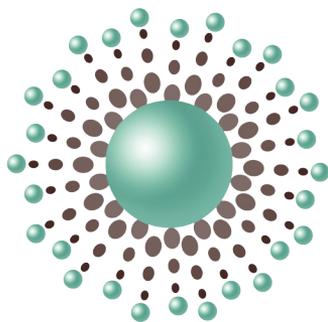


COMPUTAEX

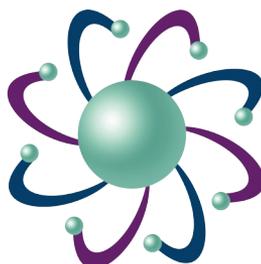
MEMORIA ANUAL

2013



COMPUTAEX

MEMORIA
2013



CÉNITS

© Fundación COMPUTAEX

EDICIÓN: Fundación COMPUTAEX

DISEÑO: Fundación COMPUTAEX

Impreso en España

Printed in Spain

ISBN - 10: 84-616-9890-8

ISBN - 13: 978-84-616-9890-5

DEPÓSITO LEGAL: CC-130-2014



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

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

ÍNDICE DE CONTENIDOS

SALUDA.....	5
HOY FUE MAÑANA AYER.....	7
ORGANIZACIÓN.....	9
PROYECTOS DESARROLLADOS.....	17
PROYECTOS SOPORTADOS.....	35
PROYECTOS CONCLUIDOS.....	77
RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN.....	89
FINANCIACIÓN DE PROYECTOS.....	105
ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN.....	115
RECURSOS.....	137
NOTAS DE PRENSA.....	157

SALUDA

Para la inmensa mayoría de los ciudadanos, la supercomputación es un concepto desconocido, casi de otro planeta. No somos conscientes de que la supercomputación tiene un papel fundamental en ámbitos tan cotidianos como los vehículos que conducimos, los aviones en que volamos, la localización y extracción del combustible que consumen nuestros vehículos o calientan nuestras casas, el desarrollo de nuevos fármacos y tratamientos médicos que facilitan nuestras vidas, el uso de Internet, los avances médicos y un largo etcétera.



Sin embargo, la supercomputación se ha convertido en indispensable, tanto para el avance científico como para la competitividad económica, y los países y regiones más desarrolladas se han dado cuenta de que el liderazgo en la computación de altas prestaciones es un requisito imprescindible para el liderazgo científico y económico.

Al igual que el número de electrodomésticos, vehículos o teléfonos son indicadores del nivel de desarrollo de una determinada sociedad, en la actualidad la capacidad de cómputo, de procesamiento y de almacenamiento de grandes volúmenes de información se ha convertido en un evidente marcador del grado de avance de la actual sociedad de la información y del conocimiento.

Los estudios especializados indican que Europa y España han de hacer esfuerzos en el ámbito de la supercomputación si no quieren perder esta importante oportunidad mundial. Contar con infraestructuras que permitan el almacenamiento y procesamiento de grandes volúmenes de información evitará que estas modernas sociedades no tengan dependencias innecesarias en un activo tan importante como es la información y el conocimiento.

Extremadura quiere ser una región puntera en supercomputación, y a ello está dedicando todos sus esfuerzos la Fundación COMPUTAEX, encargada de gestionar el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CénitS). Su objetivo es fomentar, difundir y prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas no sólo a las comunidades investigadoras extremeñas, sino también a aquella empresa o institución que lo solicite, con el fin de contribuir, mediante el perfeccionamiento tecnológico y la innovación, a la mejora de la competitividad de las empresas.

Aunque la supercomputación es su principal actividad, los técnicos de CénitS participan, como se puede constatar en este anuario, en todo tipo de proyectos tecnológicos al servicio de investigadores, tecnólogos, innovadores y emprendedores.

Toda la infraestructura con que cuenta CénitS no hace más que reforzar las potencialidades de lo que podemos denominar el ecosistema del conocimiento en Extremadura. El Sistema Extremeño de Ciencia, Tecnología e Innovación (SECTI) articula un completo conjunto de organismos generadores de conocimiento, de

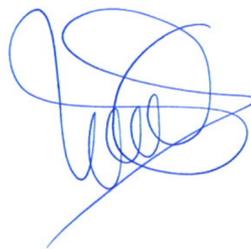
titularidad pública o privada, que abarca todos los sectores productivos de nuestra Comunidad. Disponemos, por tanto, de un entramado que permitirá que las iniciativas y proyectos en el ámbito del sector de la innovación puedan enraizar y salir adelante para dar lugar en pocos años a la consolidación de este ecosistema en Extremadura donde nuestro Centro de supercomputación está jugando un papel destacado.

Si algo hemos aprendido de la crisis es que necesitamos un cambio de modelo productivo que venga determinado por una ecuación de tres factores: Tecnología+Innovación+Talento. Éste es el modelo que nos ayudará a cimentar nuestro futuro sobre una sólida base si trabajamos con tenacidad.

El reto es implantar este nuevo modelo productivo en todos los ámbitos de la sociedad extremeña, y por ello desde el Gobierno de Extremadura se ha diseñado la Estrategia Regional de Investigación e Innovación para la Especialización Inteligente (RIS3) apoyada en cinco áreas prioritarias o de especialización: agroalimentación, energías limpias, turismo, salud y tecnologías de la información y la comunicación. Precisamente las TIC, además de ser transversales y una herramienta fundamental para el resto de sectores, se posicionan con fuerza como un sector propio que genera ya más del 2% del PIB y da trabajo a casi 3.000 profesionales en algo más de 500 empresas. Y no hay que olvidar que si los emprendedores son los grandes generadores de empleo y de riqueza en nuestra región, la mayor parte de esos emprendedores están en la actualidad relacionados con las nuevas tecnologías.

Desde sus inicios, la Fundación COMPUTAEX ha contado con la tecnología más avanzada, a la que ha sabido sumar el carácter innovador y el talento de su equipo humano, que ha demostrado, como se puede constatar en este anuario, que los resultados pueden ser mejorados año a año si se trabaja con ahínco y determinación.

Presidenta de la Fundación COMPUTAEX



Cristina E. Teniente Sánchez

HOY FUE MAÑANA AYER

El proyecto de la Supercomputación en Extremadura se asienta sobre el trípode que le proporciona la Fundación COMPUTAEX que tiene en CénitS su principal instrumento que, a su vez, cuenta con el supercomputador LUSITANIA como herramienta más importante. Desde que en Diciembre de 2008 comenzase su actividad el supercomputador LUSITANIA, 2013 ha sido, sin lugar a dudas, el año más productivo del centro CénitS que ha permitido a la Fundación COMPUTAEX retornar a la sociedad el máximo de los objetivos encomendados.



La actividad investigadora del Centro se divide en tres categorías generales: Ciencias de la Vida, Ciencias de la Tierra y Ciencias Informáticas y de Comunicaciones. En estas tres categorías se han centrado los proyectos más destacables que se han llevado a cabo durante este ejercicio, dando lugar a notables resultados que quedan recogidos en esta memoria anual.

La financiación de la Fundación proviene de tres vías principales: de la asignación nominativa que la Fundación recibe de los presupuestos regionales; de los fondos obtenidos en convocatorias competitivas de origen europeo, nacional y regional; y de los contratos y convenios con empresas e instituciones por la prestación de servicios. Este año ha sido especialmente importante la financiación obtenida a través de proyectos, contratos y convenios. Si se suman las cantidades de todos los proyectos en los que ha participado en 2013 la Fundación, se obtiene una cifra de 10.362.206 €, de los cuales 1.623.883 € han sido concedidos en varias anualidades a COMPUTAEX como Fundación pública sin afán de lucro, aunque sí con la aspiración de conseguir el mayor grado de sostenibilidad posible.

Además de la financiación obtenida por diferentes vías, tal vez lo más destacable de este ejercicio haya sido la colaboración con empresas y organizaciones privadas. La Fundación, para llevar a cabo los fines que tiene encomendados, acomete una serie de actividades fundamentales entre las que destacan *"Atender a las necesidades tecnológicas de las entidades y empresas que así lo requieran"*, *"Contribuir al desarrollo y fortalecimiento de la capacidad competitiva de las comunidades investigadoras extremeñas, así como del sector empresarial"* y *"Fomentar y promocionar la cooperación entre empresas e instituciones"*. Para intentar dar respuesta a todo ello hemos participado en numerosos proyectos donde el principal objetivo ha sido promocionar la colaboración y la transferencia tecnológica al sector productivo.

Son también tres las formas de enfrentarse a la actividad diaria en el Centro: por un lado están las investigaciones e innovaciones llevadas a cabo por el propio personal del Centro; por otro la prestación de servicios a terceros (investigadores, tecnólogos e innovadores); y, por último, el acompañamiento que el Centro realiza a instituciones públicas y organizaciones privadas para ayudarlas en la consecución de sus propios fines y objetivos. Todo esto nos obliga a tener nuestros equipos técnicos a pleno rendimiento y en estado óptimo de funcionamiento, lo que no se podría conseguir si no se contase con un gran equipo humano que es, en realidad, el principal activo de la Fundación. Este año el equipo técnico y humano de CénitS ha participado en un total de 10 proyectos propios de investigación, innovación y desarrollo tecnológico, llevados a cabo por los propios técnicos del Centro y, además, ha dado cobertura a un total de 24 proyectos liderados por investigadores e innovadores de varias Universidades, Centros de investigación y Empresas.

La colaboración internacional ha sido otro importante objetivo alcanzado este año de modo que los proyectos nos han llevado a la cooperación con socios franceses, portugueses, ingleses, belgas, irlandeses, letones, holandeses y finlandeses. Estas colaboraciones internacionales, unidas a las nacionales y regionales, son especialmente enriquecedoras en el más amplio sentido de la palabra.

Ha continuado el reconocimiento público de la actividad de la Fundación y lo valoramos especialmente porque proviene del propio sector que ha considerado el esfuerzo innovador realizado en su trayectoria por COMPUTAEX y CéniTS. También la divulgación, difusión y publicación de resultados de investigación son otro importante reto para un Centro como CéniTS que este año ha tenido también su reconocimiento.

Como se puede constatar en este anuario, 2013, queda, por tanto, como el ejercicio con más importantes logros alcanzados hasta la fecha por la Fundación COMPUTAEX que espera seguir contando con el apoyo de sus Patronos y del de la propia sociedad que, en suma, es para la que trabajamos plenamente convencidos día a día.



José Luis González Sánchez

ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

ORGANIZACIÓN

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

También cuenta con gran número de colaboradores de inestimable valor.

FUNDACIÓN COMPUTAEX

La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX) fue constituida en 2009 por la Junta de Extremadura como organización de naturaleza fundacional sin ánimo de lucro. Tiene personalidad jurídica propia y plena capacidad de obrar, pudiendo realizar, en consecuencia, todos aquellos actos que sean necesarios para el cumplimiento de la finalidad para la que fue creada.



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

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

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.

OBJETO Y FINES

La Fundación tiene como fines todos aquellos que promuevan el desarrollo de las tecnologías de la información, el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas como instrumentos para el desarrollo socioeconómico sostenible, estimulando la participación de la sociedad civil movilizando sus recursos y dedicando especial atención a las relaciones de cooperación entre los centros de investigación públicos y privados y del sector productivo.

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

PATRONATO

El Patronato es el principal órgano de gobierno de la Fundación, actualmente compuesto por los siguientes patronos.

P A T R O N A T O	PRESIDENTA	Dña. Cristina Teniente Sánchez Ilma. Sra. Vicepresidenta, Portavoz y Consejera de Empleo, Empresa e Innovación
	VICEPRESIDENTE	D. Sergio Velázquez Vioque Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia y Tecnología
	PATRONOS	D. Fernando Gutiérrez Creus Ilmo. Sr. Secretario General de Empleo, Empresa e Innovación
		Dña. Candelaria Carrera Asturiano Ilma. Sra. Directora General de Empresa y Actividad Emprendedora
		D. Miguel Córdoba Pérez Ilmo. Sr. Director General de Comercio e Inversiones
DIRECTOR GENERAL	D. José Luis González Sánchez Secretario del Patronato	

EQUIPO CÉNITS 2013

Cénits es el Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación y el principal instrumento de la Fundación COMPUTAEX para llevar a cabo sus fines. En 2013 se han producido nuevas incorporaciones de carácter técnico e investigador para ampliar las capacidades de acción y dar respuesta a las necesidades del Centro y a sus usuarios.



**José Luis
González Sánchez**
Director General
jose Luis.gonzalez@cenits.es



**César
Gómez Martín**
Jefe de Equipo de
Supercomputación
cesar.gomez@cenits.es



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



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



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



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



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



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

TÉCNICOS DE INVESTIGACIÓN

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



**Blanca
Clemente Sánchez**
Técnico de apoyo a la I+D+i
blanca.clemente@cenits.es



**María Francisca
Roncero Holgado**
Técnico de apoyo a la I+D+i
mariafrancisca.roncero@cenits.es



**Juan Carlos
Romero Blanco**
Técnico de apoyo a la I+D+i
juancarlos.romero@cenits.es



**Manuel Alfonso
López Rourich**
Cloud Computing
alfonso.lopez@cenits.es



**Pedro
Rodríguez Cubero**
Green IT
pedro.rodriguez@cenits.es

AGRADECIMIENTOS

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

- El personal del CETA-CIEMAT que nos acoge en su Centro del conventual de San Francisco de Trujillo.
- El personal del CCMI y de Extremadura Avante que acoge en su Centro de Cáceres parte de nuestro equipo humano.
- El personal de GPEx (especialmente Ana Beatriz Bueno Martínez, Esther Moraño Gordillo, Celestino Niso Hurtado, Andrés Casallo Mariscal y Juan Pérez Peña) que nos ayuda con las labores administrativas.
- El personal de la extinta Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica (especialmente a Sergio Palma Orantos, Raúl Lorenzo Marcos, Jesús García Rubio, Manuel López Cáceres, Mercedes Cortés Larrey, Marisol Monge Terrones, José Fuentes Solano, Constantino Gutiérrez Barbarrusa, Andrés Novas Molina, Jorge Rebollo y Ángel Ramón Carrasco Sayago) que colabora en múltiples tareas burocráticas.
- El personal de la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación (especialmente a Ana Benítez Jiménez y Carmen Martínez García) que coopera en tareas de coordinación.
- El personal de la Secretaría General y de la Secretaría General de Empleo, Actividad Empresarial e Innovación Tecnológica (especialmente a Inmaculada Caballero Fernández, Juan Manuel Vitar González, Luis Manuel Alonso Santiago, Eva María Docasar González y Rosa María Cortés Díaz) que nos asesoran.
- Luis Morales Sánchez, Jefe de Sección del Protectorado de Fundaciones de Extremadura.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones de Extremadura que colaboran en proyectos y actividades comunes.
- Especialmente a los actuales Patronos por su compromiso con la Fundación.



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

PROYECTOS DESARROLLADOS

En este apartado se presentan los proyectos de investigación e innovación más importantes desarrollados o liderados por CénitS.

ECO-TRAFIC



DESCRIPCIÓN

El desarrollo sostenible se define normalmente como el que solventa las necesidades del presente sin comprometer las capacidades de las generaciones futuras para satisfacer sus propias necesidades. En este desarrollo, uno de los pilares es el transporte sostenible, es decir, la capacidad de satisfacer la demanda del transporte actual sin comprometer la capacidad de satisfacer las necesidades de futuras generaciones.

Cuando se planifica un sistema de transporte es necesario tener presente la eficiencia energética y los requerimientos de dicho sistema. Las iniciativas en el ámbito de las *smart cities* surgen para buscar soluciones ante las nuevas necesidades de los sistemas.

La infraestructura de centros como Cénits puede ser de gran ayuda para ofrecer a los ciudadanos la calidad de vida y eficiencia en el uso de sus recursos. Los responsables de las administraciones locales están valorando actualmente dichas instalaciones para contribuir al impulso de las ciudades inteligentes.



Estudios previos permiten demostrar que es posible ahorrar tiempo, dinero y emisiones de CO₂ si se controlan adecuadamente los flujos de tráfico, los cruces, los semáforos, las rotondas, los aparcamientos y el alumbrado nocturno, por citar sólo los ejemplos más evidentes. Mediante servicios de *cloud computing*, la supercomputación, la alta disponibilidad y la seguridad de la información bajo un enfoque centrado en las posibilidades del *big data* y *open data*, se puede conseguir una gestión del tráfico urbano mucho más sostenible.

OBJETIVOS

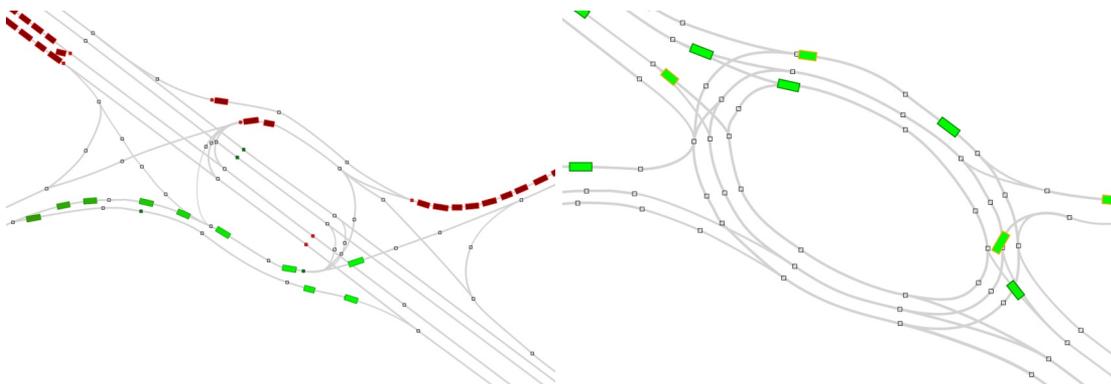
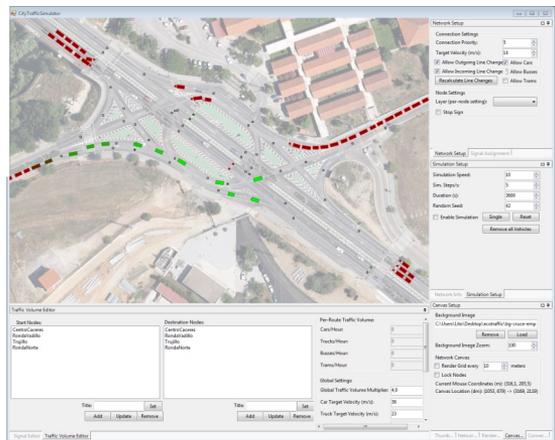
El principal objetivo de este proyecto propone la gestión eficiente del tráfico y la implantación de sistemas de control en las vías de comunicación de las ciudades extremeñas mediante servicios *cloud*, utilizando los paradigmas de *big data* y *open data*:

- Disminuir los tiempos de desplazamiento de los ciudadanos y el consumo de combustibles fósiles.
- Minimizar el impacto de la huella de carbono.
- Asegurar que los tiempos de desplazamiento sean fiables.
- Posibilitar la adaptación de las infraestructuras para absorber picos puntuales de tráfico.
- Salvaguardar la movilidad, la seguridad y la accesibilidad de los ciudadanos.

METODOLOGÍA

El proyecto se ha centrado en el desarrollo de un modelo para el estudio del tráfico en una de las intersecciones más frecuentadas de la ciudad de Cáceres. En ella 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.

Los parámetros objeto de estudio han sido los tiempos y velocidades medias por trayecto, junto con el número de paradas que tenían que realizar los vehículos a lo largo de dicho trayecto. Las simulaciones de los flujos de tráfico y de las características del cruce regulado por semáforos se basan en información pública de estudios previos. Tras la obtención de estos datos, y para poder realizar comparativas, se tomó la decisión de elaborar un estudio que confrontara la situación actual (la intersección regulada mediante semáforos), con la simulación de una rotonda en el mismo emplazamiento.



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 pueden destacar los siguientes resultados:

- 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".

TAXONOMTIC



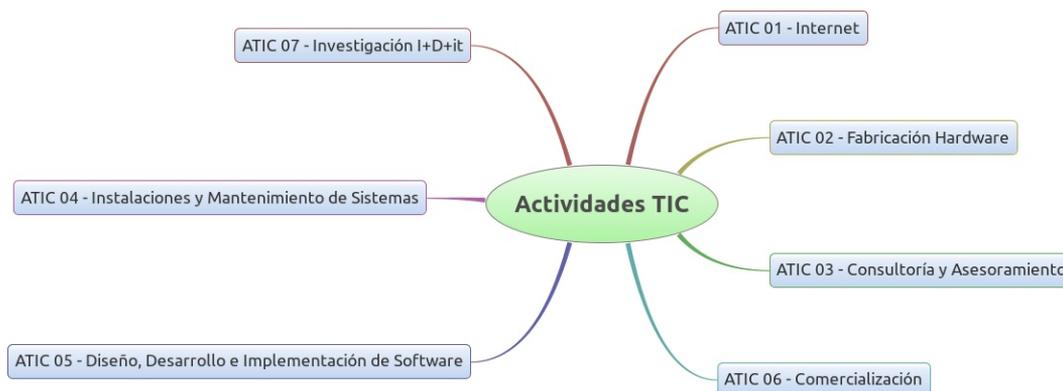
DESCRIPCIÓN

Las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC) se han transformado en la herramienta de desarrollo más importante del siglo XXI. El conjunto de empresas y profesionales que proveen dichas tecnologías 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.

Desde el punto de vista tecnológico y de la innovación, históricamente se ha percibido a Extremadura como una región desfavorecida dentro del conjunto de España. Las inversiones más importantes provenientes del exterior siempre han estado ligadas a sectores más tradicionales como la agricultura o la ganadería, aumentando de manera colateral la brecha tecnológica existente. Sin embargo, 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 dicha brecha tecnológica.

OBJETIVOS

- El objetivo principal de este proyecto consiste en 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 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.
- Como objetivo secundario, se establecerán las bases para la construcción de un sistema bajo el paradigma del *open data* que permita consultar toda la documentación e informes elaborados durante el desarrollo del proyecto.



METODOLOGÍA

La primera fase del proyecto ha consistido en entender y definir el concepto TIC a través del estudio y análisis de cada una de las definiciones previas elaboradas por expertos en la materia. La conclusión que se desprende es que existe una gran dificultad a la hora de definir con claridad el concepto TIC. Generalmente, el concepto de Tecnologías de la Información y la Comunicación se ha asociado al conjunto de recursos, procedimientos y técnicas utilizados para procesar, almacenar y transmitir información, olvidando a menudo el papel fundamental que desempeñan la informática y las telecomunicaciones.

Para el estudio del sector TIC ha sido necesario identificar las empresas que lo constituyen a través de diversas fuentes de información, destacando el INE, el BORME, SABI y CAVATRANS y los códigos CNAE-2009. A

partir de las 1.000 empresas candidatas detectadas, se propuso la creación de una nueva clasificación de actividades TIC que se adaptara de forma más natural a las actividades económicas propias del sector, dada la incapacidad de CNAE-2009 de clasificar ciertas empresas. Fruto de este análisis se identificaron 558 empresas del sector TIC en la región, de las cuales, 498 se corresponden con sociedades mercantiles y el resto con autónomos. Una vez identificadas las empresas del sector, se realizó el estudio, análisis y comparativa de la evolución de diversos sectores en los últimos años desde el punto de vista económico y de la constitución y disolución de sociedades.

También se ha estudiado la formación TIC en Extremadura a partir de los datos suministrados por la Universidad de Extremadura, el Colegio Profesional de Ingenieros en Informática de Extremadura y la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación, desde 1983 hasta 2013, para constatar el número de profesionales egresados.

Además se ha realizado una comparativa sectorial regional a partir de los datos suministrados por el INE y la Contabilidad Regional de España para comprender el comportamiento de los sectores durante los últimos años y, posteriormente, una comparativa nacional del sector TIC para analizar la evolución en ambos casos y destacar los puntos en común.

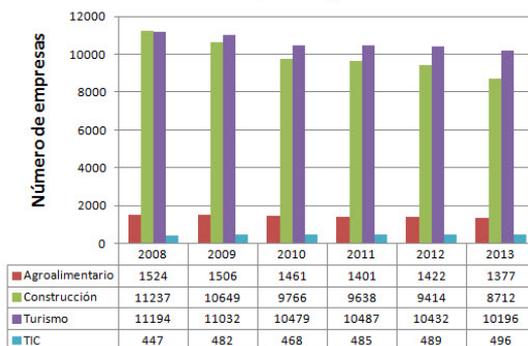
OBJETIVOS ALCANZADOS

- Este proyecto ha 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, traduciéndose en el 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*.

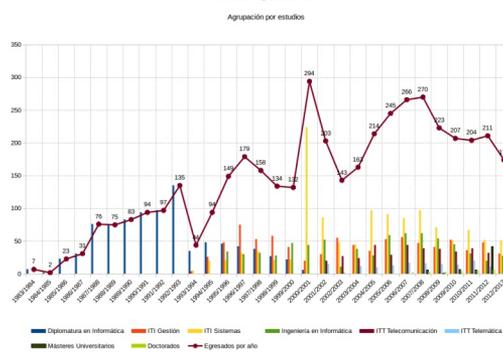
FINANCIACIÓN

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".

Número de empresas por sector



Evolución Egresados UEx



ESTIRPEX



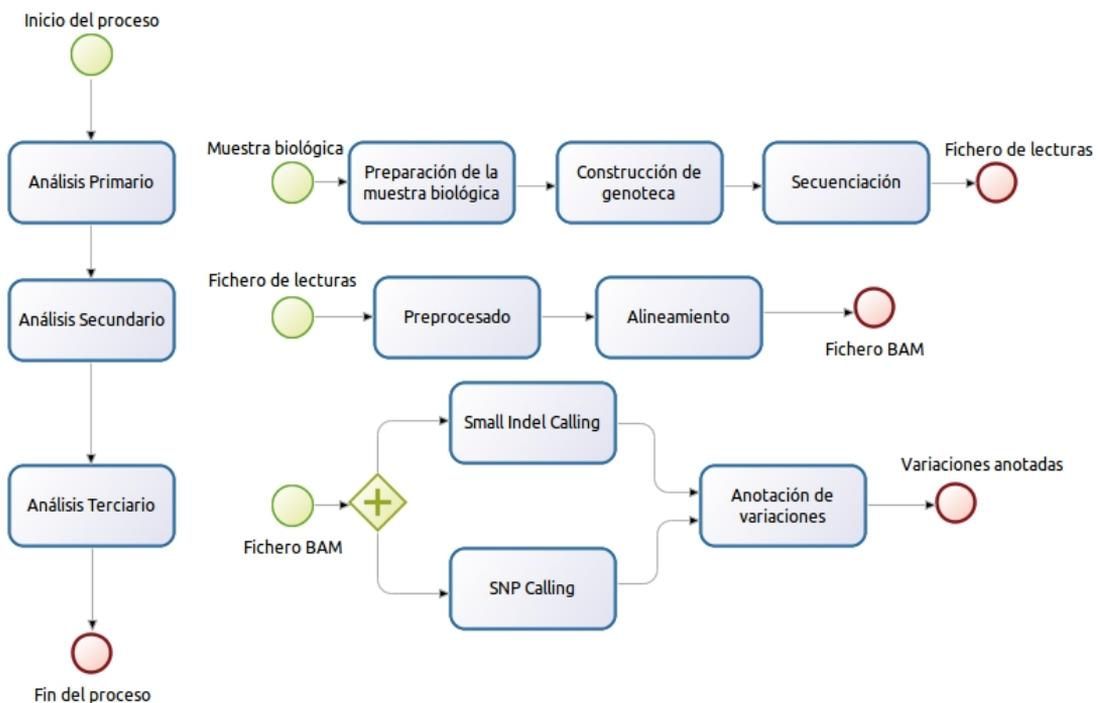
DESCRIPCIÓN

Los avances en investigación en el ámbito sanitario han sido siempre uno de los principales retos de la humanidad. Uno de los hallazgos más importantes ha sido determinar que el estudio de la secuencia de ADN permite conocer los procesos biológicos fundamentales del organismo y su funcionamiento. Hasta hace escasos años, secuenciar el ADN tenía un elevado coste económico y temporal. Ante estos problemas, surgen las tecnologías NGS, y con ellas un nuevo paradigma de secuenciación genética que permite la secuenciación del genoma o de secciones de éste a gran escala, con una importante disminución del tiempo y del coste del proceso.

