instituto Politécnico de Portalegre), CEBAL (Centro de Biotecnología Agrícola e Agro-Alimentar do Alentejo), CEVALOR (Centro Tecnológico da Pedra Natural de Portugal), ADR-IPP y CATAA (Associação Centro de Apoio Tecnológico Agro-Alimentar de Castelo Branco).

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

Objetivos

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

Objetivos alcanzados

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

Fuentes de financiación

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

NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología

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

Los nanosensores basados en nanoantenas permiten superar el límite de difracción de los dispositivos ópticos tradicionales, es decir, permiten capturar o dirigir la emisión de luz con precisiones inferiores a la longitud de onda. Esto está abriendo no solo un amplio abanico de nuevas aplicaciones (como la fabricación de nuevos detectores con capacidad de observar objetos con precisiones por debajo de la longitud de onda de la luz), sino la capacidad para realizar nuevas investigaciones en el marco de la naturaleza plasmónica del comportamiento electromagnético de los metales de las nanoantenas, para mejorar sus prestaciones.

Objetivos

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

Metodología

Se han utilizado herramientas testeadas con éxito en LUSITANIA. El Grupo de Electromagnetismo Computacional de la Universidad de Extremadura ha desarrollado multitud de herramientas de análisis electromagnético para supercomputadores que se han comportado con éxito y han conseguido diversos logros reconocidos mundialmente.

Para adaptarse al estudio de nuevos materiales en nanotecnología el Grupo ha adaptado estas herramientas para incorporar numerosos de los comportamientos extraordinarios de los nuevos nanomateriales, entre los que está el comportamiento plasmónico de los metales a frecuencias ópticas, lo que ha requerido la aplicación de formulaciones basadas en ecuación integral, puesto que facilitarían el análisis de los mismos con mayor precisión.

Publicaciones y congresos

- J Rivero, JM Taboada, L Landesa et al, "Surface

integral equation formulation for the analysis of left-handed metamaterials", *Optics Express*, 2010.

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

Optimization of the diffused matrix format for heterogeneous parallel computing

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

Objetivos

Optimizar la estructura Diffused Matrix Format (DMF), diseñada por el grupo de investigación GRNPS para el almacenamiento de imágenes adquiridas por sensores a bordo de aviones y satélites.

Metodología

La estructura DMF se basa en la construcción de una matriz cuyas celdas son listas de unidades básicas de medición (DMR). La idea es indexar dicha matriz, de tal manera que la nueva estructura consistirá en un árbol de tipo Quad-Tree cuyas hojas estarán constituidas por una determinada región de la imagen en formato DMF, según el número de mediciones.

Se han realizado algoritmos de procesamiento básicos de imágenes multiespectrales sobre la nueva estructura, para que las unidades de procesamiento más rápidas pueden hacerse cargo de las hojas con más mediciones, y las más lentas (aquellas con menos mediciones).

Es interesante realizar un estudio sobre el balance

óptimo que permita minimizar el tiempo de ejecución teniendo en cuenta diversos parámetros, siendo los más importantes el número de nodos del árbol, el tamaño de celda de las matrices DMF, y el tiempo empleado en las comunicaciones entre las diversas unidades de procesamiento.

Objetivos alcanzados

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

Publicaciones y congresos

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

Proyecto SEDE

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

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

CénitS puso a disposición del proyecto SEDE sus recursos para desarrollar un sistema informático

automatizado y autoconfigurable, basado en la aplicación de redes neuronales y lógica difusa, capaz de medir y representar gráficamente la evolución de los escenarios empresariales en los diversos entornos estratégicos.

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

Objetivos alcanzados

Tras su puesta en marcha, permite dar respuesta a las necesidades de Vigilancia Estratégica de las empresas, aportando un sistema que proporciona ventaja competitiva, calidad de la información y usabilidad.

Proyecto SysGobEx

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

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

SIBE

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).

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

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

Objetivos

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

Simulación de dispositivos ópticos integrados

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

Objetivos

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

Metodología

Analizar y diseñar dispositivos y sistemas de comunicaciones ópticas ha requerido resolver ecuaciones diferenciales. Para dispositivos integrados se han usado métodos numéricos. Estos algoritmos permiten resolver las ecuaciones diferenciales que rigen el funcionamiento de láseres, fibras ópticas, fotodetectores, moduladores, etc. Es especialmente destacable su aplicabilidad al estudio de la rotación no lineal de la polarización de la luz que, junto con la dispersión en el modo de polarización, constituye un elemento clave en el diseño de los sistemas de comunicaciones ópticas actuales.

Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio

Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.

OpenSimRIPCA es un simulador de redes MPLS (Multiprotocol Label Switching) con soporte para cómputo de LSP (Label Switched Paths) en entornos interdominio. Como característica adicional, OpenSimRIPCA incorpora avanzados mecanismos de colaboración entre PCE (Path Computation Elements) adyacentes cuyo rendimiento se desea evaluar.

Objetivos

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

Objetivos alcanzados

- Se ha utilizado OpenSimRIPCA para computar más de 30 millones de LSP interdominio sujetos a múltiples restricciones de ingeniería de tráfico sobre una topología de red Pan-Europea formada por 28 dominios MPLS interconectados y siguiendo una arquitectura PCE.
- Se ha evaluado la capacidad de los mecanismos avanzados implementados en OpenSimRIPCA para reducir el tiempo de cómputo por LSP así como el volumen global de recursos empleados para ello.

Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones

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

Objetivos alcanzados

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

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

Antonio Muñoz Roldán perteneciente al Departamento de Informática del CIEMAT.

Objetivos

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

TaxonomTIC

Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

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

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

Objetivos

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

Metodología

La metodología se ha sustentado sobre la base del

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

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

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

Objetivos alcanzados

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

Financiación

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

TaxonomTIC-2

Equipo de CénitS - COMPUTAEX.

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

Objetivos

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

Metodología

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

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

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

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

Objetivos alcanzados

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

Financiación

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



6

Resultados de investigación



Resultados de investigación

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

Esta sección presenta los resultados más notables que han sido publicados en congresos y revistas durante el año 2015, además de la Tesis Doctoral y los Trabajos Finales de Máster desarrollados.

Publicaciones en congresos

Experimental evaluation of mobility management protocols for multimedia communications.

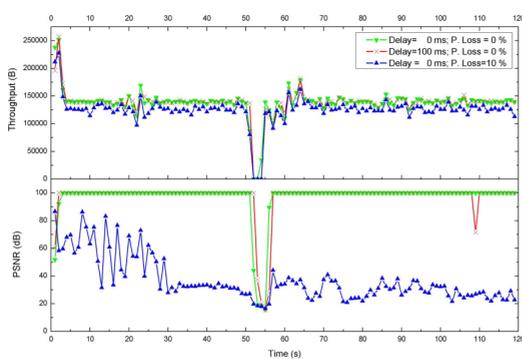
Javier Carmona-Murillo, David Cortés-Polo, Jesús Calle-Cancho, José-Luis González-Sánchez, Francisco-Javier Rodríguez-Pérez. XII Jornadas de Ingeniería Telemática (JITEL2015), pp. 293-300. Palma de Mallorca (España), 14-16 de octubre de 2015. ISBN: 978-84-606-8609-5.

The recent proliferation of multimedia portable devices, together with the increasing development of services and applications over mobile networks has made multimedia traffic one of the major challenges for the future mobile Internet. Current packet based mobile architectures such as 3GPP evolved packet system make use of all IP broadband services. Moreover, mobility management in 4G is made by means of host based and network based mobility management approaches. Mobile IPv6 and Proxy Mobile IPv6 are the most representative solutions standardized by the IETF. Recently, the IPv6 mobility support has been newly integrated into the kernel sources and Linux mobility ready kernels are available from versions 3.8.1. This support from IPv6 kernel space allows the development of open source mobility management protocols in the Linux user space. In this paper, the authors present an experimental study of Mobile IPv6 and Proxy MIPv6, based on their open source implementations. The researchers analyze the handover latency characteristics in both

protocols and provide both quantitative and qualitative performance measures of multimedia communications under different network conditions.

Testbed are, by far, the most realistic method for evaluating performance, as they practically use the protocol implementations and the hardware that is the same, or very similar, to the one used for the production networks. However, large testbed are expensive to build and manage and for very large (or highly mobile) networks, practically impossible to implement. Furthermore, the degrees of freedom in a testbed is significantly reduced in comparison with a mathematical analysis or network simulation. Assuming these limitations, in this article the authors conducted a study related to the performance of real IPv6 mobility management implementations in the IPv6 Linux stack, evaluating the current state of these protocols by means of an experimental testbed.

The authors focus on the most representative IETF solutions: MIPv6 and PMIPv6. Qualitative and quantitative results have been obtained from both real time and streaming multimedia applications under different network conditions. Quantitative results show the handover latency produced by both open source implementations. They quantify the dependency of the MIPv6 handover delay in the Routing Advertisement interval, whereas the PMIPv6 implementation is not dependent of RA messages, as expected. Moreover, the PSNR video quality indicator is used to evaluate the multimedia transmission. It should be noted that streaming traffic in the PMIPv6 testbed give low PSNR values due to the short additional delays produced by the MAG which penalizes the PSNR value



because some wait times are introduced due to buffer starvation.

Finally, in order to compare these quantitative results of the multimedia transmissions with a subjective valuation, user perceptions are evaluated. In this case, streaming multimedia provides a better valuation than real time due to penalization of the handover disruption time. A better user experience is achieved when handover latency is reduced.

Green Code, Energy Efficiency in the Source Code for High-Performance Computing

Green Code, Energy Efficiency in the Source Code for High-Performance Computing. Javier Corral-García, César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez. *Sistemas y Tecnologías de la Información, Actas de la 10ª Conferencia Ibérica de Sistemas y Tecnologías de la Información, Vol. II. CISTI 2015. Águeda, Aveiro, Portugal. 17-20 junio 2015. ISBN: 978-989-98434-5-5. pp 61-64.*

El consumo energético es un reto clave en HPC (High-Performance Computing, computación de alto rendimiento). Actualmente, las optimizaciones para el ahorro energético referentes al software suelen implementarse en distintos niveles, siendo patente la falta de propuestas para que el usuario final escriba directamente código eficiente energéticamente. Se pretende, por tanto, contribuir a la

optimización de códigos fuente que permitan obtener rendimientos óptimos y eficiencias máximas en sus ejecuciones, demostrando la importancia de ciertas estrategias en la creación del código.

En el artículo publicado se demuestra la importancia de las estrategias eficientes en la creación de código. Concretamente, según las ejecuciones realizadas, la aplicación de ciertas modificaciones sobre un mismo código puede dar lugar a idénticos resultados con tiempos de ejecución muy dispares que, a largo plazo, conllevarán importantes penalizaciones en el consumo.

A partir de los resultados obtenidos es posible afirmar que, mejorar la legibilidad o la futura comprensión de un código por parte de alguien ajeno a su creación, puede llegar a perjudicar seriamente el tiempo de ejecución del mismo y, consecuentemente, su eficiencia energética. Del mismo modo, la sobrecarga de operadores o la elección de una librería apropiada, son destacadas técnicas a tener en cuenta a la hora de realizar una optimización adecuada. Aunque se trata de un proyecto ambicioso y de complejidad notable, se pretende generar en un futuro próximo una solución software que permita medir de un modo más preciso la productividad de la aplicación de técnicas de eficiencia energética a la generación de códigos fuente.

Modeling Contention and Mapping Effects in Multi-core Clusters

Juan-Antonio Rico-Gallego, Juan-Carlos Díaz-Martín, Alexey L. Lastovetsky. Euro-Par 2015: Parallel Processing Workshops, pp. 197-208. ISBN 978-3-319-27308-2, DOI= 10.1007 / 978-3-319-27308-2_17.

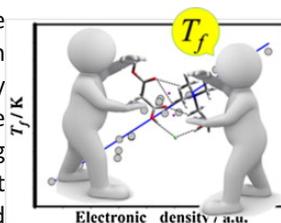
Modeling and formal analysis of parallel algorithms contribute to optimize their performance. Modern multi-core are complex machines composed of heterogeneous shared communication channels. Parallel Performance Models estimate the cost and capture the behavior of parallel algorithms through a set of parameters, providing valuable information about the behavior of the algorithm in these platforms. LogGP is a representative model using network related parameters to predict the cost of parallel algorithms as a sequence of point-to-point transmissions. Although extensions have been proposed for covering issues derived from modern platforms complexities as contention and channels hierarchy, such specific extensions are not enough to meaningfully and accurately model more than simple algorithms. τ -Lop is an alternative model that takes as a building block for modeling parallel algorithms the concept of concurrent transfers, that helps to capture algorithms behavior and allows to represent and accurately predict their cost in multi-core clusters. This paper shows the analysis capabilities of τ -Lop through two cases of study involving elaborated MPI collective operations.

Publicaciones en revistas

An approach for the rationalization of melting temperature for deep eutectic solvents from DFT

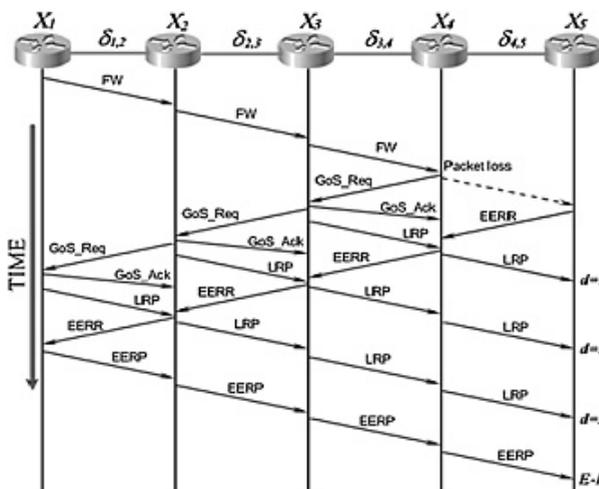
Gregorio García, Mert Atilhan, Santiago Aparicio. *Chemical Physics Letters*, Vol. 634, pag. 151-155, 2015. ISSN: 0009-2614. DOI:10.1016 / j.cplett.2015.06.017

Deep eutectic solvents are a new generation of solvents formed by the combination of an ionic compound with an hydrogen bond donor, which leads to a low temperature melting mixture. This work reports a Density Functional Theory study combined with a topological analysis of the electronic density for deep eutectic solvents to rationalize melting temperature at the molecular level. The reported results show a direct relationship between the melting temperature and the hydrogen bond network features. The proposed methodology shows the feasibility of tailoring macroscopic properties of deep eutectic solvents through the molecular structure of involved compounds.



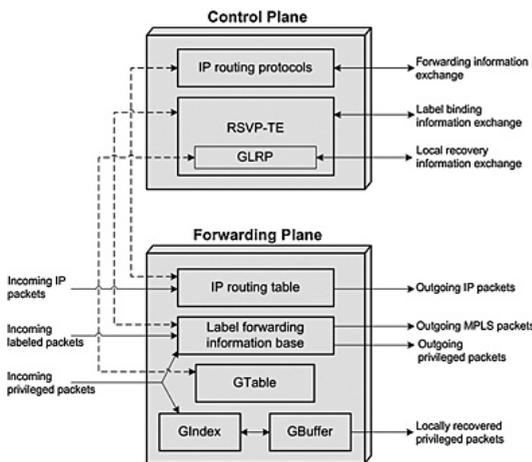
An OAM function to improve the packet loss in MPLS-TP domains for prioritized QoS-aware services.

Francisco-Javier Rodríguez-Pérez, José-Luis González-Sánchez, Javier Carmona-Murillo, and David Cortés-Polo. *International Journal of Communication Systems*. Vol 28, Issue 6, pp. 1037-1052, John Wiley & Sons, April 2015. DOI: 10.1002/dac.2742.



The emergence of new kinds of applications and technologies (e.g., data-intensive applications, server virtualization, and big data technology) has led to a higher utilization of network resources. These services imply increased bandwidth consumption and unexpected congestions, especially in backbones. In this article, a novel proposal is studied with the aim of improving the performance of prioritized forwarding equivalence classes in congested Multiprotocol Label Switching Transport Profile (MPLS-TP) domains. The congestion impact on those QoS-aware services that require high reliability and low delay is

analyzed. A new policy is implemented on MPLS-TP, which is a technology that provides QoS by means of flow differentiation in the Internet backbones. The proposal is known as Gossip-based local recovery policy and is offered as an operation, administration, and management function to allow local recovery of lost traffic for MPLS-TP privileged forwarding equivalence classes. In order to fulfill the requirements for implementation on MPLS-TP, a minimum set of extensions to resource reservation protocol traffic engineering are also proposed to provide self-management capable routes. In addition, the authors carried out a performance improvement measurement by means of an analytical model and simulations.



This article discusses the GLRP as a congestion control mechanism in MPLS-TP domains with the aim of improving reliability and performance of prioritized QoS-aware services. The authors first define and discuss the requirements for GLRP over MPLS-TP. Then, the proposal is analytically studied, and finally the benefits derived from local retransmissions of lost traffic are evaluated. Because of the property of temporal locality in lost packets, a small data buffer was used to significantly reduce the number of dropped packets, thereby improving packet delivery of QoS-aware services. However, buffering of data packets at the network layer is a new technique for improving robustness and it needs further

investigation. Although the simulations performed in this paper were quite extensive, and this protocol is designed to solve real-world congestion problems in backbone MPLS-TP networks, further research is required to determine its behavior with the QoS requirements in real backbone networks, particularly in DiffServ over MPLS-enabled networks when new premium service classes are enabled.

Assessing European primary school performance through a conditional nonparametric model

José Manuel Cordero, Daniel Santín and Rosa Simancas. *Journal of the Operational Research Society*. June 2015. DOI:10.1057 / jors.2015.42

This paper uses a fully nonparametric framework to assess the efficiency of primary schools using data about schools in 16 European countries participating in PIRLS 2011. This study represents an original enterprise since most of the empirical research in the field is restricted to evaluations at regional or national level and focused on secondary education. For the author's purpose, they adapt the metafrontier framework to compare and decompose the technical efficiency of primary schools operating in heterogeneous contexts, which in their case is represented by different educational systems or countries. Similarly, they use an extension of the conditional nonparametric robust approach to test the potential influence of a mixed set of environmental school factors and variables representing cultural values of each country. Their results indicate that the intergenerational transmission of non-cognitive skills such as responsibility or perseverance are significantly related to school efficiency, whereas most school factors do not seem to have a significant influence on school performance.

Assessing the level of happiness across countries. A robust frontier approach.

Francisco Javier Salinas Jiménez, José Manuel Cordero Ferrera, María del Mar Salinas Jiménez. *Papeles de trabajo del Instituto de Estudios Fiscales. Serie economía*, ISSN 1578-0252, Nº 4, 2015, págs. 7-23.

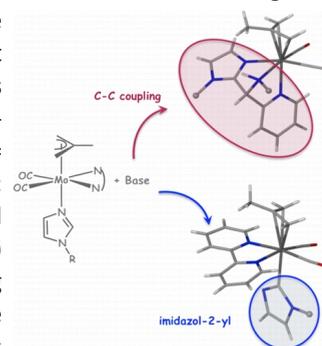
In this paper the authors propose an innovative approach based on life satisfaction to estimate

efficiency measures for individuals considering how they convert their resources into higher levels of happiness. They use an extension of the conditional nonparametric robust approach which allows us to consider a mixed set of contextual variables that can affect the levels of life satisfaction. Their empirical analysis includes data about 31,854 individuals from 26 OECD countries participating in the last wave of the World Values Survey. Results obtained indicate that the most efficient individuals in achieving happiness tend to live in northern and central European countries whereas the less efficient individuals are found, in average, in Asian transitional economies. In addition, it is also found that most of the traditional determinants of wellbeing (e.g. age, marital status, religion or unemployment) also have a significant impact on efficiency measures.

Influence of the N–N Coligand: C–C Coupling Instead of Formation of Imidazol-2-yl Complexes at $\{\text{Mo}(\eta^3\text{-allyl})(\text{CO})_2\}$ Fragments. Theoretical and Experimental Studies

Andrea Cebollada, Maialen Espinal Viguri, Julio Pérez, Jesús Díaz, Ramón López, and Lucía Riera. *Inorganic Chemistry* 2015 54 (6), 2580-2590. DOI: 10.1021/ic502729z

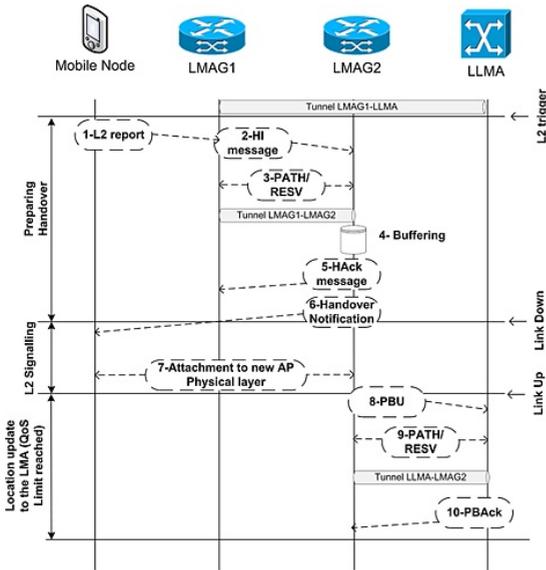
New N-methylimidazole (N-Melm) complexes of the $\{\text{Mo}(\eta^3\text{-allyl})(\text{CO})_2(\text{N-N})\}$ fragment have been prepared, in which the N,N-bidentate chelate ligand is a 2-pyridylimine. The addition of a strong base to the new compounds deprotonates the central CH group of the imidazole ligand and subsequently forms the C–C coupling product that results from the nucleophilic attack to the imine C atom. This reactivity contrasts with that previously found for the analogous 2,2'-bipyridine compounds $[\text{Mo}(\eta^3\text{-allyl})(\text{CO})_2(\text{bipy})(\text{N-RIm})]\text{OTf}$ [N-RIm = N-Melm, N-mesitylimidazole (N-MesIm, Mes= 2,4,6-trimethylphenyl); OTf = trifluoromethanesulfonate) which afforded imidazol-2-yl complexes upon deprotonation. Density Functional Theory (DFT) computations uncover that the reactivity of the imine C atom along with its ability to delocalize electron density are responsible for the new reactivity pattern found for the kind of molybdenum complexes reported herein.



Mobility management in packet transport networks for network convergence.

David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, Francisco-Javier Rodríguez-Pérez, and Javier Carmona-Murillo. *Transactions on Emerging Telecommunications Technologies*. John Wiley & Sons, Vol 26, issue 5, pp. 749-759, May 2015. DOI: 10.1002/ett.2705.

Mobility management and quality of service (QoS) are two of the most important goals in the present and future development of wireless networks. These tasks involve not only the wireless domain but also the access network that interconnects mobile devices with the Internet. This emerging topic is known as fixed mobile convergence. The intention of this convergence is the integration and creation of a unified infrastructure from fixed and wireless mobile networks. In this converged infrastructure, users can move across networks and access services seamlessly. In this paper, the authors present a study on recent advances and open research issues on mobility protocols in conjunction with multi-protocol label switching (MPLS)-based access networks. Various



mobile management protocols and their interaction with the access network are briefly introduced. A new architecture called integrated proxy mobile MPLS transport profile is also outlined to provide the highest integration level, QoS and high rates of mobility to achieve fixed mobile convergence.

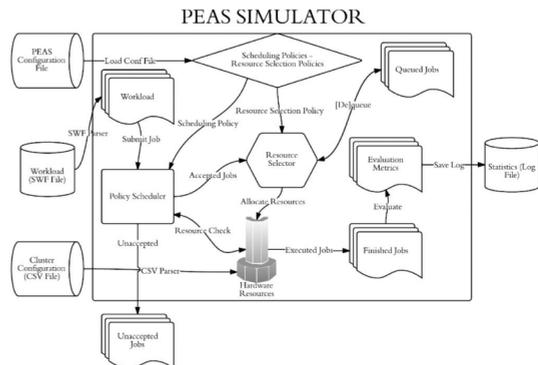
This article presents a novel architecture called IPM-TP, which supports seamless mobility management, traffic engineering and QoS and encourages network convergence. The architecture presented is a simple and cost-effective packet-based access network solution, which merges traditional fixed and mobile networks, and enables the integration of wired networks and 4G mobile broadband access technologies into future fixed mobile

convergence, which is one of the providers' main open issues. With IPM-TP, the QoS offered by the network to the MNs is improved through the reduction in handoff signalling messages, which also reduces the handoff latency and the signalling cost. Therefore, packet loss is avoided. To demonstrate this, a comparison between the proposed IPM-TP architecture and the existing solutions (PMIP and PMIP-MPLS solutions) is made.

Performance and energy aware scheduling simulator for HPC: evaluating different resource selection methods.

Gómez-Martín, C., Vega-Rodríguez, M. A., and González-Sánchez, J.-L. *Concurrency Computat.: Pract. Exper.*, 27:5436–5459. doi: 10.1002/cpe.3607.

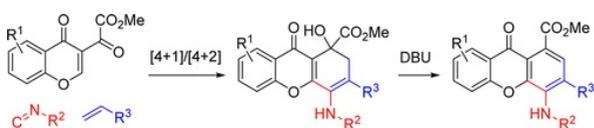
Today, in an energy-aware society, job scheduling is becoming an important task for computer engineers and system analysts that may lead to a performance per Watt trade-off of computing infrastructures. Thus, new algorithms, and a simulator of computing environments, may help information and communications technology and data center managers to make decisions with a solid experimental basis. There are several simulators that try to address performance and, somehow, estimate energy consumption, but there are none in which the energy model is based on benchmark data that have been countersigned by independent bodies such as the Standard Performance Evaluation Corporation.



This is the reason why we have implemented a performance and energy-aware scheduling (PEAS) simulator for high-performance computing. Furthermore, to evaluate the simulator, we propose an implementation of the non-dominated sorting genetic algorithm-II (NSGA-II) algorithm, a fast and

Regioselective Tandem [4 + 1]–[4 + 2] Synthesis of Amino-Substituted Dihydroxanthones and Xanthones.

Ana Bornadiego, Jesús Díaz, Carlos F. Marcos. Regioselective Tandem [4 + 1]–[4 + 2] Synthesis of Amino-Substituted Dihydroxanthones and Xanthones. *Journal of Organic Chemistry*. May 2015. DOI: 10.1021/acs.joc.5b00658.