La Fundación COMPUTAEX ha emprendido varios proyectos con los Hospitales Infanta Cristina de Badajoz y San Pedro de Alcántara de Cáceres, centrados en el estudio de la secuencia genética de determinados pacientes extremeños, procesadas en el centro CénitS con el supercomputador LUSITANIA. Con este proyecto se persigue ampliar las investigaciones y el trabajo ya realizado en el ámbito de la ultra-secuenciación genética y servir de repositorio piloto de información histórica que permita a los ciudadanos obtener sus árboles genealógicos, así como disponer del historial vital de sus antecesores.

OBJETIVOS

- Creación de un repositorio de datos históricos y clínicos a partir de la digitalización de archivos de interés genealógico, con el fin de garantizar su conservación y para ponerlo a disposición de ciudadanos y especialistas en genética para su consulta.
- Investigación y desarrollo de soluciones que permitan a especialistas en genética 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

La primera fase del proyecto ha consistido en identificar las fuentes de datos útiles para la construcción del repositorio y las implicaciones legales asociadas al tratamiento y almacenamiento de la información generada.

Para el estudio de las enfermedades hereditarias, ha sido necesario abordar con la infraestructura de CénitS las dos últimas fases del proceso de ultra-secuenciación genética:

- Análisis primario: generación de una biblioteca de clones de secciones de interés del ADN, para obtener millones de secuencias de longitud finita denominadas lecturas.
- Análisis secundario: alineamiento de las lecturas obtenidas en el análisis primario respecto a una secuencia de referencia de consenso.
- Análisis terciario: detección y anotación de variaciones de la secuencia.

Además, durante la ejecución del proyecto ha sido necesario el desarrollo e implementación de varias soluciones software que apoyasen el despliegue de la plataforma de acceso a datos históricos y clínicos:

- Base de datos de variaciones: almacena toda la información generada en el procesamiento de las lecturas de un exoma, variaciones y anotaciones.
- Software de inserción de variaciones anotadas: traslada el contenido de los ficheros resultantes del procesado de las secuencias de exomas a la base de datos de variaciones creada para tal efecto.
- Visor de variaciones: permite la consulta de variaciones y la aplicación de filtros para acotar la búsqueda de los resultados.

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".

GREEN CODE



DESCRIPCIÓN

La mejora de la eficiencia energética en los dispositivos electrónicos modernos se ha convertido en un tema recurrente que se aborda tanto en componentes hardware como software. Las optimizaciones en el hardware se logran a través del diseño de circuitos más eficientes y en el software se suelen implementar en el sistema operativo, utilizando distintas técnicas de planificación que analizan los procesos activos en términos energéticos mediante *green compilers* y el código en tiempo de compilación.

Green Computing (también conocido como Green IT o Tecnologías Verdes) es el término utilizado para referirse a este nuevo paradigma de trabajo que se centra en el ahorro energético mediante la aplicación de diferentes técnicas software y hardware. Las investigaciones en este ámbito tiene especial interés para la sostenibilidad económica y ecológica de los centros de procesos de datos.

En este sentido, la computación de alto rendimiento y el ahorro energético son objetivos contrapuestos dentro del *Green Computing*. Una manera de ahorrar energía puede consistir en reducir la tensión de los circuitos lógicos, sin embargo, esto origina circuitos más lentos y frecuencias más bajas, lo que hace disminuir el rendimiento.

Este proyecto abre una nueva línea de investigación que complementa los estudios previos realizados por COMPUTAEX (centrados en las infraestructuras IT, las redes de comunicación y en la explotación de recursos medioambientales) y con la que se persigue el desarrollo de código fuente eficiente.

OBJETIVOS

- Análisis del estado del arte desde el marco teórico existente: paradigmas de programación, tipos de computadoras y modelos de computación.
- Estudio de los distintos métodos de optimización de código fuente de ámbito general, dentro del desarrollo de código para computadores de altas prestaciones, con el fin de obtener rendimientos óptimos y eficiencias máximas, sin perder de vista la correcta implementación de sus funcionalidades.
- Presentación de resultados que pongan de manifiesto los beneficios que aporta la programación de código optimizado.

```
#pragma omp for private(x) reduction(+:sum) schedule(static)
for (int i=0; i < NUM_STEPS; ++i) {
    x = (i+0.5)*step;
    sum += 4.0/(1.0+x*x);
}
```

3,85 s

```
#pragma omp for private(x) reduction(+:sum) schedule(static)
for (int i=0; i < NUM_STEPS; ++i) {
    x = (i+0.5)*step;
    x_square = x*x;
    numerator = 4.0;
    denominator = 1 + x_square;
    fraction = numerator / denominator;
    sum = sum + fraction;
}
```

64,40 s

METODOLOGÍA

Partiendo de trabajos previos realizados en CémitS, para la realización de este proyecto es esencial la evaluación, el análisis y la investigación de las posibles mejoras en la eficiencia energética de los equipos TI mediante la mejora del código en los siguientes niveles:

- Aplicaciones software destinadas al usuario final.
- Sistema operativo y gestores de colas para los clústeres de cómputo.
- Herramientas y librerías estándares.
- Comunicaciones de red.

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Se ha presentado 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 experimentales muestran que, aunque la optimización suele ser el último paso realizado cuando se está programando, es una tarea de suma importancia.
- La principal diferencia entre un código optimizado y no optimizado es su velocidad de ejecución. Esta velocidad es especialmente importante en los supercomputadores, ya que los problemas que resuelven, pueden alargarse durante semanas o meses hasta que se obtienen resultados. Al tratarse de periodos tan amplios, el tiempo de ejecución puede sufrir importantes variaciones dependiendo de la eficiencia de su código. Un código eficiente supone entonces no sólo un menor tiempo de ejecución sino un consumo energético mucho menor que el de un código no optimizado.
- Se considera demostrada la importancia de las estrategias eficientes en la creación de código. En concreto, la aplicación de modificaciones sobre un mismo código puede dar lugar a idénticos resultados con tiempos de ejecución muy dispares que, a largo plazo, además acarrearán importantes penalizaciones en el consumo energético.
- A partir de los resultados obtenidos es posible afirmar que mejorar la legibilidad o la futura compresión de un código por parte de alguien ajeno a su creación, llega a perjudicar seriamente el tiempo de ejecución del mismo y, consecuentemente, su eficiencia energética.

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".

SIATDECO

SISTEMA DE INFORMACIÓN PARA LA AYUDA A LA TOMA DE DECISIONES EN ENERGÍAS ECOLÓGICAS

PARTICIPANTES

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

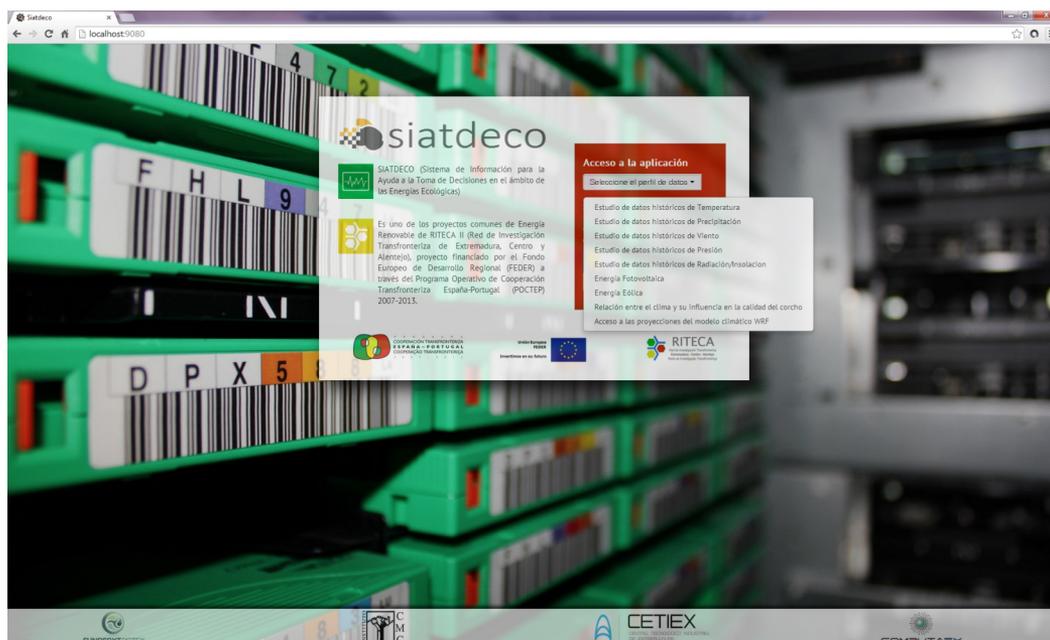
DESCRIPCIÓN

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

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

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

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



OBJETIVOS

- Realizar simulaciones de diversos modelos climáticos a 2, 5, 10, 20 y 30 años vista, y estudiar las correlaciones existentes entre los diversos factores climáticos (sol, viento y lluvias, principalmente) y la productividad energética ecológica en la Euroregión EUROACE, correlacionando variables que permitan la toma de decisiones en diversos ámbitos.
- Inventariar las plantas y fuentes de energía ecológica existentes en la actualidad en la Euroregión EUROACE.
- Definir y detectar las variables a analizar en el modelo climático.
- Obtención de un modelo climático piloto en la zona transfronteriza de La Raya. Se recurrirá a datos climáticos de carácter histórico y se captarán nuevos datos durante el ciclo de vida del proyecto, en diferentes estaciones meteorológicas de la zona (principalmente de La Raya) donde se propone aplicar el proyecto.
- Captación de datos climatológicos en la zona de la Raya durante el ciclo de vida del proyecto y contrastarlos con datos históricos de clima y de calas de corcho para poder correlacionar variables que puedan resultar de interés para la toma de decisiones en función de las previsiones proporcionadas por el modelo climático.
- Implementar un SIATD (Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones) para ser usado en el contexto de las energías ecológicas.
- Investigar la potencialidad de otras energías ecológicas alternativas a las que están ya implantadas.

METODOLOGÍA

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

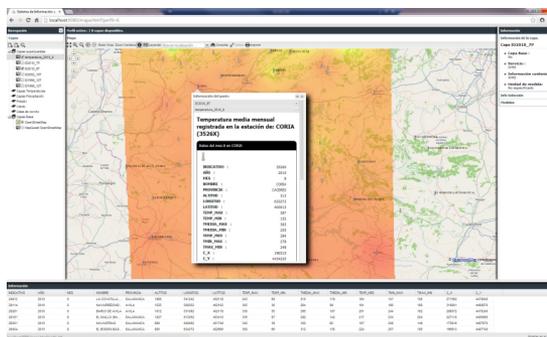
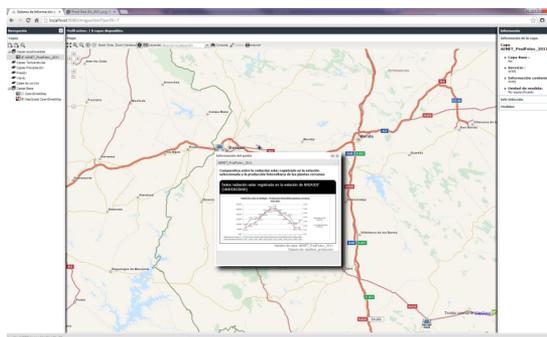
Tras valorar toda esta información, SIATDECO proporciona la información resultante sobre la idoneidad de la zona de estudio. Si la zona elegida no fuera viable, SIATDECO aporta alternativas, incluyendo la solución óptima.

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Inventario de plantas y fuentes de energía ecológica existentes en la actualidad en la Euroregión EUROACE. El objeto del inventario es localizar geográficamente y caracterizar las plantas generadoras de energía eléctrica, conectadas ya a la red o en construcción, existentes en las regiones Centro y Alentejo en Portugal, y en la región de Extremadura en España. El inventario servirá de apoyo al sistema de ayuda a la toma de decisiones para determinar el potencial de generación eléctrica de plantas productoras de energía renovable en función de su ubicación. Según el trabajo realizado, las 242 plantas de este tipo que funcionan en Extremadura disponen de una potencia total instalada de 3.110,8 megavatios.



- Definición de las variables a analizar en el modelo climático. Entre las variables analizadas se encuentran la temperatura media mensual, la precipitación media mensual, la velocidad media del viento, etc. Se ha elaborado un informe donde se recogen todas estas variables
- Recopilación de datos climáticos históricos de las estaciones meteorológicas de la AEMET y captación de nuevos datos durante el ciclo de vida del proyecto. Además de los datos del clima, se han recopilado datos de calas de corcho y datos de producción fotovoltaica en Extremadura con el objetivo de intentar determinar la influencia que tiene el clima en la calidad del corcho y en la producción energética.
- Modelo climático piloto para la zona transfronteriza de La Raya. Para obtener las proyecciones del clima futuro, se ha utilizado una integración de dos modelos climáticos: el modelo global CESM y el modelo regional WRF, ambos alojados en el supercomputador LUSITANIA. Estos modelos se han simulado para el intervalo 2080 – 2099 y está en marcha una nueva integración para poder realizar la simulación del clima de los años comprendidos entre 2015 y 2025.
- Implementación del SIATD. El sistema de información se ha desarrollado sobre la plataforma OpenGeo Suite. Se trata de un framework geoespacial totalmente integrado para servir mapas y datos a través de aplicaciones web, dispositivos móviles y clientes de escritorio. Es una solución 100% Open Source que combina PostGIS, GeoServer, OpenLayers, GeoExt y GeoWebCache. El uso de una base de datos como PostGIS permite una potencia y velocidad de consulta elevadas. El servidor de mapas GeoServer provee acceso a fuentes de datos SIG mediante estándares OGC, además de un panel de administración completo vía web. El sistema desarrollado consiste básicamente en una aplicación n Sistema de Información Geográfica integrado que facilita el acceso a todos los datos recopilados para el proyecto. Estos datos serán servidos en forma de mapas en formato ráster y vectorial, además de representados mediante gráficos para estudiar su evolución a lo largo de los años.
- Informe de evaluación de energías alternativas en la EUROACE. El objeto de este informe es investigar la potencialidad de otras energías ecológicas alternativas a las que están ya implantadas. Las alternativas energéticas analizadas tienen ventajas e inconvenientes con respecto a las que se encuentran implantadas en la actualidad en el sistema energético de la región EUROACE. Algunas incluso tienen ya una importancia relevante en el mismo. La toma de decisiones sobre el sector queda en manos de las instancias con potestad para ello, que en base a la legislación marcarán las tendencias futuras.



FINANCIACIÓN

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

DESARROLLO DE UNA RED DE INFRAESTRUCTURAS FEDERADAS PARA LA GENERACIÓN DE SERVICIOS DE VIRTUALIZACIÓN DE PUESTOS DE TRABAJO

PARTICIPANTES

FCSSL, COMPUTAEX, UDL, Université Montpellier 2, AEI, Inova-ria y Consorcio PCITAL

DESCRIPCIÓN

La penetración del Cloud en sectores de la Administración y la industria está resultando lenta, desaprovechándose por tanto las ventajas competitivas que esta tecnología puede proporcionar tanto a las empresas TIC proveedoras como a los usuarios finales de las mismas.

El proyecto propone una infraestructura Cloud privada, utilizando los recursos disponibles en diferentes centros de supercomputación ubicados en distintas regiones SUDOE, con objeto de asegurar a los usuarios la protección de datos y cumplimiento de las normas, relativas a la seguridad de información y de los SLAs establecidos. La puesta en marcha de este servicio conllevaría una mejora de la competitividad y un ahorro de costes en los sectores destinatarios del mismo.



Además, los clusters 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.

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 Clusters de empresas TIC, incluyendo de este modo un servicio diferenciador en sus portafolios de productos y contribuyendo asimismo 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 una 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.

FINANCIACIÓN

INTERREG IV B Sudoeste Europeo

MODERNIZACIÓN E INNOVACIÓN TECNOLÓGICA CON BASE TIC EN SECTORES ESTRATÉGICOS Y TRADICIONALES

PARTICIPANTES

GobEx, ICMC, INTROMAC, CCMIJU, FEVAL, COMPUTAEX, FUNDECYT-PCTEX, CTAEX, Universidade de Évora, IPP, CEBAL, CEVALOR, ADR-IPP, CATAA

DESCRIPCIÓN

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; 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 propios, 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.

Los recursos y capacidades de los territorios de un lado y otro de la frontera son de idéntica naturaleza de modo que la base de la economía y la especialización de sus centros de investigación son muy similares. Por tanto, el reto de convertir la EUROACE en un ecosistema innovador implica un esfuerzo por unir las capacidades emprendedoras con las capacidades innovadoras que existen en el conjunto del territorio.

OBJETIVOS

El objetivo principal 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.
- Modernizar tecnológicamente 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.

FINANCIACIÓN

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

SMART GREEN DATA CENTER

PARTICIPANTES

COBRA INSTALACIONES Y SERVICIOS, S. A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS, CETIEX, INTROMAC

DESCRIPCIÓN

A la hora de realizar el diseño de un Centro de Proceso de Datos (CPD), el concepto inicial que se contempla es la del diseño de una sala de comunicaciones donde se van a ubicar potentes servidores. Esta premisa inicial, pone de manifiesto uno de los primeros condicionantes del diseño de CPD, el carácter crítico de los datos que se manejan, puesto que la mayoría de las empresas dependen de la disponibilidad, seguridad y redundancia de la información que se almacena en sus servidores.



La no disponibilidad de esta información supone elevados costes para cualquier compañía, especialmente en las que el departamento financiero tiene que funcionar ininterrumpidamente, sin lentitud en el tráfico de datos y donde sus transacciones deben estar totalmente libres de errores.

Así mismo, la demanda de más potencia computacional y electricidad, de mejores soluciones para la refrigeración y de instalaciones que van creciendo junto con una organización, está creando una crisis en los centros de datos a escala mundial.

El simple hecho de añadir más servidores y aumentar la potencia del aire acondicionado ya no es viable. En lugar de ello, numerosas organizaciones están tratando de hacer frente a esta crisis mediante la construcción de nuevas instalaciones o introduciendo cambios significativos en sus ubicaciones ya existentes. Su objetivo es optimizar sus centros de datos, no sólo para dar cabida a más hardware, sino también para cumplir los objetivos de su negocio.

OBJETIVOS

- Desarrollar, diseñar, fabricar, e implementar un novedoso prototipo de Data Center (CPD) 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 (consumo energético, ruidos, vibraciones, radiaciones, cableados, etc.).

FINANCIACIÓN

CDTI - FEDER INTERCONECTA



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

PROYECTOS SOPORTADOS

En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2013.

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

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

CIENCIAS DE LA VIDA

SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL EN SISTEMAS POLIATÓMICOS.

ESTUDIOS CINÉTICOS Y DINÁMICOS TEÓRICOS

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de la Tesis Doctoral de Manuel Monge-Palacios.
- Investigaciones sobre el sistema $\text{Cl}+\text{NH}_3$, que presenta una complicada topología en la superficie de energía potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema $\text{OH}+\text{NH}_3$, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremanera la construcción de la superficie.
- Estudio teórico de la reacción de transferencia de hidrógeno entre el radical hidroxilo y el amoníaco. Se ha construido la superficie de energía potencial analítica y se ha realizado un exhaustivo estudio cinético y dinámico.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- M. Monge-Palacios, C. Rangel, J.C. Corchado and J. Espinosa-García: Analytical potential energy surface for the reaction with intermediate complexes $\text{NH}_3 + \text{Cl}$; $\text{NH}_2 + \text{HCl}$: application to the kinetics study. *International Journal of Quantum Chemistry*. 2012, 1887-1903.
- J. Espinosa-García, M. Monge-Palacios and J.C. Corchado: Constructing potential energy surfaces for polyatomic systems: Recent progress and new problems. *Advances in Chemical Physics*. 2012, 1-19.
- E. Garcia, J.C. Corchado and J. Espinosa-García: A detailed product distribution analysis of some potential energy surfaces describing the $\text{OH} + \text{CO}$; $\text{H} + \text{CO}_2$ reaction. *Computational and Theoretical Chemistry*. 2012, 47-52.
- M. Monge-Palacios, M. Yang and J. Espinosa-García: QCT and QM calculations of the $\text{Cl}(2\text{P}) + \text{NH}_3$ reaction: influence of the reactant well on the dynamics. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2012, 4824-4834.
- M. Monge-Palacios, J.C. Corchado and J. Espinosa-García: Quasi-classical trajectory study of the role of vibrational and translational energy in the $\text{Cl}(2\text{P}) + \text{NH}_3$ reaction. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2012, 7497-7508.
- Congreso Mundial del World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela, Spain, 2011.
- "Ab initio based potential energy surface and kinetics study of the $\text{OH}+\text{NH}_3$ hydrogen abstraction reaction. M. Monge, C. Rangel and J. Espinosa-García. *J.Chem.Phys.*, 138, 084305-1 (14 páginas) (2013)
- Dynamics study of the $\text{OH}+\text{NH}_3$ hydrogen abstraction reaction using QCT calculations based on an analytical potential energy surface. M. Monge, J.C. Corchado and J. Espinosa-García, *J.Chem.Phys.*, 138, 214306-1 (11páginas) (2013)
- Role of the vibrational and translational energy in the $\text{OH}+\text{NH}_3$ reaction: A Quasi-classical trajectory study. M. Monge, and J. Espinosa-García, *J.Phys.Chem. A*, 117, 5042-5051 (2013)
- Bond and mode selectivity in the $\text{OH} + \text{NH}_2\text{D}$ reaction. A quasi-classical trajectory calculation. M. Monge, and J. Espinosa-García, *Phys.Chem.Chem.Phys.* 15, 19180-19190 (2013)

FINANCIACIÓN

Junta de Extremadura, Proyecto IB10001.

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

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

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

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

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Una de las líneas de investigación se ha centrado en la síntesis y estudio estructural de bases de Schiff generadas por condensación de aldehídos aromáticos con aminas de diferente naturaleza (aromáticas, alifáticas, aminopolioles y aminoheterociclos). El estudio estructural, basado en experiencias de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear, se ha completado con estudios teóricos llevados a cabo a nivel DFT, en fase gaseosa y en disolución, que han permitido realizar un completo análisis de los equilibrios imina-enamina en disolución y en estado sólido.
- Se ha realizado el estudio de los equilibrios tautoméricos imina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioletris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G* y M06-2X/6-311++G** se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación ($< 8 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$). 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 delnaftaldehído ha puesto de manifiesto que la estructura imínica es ligeramente más estable que la enamínica, lo cual vuelve a estar de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.

- Se ha estudiado, además de los equilibrios tautoméricos, los perfiles conformacionales de varias hidrazonas derivadas de naftaldehídos y N-aminoheterociclos. Se ha analizado la variación de energía en función del ángulo diedro C-N-N-C a nivel DFT (B3LYP/6-31G* y M06-2X/6-311++G**) incluyendo el efecto del disolvente mediante el método SMD. Con independencia del disolvente, las formas imínicas son en todos los casos las más estables. Sin embargo, la presencia de dos grupos metilo en posiciones orto en el anillo de anilina implica una menor diferencia de energía entre ambos tautómeros. Además, en todos los casos, ha quedado demostrado que la presencia del par de electrones del nitrógeno adyacente al grupo imino es clave en la estabilización de dicha forma tautomérica.
- Simulación de la reactividad química en el interior de cápsulas moleculares. En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método para catalizar reacciones químicas. Se trata de los denominados "matraces" o "cápsulas" moleculares. Éstos consisten en estructuras moleculares que forman una cavidad en su interior, donde se alojan los reactivos y tienen lugar las transformaciones, de forma similar a lo que ocurre en la naturaleza en el caso de las reacciones biocatalizadas por enzimas. El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. Sin embargo, su estudio a través de métodos computacionales no se había abordado hasta el momento debido al elevado número de átomos que son necesarios para la modelización, lo que hace que el coste computacional sea demasiado elevado. Los cálculos realizados han permitido modelar por primera vez una reacción química en el interior de una de estas macromoléculas. Concretamente, se ha estudiado la cicloadición de alquinos con azidas, que da lugar a triazoles, compuestos muy valiosos desde el punto de vista biomédico.
- Hidrogenación de amidas mediante catalizadores basados en rutenio. La reacción de hidrogenación es una de las más importantes en química. Se trata de un proceso que requiere elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores específicos. Los catalizadores basados en complejos de rutenio se encuentran entre los más estudiados. Sin embargo, su mecanismo de actuación era desconocido hasta el momento. Los cálculos realizados han permitido conocer todos los pasos a través de los cuales transcurre el proceso, los cambios de energía implicados, así como explicar la formación de los diferentes compuestos químicos a que da lugar la hidrogenación.
- Descubrimiento de un nuevo organocatalizador para la síntesis de tetrazoles por cicloadición de azidas y nitrilos. Los tetrazoles son compuestos de gran importancia ya que intervienen en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La síntesis de estos compuestos es compleja, ya que requiere temperaturas muy elevadas y prolongados tiempos de reacción. Los cálculos realizados han permitido diseñar y preparar, en colaboración con el equipo que dirige el Prof. Oliver Kappe en la Universidad Karl-Franzens de Graz, el primer organocatalizador para esta reacción. Su utilización permite preparar tetrazoles de forma muy rápida, lo que hará posible que su producción a gran escala sea más eficiente y barata de lo que es actualmente.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- Luciana Dalla-Vechia, Vanessa G. Santos, Marla N. Godoj, David Cantillo, C. Oliver Kappe, Marcos N. Eberlin, Rodrigo O. M. A. de Souza and Leandro S. M. Miranda: On the mechanism of the Dakin–West reaction. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Agosto, 2012. DOI: 10.1039/C2OB26560E.
- Markus Damm, Christoph Nussold, David Cantillo, Gerald N. Rechberger, Karl Gruber, Wolfgang Sattler,

- C. Oliver Kappe: Can electromagnetic fields influence the structure and enzymatic digest of proteins? A critical evaluation of microwave-assisted proteomics protocols. *Journal of Proteomics*. 2012. 1874-3919. doi: 10.1016/j.jprot.2012.07.043.
- Noelia Araújo, Sarah F. Jenkinson, R. Fernando Martínez, Andreas F. G. Glawar, Mark R. Wormald, Terry D. Butters, Shinpei Nakagawa, Isao Adachi, Atsushi Kato, Akihide Yoshihara, Kazuya Akimitsu, Ken Izumori, and George W. J. Fleet. Synthesis from d-altrose of (5R,6R,7R,8S)-5,7-dihydroxy-8-hydroxymethylconidine and 2,4-dideoxy-2,4-imino-d-glucitol, azetidines analogues of swainsonine and 1,4-dideoxy-1,4-imino-d-mannitol, *Org. Lett.*, 2012, 14, 4174–4177. doi: 10.1021/ol301844n
 - Cantillo, D., Ávalos, M., Babiano, R., Cintas, P., Jiménez, J. L. and Palacios, J. C. (2012): On the Prebiotic Synthesis of D-Sugars Catalyzed by L-Peptides: Assessments from First-Principles Calculations. *Chemistry: A European Journal*. 18: 8795–8799. doi: 10.1002/chem.201200466.
 - David Cantillo, Hassan Sheibani, and C. Oliver Kappe. Christian Doppler Laboratory for Microwave Chemistry (CDLMC) and Institute of Chemistry, Karl-Franzens-University Graz, Heinrichstrasse 28, A-8010 Graz, Austria: Flash Flow Pyrolysis: Mimicking Flash Vacuum Pyrolysis in a High-Temperature/High-Pressure Liquid-Phase Microreactor Environment. *The Journal of Organic Chemistry* 77 (5), pp 2463–2473. Febrero de 2012.
 - David Cantillo, Bernhard Gutmann, and C. Oliver Kappe: Mechanistic Insights on Azide–Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide–Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier–Haack-Type Organocatalyst. *The Journal of Organic Chemistry*. 7 Marzo, 2011.
 - R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, Mark E. Light, José L. Jiménez, Juan C. Palacios, Esther M.S. Pérez, Vicenta Rastrojo: Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: Structure and stereodynamics. *Tetrahedron*. Marzo de 2011, 67, 2025-2034.
 - Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Structure and Spectroscopy of the Emitting States of 1-Phenylpyrrole. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Abril de 2011, 7, 1850–1857.
 - David Cantillo: Mechanistic Insights on the Ruthenium-Catalyzed Hydrogenation of Amides – C–N vs. C–O Cleavage. *European Journal of Inorganic Chemistry*. Mayo de 2011, 3008-3013.
 - R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, Juan C. Palacios: Schiff Bases from TRIS and ortho-Hydroxyarene-carbaldehydes: Structures and Tautomeric Equilibria in the Solid State and in Solution. *European Journal of Organic Chemistry*. Mayo de 2011, 3137-3145.
 - R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of salicylaldehydes and hydroxyl naphthaldehydes investigated in solution and the solid state. XVI Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica, Universidad de Burgos, 19-24 junio, 2011.
 - David Cantillo, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez and Juan C. Palacios: On the enhanced reactivity and selectivity of triazole formation in molecular flasks. A theoretical rationale. *Organic and Biomolecular Chemistry*. Agosto de 2011, 7638–7642.
 - Ignacio Fdez. Galván, M. Elena Martín, Aurora Muñoz-Losa, Manuel A. Aguilar: Dual Fluorescence of Fluorazene in Solution: A Computational Study. *Journal of Chemical Theory and Computation*, Septiembre de 2011, 7, 3694-3701.
 - R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light and Juan C. Palacios: Tautomerism in Schiff bases. The cases of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde and 1-hydroxy-2-naphthaldehyde investigated in solution and the solid state. *Organic & Biomolecular Chemistry*. Septiembre de 2011, 9, 8268–8275
 - M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. *Theoretical Chemistry Accounts*. Octubre de 2011, 128, 783-793.