A highly convergent and operationally simple approach to mycotoxin-related 4-amino-substituted 1-hydroxydihydroxanthones is described. The

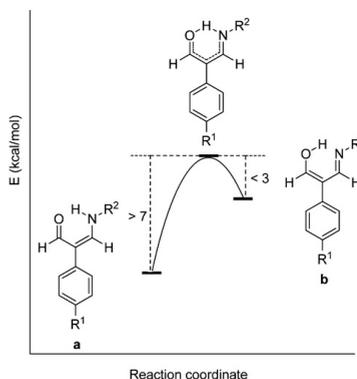
target compounds are obtained in one pot by the multicomponent reaction of 3-carbonylchromones, isocyanides, and nonsymmetric dienophiles. The reaction, which involves a tandem [4 + 1]–[4 + 2] cycloaddition, efficiently affords a variety of both monomeric and dimeric polysubstituted dihydroxanthones structurally similar to bioactive ergochromes. Further aromatization to the corresponding xanthones is readily achieved by treatment with DBU under microwave irradiation.

The authors have successfully designed a straightforward multicomponent synthesis of xanthone mycotoxin analogues. These compounds are structurally similar to natural globosuxanthones and diversolonic acids and hence may have interest for their biological activities. The reaction takes place in very mild conditions and represents a significant improvement over previously reported synthesis. Both hydrogenated and fully aromatized xanthones can be selectively synthesized in a one-pot process. The highly convergent and atom economic tandem reaction affords the target compounds in high yields, with complete regioselectivity, starting from readily available 3-carbonylchromones, isocyanides, and dienophiles. The authors have demonstrated the utility of this methodology for the synthesis of structurally challenging dimeric dihydroxanthone 12. This compound, closely related to mycotoxin secalonin acid, was obtained in a 55% yield in only three reaction steps starting from bisphenol 9. Further research aimed to the development of an enantioselective version of this reaction is currently underway in their lab.

Rethinking Aromaticity in H-Bonded Systems. Caveats for Transition Structures Involving Hydrogen Transfer and π -Delocalization

María P. Romero-Fernández, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, and Juan C. Palacios. *The Journal of Physical Chemistry A* 2015 119 (3), 525-534. DOI: 10.1021/jp5113735

Monoaza- and diaza-derivatives of malondialdehydes, in short aminoacroleins and vinamidines, are prototypical examples of open-chain structures prone to π -electron delocalization, for which intramolecular hydrogen bonding enhances (or diminishes) their pseudoaromaticity depending on the substitution pattern. This interplay is illustrated herein by DFT-based calculations of aromaticity indices in the gas phase and polar solvents. Elucidation of transition structures involved in tautomeric conversions helps to solve how the intramolecular hydrogen transfer occurs. While TSs exhibit a high degree of aromaticity, the dichotomy between forward and backward

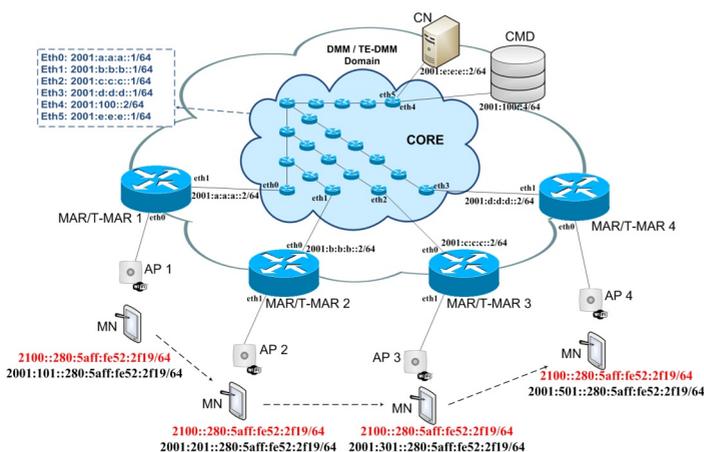


pathways points to a complex trajectory. Addition of thermal corrections to the electronic energy decreases both the enthalpy and free energy leading to negative ΔH^\ddagger and ΔG^\ddagger values. This variational effect accounts for the otherwise elusive distinction between transition structures and saddle points (usually overlooked for high electronic barriers). Also, this rationale fits well within the framework of Marcus' theory.

A series of well-established aromaticity indices, namely $\Sigma\Delta N$, I, APoz, KP, Q, λ , HOMA, HOMED, and HOMHED, provide insightful correlations to evaluate the electronic delocalization of pseudoheterocyclic tautomers of 2-aryl-substituted alkyl(aryl)aminoacroleins and 3-aryl-substituted 1,5-dialkyl(aryl)vinamidines, as well as their transition structures corresponding to the intramolecular proton transfer. The DFT-based study (M06-2X/6-311++G(d,p) conducted in both the gas phase and polar solvents allowed the authors to estimate the influence of substituents on the conjugated backbone. No appreciable solvent effect could be detected from this computation. The striking fact that negative ΔG^\ddagger values were found for the proton transfer between iminoenol and aminoketone tautomers of 3-aminoacroleins, characterized by low energy barriers and large imaginary frequencies, can be attributed to variational effects, which are usually overlooked for processes involving higher energy barriers (as the proton transfer from aminoketone to iminoenol tautomers in the aforementioned 3-aminoacroleins). These negative ΔG^\ddagger values can however be easily corrected by applying the Marcus theory.

TE-DMM: A Proposal to Improve the Control Plane in PMIPv6-based DMM Networks.

Jesús Calle-Cancho, Javier Carmona-Murillo, David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, and Francisco-Javier Rodríguez-Pérez. *IEEE Latin America Transactions*, vol.13, no.9, pp. 3149-3155, September 2015. DOI: 10.1109/TLA.2015.7350071.



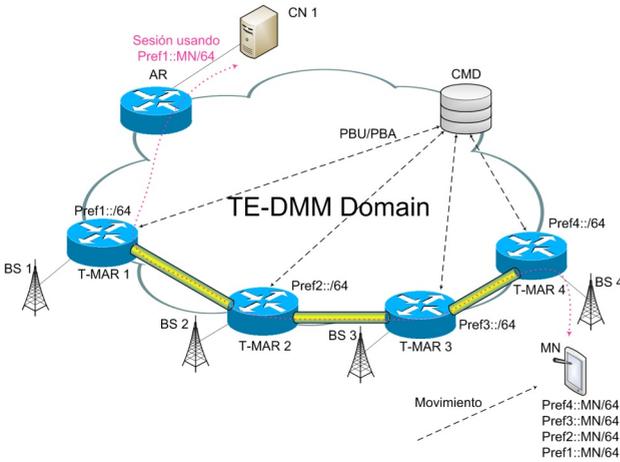
conectividad ubicua independientemente del lugar, instante, aplicación utilizada o tecnología de acceso empleada.

A tal efecto, el IETF (Internet Engineering Task Force) ha estandarizado protocolos para la gestión de la movilidad IP como son Mobile IPv6 (MIPv6) o Proxy Mobile IPv6 (PMIPv6). Sin embargo, estos paradigmas de gestión de movilidad centralizada no son eficientes bajo determinadas circunstancias. Por ello, actualmente se están proponiendo nuevos enfoques basados en gestión de la movilidad

En los últimos años, el tráfico de datos a través de dispositivos móviles ha experimentado un crecimiento exponencial debido al gran desarrollo de aplicaciones que tienen como base Internet: desde tráfico web tradicional hasta aplicaciones exigentes de ancho de banda o sensibles al retardo, como puede ser el vídeo. Aparte, la proliferación de dispositivos móviles ha incrementado la necesidad de dar soporte a la movilidad, cuyo principal objetivo es la provisión de

distribuida cuyo propósito es superar las limitaciones que surgen como consecuencia del uso de la gestión tradicional de la movilidad, que es centralizada.

En este artículo se presenta un análisis comparativo de rendimiento entre DMM (Distributed Mobility Management) y TE-DMM (Tunneling Extension to Distributed Mobility Management), no solamente de manera analítica, sino también realizando pruebas de evaluación experimental. En primer lugar se presenta TE-DMM, una propuesta desarrollada con el objetivo de reducir la carga de señalización que se introduce con DMM. La evaluación se lleva a cabo de forma analítica y experimental. Desde el punto de vista analítico, el modelo propuesto permite comparar ambas propuestas, obteniendo resultados que demuestran de forma cuantitativa la mejora en términos de coste de señalización y procesamiento de TE-DMM frente a la solución DMM. Por otro lado, para



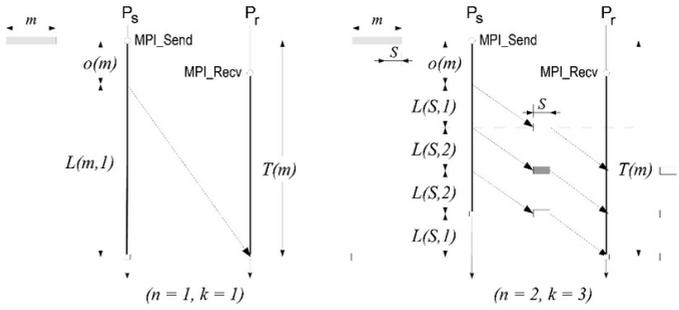
realizar la evaluación experimental se llevó a cabo la implementación de la propuesta en un sistema Linux, comparándola con la propuesta DMM. Los resultados obtenidos de esta experimentación indicaron que TE-DMM mejora significativamente en términos de latencia de handover y pérdida de paquetes. Se pudo concluir, por tanto, que TE-DMM realiza un uso mejor de los recursos de la red y mejora el comportamiento del plano de control con respecto a DMM.

τ-LoP: Modeling performance of shared memory MPI.

Juan Antonio Rico Gallego, Juan Carlos Díaz Martín. *Parallel Computing*. Volume 46, July 2015, Pages 14–31. DOI: 10.1016/j.parco.2015.02.006.

Las operaciones colectivas definidas en el estándar MPI de paso de mensajes, para sistemas de múltiples procesadores, se pueden implementar mediante varios algoritmos. El modelado formal del coste de estos algoritmos permite su comparación, además del análisis de su rendimiento de manera independiente de la máquina.

Los métodos utilizados actualmente derivan de LogP, un modelo concebido para representar el coste de mensajes punto a punto entre nodos monoprocesador en una red de comunicaciones. Sin embargo, los supercomputadores actuales se construyen en base a nodos que integran cada vez más cores accediendo a la jerarquía de memoria, y la comunicación dentro del nodo adquiere relevancia. Las técnicas para comunicar procesos en memoria compartida, como la segmentación de mensajes o las operaciones colectivas no basadas en mensajes punto a punto, son muy



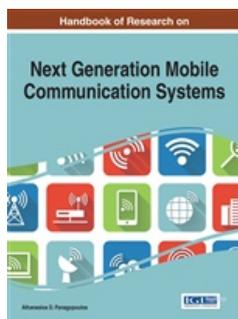
diferentes a las utilizadas para comunicar procesos a través de una red, y requieren de nuevos métodos de representación.

Usando como recurso el supercomputador LUSITANIA, el trabajo de estos investigadores profundiza en las razones de la falta de precisión de LogGP y otros modelos más recientes como LognP y m lognP, y propone un nuevo modelo, denominado τ -Lop, cuyo objetivo es modelar de forma precisa y representativa las comunicaciones MPI en memoria compartida. En el estudio se modelan y analizan algunos de los algoritmos utilizados para implementar la operación colectiva MPI broadcast en las bibliotecas MPI más conocidas: MPICH y OpenMPI.

Libros / Capítulos de libros

Mobile-Fixed Integration for Next-Generation Mobile Network: Classification and Evaluation.

David Cortés-Polo, José-Luis González-Sánchez, Francisco-Javier Rodríguez-Pérez and Javier Carmona-Murillo. *Handbook of Research on Next Generation Mobile Communication Systems*. pp 466 - 484. ISBN: 9781466687325.



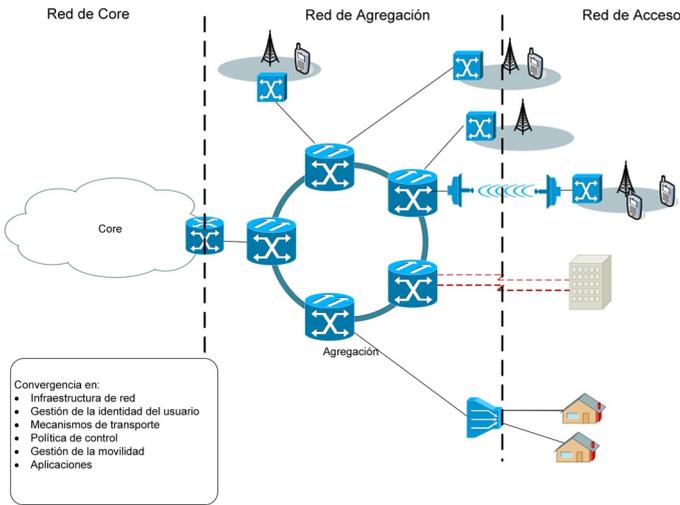
In recent years, the growth the in number of heterogeneous interconnected systems, as well as the emergence of new requirements in applications and services are progressively changing the original simplicity and transparency of the Internet architecture. When this architecture was designed, the main goal was to interconnect stationary host. Therefore, the appearance of mobile communications has made necessary to adapt traditional protocols in order to accommodate mobile users. This implies a new interaction between the mobile network and the fixed access network. This chapter describes the main IP mobility protocols and presents a novel classification, which relates the integration of the mobility protocol with the access network. The chapter also presents analytical models to evaluate the registration updates cost and the packet loss rate of the classified protocols.

Tesis doctorales

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

Durante el año 2015, se presentó esta tesis doctoral, realizada por David Cortés, Administrador de redes y comunicaciones de CénitS, y dirigida por José Luis González Sánchez, Director General de la Fundación COMPUTAEX.

La gestión de la movilidad y la Calidad de Servicio (QoS) son dos de los objetivos más importantes en el presente y futuro desarrollo de las redes inalámbricas. En los últimos años, el incremento de los sistemas interconectados a la red de datos, y la aparición de nuevos dispositivos, servicios y



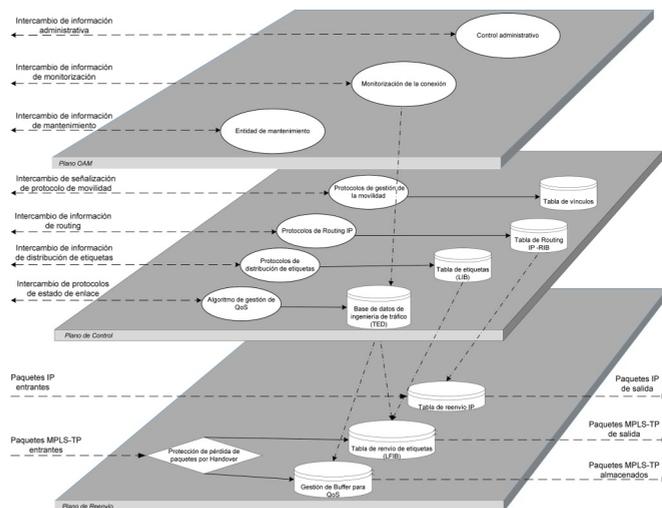
aplicaciones han modificado la simplicidad y transparencia con la que se ideó Internet de manera progresiva, así como la organización tradicional de las redes. Además, se están desarrollando nuevos servicios y aplicaciones que requieren de una red de gran capacidad, no sólo en el dominio inalámbrico, sino también en la red que interconecta a los dispositivos móviles con Internet. Es por esto que tanto la industria como la comunidad científica están trabajando en la búsqueda de la

convergencia fija/móvil (FMC). La principal motivación de esta convergencia es la integración y creación de una infraestructura unificada de redes fijas y móviles. En esta infraestructura convergente, los usuarios podrán moverse entre las diferentes redes y acceder a los servicios de manera transparente.

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

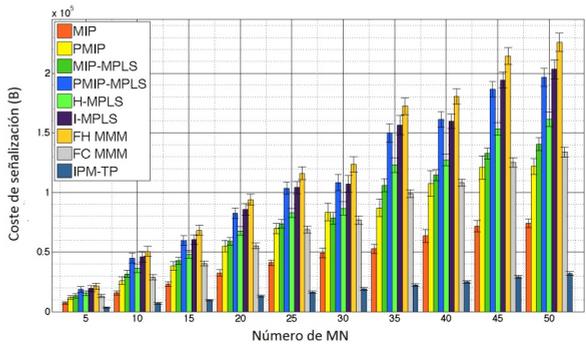
Por lo tanto, la integración de redes heterogéneas para la convergencia de los dos paradigmas fijo y móvil, de manera transparente, se consigue a través del despliegue de arquitecturas basadas en IP. Gracias a este despliegue, y al desarrollo de protocolos de gestión de la movilidad basados en IP como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

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



despliegue de una red fija/móvil completamente integrada, aun cuando la movilidad del nodo móvil sea alta.

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

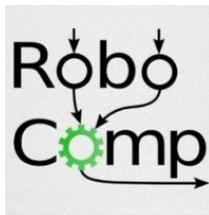


Para evaluar la propuesta se han realizado análisis y simulaciones que miden el rendimiento de los protocolos en términos de costes de movilidad, latencia de handover y parámetros de QoS.

Trabajos finales de Máster

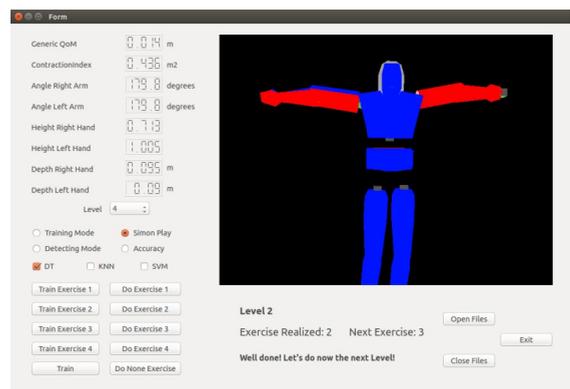
Análisis de imágenes en profundidad en terapias de rehabilitación supervisadas por robots autónomos. Máster en Ingeniería de Telecomunicación.

Eva María Mógena Cisneros



En un futuro cercano la interacción y el contacto entre humanos y robots se transformarán en algo cotidiano. Pero, antes de alcanzar dicho futuro, es imprescindible la realización de investigaciones que permitan establecer y diseñar algoritmos de tal modo que los robots puedan realizar tareas de forma completamente autónoma. Entre estas tareas, destacan aquellas orientadas a la mejora de la salud de las personas como es el caso de liderar terapias de recuperación física.

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



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

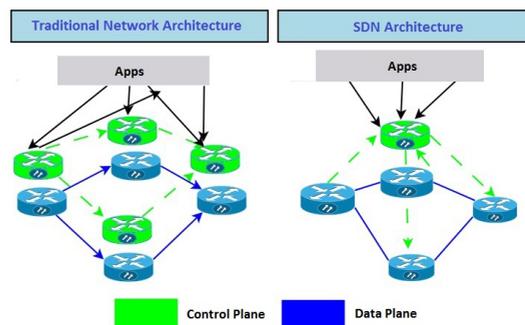
Despliegue de un testbed de redes definidas por software para la gestión de recursos de red en un CPD. Máster en Ingeniería de Telecomunicación.

Laura Amarilla Cardoso



El aumento de los dispositivos móviles y los contenidos, la virtualización de servidores, y la llegada de los servicios en la nube son algunas de las tendencias que impulsan a la industria del networking a reexaminar las arquitecturas de red tradicionales. El modelo de red predominante hoy en día no está optimizado para satisfacer los requerimientos actuales y futuros de los operadores de telecomunicaciones, empresas y usuarios finales. La mayor parte de las redes convencionales presentan una arquitectura estática inadecuada para los requisitos actuales, como, por ejemplo, las necesidades de almacenamiento de los centros de datos empresariales. Al reconocer el problema, la comunidad del networking trabaja para desarrollar nuevos modelos de red que se adapten mejor a los requisitos que son necesarios para los nuevos servicios y aplicaciones.

En los últimos años, una de las tendencias tecnológicas que ha suscitado mayor interés en los fabricantes son las Redes Definidas por Software (SDN). Este concepto no es nuevo y completamente innovador sino que surge como el resultado de contribuciones ideas y avances en la investigación de redes. La idea de una red que pueda programarse, y no simplemente configurarse, ha sido ya aplicada por numerosos fabricantes, pero con la limitación de que todas las iniciativas habían sido propietarias.



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

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

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



7

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



Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión

La Fundación COMPUTAEX tiene también 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 2014 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación.

Convenios de colaboración

Universidad de Extremadura



Los Másteres TIC impartidos por la Universidad de Extremadura surgen para dar respuesta a la demanda de empresas y organizaciones del sector de profesionales especializados en el sector TIC. COMPUTAEX y su centro CénitS colaboran ofreciendo su experiencia y sus recursos con el fin de dinamizar y fomentar el sector tecnológico de nuestra región.

Este convenio también permitió convocar tres becas ligadas a tareas de investigación, desarrollo, implantación y provisión de servicios en CénitS, teniendo como objetivo la formación de los becario a través de dichas tareas. Además, COMPUTAEX y CénitS

colaboran con los Másteres TIC impartidos por la Universidad de Extremadura desde 2011, impartiendo docencia en la asignatura "Computación de Altas Prestaciones" del Máster en Ingeniería Informática.

Fujitsu



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

HP



Hewlett-Packard es socio tecnológico de CénitS, como fabricante del supercomputador LUSITANIA y de la mayor parte de su tecnología.

CESGA



El Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) es el centro de cálculo, comunicaciones de altas prestaciones y servicios avanzados de la Comunidad Científica Gallega, Sistema Académico Universitario y del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Es uno de los referentes nacionales en el campo de la supercomputación. CESGA y CénitS colaboran en la mayoría de sus ámbitos de actividad.

INTROMAC



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

Red de e-Ciencia de España



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

Extremadura Avante



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

aportado a COMPUTAEX y CénitS importantes colaboraciones para llevar a cabo sus objetivos.

REDIRIS



La Fundación COMPUTAEX forma parte de las instituciones afiliadas a RedIRIS (Red Española para la Interconexión de los Recursos Informáticos de universidades y centros de investigación), fundada en el año 1988, convirtiéndose en la red académica y de investigación española. Actualmente, RedIRIS está integrada dentro de la Entidad Pública empresarial Red.es, del Ministerio de Industria, Energía y Turismo. Esta afiliación permite a COMPUTAEX acceder a un gran número servicios que provee RedIRIS para la comunidad científica. De entre estos servicios son destacables la interconexión a la red de datos académica española, la monitorización de servicios de las instituciones, la seguridad de equipos y redes informáticas, y servicios relacionados con identidad digital. RedIRIS tiene alrededor de 400 instituciones afiliadas, principalmente Universidades y Organismos Públicos de Investigación.

Red Española de Supercomputación



En 2015, CénitS pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES), incorporándose, a las 19 redes nacionales existentes. La RES surgió como infraestructura distribuida, para dar servicio a la comunidad científica, con la voluntad de cubrir las necesidades de supercomputación de los diversos grupos de investigación existentes.

De este modo, la RES ofrece un servicio optimizado y unificado a usuarios de la supercomputación en España, mediante la aplicación de criterios homogéneos de acceso a su uso, gracias a una eficiente coordinación de sus recursos. Para ello, cada centro cede parte de los mismos, los cuales son gestionados por un comité común e

independiente, encargado de evaluar las peticiones de acceso en base a la excelencia científica y la necesidad real de cada interesado.

Actualmente, forman la RES los siguientes nodos: Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS), Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM), Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC), Universidad de Cantabria (UC), Universidad de Málaga (UMA), Universidad de Valencia (UV), Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza (UZ), Instituto Tecnológico de Canarias (ITC), Fundación COMPUTAEX, Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), Consorcio de Servicios Universitarios de Cataluña (CSUC), Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL), y Universidad Autónoma de Madrid (UAM).



Appentra Solutions



Appentra Solutions es una spin-off de la Universidad da Coruña creada en julio de 2012, cuya misión es desarrollar herramientas software de alta calidad que permitan un uso extensivo de las

técnicas de computación de alto rendimiento en todas los campos de la ingeniería, la ciencia y la industria.

Este convenio potencia el desarrollo de nuevos proyectos de I+D+i que permitan explotar la potencia de los modernos sistemas HPC de una forma más eficiente y productiva, aumentando la rentabilidad de las inversiones realizadas en los sistemas disponibles en CénitS.

Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León



La Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL)

es una Organización no lucrativa, perteneciente al Sector Público de Castilla y León, que tiene como actividad principal, la mejora de las tareas de investigación en las Universidades, los centros de I+D y las empresas de Castilla y León, promoviendo y desarrollando acciones de innovación en el mundo de la Sociedad del Conocimiento, el área del cálculo intensivo, las comunicaciones y los servicios avanzados, contribuyendo mediante el perfeccionamiento tecnológico al desarrollo económico de la Comunidad y a la mejora de la competitividad de las empresas. Este convenio permite la colaboración con el objeto de compartir experiencias y elaborar proyectos conjuntos en el ámbito de la I+D+i, la formación y la divulgación científica.

Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón



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

La Fundación COMPUTAEX y la Fundación CCMI han llegado a un

acuerdo de colaboración para la cesión de espacios en el edificio del CCMI, que acogerá a los recursos técnicos y humanos de CénitS.

Derecho tecnológico e informática forense

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



Colaboración en los másteres TIC de la Universidad de Extremadura



La Fundación COMPUTAEX y su Centro CénitS colaboran con los Másteres TIC impartidos por la Universidad de Extremadura desde principios de 2011, ofreciendo su experiencia y sus recursos con el fin de dinamizar y fomentar el sector tecnológico de nuestra región.

Más concretamente, se ha impartido docencia en la asignatura “Computación de Altas Prestaciones” del Máster en Ingeniería Informática.

También se han codirigido varios trabajos fin de máster y se han tutorizado tres becas de formación, cuyas actividades se presentan a continuación.

Becas de formación

Laura Amarilla Cardoso

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

Respecto al ámbito académico, se propone desarrollar el Trabajo Fin de Máster utilizando los recursos propios que posee la fundación, llegando a límites inalcanzables realizando el mismo estudio del trabajo siendo ajenos a la organización. Para ello, en estas prácticas se realizó la implementación y posterior evaluación de una red definida por software (Software Defined Network, SDN de sus siglas en inglés), ofreciendo la opción de ejecutar pruebas en entornos reales y no estancarse en simples simulaciones.

Por otro lado se ha participado en diversos proyectos TI y de innovación, en los que participa la Fundación, como INRETEL proyecto que forma parte del programa COINVESTIGA y estudia nuevas metodologías para el procesamiento de reclamaciones de los usuarios de los servicios de telecomunicaciones.

También en este periodo de tiempo se ha colaborado en programas de eficiencia energética enmarcado en el proyecto ConSumar, dedicado a la creación de una plataforma para la optimización de costes energéticos, tanto a nivel doméstico como empresarial, aprovechando la normativa del nuevo sistema tarifario eléctrico y el análisis de datos en torno al suministro y consumo eléctrico que ofrece el BigData.