- Francisco F. García-Prieto, Ignacio Fdez. Galván, Manuel A. Aguilar, M. Elena Martín: Study on the conformational equilibrium of the alanine dipeptide in water solution by using the averaged solvent electrostatic potential from molecular dynamics methodology. *The Journal of Chemical Physics* 135, 194502. Noviembre de 2011.
- Aurora Muñoz-Losa, M. Elena Martín, Ignacio Fdez. Galván, M. Luz Sánchez, Manuel A. Aguilar: Solvent Effects on the Radiative and Nonradiative Decay of a Model of the Rhodopsin Chromophore. *Journal of Chemical Theory and Computation*. Noviembre de 2011.

FINANCIACIÓN

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

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

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Se han realizado estudios teóricos sobre el fenómeno de la doble fluorescencia en disolventes polares para dos compuestos afines, como son el 1-fenilpirrol y el fluoraceno. Los resultados en ambos casos indican que posiblemente la estructura responsable de la banda de fluorescencia de baja energía no presenta un giro importante entre los dos anillos, lo que apoyaría el modelo PICT (planar intramolecular charge transfer) frente al TICT (twisted intramolecular charge transfer).
- Se ha completado un estudio sobre los estados excitados de una molécula de interés biológico como el 11-cis-retinal. En este caso se sugiere que la complejidad en el espectro de fluorescencia observado experimentalmente procede de la presencia de dos estados electrónicos excitados de distinta naturaleza. Además, se ha demostrado que la desexcitación no radiante a través de una intersección cónica (que da lugar a la isomerización) puede transcurrir sin apenas barrera energética, aunque la reorganización del disolvente necesaria hace que el proceso sea mucho más lento en disolución que en vacío.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- M. Elena Martín, M. Luz Sánchez, José C. Corchado, Aurora Muñoz-Losa, Ignacio Fdez. Galván, Francisco J. Olivares del Valle, Manuel A. Aguilar: Theoretical study of the role of solvent Stark effect in electron transitions. *Theor. Chem. Acc.* 128 (2011) 783-793.

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

FINANCIACIÓN

Ministerio de Ciencia e Innovación.
Fondos FEDER.

SULFUR DIOXIDE CAPTURE BY IONIC LIQUIDS FROM A MOLECULAR POINT OF VIEW: A DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

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. 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. 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. 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. About SO₂ capture, theoretical works are still scarce, and most

also use B3LYP functional. 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 Equilib.*, 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.

QUANTUM CHEMISTRY AND MOLECULAR MODELING

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

Ministerio de Educación y Ciencia.
Junta de Extremadura.

NUEVAS SUSTANCIAS GELIFICANTES DERIVADAS DE MONOSACÁRIDOS E HIDRAZIDAS DERIVADAS DE DIÁCIDOS

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

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

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

Además, los 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.

CONSTRUCCIÓN DE SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL

INVESTIGADORES

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

Programas escritos en lenguaje FORTRAN.

CIENCIAS DE LA TIERRA

THE IMPACT OF THE 11 YEAR SOLAR CYCLE IN WACCM SIMULATIONS

INVESTIGADORES

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

INVESTIGADORES PARTICIPANTES

Natalia Calvo de la Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García de la Universidad de Extremadura, Katja Matthes de Helmholtz-Zentrum für Ozeanforschung Kiel - GEOMAR (Kiel, Alemania) y Daniel R. Marsh del National Center for Atmospheric Research, Boulder (CO, EEUU).

OBJETIVOS

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Se ha investigado la influencia del ciclo de 11 años de la radiación solar sobre el clima a través de simulaciones con el modelo climático *Whole Atmosphere Community Climate Model* (WACCM). La mayoría de los resultados previos en este tema ha sido resumida en Gray et al. (2010).
- Debido a la limitada duración temporal de las observaciones, como los re-análisis (1960-2005) y satélites (1979-2005), la detección de la señal del ciclo de 11 años en la atmósfera es complicada.
- Aparte de la incertidumbre en la detección en la señal en sí, las medidas satélites de la irradiancia solar han demostrado también que hay incertidumbre en la magnitud de la variabilidad de la irradiancia solar en ciertas bandas, como en la ultravioleta (200-300 nm) y ultravioleta cercana (300-400 nm), sobre todo en el último ciclo solar (Lockwood, 2011).
- En este contexto, el uso de modelos climáticos de circulación general resulta provechoso para investigar la señal del ciclo solar, y los mecanismos físicos que dan lugar a ella.
- Estudios previos han demostrado que el modelo WACCM reproduce la señal en observaciones, y ha confirmado la presencia de mecanismos dinámicos a través de los cuales la influencia del ciclo de 11 años se propaga desde la alta estratosfera (50 km) hasta las capas más bajas de la atmósfera (Chiodo et al., 2012). Hay incertidumbre instrumental en las variaciones espectrales del flujo de radiación solar entre máximos y mínimos del ciclo solar de 11 años, sobre todo en bandas como la UV-A [300-400 nm] y la UV-C [240-270 nm]. Por otro lado, también se está debatiendo la posibilidad de que la variabilidad climática a escala decadal en la baja estratosfera tropical no esté forzada por el ciclo solar, sino por otras fuentes como El-Niño y los volcanes.

- El modelo WACCM es una herramienta adecuada para el desarrollo de la actividad, pero tiene un elevado coste computacional debido a la inclusión en su código de la química estratosférica. Gracias a la ayuda técnica por parte del equipo de CénitS, y a colaboración con científicos de EEUU que han desarrollado el código WACCM, y de varias instituciones en Europa y en España (entre ellas, la UEX), hemos podido aprovechar el supercomputador LUSITANIA para hacer integraciones.
- Se han realizado experimentos de sensibilidad forzando el modelo WACCM con la distribución espectral típica de la irradiancia solar en máximos y mínimos del ciclo de 11 años de la actividad solar. Además, se han realizado experimentos con un aumento artificial de 1% en la UV cercana (300-400 nm), que representa la incertidumbre instrumental en esta banda espectral. El aumento aplicado es pequeño en comparación con la variabilidad en las bandas de la UV, que se ha estimado en 4-8% (siendo % la variación relativa entre mínimo y máximo de actividad). En WACCM, la respuesta dinámica a este forzamiento en la circulación estratosférica durante el invierno boreal es distinta al caso típico de máximo y mínimo solar. Esto indica que la sensibilidad del modelo a la incertidumbre instrumental en el forzamiento solar es grande, y que el experimento de sensibilidad da resultados más cercanos a las observaciones en ciertos meses (p.j. Diciembre y enero). Se plantea realizar una serie de experimentos de sensibilidad con la radiación en la UV (200-300 nm), para investigar 1) la sensibilidad del modelo a estas bandas, y 2) la contribución de estas mismas bandas a la respuesta en la atmósfera al ciclo solar de 11 años.
- Se ha encontrado que la circulación estratosférica en altas latitudes es sensible a la amplitud del ciclo solar en la UV, y que simulaciones con un aumento idealizado en las bandas de la UV-A y UV-C dan respuestas distintas en el vórtice polar. La sensibilidad se debe a que la altura de máxima absorción de la UV varía según la longitud de onda, y que anomalías térmicas en diferentes alturas estratosféricas afectan a su vez de diferente manera a la propagación de las ondas planetarias. Por otro lado, simulaciones de WACCM con inclusión de todos los forzamientos observados (gases a efecto invernadero, volcanes, ciclo solar) demuestran que parte de la variabilidad decadal que se observa en la baja estratosfera tropical y que hasta ahora se creía estar relacionada con el ciclo solar de 11 años se debe en realidad a dos erupciones volcánicas (El Chichon en 1982 y Pinatubo en 1991). Estas erupciones han tenido lugar durante picos de actividad solar, lo cual dificulta la separación de los efectos del ciclo solar y de los volcanes.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- Chiodo G., D.Marsh, N.Calvo, and K.Matthes: The impact of volcanic events and ENSO on the detection of the solar cycle signal in the tropical lower stratosphere. European Geophysical Assembly 2012. Viena (Austria).
- Chiodo G., K. Matthes, K. Kodera, N. Calvo and R. Garcia-Herrera: Sensitivity of the atmospheric response to idealized UV solar-cycle variations in WACCM. 3rd international conference on Earth-System-Modeling. Hamburgo, Alemania.
- G. Chiodo, N.Calvo, D.Marsh and R.Garcia-Herrera (2012): The 11 year solar cycle signal in transient simulations from the Whole Atmosphere Community Climate Model. Journal of Geophysical Research, Volumen 117, D06109, Numero: doi:10.1029/2011JD016393.
- G.Chiodo, D.Marsh, N.Calvo and K.Matthes. The impact of volcanic events and ENSO on the detection of the solar cycle signal in the tropical lower stratosphere. European Geosciences Union General Assembly 2012. Abril de 2012.
- G.Chiodo, K.Matthes, K.Kodera, and N.Calvo. SPARC SOLARIS & HEPPA Intercomparison Activities: Sensitivity of the atmospheric response to idealized spectrally resolved solar forcing in WACCM3.5. WCRP Open Science Conference 2011.
- Ponencia de poster en la WCRP - Denver (EEUU) 24/10 - 28/10 de 2011 entitulado "Impact of idealized spectral solar forcing in the WACCM-3.5 model", y con agradecimientos al CENITS. G.Chiodo, K.Matthes,

K.Kodera and N.Calvo.

- Exposición oral en el congreso Space Climate 4 en Goa (India) Enero 2011. intitulada "11-yr solar cycle effects in two coupled chemistry-climate models". G.Chiodo, N.Calvo, H.Schmidt and R.Garcia-Herrera.
- Exposición oral en el congreso SCOSTEP 2010 en Berlin (Alemania) Julio 2010. intitulada "The 11-y solar cycle in transient WACCM-3.5 simulations". G.Chiodo, N.Calvo and R.Garcia-Herrera

FINANCIACIÓN

Beca pre-doctoral de Formación de Profesorado Universitario (FPU), ref AP2009-00064.

COST action ES1005 "Towards a more complete assessment of the impact of solar variability on the Earth's climate".

SIMULACIÓN DEL CLIMA MEDIANTE EL MODELO WACCM

INVESTIGADOR PRINCIPAL

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

INVESTIGADORES PARTICIPANTES

Guadalupe Saenz García, Francisco Javier Acero Díaz y María Cruz Gallego Herrezuelo.

OBJETIVOS

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- A lo largo de este año se han realizado dos simulaciones del clima, una con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y otra con el modelo CESM (Community earth system model). La primera se ha realizado para complementar una realizada el año anterior pero con un forzamiento externo de 8.5 W/m^2 en 2100. La segunda se ha realizado para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional.
- Se está trabajando también en la simulación mediante un modelo regional. Esta segunda integración se espera que será útil entre otros proyectos, al proyecto RITECA, en el que se encuentra involucrado el propio CénitS.
- Durante el pasado año, se puso a punto y se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Así mismo se puso a punto y se realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Climate Earth System Model).
- La idea de este proyecto es analizar la posibilidad de la realización de simulaciones climáticas mediante el supercomputador LUSITANIA. Los modelos anteriores son modelos desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, USA) y están especialmente adaptados para uso en sus ordenadores.
- Resulta del máximo interés conocer si estos programas, convenientemente compilados, se pueden ejecutar en otro tipo de máquinas y si los resultados obtenidos en éstas son comparables a los obtenidos en el NCAR.
- Un análisis de los datos obtenidos nos indican que efectivamente, los resultados son comparables a los obtenidos en los ordenadores del NCAR.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

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

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

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

Las energías renovables van a jugar en las próximas décadas un papel clave en el sistema energético a nivel mundial. Esta revolución energética tiene en España a uno de sus mayores impulsores, destacando en particular como uno de los líderes en el aprovechamiento de la energía eólica y solar. Dichas fuentes tienen la ventaja de una menor incidencia en el medio ambiente y se han convertido en un factor estratégico para afrontar el actual marco de fuerte crecimiento de la demanda energética en todo el mundo, así como la dependencia de las formas tradicionales basadas en los combustibles fósiles.

Sin embargo la explotación de estas fuentes primarias no está exenta de diversos problemas de primer orden que se han de resolver. Entre ellos se encuentra el de la variabilidad espacio-temporal de los recursos. Dicha variabilidad afecta a la producción y gestión de la electricidad obtenida mediante las diferentes tecnologías de explotación; en definitiva a su integración dentro del sistema energético. Además, como variables climáticas, la radiación y el viento están sujetos a variaciones naturales en un amplio rango de escalas espaciales y temporales, así como a los efectos del cambio climático.

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

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

FINANCIACIÓN

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

PROCESAMIENTO PARALELO DE IMÁGENES HIPERESPECTRALES DE LA SUPERFICIE TERRESTRE

INVESTIGADORES

Antonio Plaza Miguel de la Universidad de Extremadura.

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

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

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

ABAQUS

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

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

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

INVESTIGADORES

Eduardo Sabio Rey. Universidad de Extremadura.

DESCRIPCIÓN

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

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

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

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

DISTRIBUCIÓN DE NIVELES ELECTROMAGNÉTICOS EN DETERMINADOS ENTORNOS GEOGRÁFICOS

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

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

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

CIENCIAS INFORMÁTICAS Y DE COMUNICACIONES

NANOGATHER.

ANÁLISIS Y DISEÑO DE NUEVOS SENSORES EN NANOTECNOLOGÍA

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

Los nanosensores basados en nanoantenas permiten superar el límite de difracción de los dispositivos ópticos tradicionales, es decir, permiten capturar o dirigir la emisión de luz con precisiones inferiores a la longitud de onda. Esto está abriendo un amplio abanico de nuevas aplicaciones, desde la fabricación de nuevos detectores con capacidad de observar objetos con precisiones por debajo de la longitud de onda de la luz hasta nuevos dispositivos de comunicaciones de gran ancho de banda y pasando por nuevos dispositivos de almacenamiento de elevada capacidad.

Una de las características esenciales de las nanoantenas es la naturaleza plasmónica del comportamiento electromagnético de los metales. En el proyecto se pretende conseguir nuevos resultados y nuevas estructuras para mejorar las características de las nanoantenas.

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

Para el desarrollo de este proyecto se utilizarán herramientas ya testadas con éxito en LUSITANIA. El Grupo de Electromagnetismo Computacional de la Universidad de Extremadura ha desarrollado multitud de herramientas de análisis electromagnético para supercomputadores que se han comportado con éxito y han conseguido diversos logros reconocidos mundialmente.

Para adaptarse al estudio de nuevos materiales en nanotecnología el Grupo ha adaptado estas herramientas para incorporar numerosos de los comportamientos extraordinarios de los nuevos nanomateriales, entre los que está el comportamiento plasmónico de los metales a frecuencias ópticas. Se aplicarán, al contrario de lo que se viene utilizando para estudiar el comportamiento electromagnético de los nanomateriales, formulaciones basadas en ecuación integral, puesto que facilitan el análisis de los mismos con mayor precisión.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- J Rivero, JM Taboada, L Landesa et al, "Surface integral equation formulation for the analysis of left-handed metamaterials", Optics Express, 2010.

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

OPTIMIZATION OF THE DIFFUSED MATRIX FORMAT FOR HETEROGENEOUS PARALLEL COMPUTING

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

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

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- Cristo A, Martínez P, Valencia D, Pérez RM, Hernández LM (2011). "Adaptation of the Diffused Matrix Image Format to Store Simulated Data from FLEX / Sentinel-3 Future ESA Missions". 3rd International

Conference on Image Processing & Communications, Bydgoszcz, Polska.

- Hernández LM, Cristo A, Martínez P, Pérez RM (2011). "Diffused Matrix Format (DMF): A Data Structure for Airborne and Spaceborne Image Processing". ESA Advanced Training Course in Land Remote Sensing, Kraków (Polska).

FINANCIACIÓN

Junta de Extremadura
Fondo Social Europeo

SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS ÓPTICOS INTEGRADOS

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

La metodología de investigación asociada al análisis y diseño de dispositivos y sistemas de comunicaciones ópticas requiere la resolución de ecuaciones diferenciales lineales y no lineales. Para dispositivos integrados se utilizan métodos numéricos como el método de elementos finitos y el método de diferencias finitas.

Estos algoritmos permiten resolver las ecuaciones diferenciales que rigen el funcionamiento de láseres, fibras ópticas, fotodetectores, moduladores, etc. Es especialmente destacable su aplicabilidad al estudio de la rotación no lineal de la polarización de la luz que, junto con la dispersión en el modo de polarización, constituye un elemento clave en el diseño de los sistemas de comunicaciones ópticas actuales.

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

EVALUACIÓN DE AZEQUIAMPI

INVESTIGADORES

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

DESCRIPCIÓN

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

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

METODOLOGÍA

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

CONSUMO ENERGÉTICO DE OPERACIONES COLECTIVAS MPI EN PLATAFORMAS MULTICORES

INVESTIGADORES

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.

DESCRIPCIÓN

En los últimos años, el interés por el ahorro energético se ha extendido, llegando incluso al ámbito de la computación. Las aplicaciones que requieren paralelismo utilizan, habitualmente, una gran cantidad de nodos de computación, recursos (memoria RAM) e incluso de dispositivos de comunicación (buses internos, redes, etc). Así, ha surgido interés en estudiar cómo optimizar el uso de los recursos, minimizando al mismo tiempo el impacto energético de las aplicaciones.

MPI es el estándar de comunicación en la programación paralela en supercomputadores. Del conjunto de operaciones disponibles en MPI, el de operaciones colectivas es el más utilizado por las aplicaciones científicas. Por lo tanto, una buena estrategia para aumentar el rendimiento de las aplicaciones científicas es mejorar las prestaciones de dichas operaciones. Lo mismo ocurre con el consumo energético asociado a una cierta aplicación. Para cada operación colectiva de MPI, existen varios esquemas de implementación. El objetivo del proyecto es determinar qué esquemas de implementación de dichas operaciones son más eficientes energéticamente en una máquina multicore.

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. Para realizar este estudio, se propone el uso del benchmark IMB muy utilizado en la comunidad científica para testear implementaciones de MPI.

Las pruebas se realizarán en el supercomputador LUSITANIA que cuenta con 128 cores por nodo. El benchmark IMB se configurará para iterar sobre el número de cores en potencia de dos (1, 2,..., 128), para diferentes tamaños de mensajes a intercambiar (0, 1, 2, 4,..., 64MB), para los tres tipos de operaciones colectivas y para cada esquema de implementación de las mismas. El seguimiento del consumo eléctrico se realizará mediante una pinza amperimétrica monitorizada remotamente. Debido a que sólo se dispone de un instrumento de monitorización y de las particularidades del sistema de alimentación eléctrica del supercomputador, el número de cores a monitorizar se restringe de 128 a 64.

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 observado que una operación colectiva tiene asociado un consumo energético mayor mientras más procesos tenga asociados a dicha comunicación. Además, un mayor tamaño de mensaje implica un mayor consumo eléctrico.
- Utilizar un esquema de implementación u otro no supone diferencias significativas en cuanto al

consumo eléctrico relativo. Una operación menos eficiente energéticamente tiende a terminar antes debido a que hace un uso más intensivo del hardware; mientras que una operación más eficiente en términos energéticos, tiende a consumir más tiempo para completarse. Así, el consumo eléctrico total se compensa entre los diferentes esquemas.

- Se ha observado que las operaciones colectivas que son más eficientes en tiempo, también lo son en términos de consumo energético global. El consumo global viene determinado por la suma del consumo relativo más el consumo base (necesario para que la máquina funcione).

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

INVESTIGADOR PRINCIPAL

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

DESCRIPCIÓN

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

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

OBJETIVOS

Supercomputing electromagnetic tools for plasmonic materials and metamaterials: The first objective is to extend the scope of applications of the SIE-MoM formulations and latest breakthroughs in fast and parallel integral-equation algorithms to the electromagnetic analysis of plasmonic nanostructures and artificial materials in visible and near-infrared frequency bands. This main objective is divided in the following partial objectives:

- SIE-MoM formulations for plasmonic materials and metamaterials: The basic SIE-MoM formulations will be developed for the solution of problems with multiple plasmonic and metamaterial objects. We will

focus on formulations with proved high accuracy and convergence. These formulations will be adapted and further optimized to account for the quite different and non-naturally occurring electromagnetic response of metamaterials and plasmonic media at optical frequencies.

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

Todos los avances anteriores están en la frontera de la investigación en electromagnetismo computacional y

presentan un gran interés en el contexto de las actuales y futuras aplicaciones nanotecnológicas. Estos avances se están plasmando en diferentes publicaciones en revistas con gran impacto del SCI y congresos nacionales e internacionales. Gran parte de estas contribuciones son por invitación. A continuación se enumeran las contribuciones a revistas y congresos con agradecimiento al CénitS.

PUBLICACIONES Y CONGRESOS

- J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Surface Integral Equation Solvers for Large-Scale Conductors, Metamaterials and Plasmonic Nanostructures," Appl. Comput. Electrom. (ACES) Journal, vol. 27, no. 2, pp. 189-197, 2012. Paper invitado.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, L. Landesa, "MLFMA-FFT parallel algorithm for the solution of extremely large problems in electromagnetics," to appear in Proceedings of the IEEE, Special issue on Large Scale Electromagnetic Computation for Modeling and Applications, Jan. 2013. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2194269. Paper invitado.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Supercomputing solution of large electromagnetic problems with parallel MLFMA-FFT," 28th International Review of Progress in Applied Computational Electromagnetics (2012 ACES Conference), Columbus, Ohio (USA), 10-14 de abril de 2012. Ponencia invitada.
- J. M. Taboada, J. Rivero, L. Landesa, M. G. Araújo, and F. Obelleiro, "Optimization of invisibility cloaks by surface integral equation method", International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012. Ponencia invitada.
- J. M. Taboada, M. G. Araújo, J. Rivero, L. Landesa, and F. Obelleiro, "Fast Surface Integral Equation Formulations for Large-Scale Conductors, Metamaterials, and Plasmonic Problems", International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA 2012), Cape Town, South Africa, September 2-7, 2012. Ponencia invitada.
- J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, "Optimization of invisibility cloaks by surface integral equation method", XXVII Simposium Nacional de la Unión Científica Internacional de Radio (URSI 2012), Elche (Alicante), 12-14 de septiembre de 2012.
- J. Rivero, J. M. Taboada, L. Landesa, "Design of Invisibility Cloaks using Surface Integral Equation Method", Sixth International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (Metamaterials 2012), St. Petersburg, Russia, 17-22 September 2012.
- J. Rivero, J.M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, F. Obelleiro, "Optimized design of multilayer invisibility cloaks for arbitrary geometries," 7th European Conference on Antennas and Propagation – EUCAP 2012, Gonthenburg, 8-12 april 2013.
- J. M. Taboada, L. Landesa, M. G. Araújo, J. Rivero, D. M. Solís, L. Bote, F. Obelleiro, and J. L. Rodríguez, "Fast Surface Integral Equation Methods for Electromagnetic solution of Large-Scale Conductors, Metamaterials and Optical Nano-antennas," VI LEMA-EPFL Workshop on Integral Techniques for Electromagnetics (INTELECT'2012), Sevilla, 19 octubre 2012. Ponencia invitada.

FINANCIACIÓN

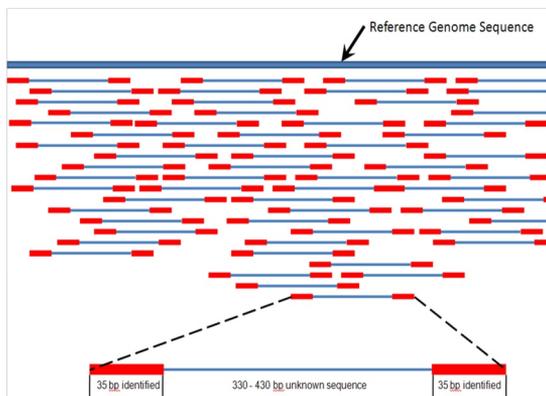
Gobierno de España y Fondos Europeos de desarrollo regional (FEDER), proyectos TEC2011-28784-C02-01, TEC2011-28784-C02-02, CONSOLIDER INGENIO 2010 CSD2008-00068. Gobierno de Extremadura, ayuda a grupos de investigación GR10126.

ULTRASECUENCIACIÓN GENÉTICA MEDIANTE TÉCNICAS DE SUPERCOMPUTACIÓN

DESCRIPCIÓN

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

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



OBJETIVOS

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

SIBE

CENTRO DE INVESTIGACIÓN

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).

DESCRIPCIÓN

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

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

OBJETIVOS

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

RED ESPAÑOLA DE E-CIENCIA

DESCRIPCIÓN

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

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

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

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

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

OBJETIVOS

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



FACTORÍA DE INNOVACIÓN

DESCRIPCIÓN

Factoría de Innovación es una comunidad virtual de emprendedores, empresarios y personas inquietas, que busca conectar innovación y talento para generar nuevas oportunidades de negocio, un lugar de encuentro y reunión en el que se puede encontrar información sobre lo último en innovación, creatividad, tecnología, modelos de negocio, posibilidades para pymes y emprendedores. Principalmente agrupa a miembros de la región de Extremadura y la zona del Alentejo Portugués, aunque se encuentra abierta a más regiones españolas.