Objetivos

- Estudio de los fundamentos de las redes definidas por software (SDN).
- Conocimiento de los diferentes controladores SDN con el estudio de la funcionalidad y el rendimiento del controlador SDN.
- Llevar a cabo un entorno de pruebas de una implementación SDN en un entorno virtual y en uno real, para su posterior evaluación.
- Investigación para la obtención de una nueva metodología y un prototipo TIC para el tratamiento de reclamaciones de servicios de telecomunicaciones.
- Estudio de una herramienta software para el ahorro en el coste de energía eléctrica sirviendo como comparador tarifario

eléctrico para ámbito doméstico y empresarial.

- Apoyo de las actividades cotidianas realizadas en CénitS.

Objetivos alcanzados

- Presentación del Trabajo Fin de Máster en Ingeniería de Telecomunicaciones denominado: “Despliegue de un testbed de redes definidas por software para la gestión de recursos de red de un CPD”.
- Contribución con el proyecto ConSumar, que forma parte del programa CENITAL, realizando una prospectiva de todas las características del nuevo sistema tarifario eléctrico. Ofreciendo de esta forma un método de cálculo para el diseño de una aplicación software que sirva como comparador tarifario disponible a los consumidores que quieran conocer con detalle la oferta eléctrica en cada momento.
- Apoyo en la creación de una plataforma de satisfacción, donde los usuarios puedan compartir experiencias, informaciones y dudas; centralizado de esta manera las diversas quejas y problemas con la calidad del servicio recibido.
- Colaboración con el proyecto INRETEL, realizando un informe con las diversas técnicas para la extracción de información útil de las distintas redes sociales (como Facebook, Twitter, ect) utilizando técnicas de BigData. Como ejemplo se desarrolló un análisis de los datos de Facebook mediante GRAPH API.
- Participación en eventos realizados por la Fundación.

Eva Mogena Cisneros

Al amparo de la beca otorgada por el convenio firmado entre la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX se han desarrollado tareas de investigación, implantación y provisión de servicios en CénitS, teniendo como objetivo formar al becario a través de dichas labores en el ámbito laboral e investigador en el marco del desarrollo de las TIC en la región.

Como principal resultado de estas prácticas de formación se realizó un Trabajo Fin de Máster de investigación y desarrollo, donde se implementó una sesión de terapia con un robot, especialmente diseñada para que personas de la tercera edad mejoraran sus habilidades cognitivas. En dicha sesión terapéutica, el robot jugará con el paciente,

quién tendrá que repetir una secuencia de movimientos que el robot le haya indicado previamente y mediante el sensor RGB-D de la cámara Kinect que posee el robot, se recolecte los resultados del ejercicio realizado por el paciente.

Por otra parte, también se ha colaborado en el despliegue de sistemas innovadores de monitorización y telemetría de infraestructuras con la realización del proyecto Software Sensor For Smart Infraestructures (S4I). Este estudio se fundamenta en el impulso de las innovadoras técnicas definida como Monitorización de la Salud Estructural conocido en inglés como Structural Health Monitoring (SHM), donde integra y optimiza las operaciones de construcción, gestión, explotación y mantenimiento abarcando todo el ciclo de vida de la estructura.

Además de todos los trabajos anteriores, también se ha participado en otros proyectos TI dedicados al estudio de la situación de las TIC en la región extremeña cuyos resultados están incluido en la memoria de TaxonomTIC 2015.

Por último, se ha realizado tareas de apoyo en Cénits, colaborando en eventos promovidos y llevados a cabo por el Centro.

Objetivos

- Estudio de la estimulación cognitiva en personas adultas mayores.
- Análisis de funcionamiento de la cámara Kinect y su sensor RGB-D, junto con la creación de una base de datos de los vídeos de las terapias para el entrenamiento del sistema y extracción de las características y

parámetros de los ejercicios realizados.

- Investigación de algoritmos de aprendizaje para métodos de decisión basados en técnicas predictivas después de realizar un entrenamiento con la base de datos recolectada.
- Realizar una prospectiva de la realidad de sector TIC extremeño en relación a España y Europa que permita conocer su estado y evolución a lo largo del tiempo.
- Apoyo de las actividades de difusión realizadas por Cénits.

Objetivos alcanzados

- Presentación del Trabajo Fin de Máster en Ingeniería de Telecomunicaciones denominado: "Análisis de imágenes de profundidad en terapias de rehabilitación supervisadas por robots autónomos".
- Colaboración en la creación de una red neuronal para el proyecto S4I (Software Sensor For Smart Infraestructures) mediante el estudio de técnicas de Monitorización de la Salud Estructural (SHM) que aportan información continua de una infraestructura desde su construcción hasta el fin de su utilización, con el objetivo de desplegar diferentes estrategias que posibiliten una extensión de la vida útil de las estructuras.
- Cooperación en el estudio del uso de las TIC de la sociedad extremeña respecto a otras comunidades, englobado dentro del proyecto TaxonomTIC 2015, enmarcado en el programa CENITAL-2.
- Apoyo en las visitas realizadas al CPD de Trujillo.
- Asistencia a la noche Europea de los investigadores 2015. Participando en el taller llevado a cabo por la Fundación.

Laura Nuñez Sierra y Félix Ortiz Macías

Durante el periodo de las prácticas de formación se brinda a los becarios un contacto al mundo laboral en el ámbito de las nuevas tecnologías de la supercomputación en la región de Extremadura. A la vez que se amplía

la formación recibida por los alumnos de los Masters TIC de la UEX, ya que la beca es totalmente compatible con las clases y actividades realizadas en ellos.

En el tiempo de disfrute de la beca se han realizado varios trabajos sobre la web corporativa y las redes sociales que la Fundación utiliza como herramientas de difusión. Entre las tareas llevadas a cabo se ha desarrollado un análisis de la Web mediante GoogleAnalytics, y tras el estudio de los datos recabados se decidió realizar una reforma exhaustiva de la plataforma web para aumentar la claridad y navegación por el portal.

Respecto a la difusión de noticias se efectúa al menos una publicación por semana mostrada en el portal web y mediante la herramienta Buffer App se centralizan dicha publicaciones en las cuentas de Facebook, Twitter, LinkedIn y Google+ que poseen CénitS y la Fundación COMPUTAEX.

Por otra parte también se ha colaborado en tareas relacionadas con el subproyecto Evolución de la accesibilidad web incluido en Proyecto de CENITAL 2015 con la realización de un análisis de la comunidad extremeña en cuestión de la cobertura y las tecnologías de telecomunicaciones disponibles, y el estudio de normativas y técnicas para la valoración de la accesibilidad web en dicha región.

Simultáneamente a los trabajos expuestos anteriormente, también se ha participado en otras actividades promovidas por la Fundación, apoyando en las visitas y eventos realizados por CénitS, al igual que se ha cooperado en el diseño gráfico y creación de portadas, maquetación de proyectos, logotipos e imágenes.

Objetivos

- Realización de un análisis del portal web y las redes sociales para estudiar el comportamiento de los usuarios.
- Planificación de una reforma de la web para aumentar la claridad y facilitar la navegación por el portal.
- Estudio de la accesibilidad Web en la región extremeña.
- Apoyo en la creación y difusión del contenido publicado en la web de CénitS.

- Colaboración de eventos promovidos por la Fundación.

Objetivos alcanzados

- Desarrollo de un análisis del portal web y las redes sociales mediante GoogleAnalytics para manifestar el comportamiento de la audiencia, la adquisición, la conducta y las conversiones que se llevan a cabo en el sitio web.
- Trabajos en la transformación del portal web para ampliar la claridad del sitio web y mejorar la experiencia de navegación al usuario. Además de la actualización del contenido web.
- Ayudar en la divulgación de las noticias mostradas en el portal web y centralizar la difusión de dichas publicaciones en las cuentas de Facebook, Twitter, LinkedIn y Google+ que posee la Fundación COMPUTAEX, mediante Buffer App.
- Colaboración en el proyecto CENITAL-2015 con la perspectiva realizada para la evaluación de la accesibilidad Web en la región Extremeña, mediante el estudio del despliegue y el uso de las infraestructuras de telecomunicaciones en la comunidad y el análisis tecnológico de las diferentes normativas y sus recomendaciones para crear contenido web más accesible, como: las recomendaciones WCAG, Norma UNE 139803 u otras legislaciones sobre accesibilidad web. También se ha llevado a cabo investigaciones de los Software utilizados para la evaluación de la accesibilidad web, como por ejemplo WAVE, Total Validator o AChecker.
- Por último se ha brindado apoyo a diferentes trabajos de diseño de portadas, logotipos o imágenes, así como propuestas de maquetación de algunos proyectos realizados por CénitS. Además se ha participado en las visitas realizadas al CPD de Trujillo.

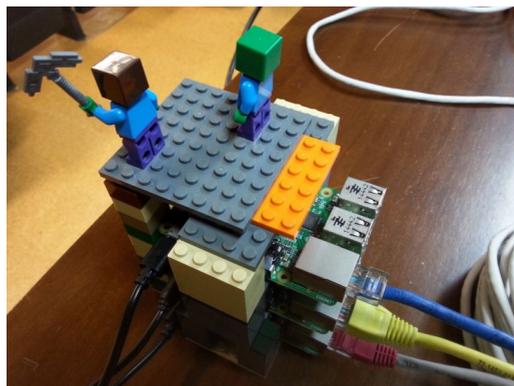
Noche europea de los investigadores 2015



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

La edición de 2015 se celebró el 25 de septiembre de manera paralela en los campus universitarios de Badajoz, Cáceres, Plasencia y Mérida, con un amplio programa compuesto por actividades científico-lúdicas, talleres, visitas guiadas por los laboratorios, exposiciones y micro-conferencias.

La Fundación COMPUTAEX se unió a la celebración y presentó el taller titulado "Monta tu propio supercomputador con piezas de LEGO y raspberries PI". En este taller práctico, se abordó la construcción de un supercomputador compuesto por raspberries PI y ensamblado con piezas de LEGO. El principal objetivo del taller era el de aprender a construir un clúster casero de ordenadores de bajo coste. Una vez construido, el clúster será sometido a tests con diferentes problemas que típicamente se resuelven con supercomputadores.



Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
16/01/15	Sede CREEX	Jornada Plan 3E: Presente y Futuro de las TIC en Extremadura	Asistentes y ponentes
22/01/15	Escuela de Administración Pública de Extremadura	Jornada de Seguridad de la Información para la Administración Pública de Extremadura	Asistentes
10/02/15	Escuela Politécnica de Cáceres	Introducción y primeros pasos con OpenNebula.	Ponentes
11-13/02/15	Universidad Politécnica de Cataluña	Administradores de la Red Española de Supercomputación	Asistentes y ponentes
17/02/15	BlueCity Mérida Palace	SEGURIDAD Extremo a extremo.	Asistentes
27-28/02/15	Complejo Cultural San Francisco.	V Jornadas de Peritaje Informático de Extremadura: "Ciberdelincuencia. Análisis forense de dispositivos móviles.	Asistentes
27/02/15	Hotel Extremadura de Cáceres	Iª Noche de la Ingeniería Informática (organizada por el CPIIEx)	Asistentes
04/03/15	IFEBA	MeetMITTIC. Encuentro Transfronterizo para la Innovación Tecnológica y el Emprendimiento.	Asistentes
05/03/15	Garaje 2.0, Cáceres.	Analítica digital: Como sacar el máximo partido a los datos	Asistentes
06/03/15	Escuela Politécnica	Second Congress on Multicore and GPU Programming.	Asistentes
26/03/15	Compañía Tmediat, Madrid	Workshop sobre Innovación y Tecnología	Asistentes
09/04/15	Kinepolis (Madrid)	DCD Converged Madrid	Ponentes
09/04/15	Garaje 2.0, Cáceres	Programa Bonos de Innovación y Vales Tecnológicos 2015. Plan de Innovación en la Pyme RIS3 - AGROTECH	Asistentes
17/04/15	Escuela Politécnica de Cáceres	IV Olimpiada Informática de Extremadura	Asistentes
13/05/15	Centro de Cirugía de Mínima Invasión, Cáceres	Jornada informativa sobre el Programa Bonos de Innovación y Vales Tecnológicos 2015. Área de la Salud.	Ponentes
20/05/15	Centro de Empresas, Almendralejo.	Jornada informativa sobre el Programa Bonos de Innovación y Vales Tecnológicos 2015. Área TIC.	Ponentes
09/07/15	CATAA, Castelo Branco.	Proyecto MITTIC. Jornada de presentación de resultados de innovación en TIC	Ponentes
14/07/15	Escuela Politécnica, Cáceres.	Big Data: Mitos y Realidades	Asistentes
17/09/15	Campus Diagonal Nord A3 Building, Barcelona.	4th HPC Advisory Council Spain Conference and the 9th RES Users' Conference on 22nd & 23rd September 2015	Asistentes

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
25/09/15	Escuela Politécnica, Cáceres.	Noche de los investigadores 2015	Ponentes
29/09/15	Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción (INTROMAC).	Jornada "Presentación de resultados de innovación TIC"	Ponentes
15/10/15	Biblioteca Central del Campus Universitario, Cáceres.	Taller de autores: pautas para publicar en revistas del IEEE	Asistentes
21-22/10/15	Hotel Silken Puerta América, Madrid.	INTEL HPC Code Modernization	Asistentes
22/10/15	Hotel Zurbarán, Badajoz.	XII Encuentro de las Telecomunicaciones en Extremadura	Asistentes
10/11/15	Edificio Guadiana, Badajoz.	Jornada informativa Oportunidades de financiación de la I+D+i en el reto social 3. Energía segura, limpia y eficiente (WP 2016/2017)	Asistentes
12/11/15	Badajoz.	Inauguración del Ecosistema W	Asistentes
12/11/15	PCTEX, Badajoz.	Taller práctico de preparación de propuestas de H2020	Asistentes
13/11/15	MINECO, Madrid.	Jornada de Big Data para Ciencias de la Tierra en España	Asistentes
17/11/15	Edificio Guadiana, Badajoz.	Jornada informativa Horizonte 2020 sobre Oportunidades de financiación de la I+D+i en el reto social 1	Asistentes
24/11/15	Ministerio de Economía y Competitividad, Madrid.	Jornada informativa sobre el Programa de trabajo 2016-2017 de Infraestructuras de Investigación	Asistentes
27/11/15	CETA-CIEMAT, Trujillo.	Seminario de Docker	Asistentes
30/11/15 02/12/15	Palacio de Congresos de Badajoz, Badajoz	Jornada de presentación de resultados POCTEP	Asistentes
02/12/15	Oficinas de Exclusive Networks, Madrid.	HiveManager NG Test-Flight	Asistentes

Portal web



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

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

Funciones

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

- Publicar los resultados de las investigaciones propias y de los usuarios que hacen uso de los recursos del Centro.
- Facilitar un modelo de contacto para las personas interesadas en el uso de los servicios ofertados por el Centro y la Fundación.

Contenidos

- Identidad corporativa: incluye información referente a CénitS y a la Fundación COMPUTAEX.
- Actualidad: canal de noticias relacionadas con la supercomputación, investigación e innovación, difusión de convenios y colaboraciones del centro y la fundación con otras entidades, noticias destacadas y hemeroteca.
- Zona de proyectos: información sobre los proyectos que hacen uso de los recursos de CénitS, los investigadores responsables de dichos proyectos y las publicaciones relacionadas respecto a esos estudios.
- Zona de eventos: agenda informativa que recoge los eventos que se realizan, en los que se colabora, participa o se consideran de interés.
- Portal de Transparencia: zona habilitada con el objetivo de facilitar a todas las personas interesadas, un acceso sencillo a la información más importante relativa a las actividades económicas de la Fundación. De esta forma, se cumple el compromiso con la transparencia a la sociedad, rindiendo cuenta de las actuaciones llevadas a cabo en el Centro y la Fundación.

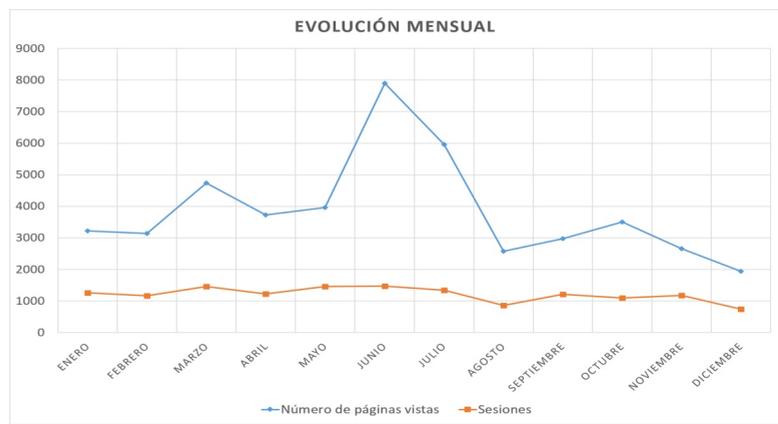
- Zona multimedia: contenido digital de tipo texto, audio, gráfico y vídeo, enlaces de interés, premios y reconocimientos.
- Documentación: información relacionada con cuestiones generales y manuales de usuario (uso y acceso a los sistemas, resolución de los problemas comunes, etc).

Datos estadísticos

Seguidamente se exponen los datos más relevantes respecto a las fuentes de tráfico en el ecosistema web para el año 2015, según GoogleAnalytics.

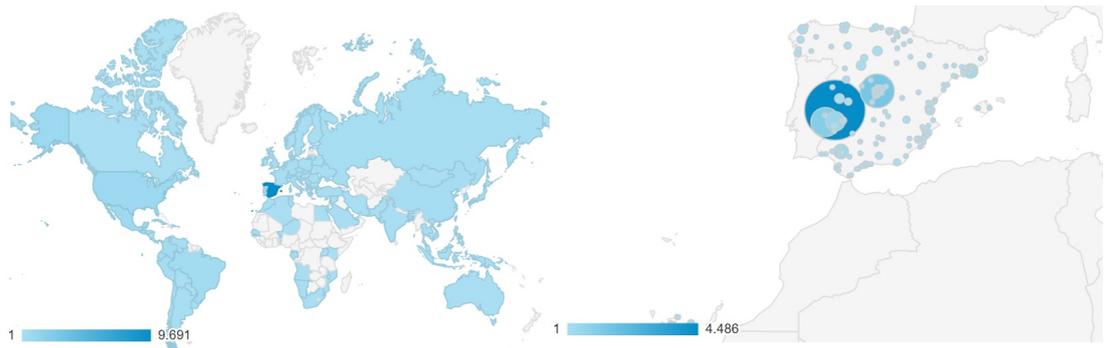
Evolución mensual

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



Ubicación geográfica

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

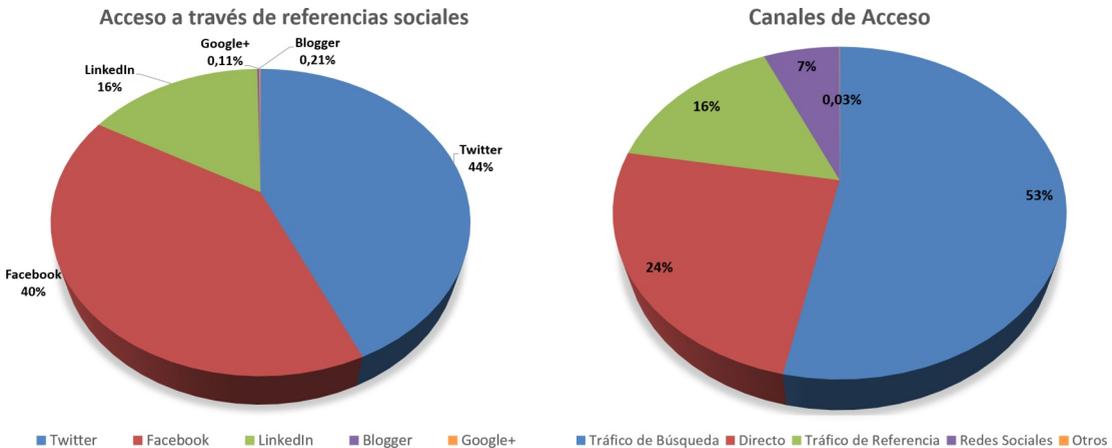


Fuente de tráfico

En la siguiente figura se muestra cómo acceden los usuarios a la plataforma web. El desarrollo en base a los estándares, las buenas prácticas en cuestiones de accesibilidad y las técnicas SEO han mejorado el porcentaje de accesos a través de los distintos motores de búsqueda y tráfico directo.

Otro porcentaje importante respecto a los canales de acceso es el tráfico llevado a cabo a través de referencias, debido a la colaboración de la Fundación COMPUTAEX y CénitS en la creación y difusión de proyectos y eventos.

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



Redes sociales



Sabiendo la gran importancia del uso de las redes sociales para la difusión de información, se ha continuado trabajando en la presencia en las distintas redes sociales más populares con el fin de dar a conocer las noticias más relevantes entorno al centro CénitS y a las investigaciones e innovaciones que surgen del uso de los recursos de los supercomputadores LUSITANIA y LUSITANIA II, mediante las siguientes redes sociales:

Facebook: página sobre el supercomputador LUSITANIA. Este canal permite divulgar las noticias que publicamos en la página web, permitiendo que los usuarios participen aportando opiniones y compartiendo la información con otros usuarios.

Twitter: este canal permite notificar cualquier tipo de evento de interés y mantener una relación con los usuarios rápida y flexible.

LinkedIn: página del centro CénitS orientada a publicitar los servicios que ofrece la Fundación a una audiencia más especializada que en las anteriores redes sociales.

Youtube: canal para centralizar los vídeos relacionados con la actividad realizada en el centro, emitidos en los distintos medios visuales.

Vimeo: canal para centralizar los vídeos grabados durante los eventos organizados por el centro.

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

Difusión y divulgación

Durante el año 2015, el Centro CénitS ha recibido la visita de más 400 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, universitarios y estudiantes de educación secundaria.

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





8

Recursos tecnológicos



Recursos tecnológicos

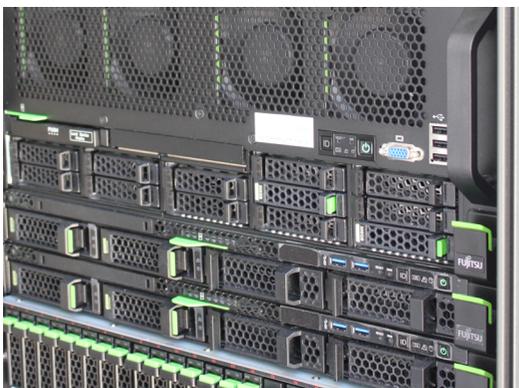
El centro CénitS tiene como objetivo principal la explotación de los Supercomputadores LUSITANIA I y II, pero también el fomento, la difusión y la prestación de servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas.

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

LUSITANIA II

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

Las características técnicas de LUSITANIA II se detallan a continuación:



Nodo de cómputo de memoria compartida

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

Clúster de memoria distribuida

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

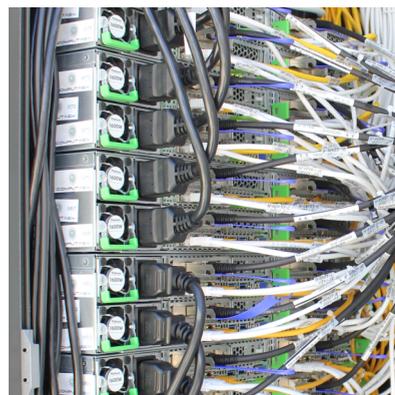
- 40 servidores Fujitsu Primergy CX2550 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2660v3, de 10 cores cada uno, a 2,6GHz (20 cores por nodo, 800 cores en total) y 25 MB de caché, con 80GB de RAM y 2 discos SSD 128GB.

Nodos de servicio

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

Nodos de desarrollo

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



Almacenamiento

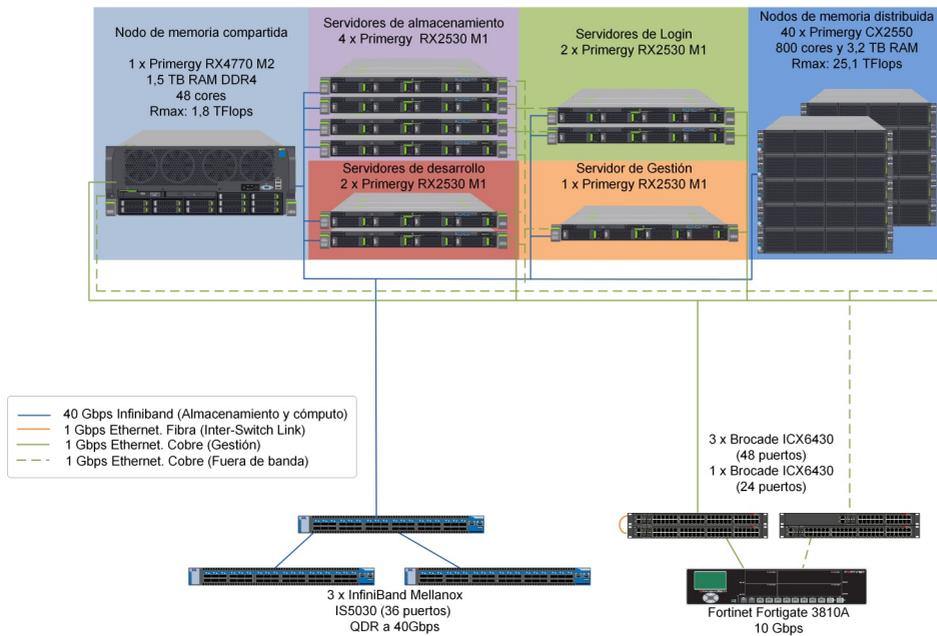
- Cabina de metadatos (MDT) Eternus DX 200S3 (15 discos de 900GB SAS) = 12 TB.
- 2 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 64GB de RAM DDR4 y 2 discos SAS de 300GB para gestión de metadatos con Lustre.
- Cabina de datos (OST)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



Topología de red

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

Arquitectura LUSITANIA II



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

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



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

LUSITANIA



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

Las características técnicas de LUSITANIA se detallan a continuación:

Nodos de cómputo

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

Nodos de servicio

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

Nodos de gestión

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

Nodos de cloud computing

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

generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

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



Unidades aceleradoras de cómputo

- 2 x HP ProLiant WS460c G6 Workstation Blade con procesadores HP BL460c G7 Intel Xeon E5645 (2.40GHz/6-core/12MB), 96 GB de memoria RAM por servidor, cuatro discos SAS de 300 GB y dos NVIDIA Tesla M2070Q (448 cuda cores y 6GB GDDR5). Estos servidores pertenecen al proyecto Siatdeco (RITECA II), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.
- 1 x Intel Xeon Phi Co-Processor 3120P. Este procesador pertenece al proyecto MITTIC (Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales), que está cofinanciado Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.