Factoría de Innovación es una iniciativa del Ayuntamiento de Cáceres puesta en marcha a través del Proyecto Fénix, con la ayuda del FEDER, dentro del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal 2007-2013.



OBJETIVOS

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

UNIDAD INTERACTIVA 3D

INVESTIGADORES

Dr. Jesús Usón Gargallo, coordinador de proyecto. Personal de las unidades de Laparoscopia, Microcirugía y Terapia Celular. Mario Suárez, especialista en diseño y animación 3D. Daniel Peguero, especialista en software. Pablo García Tres Palacios, profesional de marketing.



DESCRIPCIÓN

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 dada.

OBJETIVOS

- Crear dentro del propio CCMIJU un negocio rentable y de ámbito 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.
- Se utilizarán los recursos del supercomputador LUSITANIA para disminuir los tiempos de procesado que requiere el proyecto.



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

PROYECTOS CONCLUIDOS

En este capítulo se incluye la relación de los proyectos de investigación e innovación concluidos más relevantes, desarrollados por 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 vida", "Ciencias de la Tierra" y "Ciencias Informáticas y de Comunicaciones".

CIENCIAS DE LA VIDA

MEDIDA DE DOSIS NEUTRÓNICAS EN PACIENTES SOMETIDOS A RADIOTERAPIA

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

SIMULACIONES GIROCNÉTICAS GLOBALES DE PLASMAS DE FUSIÓN CON EUTERPE

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Se han llevado a cabo simulaciones para estudiar la dependencia de la calidad de las simulaciones no lineales realizadas con EUTERPE con parámetros de entrada como paso de tiempo del integrador, número de marcadores y número de nodos en la malla espacial. Se han estudiado inestabilidades ITG en el stellarator TJ-II a través de simulaciones en régimen lineal en la configuración estándar (100_44_64), para plasmas con $\beta = 0\%$. Se han caracterizado las tasas de crecimiento de estas inestabilidades en esta configuración.
- Se ha estudiado el confinamiento de impurezas en plasmas turbulentos en simulaciones en geometría cilíndrica usando perfiles de densidad y temperatura similares a los medios experimentales en el stellarator W7AS en modos de alto confinamiento (IC). Se encontraron inestabilidades numéricas que han impedido avanzar en estos regímenes.
- Para el estudio de la topología de flujos turbulentos, se han realizado simulaciones lineales en geometría cilíndrica usando un perfil de transformada rotacional de tipo tokamak. Cambiando los perfiles de densidad y temperatura se han encontrado regímenes con diferentes grados de inestabilidad ITG y diferentes espectros, que posteriormente serán analizados en el régimen no lineal y caracterizados desde el punto de vista topológico.

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

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

DINÁMICA FUERA DEL EQUILIBRIO DEL MODELO DE HEISENBERG TRIDIMENSIONAL EN PRESENCIA DE UN CAMPO MAGNÉTICO

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

CONSOLIDER TECNO_FUS

INVESTIGADORES

José M^a Gómez Ros CIEMAT.

OBJETIVOS

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

IFMIF-EVEDA ESPAÑA

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

SOLUCIÓN DE PROBLEMAS ELECTROMAGNÉTICOS DE GRANDES DIMENSIONES

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

ELECTROMAGNETIC SCATTERING FROM CANONICAL AND COMPLICATED OBJECTS

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

QUÍMICA COMPUTACIONAL

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

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

INVESTIGADORES

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, Rute Maria Barata Morgado y Samuel Frutos Puerto.

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

NOVEL GENOMIC REGIONS ASSOCIATED TO SPECIFIC COMPLEX CHROMATIN MARKS

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

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

CIENCIAS DE LA TIERRA

CÁLCULOS AB-INITIO

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS

- Existe evidencia de la variación de parámetros mecánicos, pero la fragilización por hidrógeno no está explicada teóricamente. Varios modelos tratan de explicar la propagación de la fisura por la presencia en el metal de átomos de hidrógeno.
- Generalmente se asume que el hidrógeno se genera 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.

CIENCIAS INFORMÁTICAS Y DE COMUNICACIONES

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

INVESTIGADORES

Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

ALOJAMIENTO DE PLATAFORMAS VIRTUALES Y WEBTV (ALDEALAB C3)

DESCRIPCIÓN

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

OBJETIVOS

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

SIMULACIÓN DEL CÓMPUTO MASIVO DE LSP EN SISTEMAS INTERDOMINIO

INVESTIGADORES

Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.

OBJETIVOS

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

COM.INFO.COM: PREDICTIBILIDAD DE INFOESTRUCTURAS DE COMUNICACIONES MEDIANTE SUPERCOMPUTACIÓN Y SU APLICACIÓN AL DESPLIEGUE DE REDES MIPv6 Y FTTx

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Simulaciones de redes reales mediante supercomputación. Se estudiaron simuladores y se seleccionaron NS2 con PDNS y NS3. Se procedió con la configuración e instalación de los mismos. Utilizando la herramienta gephi para el particionado de grafos se desarrolló una extensión para la generación de escenarios paralelos en ns2, de modo que pudiésemos paralelizar cualquier red la cual estuviese representada como un grafo en formato GML, ésta extensión nos genera los archivos .tcl necesarios para la ejecución de ns2 con el plugin de paralelización PDNS. Se han realizado simulaciones de redes reales mediante ambos simuladores.
- Soporte y despliegue de MIPv6. Se ha llevado a cabo la instalación y configuración de Omnet++ y todas sus librerías en Lusitania y la compilación de XMIPv6, además se añade Mobiwani para NS2.
- Evaluación de resultados y extrapolación para predicción de las necesidades. Se realizaron pruebas sobre escenarios reales (Red Iris, Geant y AT&T) utilizando NS2 con el complemento PDNS en Lusitania y se analizaron los datos arrojados por el supercomputador en dichas simulaciones. Se han realizado pruebas con NS3 en Lusitania y se analizaron los resultados obtenidos. Por último se hizo una predicción y extrapolación de resultados.

ALGORITMOS PARALELOS HETEROGÉNEOS PARA PROCESAMIENTO DE IMÁGENES MULTICANAL

INVESTIGADORES

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

SOPORTE PORTING A USUARIOS DEL CIEMAT EN LA PLATAFORMA LUSITANIA

INVESTIGADORES

Antonio Muñoz Roldán perteneciente al Departamento de Informática del CIEMAT.

OBJETIVOS ALCANZADOS

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



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS

RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

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

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

Esta sección presenta los resultados más notables que han sido publicados en congresos y revistas, y los reconocimientos obtenidos en 2013 por la Fundación COMPUTAEX.

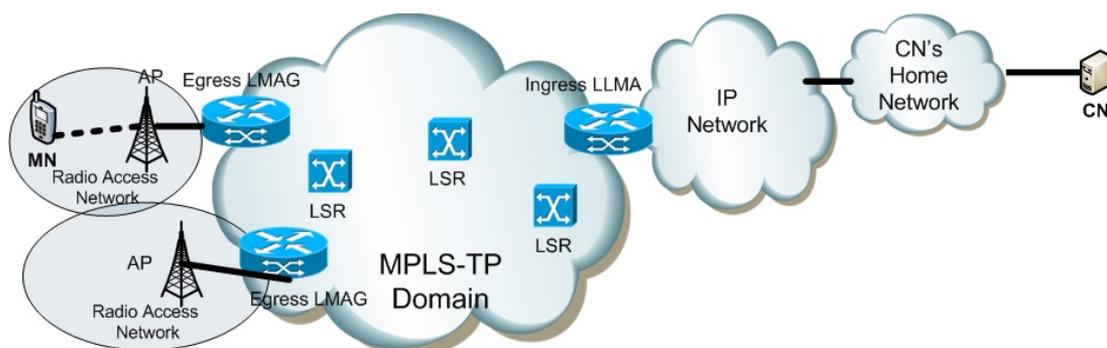
PUBLICACIONES Y PONENCIAS EN CONGRESOS Y JORNADAS

ENHANCING PTN TO IMPROVE THE QoS PROVIDED BY THE IP MOBILITY MANAGEMENT

DAVID CORTÉS-POLO, JOSÉ-LUIS GONZÁLEZ-SÁNCHEZ, JAVIER CARMONA-MURILLO, FCO. JAVIER RODRÍGUEZ-PÉREZ, JAVIER CORRAL-GARCÍA. 2013 WORLD CONFERENCE ON INFORMATION SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (WORLDIST'13). ALGARVE, PORTUGAL, MARZO 27-30, 2013. ISBN: 978-3-642-36980-3.

The integration of Mobile and Fixed Network is one of the most important topics in the Future Internet development and an open issue for network providers. In this case, mobility management and Quality of Service (QoS) are two of the main goals in this integration. These tasks are an important challenge if the mobility rate is very high. In this paper, we present a new architecture to provide both of them, QoS and high rate mobility using an IP-based mobility protocol and an MPLS-based protocol to deploy Packet Transport Networks (PTN).

To achieve this, we had developed analytical models to evaluate registration updates cost, packet loss rate and buffer requirements of the architecture. Numerical results show that the proposed mechanisms can significantly reduce registration updates cost and provide low handoff latency and packet loss rate under various scenarios.

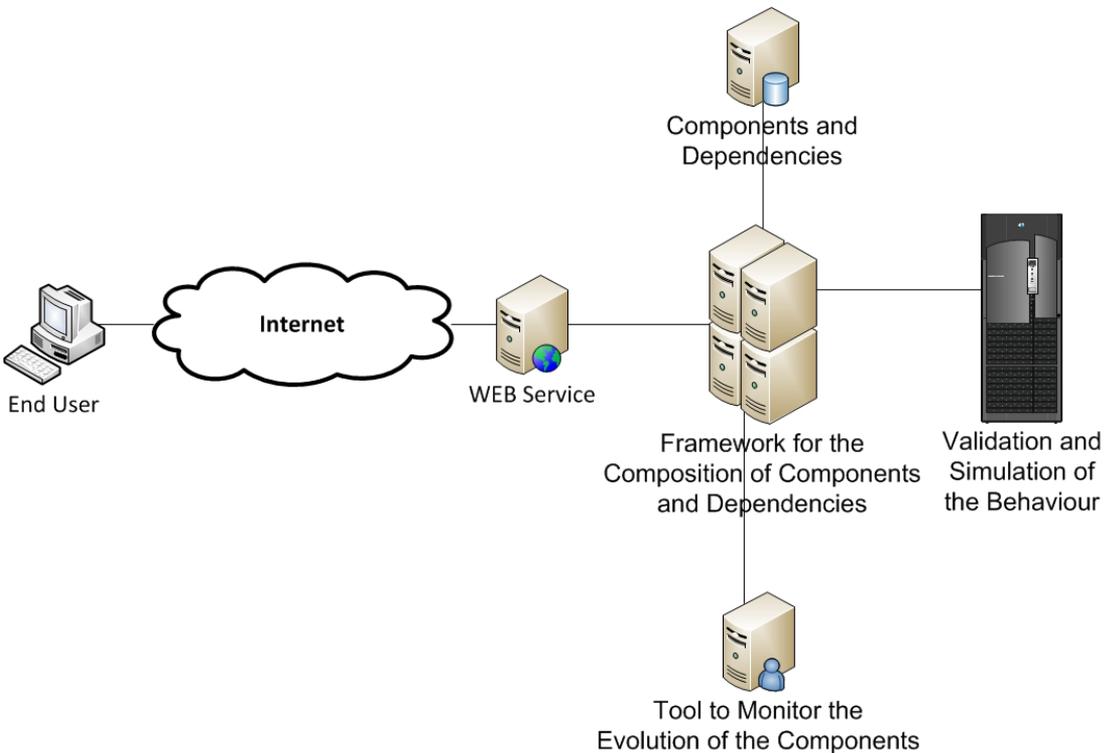


APLICABILIDAD DE LA REUTILIZACIÓN DE CÓDIGO A LA IMPLEMENTACIÓN DE SOLUCIONES EN ENTORNOS HPC

JAVIER CORRAL-GARCÍA, JOSÉ-LUIS GONZÁLEZ-SÁNCHEZ, CÉSAR GÓMEZ-MARTÍN Y DAVID CORTÉS-POLO. ACTAS DE LA 8ª CONFERENCIA IBÉRICA DE SISTEMAS Y TECNOLOGÍAS DE LA INFORMACIÓN, VOL. II. CISTI 2013. LISBOA, PORTUGAL. 19-22 JUNIO 2013. ISBN: 978-989-98434-0-0. PP 359-362.

Los investigadores y usuarios de la Computación de Alto Rendimiento, (High-Performance Computing), se enfrentan a grandes retos para resolver sus propuestas y obtener resultados óptimos. En muchos casos, estos investigadores no tienen la formación previa necesaria, sin embargo, desean compilar sus códigos y ejecutarlos lo antes posible. Esto puede ser contraproducente debido, por ejemplo, a una pobre paralelización o a la elección incorrecta de un modelo o arquitectura software.

Esta propuesta pretende cubrir las necesidades detectadas y aportar nuevas soluciones sobre los desafíos abiertos en la computación de alto rendimiento, mediante la creación de una metodología y un framework basados en componentes y orientados a aspectos, para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos HPC. El objetivo es permitir a investigadores y usuarios generar sus programas de manera más eficiente, con mayor confianza en su funcionalidad y alcanzando destacables reducciones de tiempo, esfuerzo y coste, mediante la reutilización de componentes con códigos paralelos ya desarrollados y probados previamente.

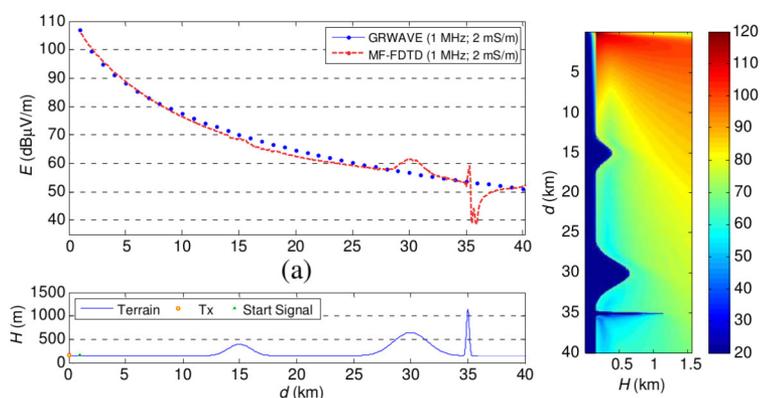


COMPUTING GROUND-WAVE ELECTRIC FIELD AT MF BAND VIA FDTD METHOD

F. T. PACHÓN-GARCÍA, J. M. PANIAGUA-SÁNCHEZ, M. RUFO-PÉREZ, AND A. JIMÉNEZ-BARCO. PROGRESS IN ELECTROMAGNETICS RESEARCH SYMPOSIUM. PIERS PROCEEDINGS, STOCKHOLM, SWEDEN, AUGUST 12-15, 2013. PP. 300-304. ISSN: 1559-9450, ISBN: 978-1-934142-26-4.

This paper presents a study about calculations of electric field at medium frequency (MF: 300 kHz–3 MHz), based on 2D finite-difference time-domain (FDTD) method. Variations of electric field with land conductivity and with typified mountains are evaluated, and the results are validated with Millington expressions and the finite element method-parabolic equation (FEM- PE), agreeing well.

The interest of introducing this technique for calculating electric field levels is that it includes reflection, diffraction, surface wave, and takes into account backscattering. Therefore, it provides a more robust solution in non-ideal environments with difficult terrain, being this a first step to analyse how suitable its use is, in terms of time consuming and accuracy of results for this frequency band.

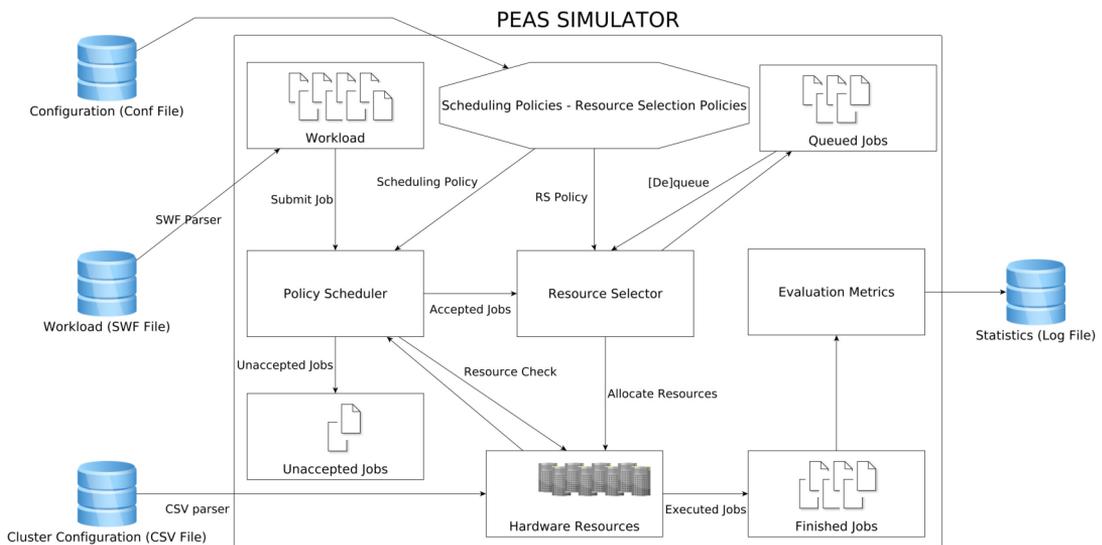


PERFORMANCE AND ENERGY AWARE SCHEDULING SIMULATOR FOR HIGH-PERFORMANCE COMPUTING

CÉSAR GÓMEZ-MARTÍN, MIGUEL A. VEGA-RODRÍGUEZ, JOSÉ-LUIS GONZÁLEZ-SÁNCHEZ, JAVIER CORRAL-GARCÍA Y DAVID CORTÉS-POLO. 7TH IBERGRID 2013, CONFERENCE PROCEEDINGS. MADRID, ESPAÑA. 19-20 DE SEPTIEMBRE 2013. ISBN: 978-84-9048-110-3. PP 17-29.

Job scheduling is a very complex task that influences the performance of High-Performance Computing (HPC) infrastructures, thus, a simulator of real computing environments for an accurate evaluation of scheduling and resource selection policies helps ICT 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 (SPEC), this is the reason why we have implemented a Performance and Energy Aware Scheduling (PEAS) Simulator for HPC. In order to validate the simulator and understand how different computing workloads behave depending on scheduling policies, several user-centric evaluation metrics have been evaluated and compared with previous studies.

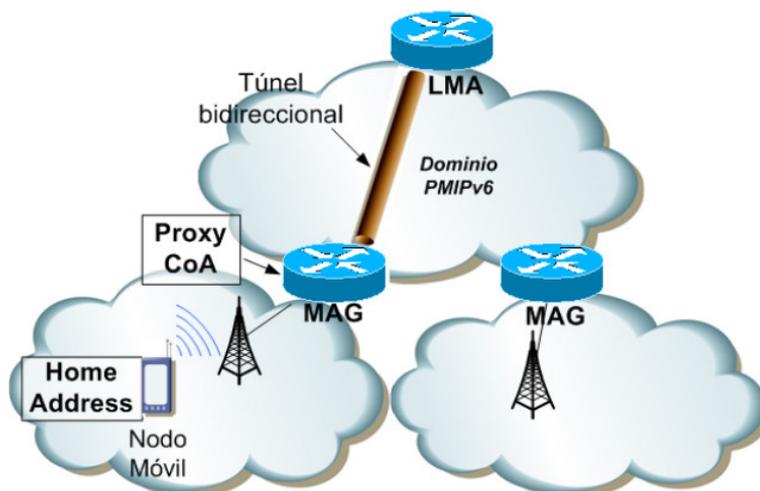


TESTBED PARA EL ANÁLISIS DEL IMPACTO DE LA MOVILIDAD EN REDES DE ACCESO

JAVIER CARMONA-MURILLO, DAVID CORTÉS-POLO, PEDRO RODRÍGUEZ-CUBERO, FRANCISCO-JAVIER RODRÍGUEZ-PÉREZ, JOSÉ-LUIS GONZÁLEZ-SÁNCHEZ. *ACTAS DE LAS JORNADAS DE INGENIERÍA TELEMÁTICA 2013 (JITEL 2013)*, pp. 357-363. GRANADA, 28-30 DE OCTUBRE DE 2013. ISBN-10: 84-616-5597-4. ISBN-13: 978-84-616-5597-7.

La gestión de la movilidad y la Calidad del Servicio (QoS) son dos de los objetivos más importantes en el desarrollo de las redes inalámbricas. Estas metas no sólo involucran al dominio inalámbrico, sino que, en gran medida, la red de acceso que interconecta al dispositivo móvil con Internet también es responsable de conseguir unas comunicaciones eficientes y con QoS. Este área de trabajo que busca la integración del dominio inalámbrico con la red de acceso se conoce como Convergencia Fija Móvil (FMC).

El objetivo final de esta convergencia es la integración y la creación de una infraestructura unificada de red, fija y móvil. En ella, los usuarios pueden moverse a través de las diferentes redes y acceder a los servicios sin interrumpir su conexión a la red. La red de acceso juega un papel muy importante en los parámetros de QoS que se proporcionan a los diferentes nodos móviles. En este trabajo se presenta un testbed para analizar la influencia de la movilidad en la red de acceso. Este testbed permite medir de manera real y no simulada la influencia del tráfico de los usuarios móviles en la comunicación.



PUBLICACIONES EN REVISTAS

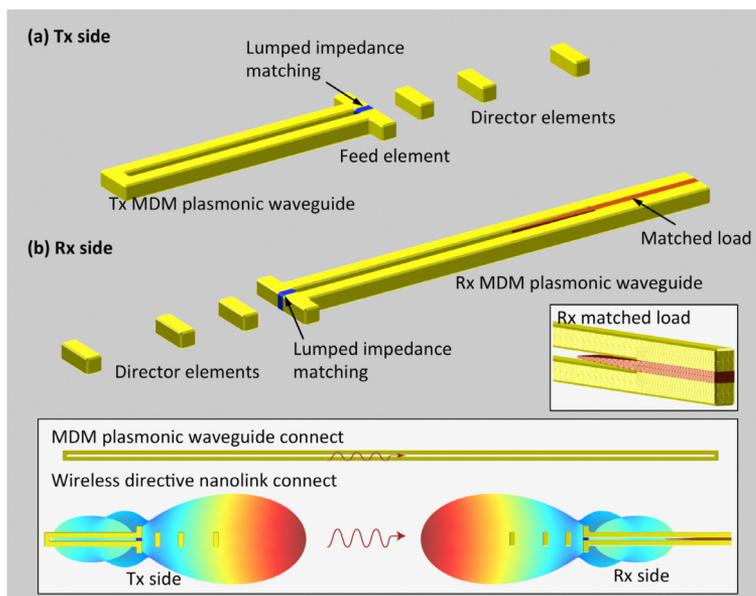
OPTIMIZATION OF AN OPTICAL WIRELESS NANOLINK USING DIRECTIVE NANOANTENNAS

DIEGO M. SOLÍS, JOSÉ M. TABOADA, FERNANDO OBELLEIRO, AND LUIS LANDESA.

OPTICS EXPRESS, VOL. 21, ISSUE 2, PP. 2369-2377 (2013) [HTTP://DX.DOI.ORG/10.1364/OE.21.002369](http://dx.doi.org/10.1364/OE.21.002369)

Optical connects will become a key point in the next generation of integrated circuits, namely the upcoming nanoscale optical chips. In this context, nano-optical wireless links using nanoantennas have been presented as a promising alternative to regular plasmonic waveguide links, whose main limitation is the range propagation due to the metal absorption losses.

In this paper we present the complete design of a high-capability wireless nanolink using matched directive nanoantennas. It will be shown how the use of directive nanoantennas clearly enhances the capability of the link, improving its behavior with respect to non-directive nanoantennas and largely outperforming regular plasmonic waveguide connects.



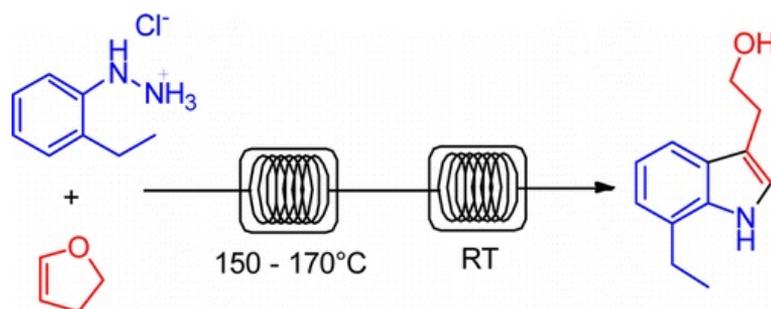
ON THE FISCHER INDOLE SYNTHESIS OF 7-ETHYLTRYPTOPHOL--MECHANISTIC AND PROCESS INTENSIFICATION STUDIES UNDER CONTINUOUS FLOW CONDITIONS

BERNHARD GUTMANN, MICHAEL GOTTSPONER, PETERI ELSNER, DAVID CANTILLO, DOMINIQUE M. ROBERGE AND C. OLIVER KAPPE.

ORG. PROCESS RES. DEV., 2013, 17 (2), PP 294–302. DOI: 10.1021/OP300363S

7-Ethyltryptophol, a key intermediate in the synthesis of the anti-inflammatory agent etodolac, was produced by Fischer indole synthesis of 2-ethylphenylhydrazine and 2,3-dihydrofuran under continuous flow conditions. The reaction generates several undesired byproducts and therefore product yields could not be improved above 40–50%.

The mechanism of this transformation was studied in detail and the structure of the byproducts carefully elucidated. Despite the only moderate product yield, the synthesis of 7-ethyltryptophol by this protocol remains interesting compared to alternative methods and starts from inexpensive reagents. The developed process is executed in an environmentally benign solvent (methanol) and, importantly, the majority of byproducts can be removed from the 7-ethyltryptophol product by a straightforward extraction process.

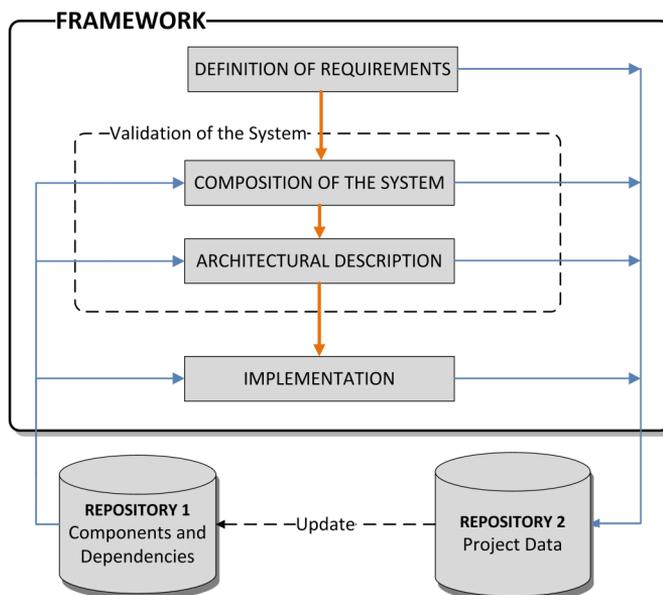


DEVELOPMENT OF SCIENTIFIC APPLICATIONS WITH HIGH-PERFORMANCE COMPUTING THROUGH A COMPONENT-BASED AND ASPECT-ORIENTED METHODOLOGY

JAVIER CORRAL-GARCÍA, CÉSAR GÓMEZ-MARTÍN, JOSÉ-LUIS GONZÁLEZ-SÁNCHEZ AND DAVID CORTÉS-POLO
INTERNATIONAL JOURNAL OF ADVANCED COMPUTER SCIENCE, VOL. 3, NO. 8, PP. 400-408, AUG., 2013. ISSN: 2251-6379

Scientific researchers face critical challenges which require an increased role of High-Performance Computing (HPC). In many cases, these users, who are specialists in their fields of action, have no previous training or the required skills to face them, or just want to compile and run their programming codes as soon as possible. Sometimes this leads to the risk of being counterproductive in terms of efficiency, because after all, researchers may have to wait longer for the final result, due to a wrong programming model, wrong software architecture, or even errors in the parallelization of sequential code. However, there is a clear lack of approaches with specific methodologies or optimal working environments for the development of specific HPC software systems.

Moreover, although there are several frameworks based on Aspect-Oriented and Component-Based Programming for supercomputing, they are focused on the design and implementation phases, while none is based on the reuse of components from the earliest stages of the development, which are defined in the Requirements Engineering. The aim of this proposal is to provide new solutions for the open challenges in high-performance computing, through a methodology and a new framework based on aspect-oriented components for the development of scientific applications for HPC environments. The objective is to allow researchers and users to create their HPC programs in a more efficient way, with greater reliance on their functionality and achieving a reduction of time, effort and cost in the processes of development and maintenance, through the reuse of components (with already developed and tested parallel source codes) from the earliest stages of the development.

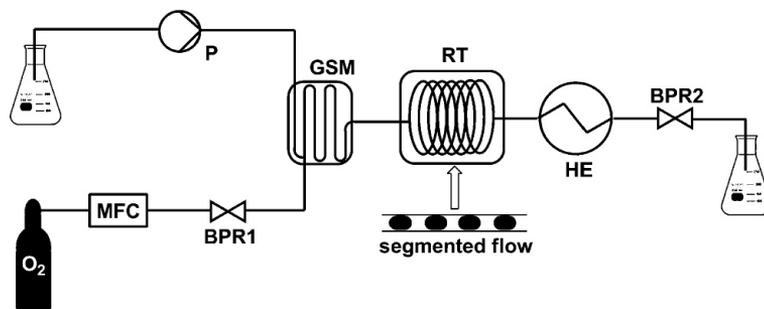


IN SITU GENERATION OF DIIMIDE FROM HYDRAZINE AND OXYGEN: CONTINUOUS-FLOW TRANSFER HYDROGENATION OF OLEFINS

PIEBER, B., MARTINEZ, S. T., CANTILLO, D. AND KAPPE, C. O. (2013).

ANGEWANDTE CHEMIE INTERNATIONAL EDITION, 52: 10241–10244. DOI: 10.1002/anie.201303528

No catalyst required! A highly efficient, catalyst-free process to generate diimide in situ from hydrazine monohydrate and molecular oxygen for the selective reduction of alkenes has been developed. The use of a gas–liquid segmented flow system allowed safe operating conditions and dramatically enhanced this atom-economical reaction, resulting in short processing times.



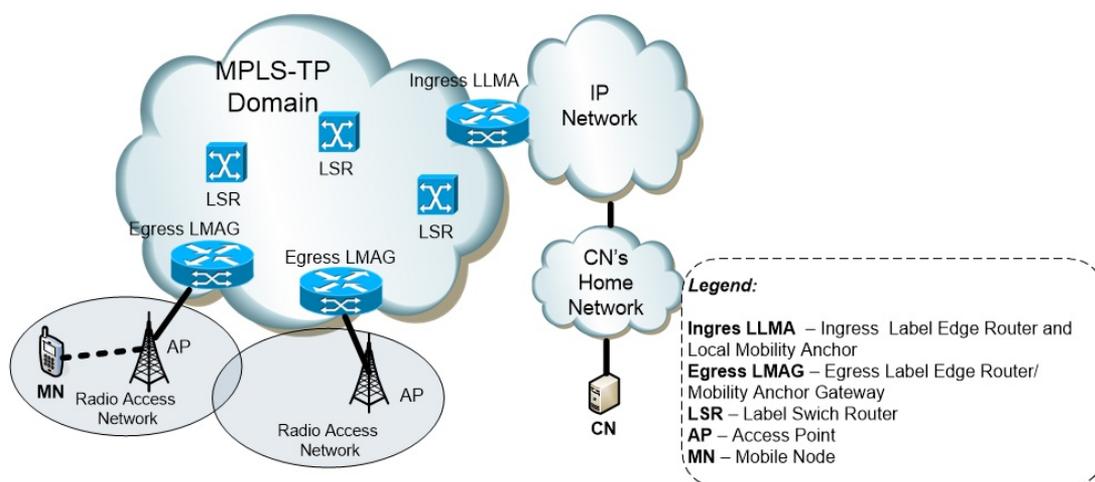
IPM-TP, A FULL INTEGRATED ARCHITECTURE TO PROVIDE SEAMLESS MOBILITY MANAGEMENT WITH QoS

DAVID CORTÉS-POLO, JOSÉ-LUIS GONZÁLEZ-SÁNCHEZ, JAVIER CARMONA-MURILLO, FCO. JAVIER RODRÍGUEZ-PÉREZ, JAVIER CORRAL-GARCÍA.

INFORMATION JOURNAL, VOL.16, No.12(B), DEC. 2013, PP.8781-8798. ISSN:1343-4500.

The integration of Mobile and Fixed Networks is one of the most important topics in the Future Internet development and an open issue for network providers. This topic is known as Fixed Mobile Convergence (FMC). The convergence looks for the integration and the creation of a unified infrastructure from fixed and wireless mobile networks. In this case, unified infrastructure and Quality of Service (QoS) are two of the main goals in this integration.

In this paper, we present a new architecture to provide both of them, QoS and integration from fixed and wireless networks using an IP-based mobility management protocol and an MPLS-based protocol in order to deploy Packet Transport Networks (PTN). To achieve this, analytical models have been developed to evaluate registration update costs, packet loss rate and buffer requirements of the architecture. Numerical results show that the proposed mechanisms can significantly reduce registration update costs and packet loss rate under various scenarios.

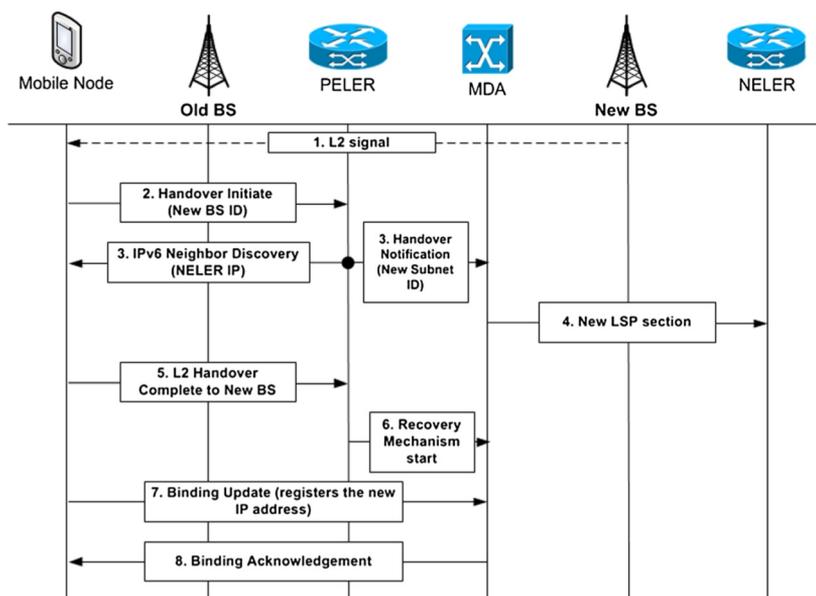


DM3: DISTRIBUTED MOBILITY MANAGEMENT IN MPLS-BASED ACCESS NETWORKS

CARMONA-MURILLO, J., GONZÁLEZ-SÁNCHEZ, J.-L., CORTÉS-POLO, D. AND RODRÍGUEZ-PÉREZ, F.-J.
 INT. J. NETWORK MGMT. 2013. DOI: 10.1002/NEM.1854

Over the last few years, mobility management in the Internet has been one of the most active fields in communications. The recent increasing mobile traffic demand is having an important impact on the design of mobile networks and some limitations are arising from traditional network deployments. In order to deal with this new scenario, mobility management network architectures are being redesigned towards a more distributed operation.

In this paper, we introduce DM3 (distributed mobility management MPLS), a fully distributed architecture designed to track efficiently the mobility of users in the current paradigm of evolving mobile IP networks. In DM3 architecture, several nodes are distributed in the MPLS-based access network and the mobile nodes are served by a close-by mobility anchor. With this operation, we reduce the routing and registration update costs, and provide a low handoff latency with a minimal packet loss rate. Analytical and experimental results are presented to justify the benefits of our proposed architecture.



AQUEOUS THERMAL DESORPTION AS AN EFFECTIVE WAY TO REGENERATE SPENT ACTIVATED CARBONS

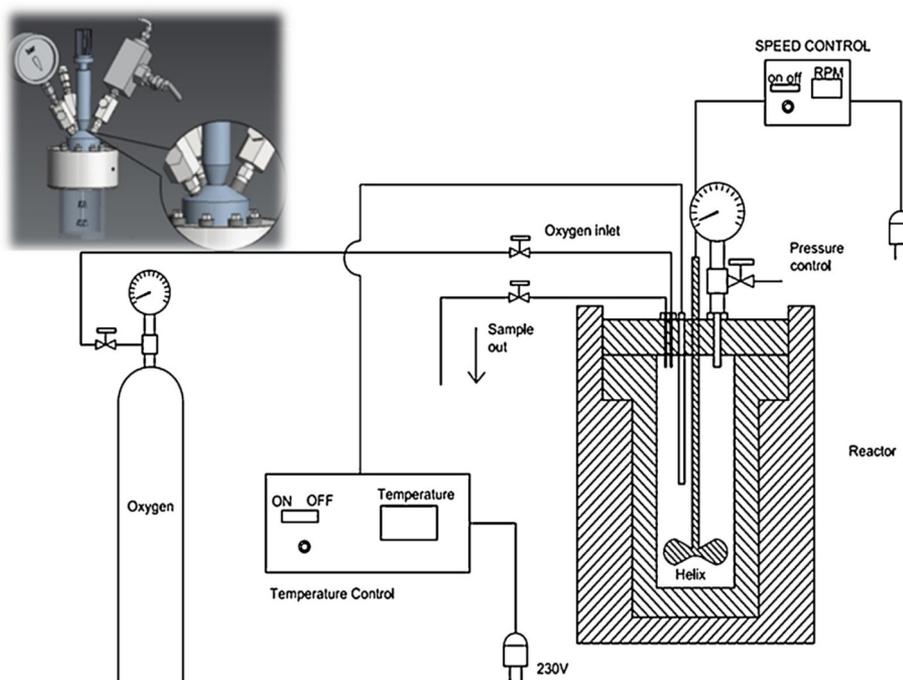
B. LEDESMA, S. ROMÁN, E. SABIO, A. ÁLVAREZ-MURILLO.

THE JOURNAL OF SUPERCRITICAL FLUIDS, VOLUME 85, JANUARY 2014, PAGES 24-30, ISSN 0896-8446, [HTTP://DX.DOI.ORG/10.1016/J.SUPFLU.2013.10.017](http://dx.doi.org/10.1016/j.supflu.2013.10.017)

This work deals with the regeneration of p-Nitrophenol (PNP) loaded Activated Carbons by means of aqueous thermal desorption. Continuous desorption experiments were performed under different temperature (140–200 °C) and stirring (100–600 rpm) conditions. The study was made with a double point of view; firstly, desorption kinetics was analyzed by applying non-linear Lagergren model. Secondly, the improvements on the textural parameters of the regenerated adsorbents as well as the regeneration efficiency were evaluated.

The results obtained revealed that the final amount of PNP desorbed was temperature dependent in the range 140–180 °C, while no improvement was found for higher temperatures, independently of the stirring speed. Likewise, temperature did not exert a marked effect on desorption kinetics.

The irreversibility of the adsorption processes was confirmed from N₂ and PNP adsorption analyses, although some differences were found. It is worth mentioning that increasing temperature did have a relevant influence on the adsorption regain of the adsorbents, being maximum for 200 °C (N₂ and PNP adsorption efficiency values up to 61% and 80%, respectively). This might be attributed to the occurrence of some activating effect induced by water under these conditions. The study of the prevalence of desorption over adsorption for enhanced temperature was complemented by the development of an Arrhenius-based model.



DISTINCIONES Y RECONOCIMIENTOS

INICIATIVA EMPRESARIAL DE TELECOMUNICACIÓN MÁS INNOVADORA DE EXTREMADURA

En la X edición de la Noche de las Telecomunicaciones en Extremadura celebrada en Cáceres el día 29 de Noviembre de 2013, el Presidente de AEXIT (Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación), D. Luis Miguel Manzano Sánchez, hizo entrega al Director General de la Fundación COMPUTAEX, D. José Luis González Sánchez, del "Premio a la Iniciativa Empresarial de Telecomunicación más Innovadora de Extremadura".

Al acto, patrocinado por las empresas Telefónica, Unify y Abertis Telecom, asistieron más de cien personas del ámbito de las tecnologías de la telecomunicación y de la informática, entre ellas el Decano-Presidente del Colegio Oficial de Ingenieros de Telecomunicación D. Eugenio Fontán Oñate.





ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

FINANCIACIÓN DE PROYECTOS

En 2013, La Fundación COMPUTAEX ha recibido financiación de fondos europeos, nacionales y regionales por su participación en proyectos de I+D+IT, realizados en colaboración con centros tecnológicos, instituciones públicas y organismos privados.

Además, desde la creación de la Fundación COMPUTAEX, se han establecido colaboraciones, contactos y cooperaciones con organizaciones públicas y privadas, fruto de las cuales se han obtenido los resultados mostrados en esta memoria anual.

En este capítulo se relacionan los proyectos más importantes para los que se ha conseguido financiación y la relación de convenios de colaboración con instituciones públicas y organismos privados vigentes desde la creación de la Fundación y los oficializados a lo largo de 2013.

PROYECTOS FINANCIADOS EN CONVOCATORIAS COMPETITIVAS

RITECA-II

Proyecto presentado al Programa FEDER-POCTEC. 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.

La Red de Investigación Transfronteriza entre Extremadura, Centro y Alentejo (RITECA), se encuentra actualmente en su segunda fase y es un proyecto de nivel europeo cuyo propósito es la creación de un marco de colaboración entre instituciones de las regiones Centro y Alentejo de Portugal y Extremadura, en el ámbito de la investigación, el desarrollo tecnológico y la innovación, que facilite y acelere el acercamiento de estas regiones al cumplimiento de los objetivos de Lisboa de la Unión Europea.

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

Gasto total: 5.593.432,45 €

Gasto elegible beneficiario COMPUTAEX: 195.000,00 €

ADQUISICIÓN, TRASLADO E INSTALACIÓN DE INFRAESTRUCTURA CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA PARA CÉNIT S

Proyecto presentado a la convocatoria de Infraestructura Científico-Tecnológica (2010-2011) del Ministerio de Economía y Competitividad.

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.

Gasto total: 517.253,99 €

Gasto elegible beneficiario COMPUTAEX: 517.253,99 €

FI4VDI: DESARROLLO DE UNA RED DE INFRAESTRUCTURAS FEDERADAS PARA LA GENERACIÓN DE SERVICIOS DE VIRTUALIZACIÓN DE PUESTOS DE TRABAJO

Proyecto presentado al 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 a ordenación espacial, que contribuya a asegurar una integración armoniosa y equilibrada de sus regiones, dentro de los objetivos de cohesión económica y social de la UE.

El objetivo de FI4VDI es 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 Clusters de empresas TIC, incluyendo de este modo un servicio diferenciador en sus portfolios de productos y contribuyendo asimismo al desarrollo de la economía y de la sociedad.

Gasto total: 859.403 €

Gasto elegible beneficiario COMPUTAEX: 124.850 €

SGDC: SMART GREEN DATA CENTER

Proyecto presentado al 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".

El objetivo de Smart Green Data Center es desarrollar, diseñar, fabricar, e implementar un novedoso prototipo de Data Center (CPD) modular, monitorizable y móvil que permita testear y controlar todos los actores que influyen en su consumo energético para maximizar su eficiencia y minimizar los impactos que experimentan los edificios que albergan los CPD.

Gasto total: 1.292.423 €

Gasto elegible beneficiario COMPUTAEX: 211.051 €

MITTIC: MODERNIZACIÓN E INNOVACIÓN TECNOLÓGICA CON BASE TIC EN SECTORES ESTRATÉGICOS Y TRADICIONALES

Proyecto presentado al Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España – Portugal, FEDER-POCTEC. 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.

MITTIC tiene como objetivo general: Fomentar el crecimiento económico y el empleo mediante el aumento de competitividad en sectores económicos estratégicos y tradicionales, proponiendo o implementando modelos y procesos innovadores de organización y producción basados en la aplicación de las Tecnologías de la Información y la Comunicación.

Gasto total: 1.521.964,84 €

Gasto elegible beneficiario COMPUTAEX: 48.000 €

ADECUACIÓN DE LA RED DE COMUNICACIONES PARA CÉNITS

Proyecto presentado a la convocatoria de Infraestructura Científico-Tecnológica del Ministerio de Economía y Competitividad. 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.

Gasto total: 306.800 €

Gasto elegible beneficiario COMPUTAEX: 306.800 €

FÉNIX-RIEP PARA LA FACTORÍA DE INNOVACIÓN.

Contrato conseguido en licitación pública del Exmo. Ayuntamiento de Cáceres para colaboración en el proyecto para la Factoría de la Innovación.

La Factoría de Innovación es una comunidad virtual de emprendedores, empresarios y personas interesadas en conectar innovación y talento para generar nuevas oportunidades de negocio.

Dotación: 4.365,39 €

EISTER: E-INFRAJET SUSTAINABILITY TRAINING AND EDUCATIONAL RESOURCE

Proyecto presentado al Séptimo Programa Marco, el cuál agrupa todas las iniciativas comunitarias relativas a la investigación bajo un mismo techo y desempeña un papel crucial en el logro de los objetivos de crecimiento, competitividad y empleo, complementado por el nuevo Programa Marco para la Competitividad y la Innovación (CIP), programas de educación y formación y Fondos Estructurales y de Cohesión en apoyo de la convergencia y la competitividad de las regiones. Constituye también un pilar fundamental del Espacio Europeo de Investigación (EEI).

El objetivo de este proyecto es desarrollar un programa educativo sobre la sostenibilidad verde de las tecnologías de la información y la comunicación, consistente en 3 partes vinculadas y en evolución: Material para una conferencia de sensibilización como parte del Workshop de introducción al curso; un curso de formación para los profesiones de e-infraestructuras para que adquieran el conocimiento y las habilidades necesarias para llevar a cabo una auditoría de sostenibilidad y preparar una estrategia para actualizar el centro de datos; la implementación de una hoja de ruta para el curso y un máster, empezando por un curso breve hasta llegar al programa completo.

Gasto total: 50.000 €

PROYECTOS PENDIENTES DE RESOLUCIÓN

Durante 2013, la Fundación ha continuado trabajando en la propuesta de nuevos proyectos de I+D+IT, con el objetivo de generar nuevas sinergias con organismos públicos y privados de la región, crear nuevos puestos de trabajo y obtener más financiación.

A continuación se muestra una relación de los proyectos que aún se encuentran pendientes de resolución.

ESTUDIO DE LAS OLAS DE CALOR EN EXTREMADURA: CLIMA ACTUAL Y FUTURO

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Plan Regional de Investigación.

CONNECT: ARQUITECTURAS DE DISTRIBUCIÓN DE CONTENIDO ENERGÉTICAMENTE EFICIENTES

Proyecto coordinado desde la Fundación COMPUTAEX y presentado al Plan Regional de Investigación.

ESTRATEGIAS PARA LA SÍNTESIS DE ESTRUCTURAS HETEROCÍCLICAS SINGULARES: NUEVA QUÍMICA DE ISONITRILOS

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Plan Regional de Investigación.

DESARROLLO DE ALIMENTOS FUNCIONALES A PARTIR DE LOS PRODUCTOS DE UNA BIO-REFINERÍA

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Plan Regional de Investigación.

ESTUDIO Y DESARROLLO DE UNA PLATAFORMA PARA EL DESARROLLO DE MASHUPS EN LA NUBE

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Plan Regional de Investigación.

DESARROLLO DE UN SISTEMA BASADO EN TRATAMIENTO AUTOMATIZADO DE DATOS Y VISIÓN POR COMPUTADOR APLICADO A IMÁGENES DE RESONANCIA MAGNÉTICA PARA EVALUAR LA CALIDAD DE JAMONES CURADOS

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Plan Nacional de Investigación.

NUEVAS REACCIONES DE ISONITRILOS COMO ESTRATEGIA PARA LA SÍNTESIS DE HETEROCICLOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Programa Estatal de Fomento de la Investigación Científica y Técnica de Excelencia del Plan Nacional de Investigación.

DESARROLLO Y OPTIMIZACIÓN DE SISTEMAS CON TECNOLOGÍA MIMO MASIVA Y SU INTEGRACIÓN EN MATERIALES DE CONSTRUCCIÓN

Proyecto coordinado desde la Universidad de Extremadura y presentado al Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad del Plan Nacional de Investigación.

CONVENIOS DE COLABORACIÓN

UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

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

Este convenio también ha permitido convocar dos becas ligadas a tareas de apoyo relacionadas con la investigación en entornos de cloud computing (desarrollo, implantación y provisión de servicios cloud) e investigación en GreenIT (optimización energética y sustentabilidad en centros de procesamiento de datos).

HP

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

CESGA

El Centro de Supercomputación de Galicia (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, compartiendo experiencias y buen hacer.

INTROMAC

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

RED DE E-CIENCIA DE ESPAÑA

La Red Nacional de e-Ciencia persigue coordinar e impulsar el desarrollo de la actividad científica en España mediante el uso colaborativo de recursos geográficamente distribuidos e interconectados mediante Internet. En la red participan usuarios y expertos en aplicaciones de diversas disciplinas científicas (biocomputación, imagen médica, química computacional, fusión, meteorología, etc.), investigadores en el ámbito de las TIC y centros proveedores de recursos, quedando así representados todos los actores de la e-Ciencia. El centro CénitS se incorpora a la red de e-Ciencia de España y se suma a la iniciativa fijada en la 2ª Reunión Plenaria de la Red Española de e-Ciencia.

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

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

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

APPENTRA SOLUTIONS

Appentra Solutions es una spin-off de la Universidade da Coruña creada en julio de 2012, cuya misión es desarrollar herramientas software de alta calidad que permitan un uso extensivo de las técnicas de computación de alto rendimiento en todas los campos de la ingeniería, la ciencia y la industria.

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

FUNDACIÓN CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE CASTILLA Y LEÓN

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

Este convenio permite la colaboración con el objeto de compartir experiencias y elaborar proyectos conjuntos en el ámbito de la I+D+i, la formación y la divulgación científica.

CENTRO DE CIRUGÍA DE MÍNIMA INVASIÓN JESÚS USÓN

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.



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN

La Fundación COMPUTAEX tiene también entre sus actividades la organización de cursos, seminarios y reuniones.

Esta sección muestra las actividades realizadas por la Fundación a lo largo de 2013 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación.

Al amparo del convenio firmado entre la Universidad de Extremadura y COMPUTAEX se ha becado en 2013 a dos estudiantes a tiempo parcial en CénitS, ligadas a tareas de investigación, desarrollo, implantación y provisión de servicios en CénitS.

BECA DE FORMACIÓN EN ENTORNOS DE CLOUD COMPUTING PARA EL DESPLIEGUE DE APLICACIONES DE SECUENCIACIÓN GENÉTICA

BECARIO

Manuel Alfonso López Rourich. Máster en Dirección TIC.

DESCRIPCIÓN

La presente beca ha tenido dos objetivos prioritarios: la propuesta y análisis de viabilidad del despliegue de servicios de ultra-secuenciación genética en un centro de supercomputación y la investigación en software para mejorar los tiempos y los resultados de un proceso de ultra-secuenciación genética.

La elevada demanda que ha experimentado la secuenciación del ADN de bajo coste ha favorecido la proliferación de diferentes tecnologías de secuenciación del alto rendimiento. La gran reducción en el tiempo de secuenciación producida por estas tecnologías, su reducido precio y las posibilidades que ofrece a médicos especialistas empuja a centros con una gran capacidad de cálculo (como es el caso de CénitS) a trabajar en el desarrollo de servicios que incluyan la ultra-secuenciación genómica.

Esta beca supone el estudio y prueba de diferentes herramientas de apoyo al proceso de ultra-secuenciación, para el alineamiento de secuencias (análisis secundario) y principalmente para la identificación de variaciones y su correspondiente anotación (análisis terciario).

OBJETIVOS

- Familiarización con el software instalado en el cluster LUSITANIA para el procesado de secuencias genéticas.
- Estudio de nuevas herramientas software para los análisis secundario y terciario del proceso de secuenciación genética.
- Establecimiento de contacto estable con personal médico dedicado a tareas de análisis genómico.
- Elaboración de comparativa de plataformas de ultra-secuenciación existentes actualmente en el mercado y estudiar la viabilidad de instalar las herramientas necesarias para su procesado en el cluster LUSITANIA.
- Recopilación y procesamiento del mayor número de pacientes posibles para crear un sistema de información de variaciones que aporte más conocimiento a los genetistas.

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Aprovechamiento de los recursos y capacidades de CénitS para lograr la realización de análisis de secuencias genéticas, y así permitir que los especialistas implicados puedan obtener resultados concretos para sus investigaciones.
- Estudio de las herramientas de procesamiento de secuencias más relevantes, así como de fuentes de información sobre genética en internet.
- Establecimiento de relaciones con el personal médico de la Unidad de Inmunología del Hospital San Pedro de Alcántara que asegura una fructífera cooperación presente y futura.
- Desarrollo de base de datos para almacenar las variaciones obtenidas en los distintos procesamientos, así como una herramienta para visualizar y filtrar variaciones con el fin de facilitar su labor a los genetistas.

BECA DE FORMACIÓN EN GREEN IT Y EN TECNOLOGÍAS DE LA INFORMACIÓN Y LA COMUNICACIÓN

BECARIOS

Pedro Rodríguez Cubero. Máster en Ingeniería Informática.

DESCRIPCIÓN

El objetivo prioritario de esta beca ha sido la participación en diversos proyectos TI en los que se encuentra embarcada la Fundación COMPUTAEX. Estos proyectos exigen la adquisición de nuevos conocimientos, así como una investigación y formación previas adecuadas.

Los proyectos a los que se ha prestado apoyo son de naturaleza muy diversa como son la eficiencia energética (Smart Green Data Center y EcoTraffic), supercomputación (Openlava) o el análisis de la situación del sector TIC en Extremadura (TaxonomTIC).

Coincidiendo con el Trabajo Fin de Máster del beneficiario de la beca se ha realizado un Estudio y análisis de las TIC en el marco directivo potenciando el trabajo desarrollado en CénitS en este sentido.

Además de las tareas antes expuestas, se ha prestado apoyo a las actividades normales de CénitS. Y se ha participado activamente en las VI Jornadas de CénitS.