Almacenamiento

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

Copias de seguridad

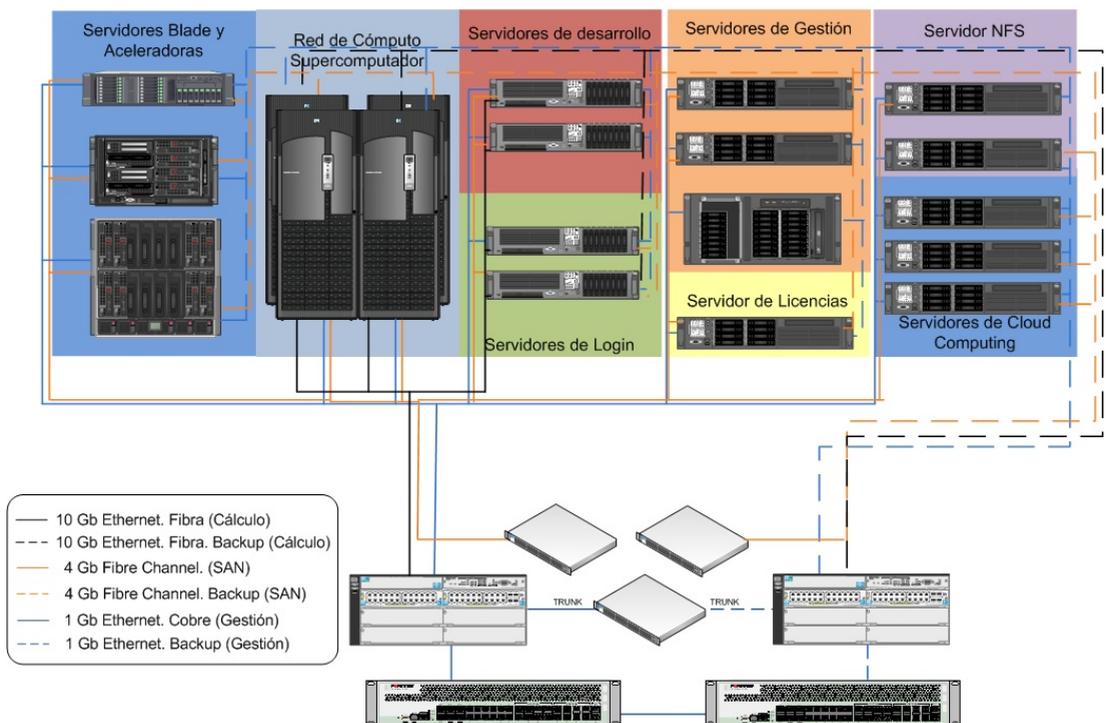
- Sistema de backup basado en la librería de cintas HP Storaeworks EML 245e.
- Capacidad para 245 cintas de tecnología LTO-4 Ultrium 1840, lo que ofrece una capacidad de 392 TB en comprimido 2:1.
- Software de gestión y planificación de backups desatendidos HP StorageWorks DataProtector.

Topología de red

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

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

- Dos firewall Fortinet Fortigate 1000C como sistema de seguridad perimetral, con conexiones a 10Gbps, capacidad de firewall, VPN, antivirus, detección de intrusiones y gestión de ancho de banda por conexión, configurados como un cluster redundante activo-pasivo de alto rendimiento y gran capacidad de procesamiento.
- Dos balanceadores de carga Radware AppDirector, con capacidades de balanceo de carga en aplicaciones y capacidades de gestión remota, en configuración de cluster redundante activo-pasivo.
- Dos switches de core HP ProCurve 5406ZL con capacidad de conmutación a 10Gbps para la red de cómputo e interfaces a 1Gbps para las redes de administración y usuarios. Cuentan con 48 puertos ethernet y 4 fibre channel cada uno.
- Dos switches de interconexión para la red de usuarios y servidores, un HP ProCurve 2626 y un HP ProCurve 2810-24G, para permitir el resto de servidores y a los usuarios la conexión a las redes de servicio.



CONSUMO DE RECURSOS

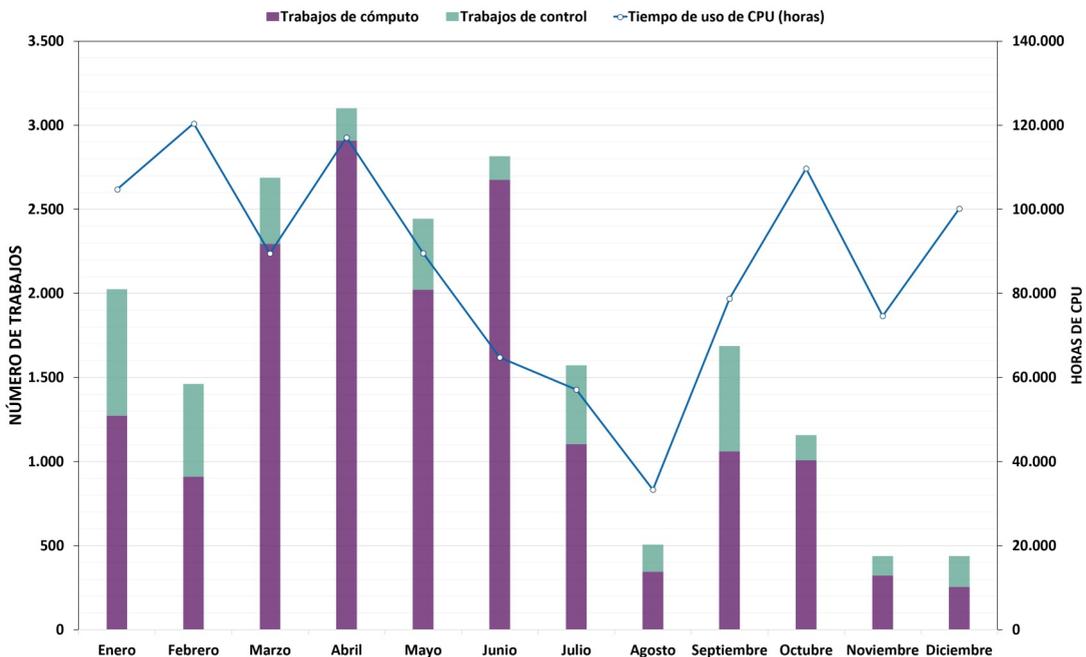
Uso de recursos

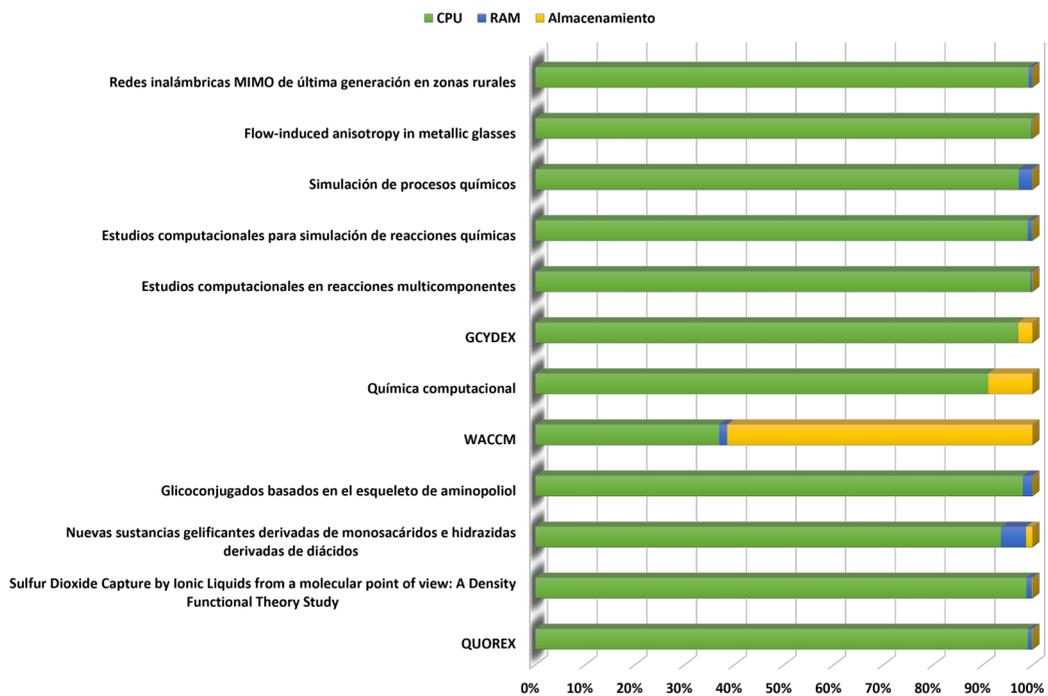
Durante el año 2015, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura hardware y software de LUSITANIA. La gráfica que se presenta a continuación muestra los datos relacionados con el consumo de los recursos en los nodos principales de LUSITANIA, que son los que soportan la mayoría de la carga de computación del Centro, en base a todos los trabajos ejecutados sobre ellos.

Durante el ejercicio de 2015, se han ejecutado un total de 20.337 trabajos de usuarios, divididos en dos categorías:

- Trabajos generales: 16.167. Estos trabajos están destinados a generar datos para su posterior análisis.
- Trabajos de control: 4.170. Estos trabajos son ejecutados por los usuarios para optimizar el entorno de ejecución de cada trabajo.

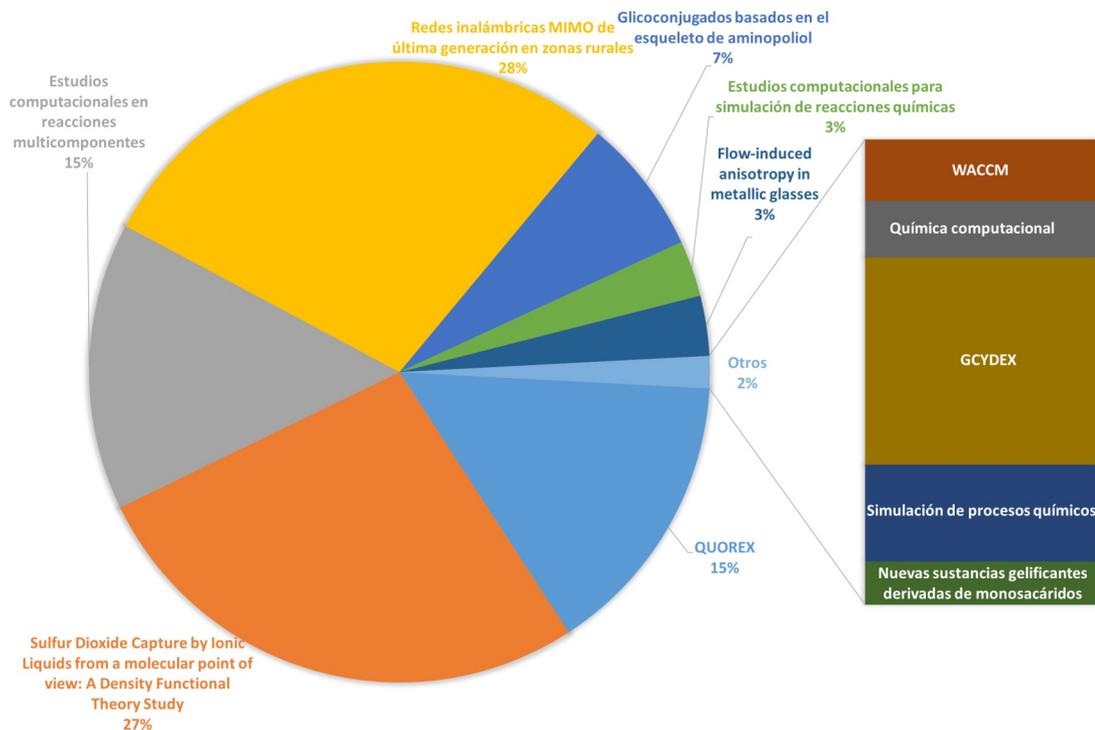
En la siguiente gráfica se muestra la relación mensual de los trabajos finalizados, tanto de cómputo como de control, y el uso de CPU. Como se puede apreciar, existen trabajos con necesidades muy dispares ya que no hay una relación directa entre el número de trabajos y las horas de CPU requeridas para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





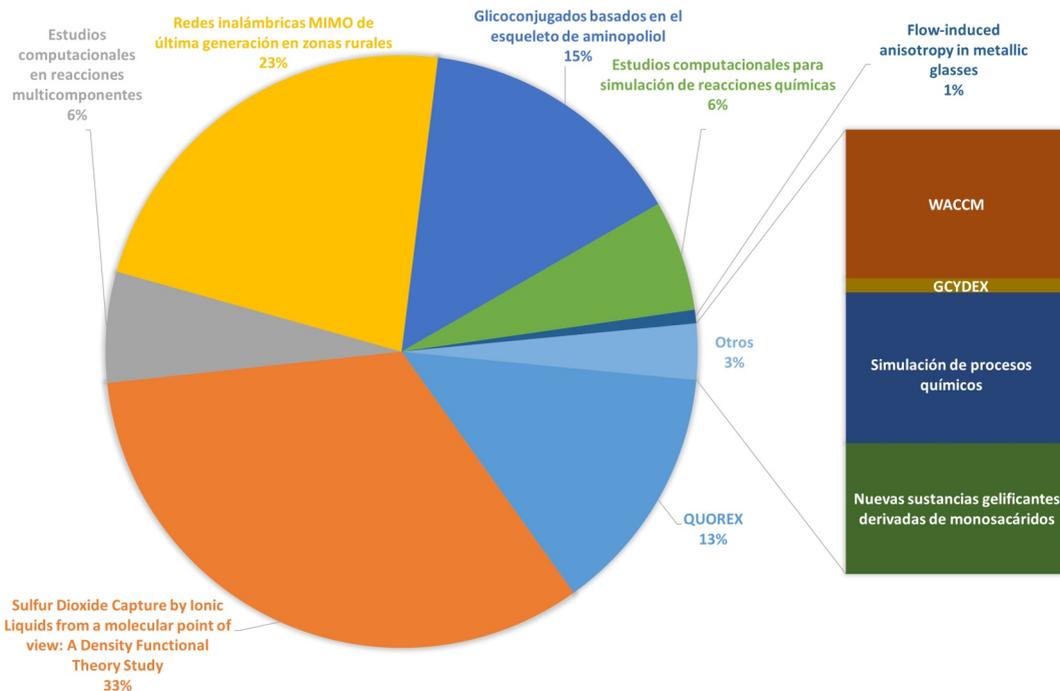
Uso de CPU

La gráfica que se presenta a continuación indica el consumo anual de CPU de LUSITANIA de los proyectos de investigación que más recursos han empleado.