OBJETIVOS

- Elaboración de informe de necesidades de supervisión de un CPD en el marco del proyecto Smart Green Data Center.
- Estudio de alternativas de software libre al gestor de colas LSF actualmente utilizado por el supercomputador LUSITANIA.
- Apoyo al proyecto Eco-Traffic de la Fundación COMPUTAEX en el estudio del tráfico en Cáceres e infografía Big Data en Smart Cities.
- Apoyo al proyecto TaxonomTIC de la Fundación COMPUTAEX en el análisis del sector TIC en Extremadura.
- Estudio y análisis del papel de los directivos en empresas del sector TIC.

OBJETIVOS ALCANZADOS

- Elaboración de informe que estudia y analiza el software y hardware disponible para dotar de inteligencia y eficiencia un CPD moderno.
- Realización de estudio sobre alternativas de software libre para administrar las colas del supercomputador LUSITANIA.
- Implantación de la solución *openlava* en cluster de desarrollo.
- Identificación y localización de las rotondas en Cáceres y estudio del consumo y gases expulsados por los vehículos para el proyecto Eco-Traffic.
- Elaboración de posible clasificación para las actividades asociadas al sector TIC con la finalidad de localizar las empresas que constituyen dicho sector de forma más sencilla, en apoyo al proyecto TaxonomTIC.
- Elaboración de encuesta destinada a los CEOs del sector TIC.

ORGANIZACIÓN Y COLABORACIÓN EN EVENTOS

6ª JORNADAS CÉNITS

Las 6ª Jornadas Cénits se celebraron los días 12 y 13 de diciembre de 2013 en el Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, en Cáceres. La apertura se realizó a las 10:00 por parte de Sergio Velázquez Vioque (Secretario General de Empleo, Actividad Empresarial e Innovación Tecnológica), Francisco Sánchez Margallo (Director Científico del CCMI) y José Luis González Sánchez (Director General de la Fundación COMPUTAEX).

Las jornadas reunieron a más de 50 asistentes entre empresarios, investigadores y alumnos, a lo largo de sus 15 horas de duración. Además, se impartió un taller de aplicación práctica de *cloud computing* con el Supercomputador LUSITANIA en las instalaciones de CénitS y se organizó la mesa de debate *¿El sector TIC un nuevo modelo productivo?*, en la que intervinieron los siguientes ponentes: Luis Miguel Manzano Sánchez, Fernando Suárez Lorenzo, Fernando Medina Cebrián, José Luis González Sánchez.

Las jornadas concluyeron con un espectáculo de magia, a cargo del Ingeniero Técnico en Informática "Mago Lope": *La Magia de la Informática*. El programa contó con las siguientes ponencias:

- Retos y Tendencias en HPC. José Luis González Sánchez. Director General de la Fundación COMPUTAEX.
- *Aplicación de las nuevas tecnologías en formación e investigación quirúrgicas*. Francisco Sánchez Margallo. Director Científico del CCMI.
- *Big Data. Un futuro hoy*. Francisco Javier Antón Vique. Presidente de la Fundación Big Data.
- *Supercomputación y Ultrasecuenciación: A la búsqueda de genes patogénicos*. Luis Fernández Pereira. Director de la Unidad de Inmunología Clínica del Hospital San Pedro de Alcántara.
- *Cáceres y ciudades inteligentes: Estrategia ante Horizon 2020*. Rebeca Domínguez Cidoncha. Jefe de Sección de Innovación de la Concejalía de Innovación, Fomento y Desarrollo del Ayuntamiento de Cáceres.
- *Propagación electromagnética en entornos de grandes dimensiones. Supercomputación con técnicas FDTD y de Óptica Geométrica*. Fernando Tomás Pachón García. Personal Docente e Investigador de la Universidad de Extremadura.
- *SIATDECO: La tecnología al servicio de las energías ecológicas*. Blanca Clemente Sánchez. Técnico de investigación de CénitS-COMPUTAEX.



- *TaxonomTIC: Taxonomía de un sector clave.* José Luis González Sánchez. Director General de la Fundación COMPUTAEX.
- *¿Para qué puede ser útil un ingeniero de telecomunicación hoy en día?* Luis Miguel Manzano Sánchez. Presidente de la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación.
- *Oportunidades y retos de la Ingeniería Informática en la sociedad actual.* Fernando Suárez Lorenzo. Vicepresidente del Consejo General de Colegios Oficiales de Ingeniería Informática.

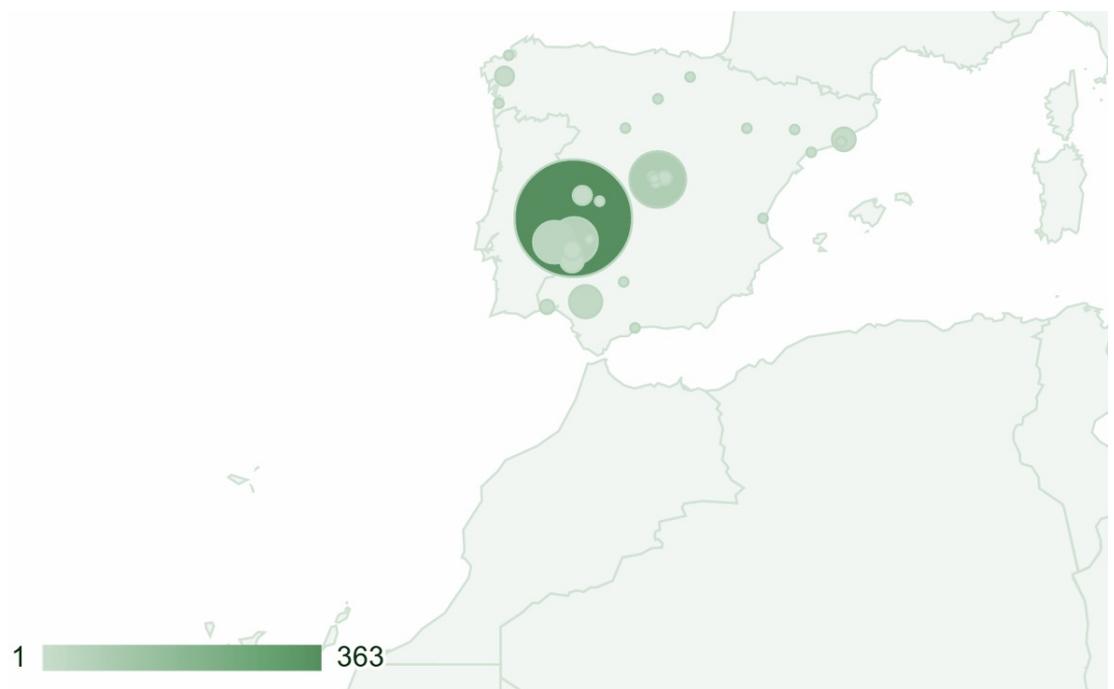
La Fundación COMPUTAEX comenzó la difusión del evento el día 27 de Noviembre a través de la página web oficial y los medios sociales a su disposición, obteniendo un impacto notable en los distintos medios (sala de prensa del Gobierno de Extremadura, EuropaPress, Canal Extremadura Noticias, Onda Cero, Cadena Cope, etc.).



El tráfico web generado por el evento supuso un 5,02% del tráfico anual de la web de la fundación. Los datos más relevantes se muestran en la siguiente tabla:

PÁGINAS VISTAS	VISITAS	VISITAS NUEVAS (%)	VISITAS HABITUALES (%)
2.203	664	52	48

Además, el evento supuso un 38,58% del tráfico en el periodo comprendido entre el inicio de la difusión y fin de año, obteniéndose además un incremento del 38,53% en la duración media de las visitas, un 19,19% más de páginas vistas por visita y un descenso del 22,61% en el porcentaje de rebote. A continuación se muestra la procedencia de las visitas recibidas:



EISTER: E-INFRAJET SUSTAINABILITY TRAINING AND EDUCATIONAL RESOURCE

El 19 de noviembre de 2013, COMPUTAEX acogió el segundo encuentro presencial de representantes de países europeos con experiencia en Green ICT, con el fin de poner en común los avances alcanzados en el subproyecto EISTER del proyecto e-InfraNet y marcar los sucesivos puntos de trabajo. La visita permitió a los asistentes conocer el centro CénitS, las actividades que realizan sus integrantes y las instalaciones que albergan el supercomputador LUSITANIA.

e-InfraNet reúne a los siguientes socios de países europeos con experiencia en Green ICT: University College of West Flanders (Howest, Bélgica), University College (Dublin, Irlanda), Leeds Metropolitan University (Leeds, Reino Unido) y Technical University of Lisbon (Lisboa, Portugal). Además cuenta con socios expertos en el desarrollo de la educación a distancia y materiales on-line: Riga Technical University (Riga, Letonia) y Open Universiteit (Países Bajos) y con expertos en centros de datos de Kajaani University of Applied Sciences (Kajaani, Finlandia).

El proyecto e-InfraNet surge de la necesidad de impulsar políticas europeas que refuercen la colaboración entre las comunidades investigadoras, con el fin de aprovechar las instalaciones científicas colectivas y mejorar la sostenibilidad ambiental de dichas infraestructuras.

El objetivo es desarrollar un programa de educación avanzada, destinado a profesionales de TI, que permita adquirir los conocimientos y habilidades necesarias para desarrollar estrategias de mantenimiento y actualización de las infraestructuras científicas para garantizar su sostenibilidad en el futuro.



I FERIA TECNOLÓGICA

La Escuela Politécnica de Cáceres organizó la I Feria Tecnológica durante la semana del centro, en la que participaron empresas e instituciones de la región con el fin de realizar charlas informativas y acercar las actividades que desarrollan a la comunidad estudiantil, docente e investigadora.

La Fundación COMPUTAEX estuvo presente con un stand en el que dio a conocer el supercomputador LUSITANIA y las actividades realizadas en el centro CénitS. Además participó en la mesa titulada "Las empresas de base tecnológica en Extremadura en el contexto actual".

Feria Tecnológica
Festividad de la Escuela Politécnica 2013

Lunes 6 de mayo
10h-19h
En el Pabellón de Informática:

- 10:30-10:45 Apertura (Acto de inauguración y bienvenida) Vicerrectora de la UEX "Universidad Digital" Carmen García González
- 10:45-11:00 Exposición: 20 empresas (15 minutos exposición + 2 minutos preguntas): 5 dispositivos móviles: Aroca, Computex, Censatis, India, Oficina de Orientación Laboral, Bolero, DiMultimedia Legaraj, Coocrea, Colegio Profesional de Ingenieros en Telecomunicación, Hometera, Heuritic, iSoft, Indra, HeurITec
- 11:00-11:20 Descanso café
- 11:20-11:40 Exposición: 11 empresas (15 minutos exposición + 2 minutos preguntas): 5 dispositivos móviles: Idéas, Epilux, Truella, Senolog, Itea, Infonotek, Colegio Profesional de Ingenieros en Informática, Aclibidat, app3a
- 11:40-12:00 CheckPoint patrocinado por la empresa CheckPoint
- 12:00-12:15 CheckPoint
- 12:15-12:30 Debate-Tertulia con mesa redonda: "Las empresas de base tecnológica en Extremadura en el contexto actual"
- 12:30-12:45 Botagar-CI para simulación proceso de selección empresa Indra
- 12:45-13:00 Presentación de Censatis: Dependencias en SmartCities + Comunidades de Operadores en la Administración Pública
- Completar simulación de siguiente



NOCHE DE LOS INVESTIGADORES 2013

La Noche de los Investigadores es un proyecto financiado por el 7º Programa Marco de Investigación y Desarrollo 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.

El programa de la edición de 2013 se celebró el 27 de septiembre simultáneamente en los campus de Badajoz y Cáceres y contó con cerca de un centenar de actividades entre talleres científicos, concursos, exposiciones, visitas a los laboratorios y los observatorios de meteorología o astronomía así como micro-conferencias.

La Fundación COMPUTAEX se unió a la celebración y presentó el taller titulado "Dadme un punto de red y Mo[Veré] el mundo". En él se trasladó a la audiencia la gran herramienta en que se han convertido los grandes centros de cómputo para enfrentarse a los más importantes retos que tiene identificados la humanidad.

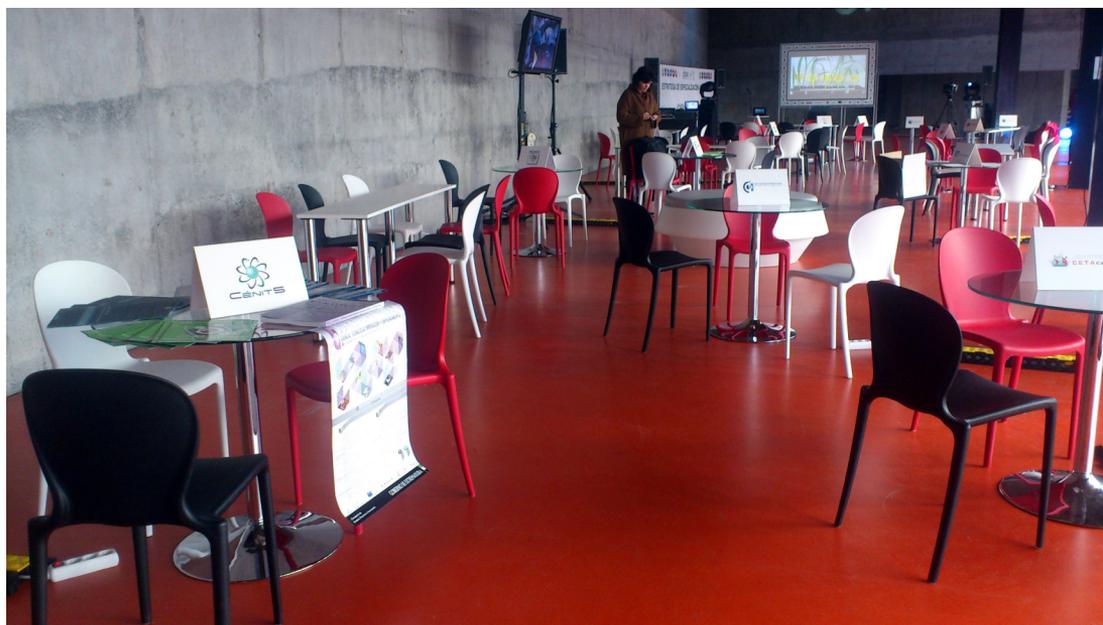
Además, se presentaron ejemplos prácticos y aplicados de la forma en que se pueden gestionar estos centros para dar soporte a las necesidades tecnológicas que los actuales ciudadanos tienen en su vida diaria.



SMART EXTREMADURA 2020

El 4 de diciembre de 2013, en el Palacio de Congresos Manuel Rojas de Badajoz, se celebró "Smart Extremadura 2020", un proceso abierto para la planificación estratégica de la Región en materia de I+D+i, que se convirtió en un punto de encuentro del empresariado, la sociedad extremeña y los agentes clave de innovación donde exponer ideas y conclusiones con las que construir una Extremadura de presente y futuro.

El centro CénitS participó, junto a otros centros de I+D pertenecientes al Sistema Extremeño de Ciencia, Tecnología e Innovación (SECTI), dentro del taller *¿DÓNDE?*, dirigido principalmente a empresas, para facilitar un primer contacto de las mismas con los centros de I+D+i extremeños, con el objetivo de que se dieran a conocer los servicios disponibles en cada centro, así como las vías de comunicación con los mismos de cara a satisfacer sus necesidades en I+D+i.



ASISTENCIA A CONGRESOS, JORNADAS, CURSOS Y EVENTOS

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
31/01/13	Madrid	Cloud Computing 2013: Infraestructuras en la nube más ágiles, flexibles y eficientes	Asistente
07/02/13	Madrid	Premios DINTEL: Alta Dirección 2013	Asistentes
08/02/13	Madrid	Presentación Norma 2013 ICREA sobre Data Centers	Asistentes
19/02/13	Cetiex, Badajoz	II Ferial Internacional de las Méridas del Mundo: Puente hacia Latinoamérica	Asistente
20/02/13	Badajoz	Foro ONE: Organizando una nueva Extremadura	Asistentes
07/03/13	CCMIJU, Cáceres	GiraTIC Salud	Asistentes
07/03/13	Mérida	Jornada informativa: Programa Feder Innterconecta para Extremadura	Asistentes
14/03/13	Fundecyt, Badajoz	Jornada sobre Oportunidades Europeas: Enterprise Europe Network	Asistentes
18/03/13	Mérida	Proyecto NEURONA	Asistente
21/03/13	Cáceres	Café Científico	Asistentes
27/03/13 30/03/13	Olhao, Portugal	WorldCist'13	Ponente
11/04/13	Madrid	III Seminario Data Centers	Asistentes
12/04/13	Edificio Embarcadero, Cáceres	Desarrollo ágil de diseño de productos y servicios	Asistentes
13/04/13	Cáceres y Badajoz	Adalid: charla sobre innovación	Asistentes
16/04/13	Mérida	Taller Sectorial Agroindustria Estrategia ONE	Participantes
24/04/13	CCMIJU, Cáceres	Foro de Innovación y Crecimiento	Asistentes
25/04/13	Embarcadero, Cáceres	Taller Sectorial Turismo Estrategia ONE	Participantes
26/04/13	Mérida	Tecnologías y Servicios Públicos en la Administración Extremeña del siglo XXI	Asistentes
03/05/13	Mérida	Coordinación proyecto SIATDECO	Participantes
06/05/13	EPCC, Cáceres	Feria TIC	Participantes
06/05/13	Badajoz	Reunión Asociación Española de Fundaciones	Asistentes
07/05/13	Badajoz	Taller Sectorial Energía Estrategia ONE	Participantes
08/05/13	Badajoz	Taller Sectorial Recursos Naturales Estrategia ONE	Participantes
08/05/13	Madrid	Revista SocInfo	Asistentes

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
15/05/13	Badajoz	O4i	Asistentes
17/05/13	Badajoz	AFEx	Asistentes
21/05/13	Madrid	Portfolio soluciones para CPD: HP-Moonshot	Asistentes
23/05/13	Embarcadero, Cáceres	Taller de captación de Fondos Europeos	Asistentes
24/05/13	EPCC, Cáceres	Conferencia "Stream-Based Reconfigurable Computing"	Asistentes
24/05/13	Badajoz	Gala Revista Grada	Asistentes
29/05/13	EPCC, Cáceres	Cátedra Telefónica: Tecnologías Aplicadas a la Eficiencia Energética	Asistentes
05/06/13	Badajoz	Taller TIC Foro ONE	Asistentes
12/06/13	Madrid	DatacenterDynamics Converged	Asistentes
13/06/13 15/06/13	Leipzig, Alemania	HP-Cast 20	Asistentes
14/06/13	Cáceres	Reunión RECI	Participantes
19/06/13	Mérida	Sociedad Digital Tecnológica sE[12	Asistentes
19/06/13 20/06/13	Lisboa, Portugal	CISTI 2013	Ponentes
24/06/13	Madrid	Fundación Orange	Asistentes
04/07/13	PCTEx, Badajoz	Coordinación del proyecto RITECA II	Participantes
04/07/13 05/07/13	Santander	Seminario para la gestión de proyectos del programa SUDOE	Asistentes
09/07/13	Mérida	HP	Asistentes
26/08/13 27/08/13	Lovaina, Bélgica	Reunión de coordinación de los socios de EISTER - e-InfraNet	Participantes
19/09/13 20/09/13	Madrid	IBERGRID 2013	Ponentes
27/09/13	EPCC, Cáceres	Noche de los investigadores	Colaboradores
02/10/13	Santa Cruz de Tenerife	Presentación ITER	Asistentes
03/10/13	PCTEx, Badajoz	Jornadas de Intermediación entre los Centros, Grupos de Investigación y Empresas	Asistentes
17/10/13	Madrid	HP-Cast Ibérica 2013	Ponencia
26/10/13 28/10/13	Cáceres	DrupalCamp 2013	Patrocinadores Asistentes
27/10/13	Granada	JITEL	Asistentes
31/10/13	PCTEx, Badajoz	Reunión de coordinación de socios del proyecto SIATDECO	Ponentes

FECHA	LUGAR	NOMBRE	PARTICIPACIÓN
05/11/13	PCTEx, Badajoz	Jornada formación proyecto NEURONA	Asistencia
18/11/13 19/11/13	CénitS, Trujillo	Reunión de coordinación de los socios de EISTER - e-InfraNet	Organizadores
19/11/13	PCTEx, Badajoz	Jornada final del proyecto RITECA II	Ponentes
20/11/13	Madrid	Congreso TESIC	Asistentes
20/11/13	Madrid	Foro del sector TIC	Asistentes
20/11/13	Madrid	AsLAN	Asistentes
27/11/13	PCTEx, Badajoz	Taller estrategia RIS3	Asistentes
29/11/13	Cáceres	Premios AEXIT	Premiados
03/12/13	EPCC, Cáceres	SmartPolitech	Asistentes
04/12/13	Badajoz	SmartExtremadura 2020	Asistentes
05/12/13	INTAEX, Badajoz	Jornada de formación en las herramientas TIC - Proyecto RITECA II	Asistentes
12/12/13 13/12/13	Cáceres	6ª Jornadas CénitS	Organizadores
16/12/13	Santiago de Compostela	CESGA	Asistentes
20/12/13	Mérida	Constitución grupo H2020	Asistentes

PORTAL WEB

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

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

FUNCIONES DEL PORTAL WEB

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

CONTENIDOS DEL PORTAL WEB

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



EVOLUCIÓN DEL PORTAL WEB

El portal web ha evolucionado desde 2009 hasta el momento, debido a la aparición de nuevas necesidades, planteamientos y mejoras del servicio existente. El trabajo realizado puede enmarcarse en las siguientes etapas:

- **Primera etapa:** rediseño estrictamente visual. Mientras se estudiaba cómo satisfacer los nuevos requerimientos y afrontar las posibles mejoras que se podían aplicar, se decidió realizar pequeños cambios para ofrecer al usuario una interfaz más agradable: se ajustaron los tamaños de letra, colores, imágenes, iconos y la cabecera.
- **Segunda etapa:** rediseño estructural y visual. Las limitaciones impuestas por el software utilizado hasta el momento, conllevó un replanteamiento sobre el uso actual y futuro del portal web. Para afrontar nuevas funcionalidades, se decidió optar por una solución *open source* más versátil, en base al estudio y desarrollo de disciplinas que abarcaban la arquitectura de la información, accesibilidad, usabilidad y SEO. Además de la aplicación de las disciplinas anteriores, se elaboró un plan estratégico que comprendía la migración de los datos de la web existente a la nueva plataforma y el análisis y reajuste de las configuraciones previas de los servidores web y de base de datos.
- **Tercera etapa:** optimización general a nivel técnico. Se han realizado mejoras en los niveles de accesibilidad y usabilidad de la plataforma para garantizar el acceso desde cualquier tipo de dispositivo electrónico. Para ello, los esfuerzos se han centrado en reducir los tiempos de respuesta y la carga de información necesaria en los distintos apartados de la web.
- **Cuarta etapa:** actualización a la rama superior más estable. Tras cuatro años utilizando drupal en su versión 6, con más de 650 entradas (noticias, eventos, publicaciones,...) y más de 750 archivos (imágenes, videos, documentos,...), dados los nuevos requerimientos del centro, se decidió realizar una actualización mayor, en la que se migró todo el contenido existente a drupal en la versión 7. De este modo, se garantiza la evolución de la plataforma y la provisión de servicios para la que fue concebida.

SERVICIO BASADO EN CLOUD COMPUTING

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

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

El proceso de migración constó de tres fases bien diferenciadas:

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

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

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

En 2013 se actualizó el sistema operativo de la máquina virtual que aloja la plataforma web para aportar más seguridad, estabilidad y velocidad.

MEJORAS DEL PORTAL WEB

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

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

Estos ajustes se han traducido principalmente en una importante mejora de la velocidad media de carga de las páginas web y en una reducción del ancho de banda necesario para servirlos. De este modo, aunque el número total de visitas crece cada año, el tráfico generado para cada conexión de usuario es menor, suponiendo un importante descenso entre 2010 y 2011 (época en la que se hicieron la mayoría de los cambios), para estabilizarse y evolucionar de forma más lineal hasta 2013.

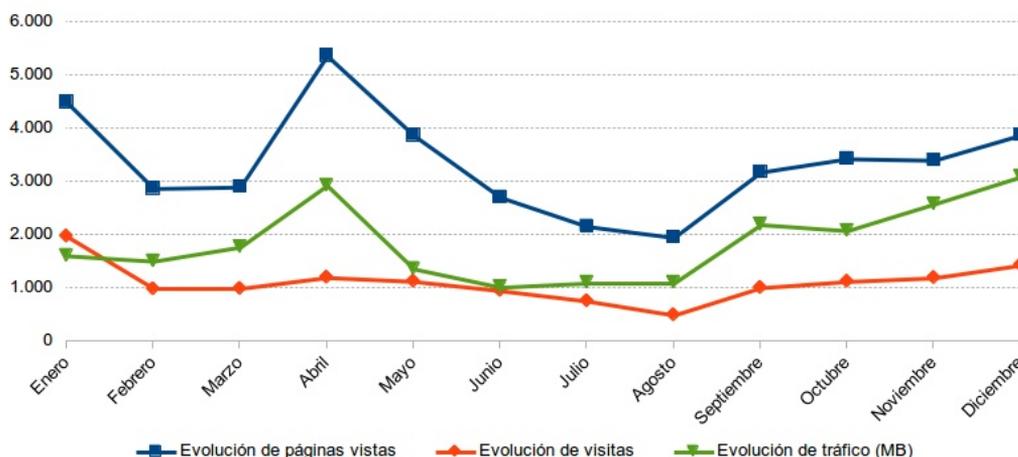


DATOS ESTADÍSTICOS

A continuación se muestran los datos que se han estimado más relevantes para el año 2013.

EVOLUCIÓN MENSUAL

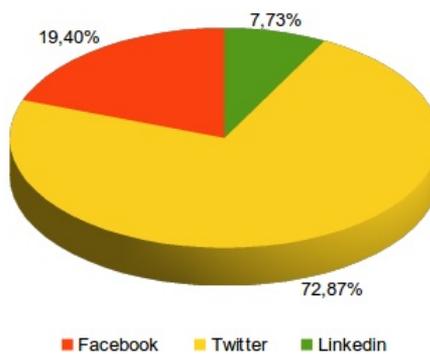
En la siguiente tabla, se muestran los datos de acceso a la web corporativa organizados por meses y según las variables más representativas:



FUENTE DE TRÁFICO

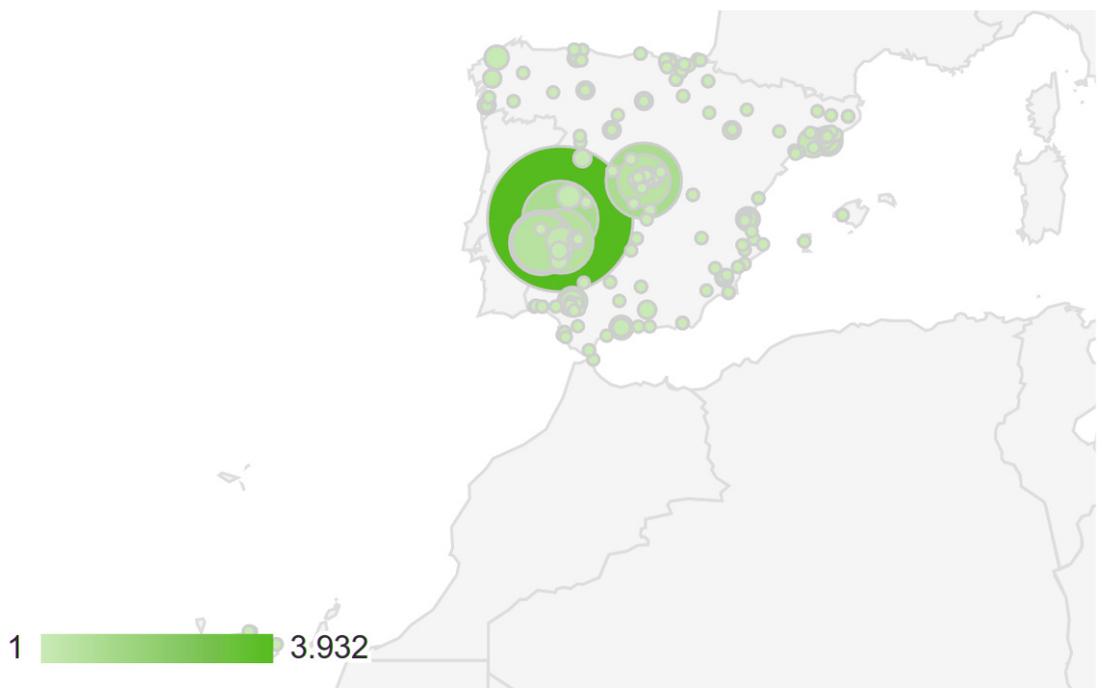
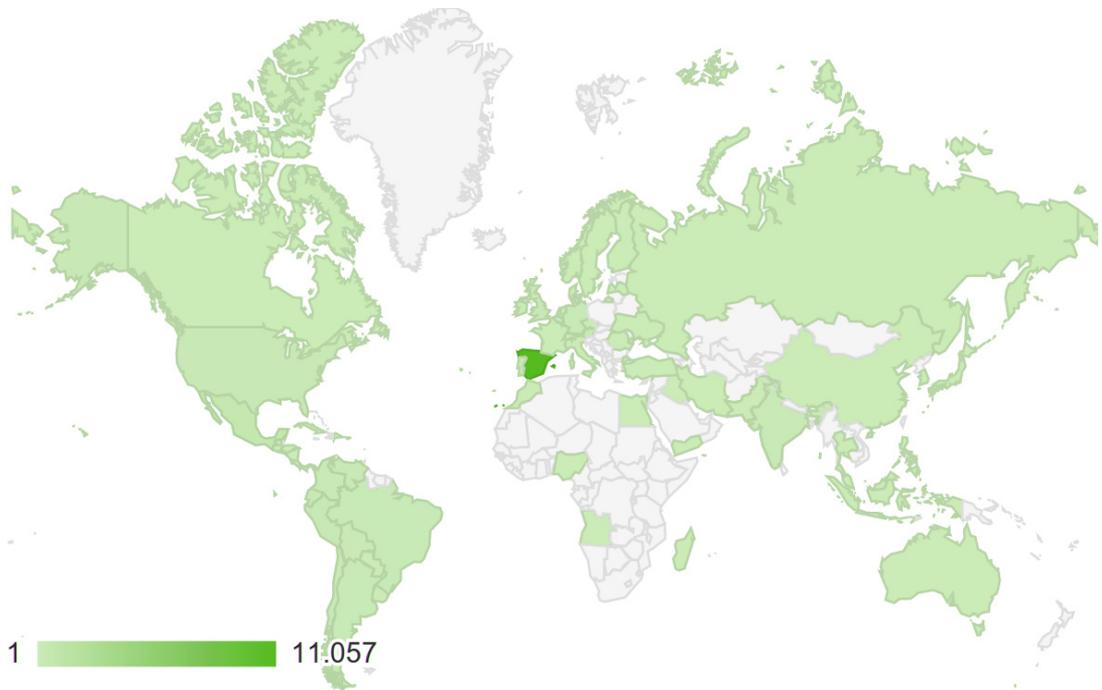
A continuación se muestra cómo acceden los usuarios al ecosistema web. El desarrollo en base a los estándares, las buenas prácticas en cuestiones de accesibilidad y las técnicas SEO han mejorado el porcentaje de accesos a través de los distintos motores de búsqueda y tráfico directo.

El esfuerzo de difusión de la actividad de la Fundación COMPUTAEX y CénitS a través de las redes sociales también ha contribuido notablemente a las visitas a la web del centro.



UBICACIÓN GEOGRÁFICA

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

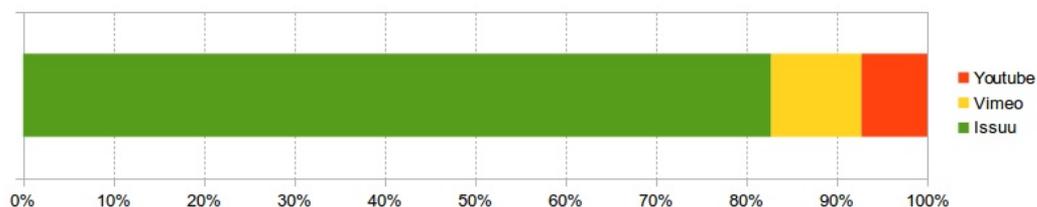
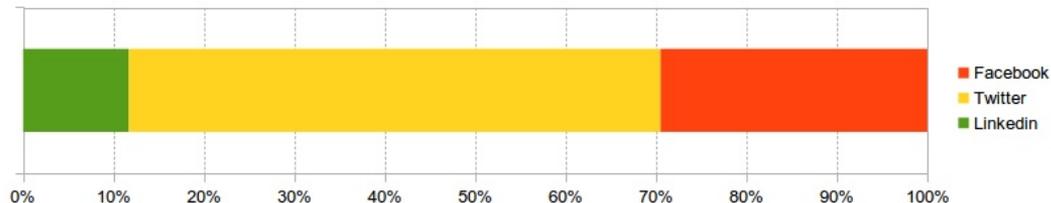


REDES SOCIALES

Conociendo la importancia de las redes sociales en cuestiones de difusión de información, se ha seguido trabajando en la presencia en las distintas redes sociales más populares con el fin de dar a conocer las noticias más relevantes entorno al centro CénitS y a las investigaciones e innovaciones que surgen del uso de los recursos del supercomputador LUSITANIA:

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

A continuación se muestran los datos más significativos de las distintas redes sociales, agrupadas éstas por similitud. El impacto hace relación al número de veces que los usuarios han visitado o interactuado de algún modo con los distintos perfiles.



DIFUSIÓN Y DIVULGACIÓN

A lo largo del año se han recibido en el Centro más de 300 visitantes. La mayor parte de las visitas recibidas provienen de empresas, investigadores, innovadores, centros tecnológicos, políticos, medios de comunicación, universitarios y estudiantes de educación secundaria. Gran parte de los visitantes se ven atraídos por las vías de colaboración que pueden establecer con CénitS, por los servicios que pueden ofrecer y/o recibir y por el conocimiento del Centro y del supercomputador LUSITANIA.

También se presentó la Memoria Anual de 2012, que puede consultarse en la web oficial de la Fundación.





ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA

RECURSOS TECNOLÓGICOS

La Fundación COMPUTAEX tiene como objetivo básico la creación, explotación y gestión de CénitS, el Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación, cuyo objeto es fomentar, difundir y prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a las comunidades investigadoras extremeñas, o a aquella empresa o institución que lo solicite y de esta forma contribuir mediante el perfeccionamiento tecnológico y la innovación, a la mejora de la competitividad de las empresas.

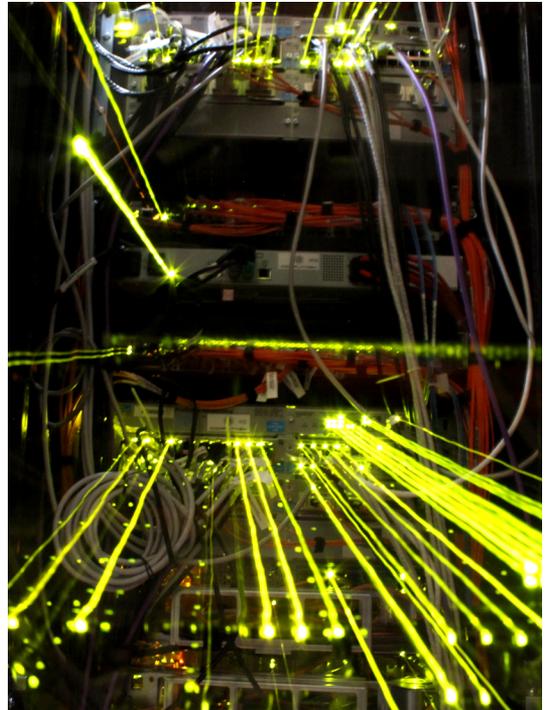
Aunque el cómputo masivo es la principal característica de LUSITANIA, CénitS cuenta con bastantes más recursos tecnológicos que se usan como herramientas para otras tareas y servicios que no son únicamente la supercomputación.

HARDWARE

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

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

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



SERVIDORES PRINCIPALES

La base del supercomputador LUSITANIA está formada por dos servidores idénticos HP Integrity SuperDome SX2000. Estos dos servidores cuentan, cada uno, con 64 procesadores Intel Itanium 9140M Dual-Core a 1.6GHz (128 procesadores lógicos por servidor). Asimismo, cada servidor está equipado con 1 TB de memoria RAM principal distribuida de manera uniforme entre las 16 celdas que conforman el servidor SuperDome. En términos de conectividad para la infraestructura de almacenamiento y de comunicaciones, los servidores SuperDome disponen de cuatro módulos de conexión PCI-X cada uno, donde cada servidor aloja los siguientes elementos:

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

Con todos estos elementos, los SuperDome son capaces de conectarse entre sí gracias a las tarjetas 10GbE formando una red de cómputo de altas prestaciones. Además, interactúan con los servidores de almacenamiento en red y las cabinas de almacenamiento a través de una red de fibra óptica. También se interconectan a las redes de servicio, usuarios y los dispositivos de E/S donde residen los sistemas operativos y las particiones de scratch que almacenan los resultados parciales de los proyectos. Cada servidor SuperDome utiliza como almacenamiento cuatro unidades HP StorageWorks MSA50 para el sistema operativo y para la partición de scratch. El sistema operativo tiene asignada una unidad de 146GB configurada con protección RAID1 y el resto del espacio está configurado en RAID6 + RAID 0 que conforma una única unidad de 3 TB. De esta forma se consigue una alta protección para los ficheros del sistema operativo y acceso de gran velocidad para los datos temporales de ejecución de los proyectos.

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



SERVIDORES AUXILIARES

La necesidad de uso de servidores auxiliares surge para facilitar el acceso a la infraestructura general del supercomputador y para realizar una serie de tareas de apoyo, que brindan una experiencia mucho más cómoda y satisfactoria a los usuarios. A continuación, se presentan las características técnicas de los servidores auxiliares del supercomputador LUSITANIA, clasificados en función de sus tareas:

SERVIDORES DE LOGIN

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

SERVIDORES DE DESARROLLO

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

SERVIDORES DE GESTIÓN Y ADMINISTRACIÓN

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

SERVIDORES DEL SISTEMA DE ALMACENAMIENTO

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

SERVIDORES DEL SISTEMA DE CLOUD COMPUTING

Un servidor IBM xSeries 345 equipado con dos procesadores Intel Xeon Dual Core y 2,5 GB de memoria RAM, soportando la infraestructura de gestión del sistema de cloud computing.

Dos servidores HP ProLiant DL380 G7 con 2 procesadores Intel Xeon Quad Core E5630, 32 GB y 64 GB de memoria RAM y 2 discos SAS de 146 gigabytes en configuración RAID 1. Un servidor HP ProLiant DL380 G5 con procesador Intel Xeon Quad-Core E5450, 16 GB de memoria RAM y 2 discos SAS de 146 GB en RAID 1. La función de estos servidores es la de proporcionar un sistema flexible que permita albergar servicios independientes, optimizando el uso de los recursos existentes en LUSITANIA.

Dos servidores HP ProLiant BL465c Gen8 Server Blade con dos procesadores AMD Opteron 6276 (2.3GHz/16-core/16MB), 256 GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 300 GB en cada servidor. También se dispone de dos servidores HP ProLiant BL465c Gen8 Server Blade con dos procesadores AMD Opteron 6366 HE (1.8GHz/16-core/32MB) de bajo consumo, 128 GB de RAM y dos discos duros SAS de 300 GB en cada servidor.

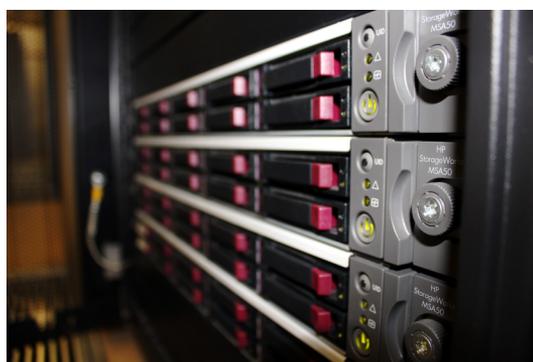
Estas cuatro máquinas conforman el cluster principal de virtualización con XenServer y están configuradas para permitir una alta disponibilidad en el servicio que prestan, albergando alrededor de 30 máquinas virtuales para distintos servicios en producción, preproducción y pruebas.

SERVIDOR DE LICENCIAS

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

UNIDADES DE PROCESAMIENTO GRÁFICO (GPUs)

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



ALMACENAMIENTO

El sistema de almacenamiento se compone de dos equipos HP StorageWorks 8100 Enterprise Virtual Array que proporcionan 265 TB de almacenamiento a través de una red de fibra óptica de alta velocidad a 4 Gbps. Esta red tiene como elementos de comunicación centrales dos switches HP StorageWorks 8/40 SAN Switch con 40 puertos cada uno y capacidad para operar de 8 Gbps.

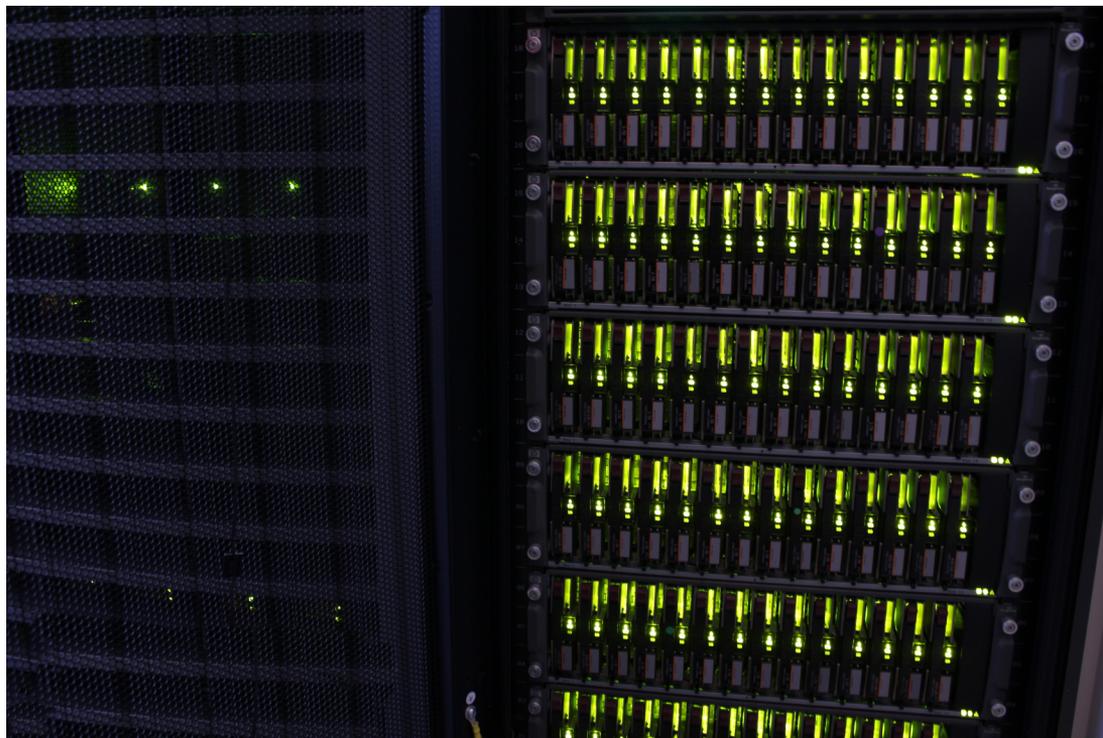
Cada unidad de almacenamiento está equipada con dos controladoras HSV210-B, cuatro Loop Switches FC de alta velocidad y 12 bandejas de discos M5314C con capacidad para 14 discos cada una, permitiendo un total por cabina de 168 discos, es decir, un total en la infraestructura de 336 discos:

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

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

El almacenamiento se distribuye a los servidores a través de un cluster de almacenamiento HP Polyserve Matrix Server, capaz de dar acceso a las unidades de almacenamiento EVA8100 mediante el sistemas de ficheros en red NFS, permitiendo el uso simultáneo de todos los servidores pertenecientes a la red de cómputo.

Este cluster HP StorageWorks Polyserve Clustered Filesystem Gateway está formado por dos servidores idénticos HP ProLiant DL380 G5 equipados con dos procesadores Intel Xeon QuadCore y 16 GB de memoria RAM, 6 tarjetas de red Gigabit Ethernet y 2 tarjetas Fibre Channel Qlogic 2432 para acceso al almacenamiento EVA8100.



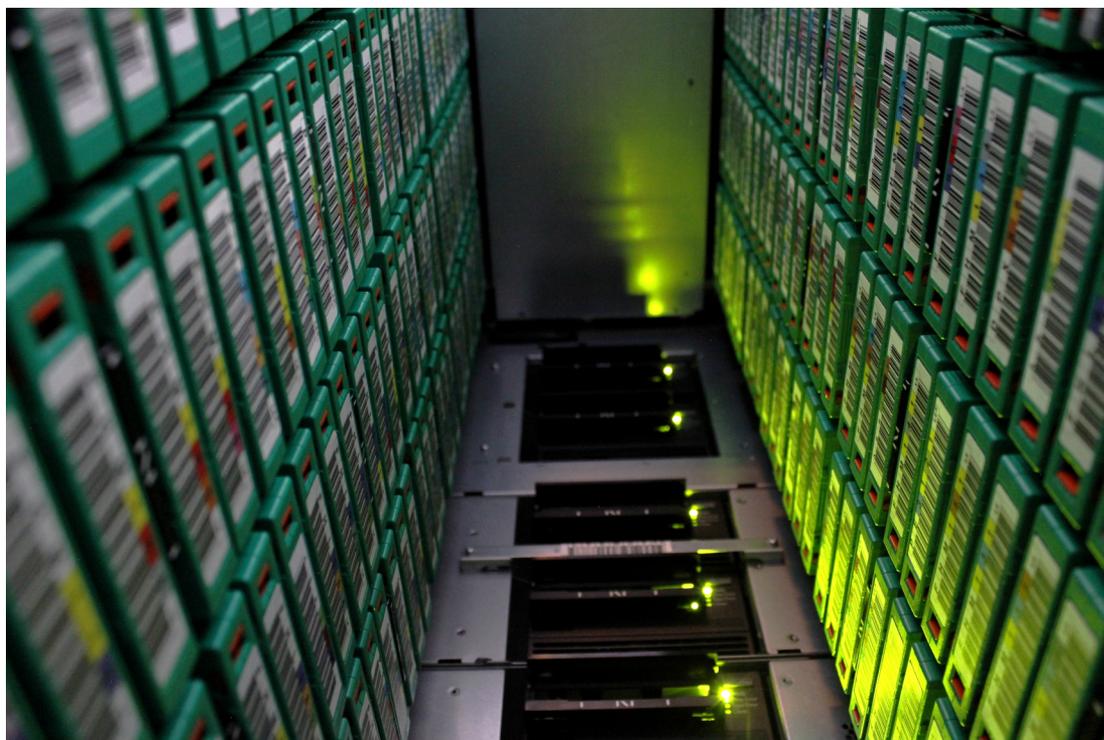
COPIAS DE SEGURIDAD

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

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

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

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



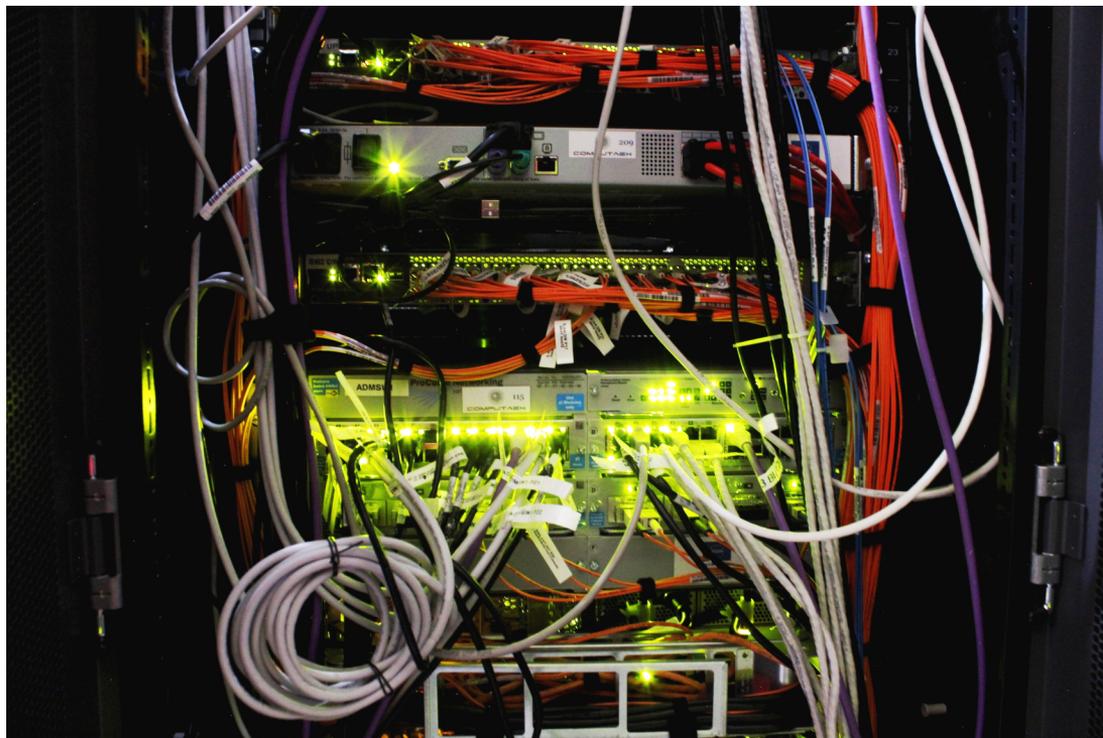
RED

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

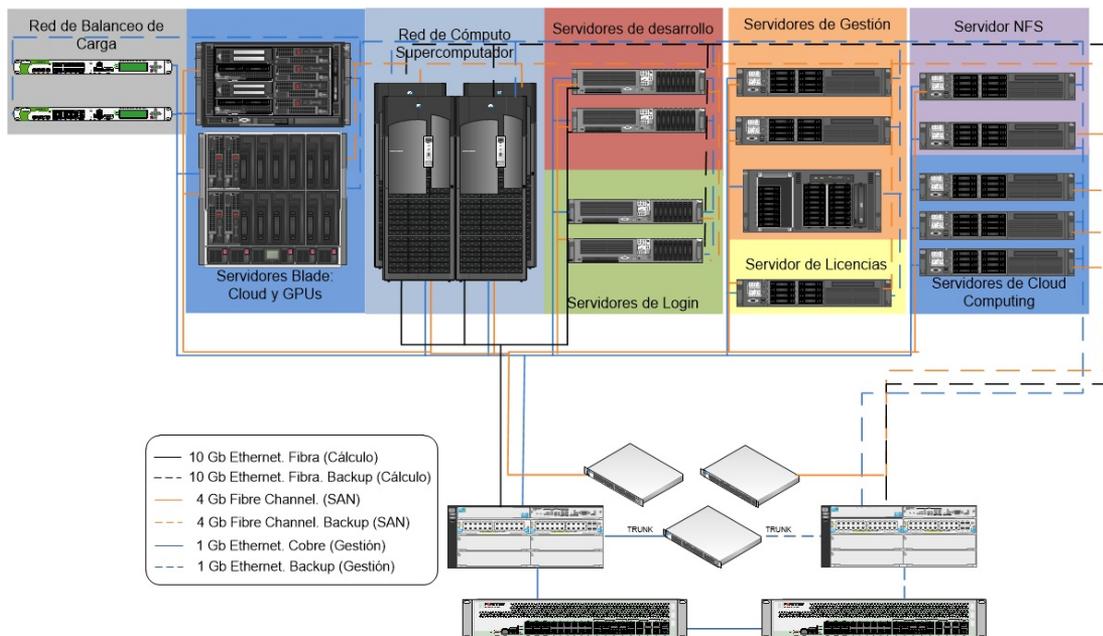
La conectividad del Centro con el exterior se resuelve a través de la Red Científico Tecnológica de Extremadura. Internamente, el supercomputador LUSITANIA cuenta con elementos de electrónica de red, gestión de ancho de banda y protección contra accesos no deseados, todos ellos redundados que garantizan la conectividad entre todos los elementos de la instalación y con el mundo exterior, incluyendo una fuerte tolerancia a fallos.

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

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



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



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

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

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

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

La principal novedad en la infraestructura de red del centro durante 2013 ha sido la sustitución de los dispositivos de seguridad perimetral, adquiriéndose los firewall de Fortinet modelo 1000C. Estos dispositivos proporcionan un mayor número de puertos de red (*fibre channel* y *ethernet*), discos duros para almacenamiento interno de los ficheros de log del sistema y un mayor ancho de banda.

CONSUMOS

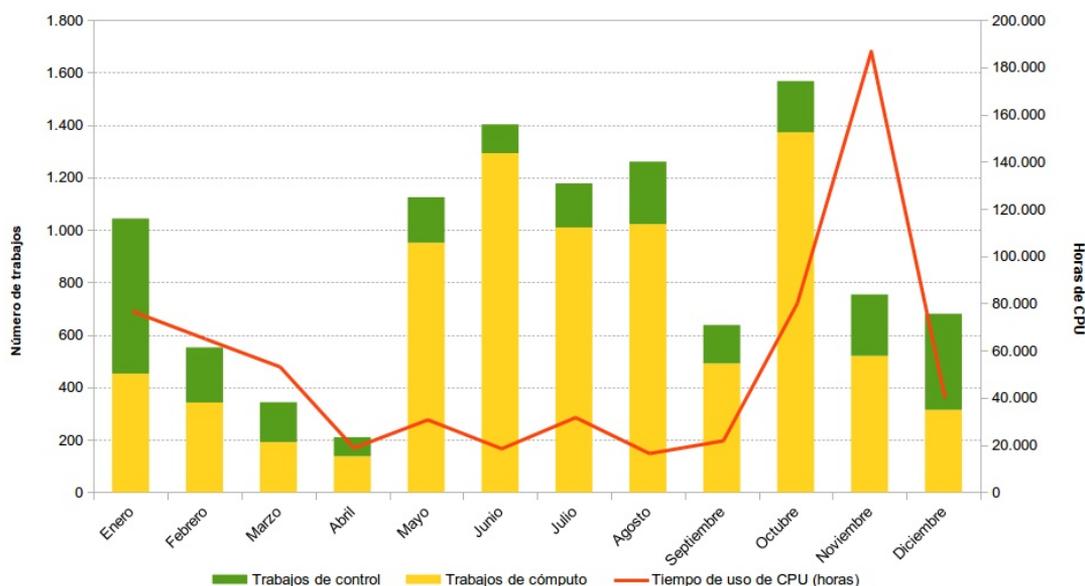
USO DE RECURSOS

Durante el año 2013, numerosos técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura hardware de LUSITANIA. A continuación, se muestran los datos relacionados con el consumo de los recursos en los nodos principales, que son los que soportan la mayoría de la carga de computación del Centro.