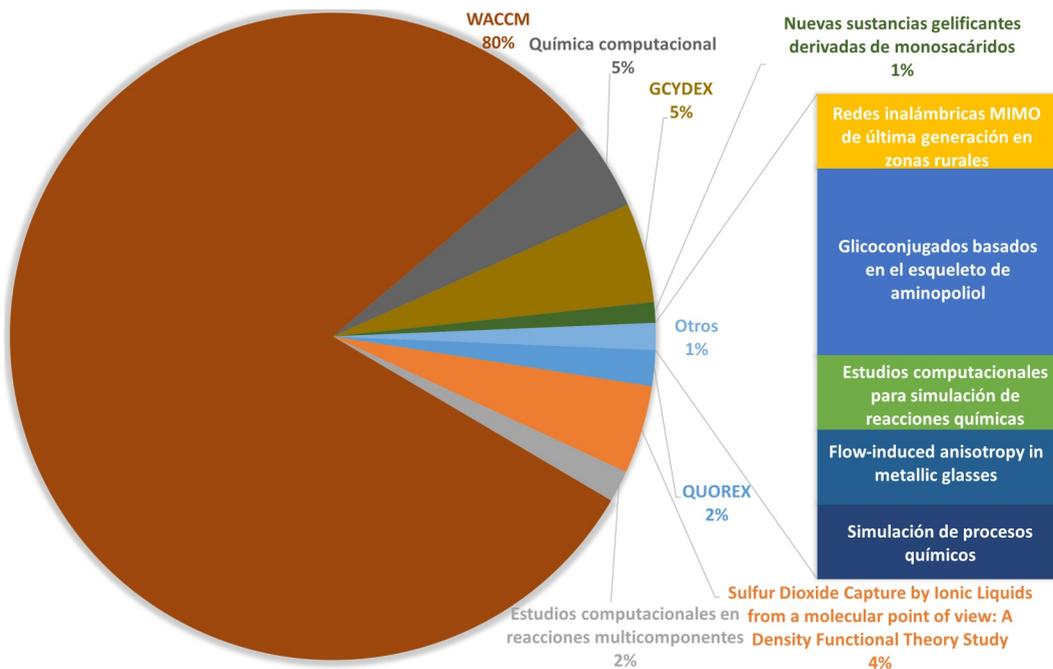
Uso de Memoria Principal

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



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

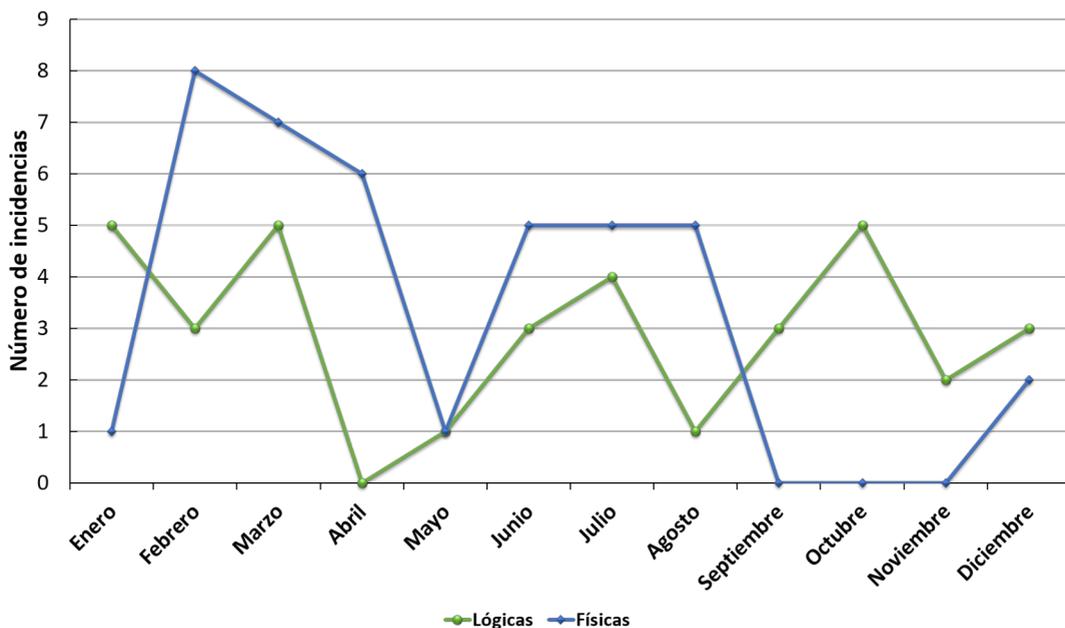
Durante el año 2015, un importante número de técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en el supercomputador LUSITANIA. Una treintena de proyectos y varias decenas de usuarios han podido beneficiarse de la infraestructura de CénitS durante el presente año.

Incidencias

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

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

El número de incidencias de usuario se ha reducido con respecto al año anterior en un 7% aproximadamente. Se han resuelto un total de 75 incidencias de usuario. A continuación se muestra la relación de incidencias lógicas o software y de incidencias físicas o hardware resueltas durante los distintos meses del año 2015.



SOFTWARE

Sistemas Operativos
Suse Linux Enterprise Server
Red Hat Enterprise
Debian
CentOS
Ubuntu

Librerías
HP-MPI
Platform MPI
Intel MPI Library
Intel Data Analytics Acceleration Library
Intel TBB Threading Library
Intel IPP Media and Data Library
OpenMP
Intel Math Kernel Library (MKL)
NetCDF
PETSc
Meep
GSL
Otras...

Computación Técnica
Octave
Matlab
Gaussian
IDL
NWChem
R

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

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



9

Notas de prensa



Notas de prensa

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 del año.

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

CénitS - COMPUTAEX en los medios

Estadísticas generales

Televisión	Radio	Prensa escrita	Prensa digital
3	1	1	109

Televisión

Fecha	Titular	Fuente
04/05/15	Entrevista sobre el Supercomputador LUSITANIA en el programa Primera Página	Canal Extremadura
29/09/15	Noticia sobre el proyecto MITTIC	RTVE Noticias de Extremadura
13/11/15	Reportaje sobre Big Data realizado por el programa "Tu Empleo"	Canal Extremadura TV

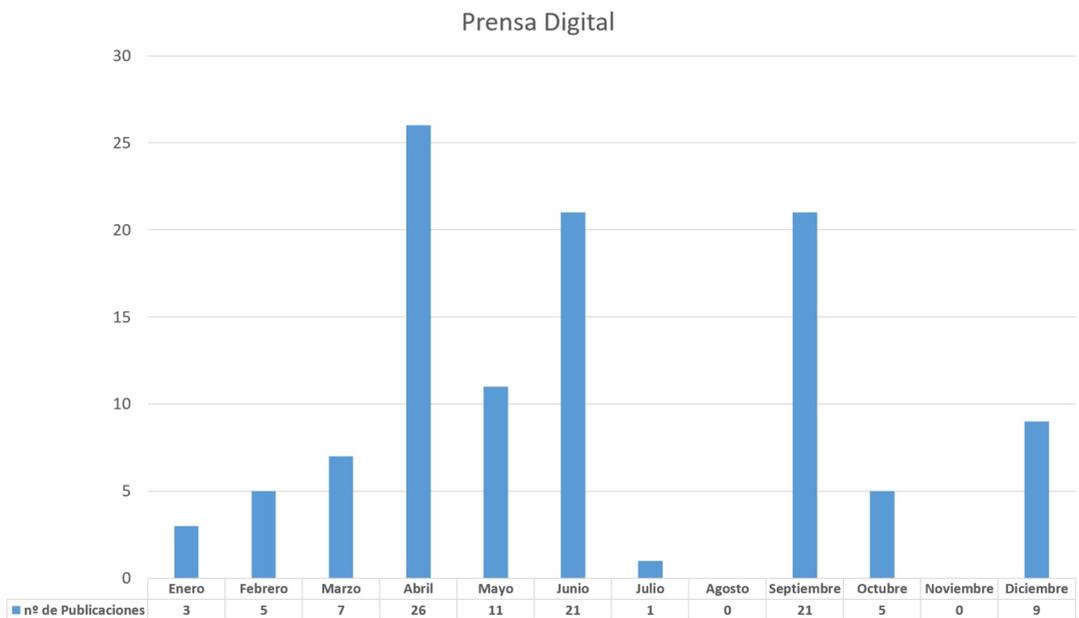
Radio

Fecha	Titular	Fuente
24/03/15	Iniciativa Agrotech	Cadena Cope

Prensa escrita

Fecha	Titular	Fuente
01/06/15	La RIS3 Extremadura se fortalece tras el reconocimiento del Centro de Cirugía de Mínima Invasión (CCMI) y el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CénitS) como infraestructuras científico-técnicas singulares	Núm. 91 Revista Grada

Prensa digital





LA RIS3 EXTREMADURA SE FORTALECE TRAS EL RECONOCIMIENTO DEL CENTRO DE CIRUGÍA DE MÍNIMA INVASIÓN (CCMI) Y EL CENTRO EXTREMEÑO DE INVESTIGACIÓN, INNOVACIÓN TECNOLÓGICA Y SUPERCOMPUTACIÓN (CÉNITS) COMO INFRAESTRUCTURAS CIENTÍFICO-TÉCNICAS SINGULARES

La Estrategia de Especialización Inteligente de Extremadura se actualiza tras la incorporación del Centro de Cirugía de Mínima Invasión (CCMI) y el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CénitS) al mapa de Infraestructuras Científico-Técnicas Singulares (ICTS), que elabora el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación del Ministerio de Economía y Competitividad



Esquema del patrón que guiará la Especialización Inteligente de Extremadura

La incorporación de ambos organismos al mapa de Infraestructuras Científico-Técnicas Singulares reconoce que son instalaciones singulares y abiertas total o parcialmente al acceso competitivo de usuarios de toda la comunidad científico-tecnológica nacional e internacional. Este hecho hace que la Estrategia de Especialización Inteligente de Extremadura se vea fortalecida gracias a que nutren la capacidad de innovación regional en sectores estratégicos para la región como la salud y las TIC.

El reconocimiento del Centro de Cirugía de Mínima Invasión como Infraestructura Científico-Técnica Singular se debe a su participación en la plataforma de investigación orientada a aplicaciones médicas denominada 'Nanbiosis' (Infraestructura integrada de producción y caracterización de nanomateriales, biomateriales y sistemas en biomedicina). El CénitS, por su parte, se incorpora como nodo a la Red Española de Supercomputación (RES) y aporta como principal instrumento el supercomputador extremeño Lusitania.

El Mapa Nacional de Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares fue aprobado por el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación el 7 de octubre de 2014. Actualmente son 29 las Infraestructuras Científico-Técnicas Singulares, aglutinando un total de 59 infraestructuras, 56 de ellas operativas y 3 en construcción.

Salud y TICs, sectores estratégicos

La RIS3 es una agenda integrada para la transformación económica de la región que garantiza un uso más eficaz de

los fondos públicos y estimula la inversión privada, ayudando a concentrar los recursos en una serie de prioridades clave hasta el año 2020.

El reconocimiento del Centro de Cirugía de Mínima Invasión y el CénitS como Infraestructuras Científico-Técnicas Singulares cobra especial relevancia en la especialización extremeña, ya que la Salud y las TICs son dos de las áreas de excelencia en las que se apoyará. También lo son la agroalimentación, las energías limpias y el turismo, que han de contribuir a mejorar la competitividad y a generar nuevas oportunidades para el emprendimiento y la atracción de empresas.

Para que estas áreas alcancen un nivel de excelencia internacional deben nutrir su capacidad innovadora de los resultados de la investigación y el desarrollo en los dominios científico-tecnológicos más influyentes, y en los que el Sistema Extremeño de Ciencia y Tecnología, como consecuencia, está obteniendo ya notables resultados. La Biología y la Ecología, la Química, la Bioquímica y la Biotecnología, la Electrónica o los nuevos materiales son algunos de estos dominios para la mejora de productos y procesos.





Entrevista en el programa Primera Página



Reportaje realizado por el programa Tu Empleo

Centro Extremeño
de iNvestigación,
Innovación Tecnológica
y Supercomputación

Carretera N-521, km 41.8
10.071 - Cáceres

Tel.: +34 927 049 070



JUNTA DE EXTREMADURA



Unión Europea

Fondo Europeo
de Desarrollo Regional
"Una manera de hacer Europa"