Se han ejecutado un total de 10.749 trabajos de usuario, divididos en dos categorías:

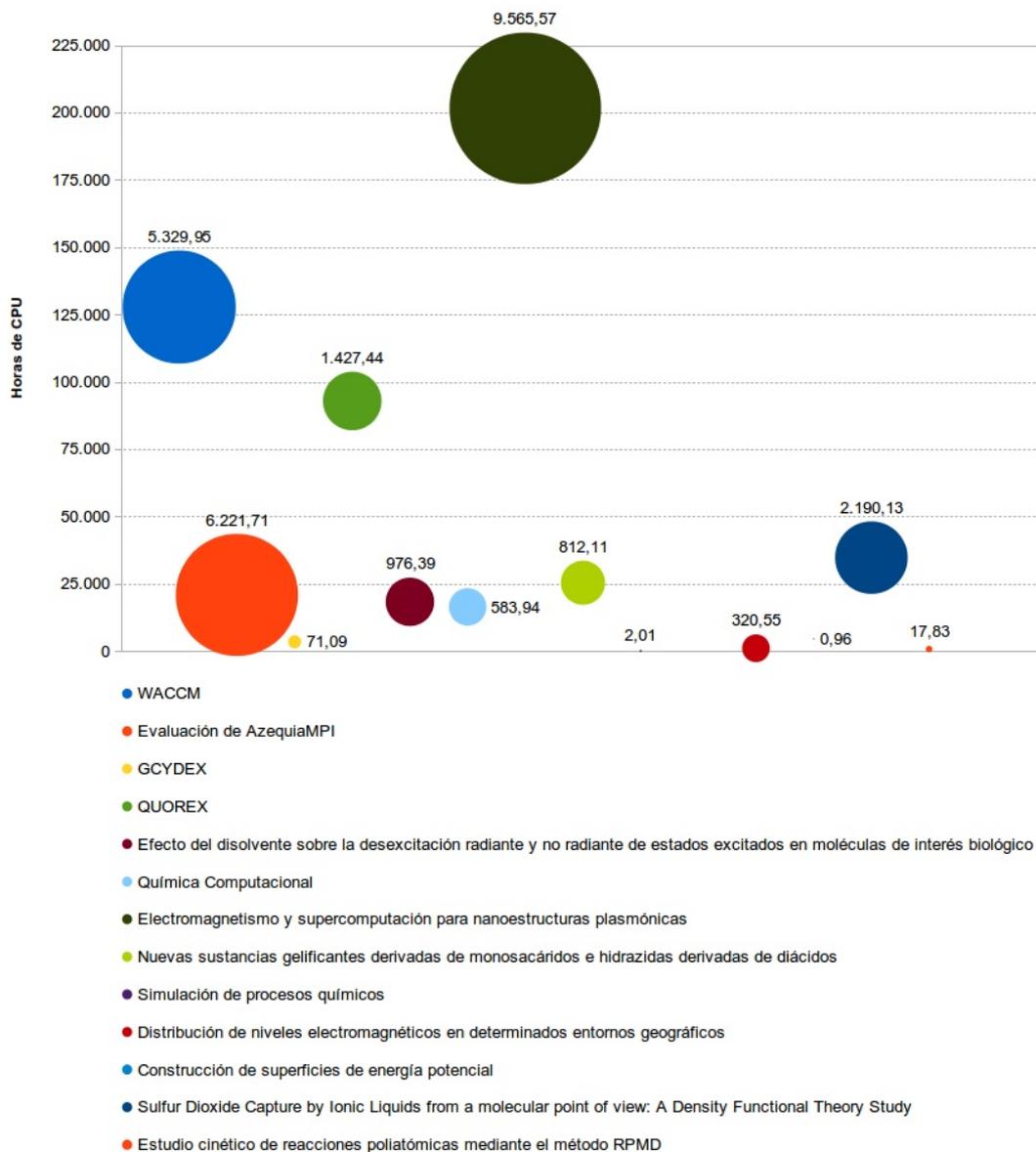
- De cómputo: 8.093. Se utilizan para generar resultados para su posterior análisis.
- De control: 2.656. Se utilizan para optimizar el entorno de ejecución de cada trabajo.

En la siguiente gráfica se muestra la relación mensual entre el total de trabajos ejecutados y el consumo 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 cuyas necesidades sean totalmente diferentes.



RELACIÓN DE RECURSOS POR PROYECTO

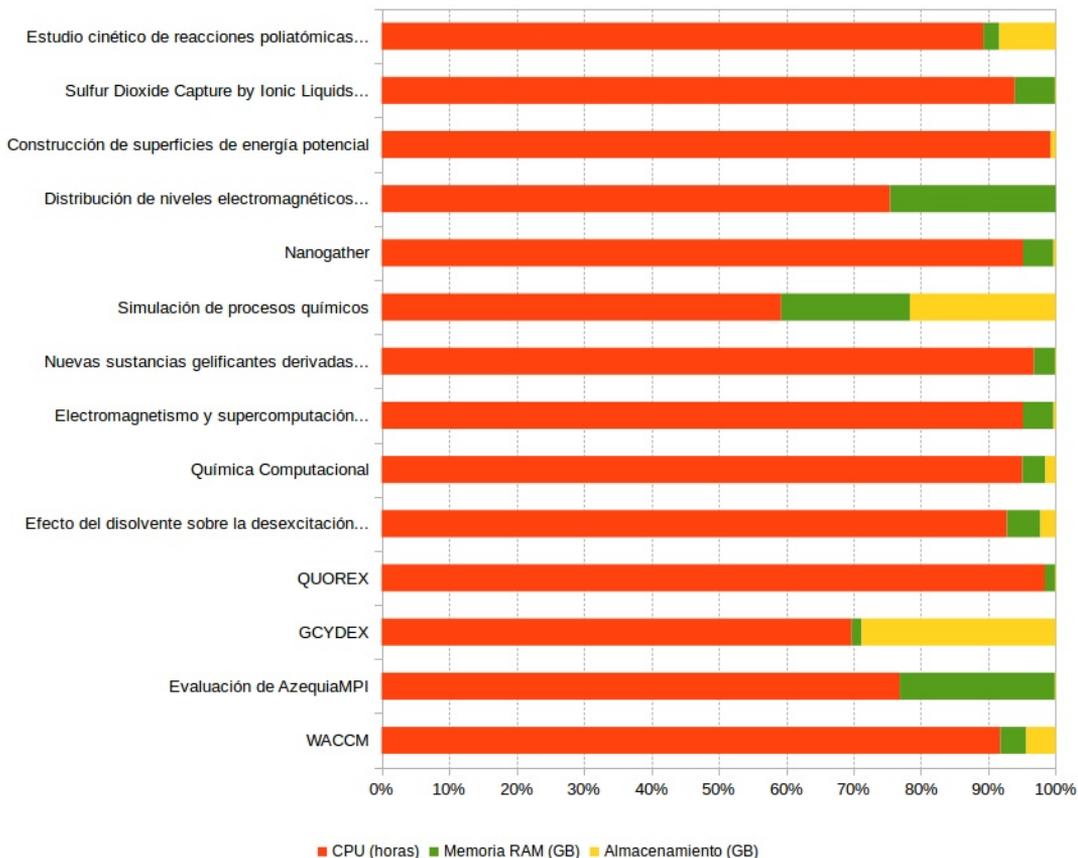
A continuación se muestran las gráficas que relacionan los distintos consumos de los proyectos que más recursos emplean, agrupados por proyecto.



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

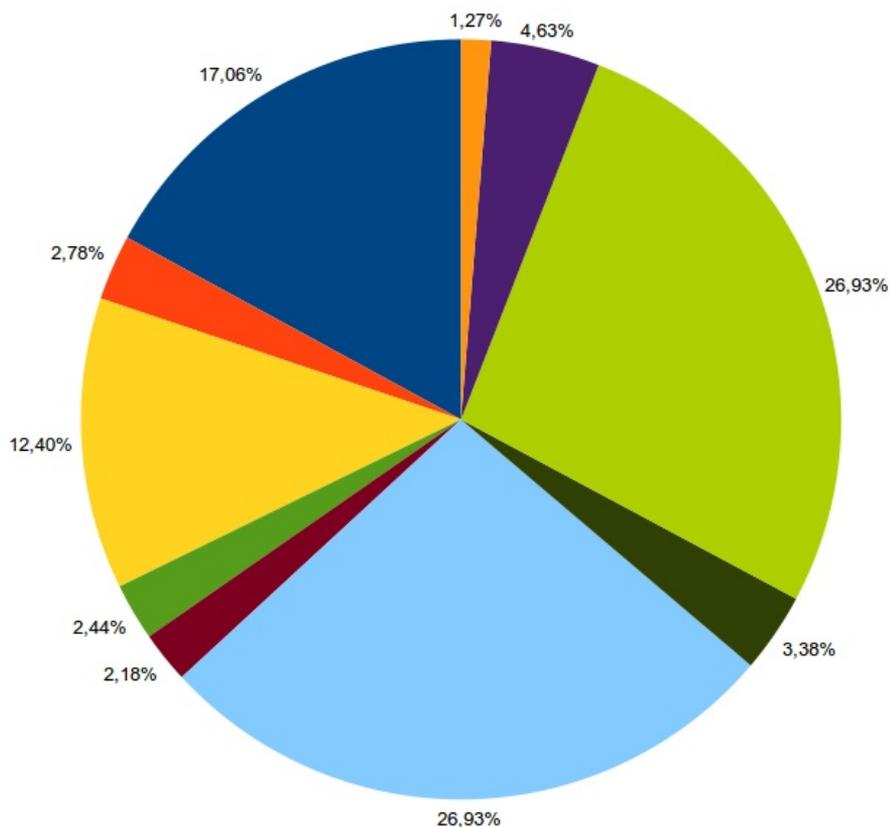
De manera clara, se pueden visualizar los proyectos que han hecho mayor uso de los recursos de CénitS. También se puede apreciar la capacidad que el supercomputador LUSITANIA dispone para albergar proyectos heterogéneos, gracias a su singular infraestructura.

En la siguiente gráfica se presenta la relación existente entre el consumo de memoria RAM, las horas de CPU y el volumen en disco utilizado, medidas agrupadas por proyecto, donde vuelve a quedar de manifiesto la versatilidad, tanto de los proyectos que se ejecutan en el supercomputador LUSITANIA, como de la propia infraestructura hardware.



USO DE CPU

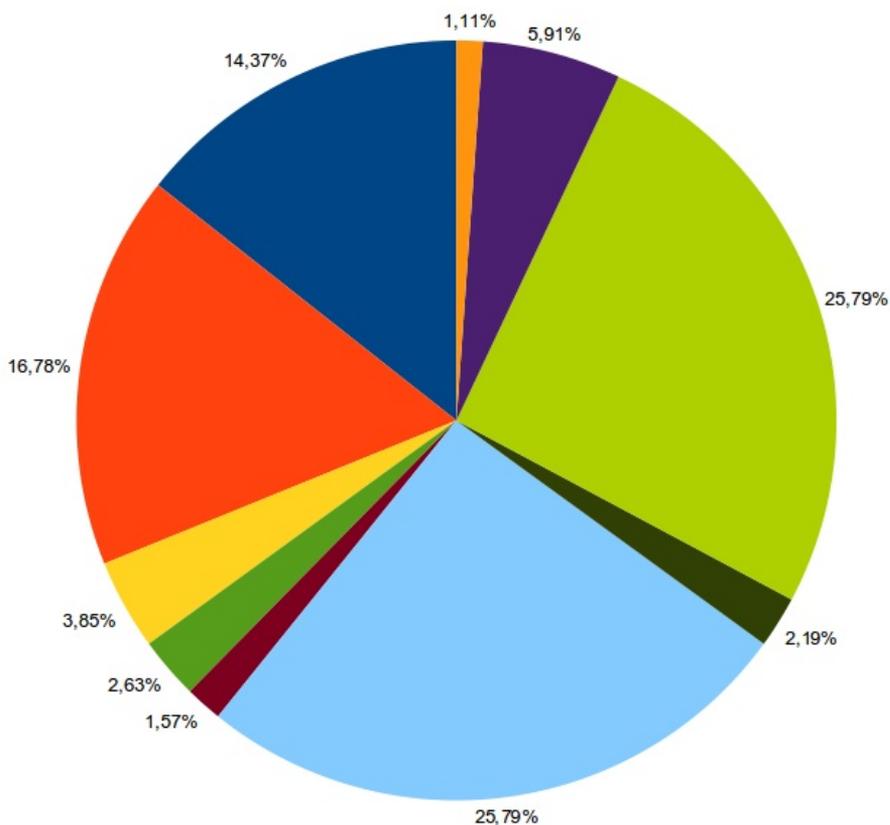
La gráfica que se presenta a continuación indica la relación del consumo anual de CPU de LUSITANIA de los proyectos de investigación que más recursos emplean.



- WACCM
- Evaluación de AzequiaMPI
- QUOREX
- Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico
- Química Computacional
- Electromagnetismo y supercomputación para nanoestructuras plasmónicas
- Nuevas sustancias gelificantes derivadas de monosacáridos e hidrazidas derivadas de diácidos
- Nanogather
- Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional Theory Study
- Resto de proyectos

USO DE MEMORIA PRINCIPAL

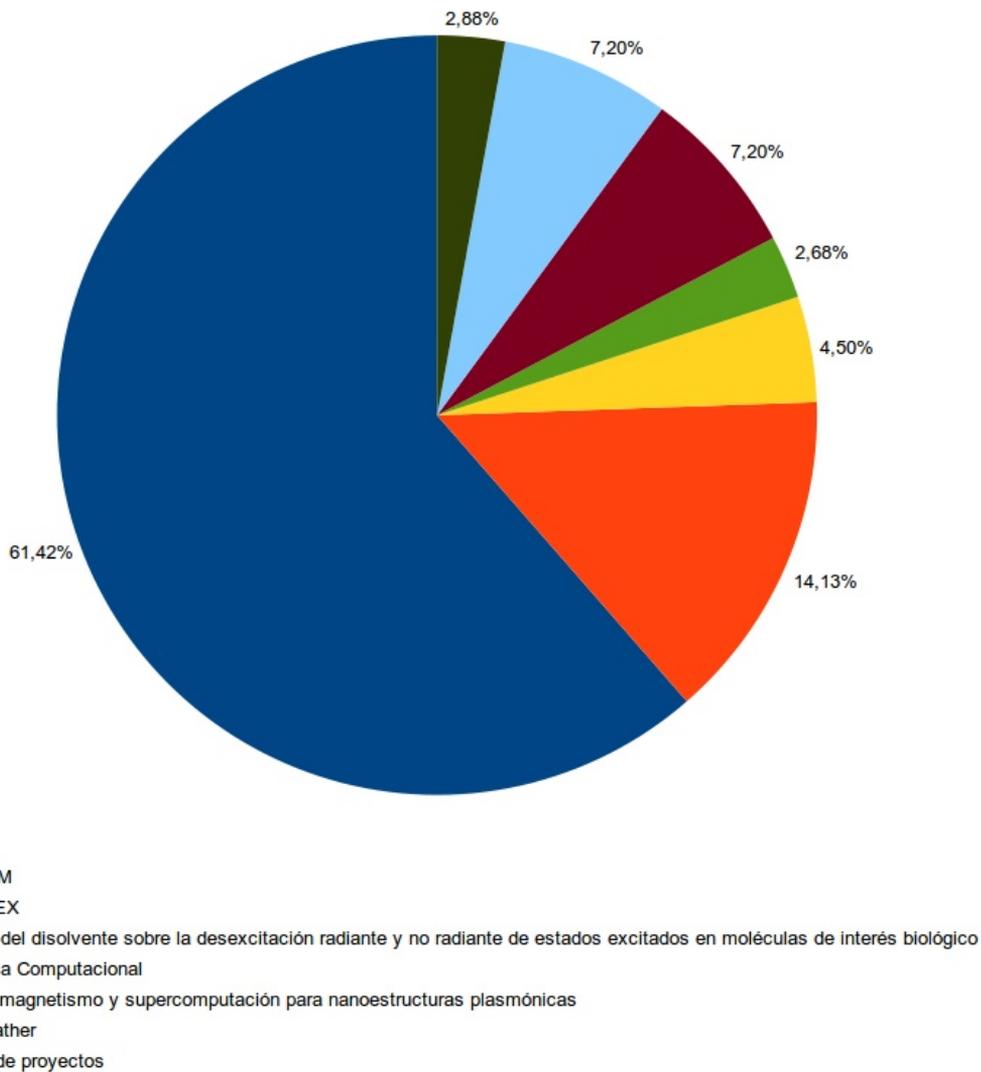
La gráfica que se presenta a continuación muestra la relación de consumo anual de memoria RAM de LUSITANIA de los proyectos de investigación que más recursos emplean.



- WACCM
- Evaluación de AzequiaMPI
- QUOREX
- Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico
- Química Computacional
- Electromagnetismo y supercomputación para nanoestructuras plasmónicas
- Nuevas sustancias gelificantes derivadas de monosacáridos e hidrazidas derivadas de diácidos
- Nanogather
- Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional Theory Study
- Resto de proyectos

USO DE ALMACENAMIENTO

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

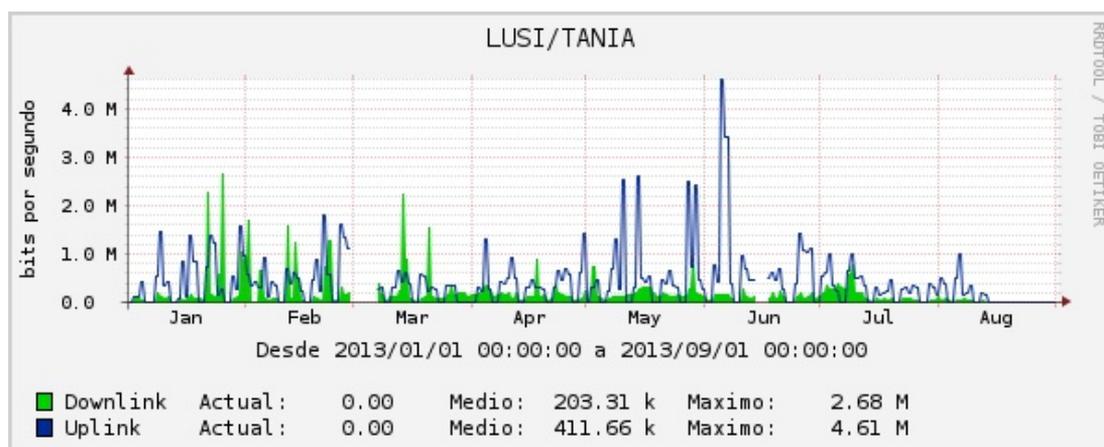


USO DE RED

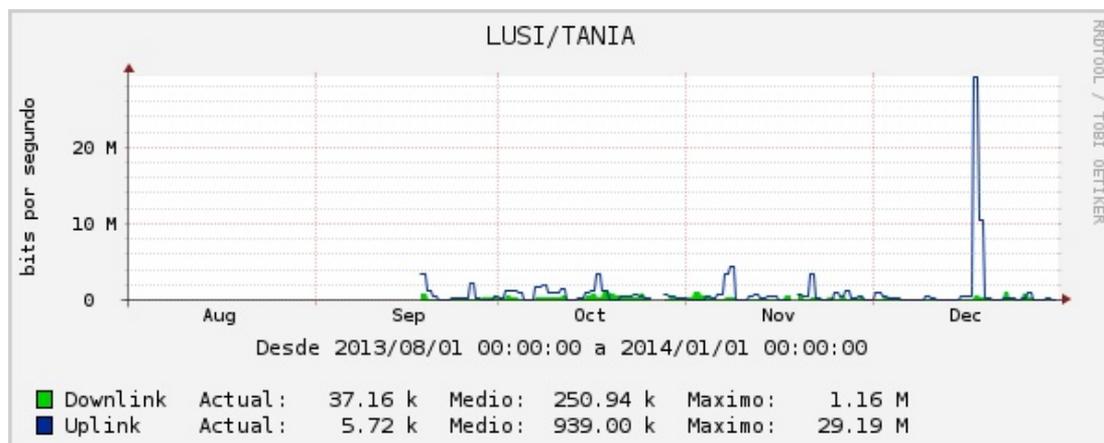
Las comunicaciones en LUSITANIA se generan principalmente entre los nodos de cómputo y los sistemas de ficheros, que se encuentran ubicados en los sistemas de almacenamiento en disco.

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

Los investigadores pueden consultar y descargar dicha información desde el exterior a través de 2 dispositivos de seguridad perimetral que controlan el acceso. En la siguiente gráfica se muestra la relación del tráfico de E/S generado en el acceso a la infraestructura, correspondiente a los firewall Fortinet FortiGate 3810A.



Entre agosto y septiembre se produjo la actualización de los dispositivos de seguridad perimetral al modelo Fortinet Fortigate 1000C, dada la necesidad de contar con una mayor número de interfaces, almacenamiento interno para los ficheros de seguimiento del sistema y para soportar un mayor ancho de banda. La relación de tráfico de E/S registrado a partir de septiembre se muestra en la siguiente gráfica.



USUARIOS

Durante el año 2013, un importante número de técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en el supercomputador LUSITANIA. Más de una treintena de proyectos y varias decenas de usuarios han podido beneficiarse de la infraestructura de CénitS durante el presente año.

INCIDENCIAS

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

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

El número de incidencias de usuario se ha incrementado con respecto al año anterior debido a los ajustes que han tenido que realizar los usuarios en sus trabajos, para hacerlos compatibles con los sistemas desplegados en el supercomputador LUSITANIA, tras su actualización a mediados de año. Se han resuelto un total de 71 incidencias de usuario.

SOFTWARE

La principal novedad en la infraestructura ha sido la actualización del software de los sistemas de acceso, desarrollo y cómputo. Esta tarea ha supuesto 6 meses de trabajo en tareas de estudio, pruebas y planificación del despliegue y 2 meses para la puesta en producción.

El software principal instalado en los nodos mencionados era:

- SUSE Linux Enterprise Server 10 Service Pack 2, con el kernel Linux 2.6.16.60.
- HP ServiceGuard A.11.18.05.
- OpenLDAP Server 2.3.32.
- HP MPI 2.02.07.
- Intel MPI 3.2.0.011.
- Compiladores Intel de C, C++ y Fortran 11.1.073 para ia64.
- Compiladores GNU 4.1.2 para C, C++, Fortran y Java.
- Gaussian 09 Revisión C.01 en el nodo de cómputo cn001.

Tras la actualización, los sistemas cuentan con el siguiente software:

- SUSE Linux Enterprise Server 11 Service Pack 2, con el kernel Linux 3.0.13-0.27.
- HP ServiceGuard A.11.19.01.
- OpenLDAP Server 2.4.20.
- Intel MPI 3.2.2.006.
- Compiladores Intel de C, C++ y Fortran 11.1.080 para ia64.
- Compiladores GNU 4.3.4 para C, C++, Fortran y 4.6.1 para GCC, G++,GFortran.
- Gaussian 09 Revisión D.01 en el nodo de cómputo cn001.



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DESARROLLADOS



PROYECTOS SOPORTADOS



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



FINANCIACIÓN DE PROYECTOS



ACCIONES FORMATIVAS Y DE DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS

NOTAS DE PRENSA

NOTAS DE PRENSA

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

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

CÉNITS-COMPUTAEX EN LOS MEDIOS

ESTADÍSTICAS GENERALES

TELEVISIÓN	RADIO	PRENSA ESCRITA	PRENSA DIGITAL
1	4	3	141

TELEVISIÓN

FECHA	TITULAR	FUENTE
12/12/13	Realización de las 6ª Jornadas CénitS	EXN1 (Canal Extremadura)

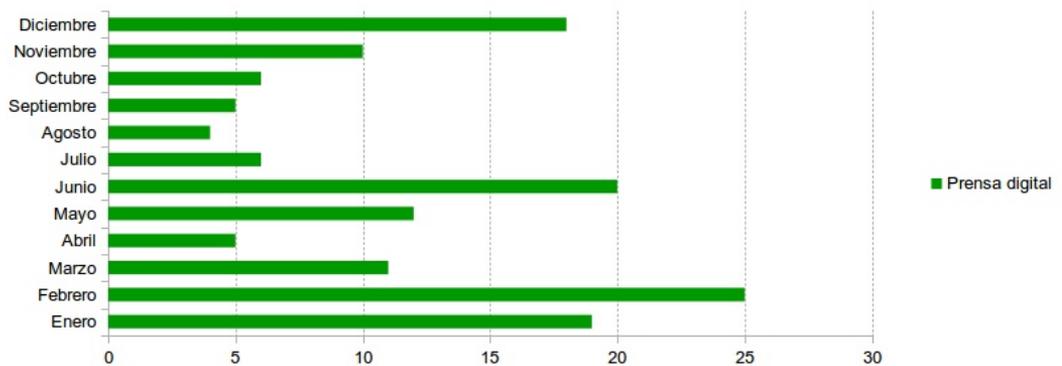
RADIO

FECHA	TITULAR	FUENTE
15/10/13	Supercomputadores españoles: Mare Nostrum y Lusitania	Eureka (RNE)
05/12/13	Entrevista sobre avances en proyecto de ultrasecuenciación genética	RNE
20/12/13	Entrevista sobre la realización de las 6ª Jornadas CénitS	Cadena Ser
20/12/13	Entrevista sobre la realización de las 6ª Jornadas CénitS	La Mañana (La Cope)

PRENSA ESCRITA

FECHA	TITULAR	FUENTE
11/07/13	50 proyectos de la supercomputadora	Diario HOY
11/07/13	La Supercomputadora Lusitania termina 50 proyectos en cuatro años	El Periódico Extremadura
01/12/13	Telefónica, en la Noche de las Telecomunicaciones	El Periódico Extremadura

PRENSA DIGITAL



Tres incendios intencionados en tres zonas diferentes de Badajoz

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...



Foto: J. L. Rodríguez

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

Los incendios ocurrieron en las zonas de...
El primer incendio se produjo en la zona de...
El segundo incendio se produjo en la zona de...
El tercer incendio se produjo en la zona de...

50 proyectos de la supercomputadora

TRASLADO A CÁCERES

La Supercomputadora Lusitania ha culminado medio centenar de proyectos en sus cuatro años de vida, entre ellos algunos relacionados con la radiofrecuencia, el cambio climático o la investigación farmacéutica contra el cáncer o el sida. En otoño, esta supercomputadora será trasladada del Ceta-Ciemat de Trujillo al Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón (CCMIJU) de Cáceres, según confirmó el director general del Centro Extremeño de Investigación, José Luis González.

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La Supercomputadora pide que se embarguen los dispositivos móviles robados de la Comisaría...
El primer dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El segundo dispositivo robado fue un teléfono móvil...
El tercer dispositivo robado fue un teléfono móvil...

La región trata al Estado a proteger a los afectados por profusiones



EL ORDENADOR LE COSTÓ AL GOBIERNO REGIONAL 7,7 MILLONES

La Supercomputadora Lusitania termina 50 proyectos en cuatro años

El próximo otoño será trasladada al Centro de Cirugía de Mínima Invasión

EFE
CÁCERES

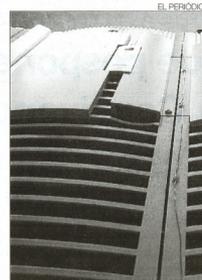
La Supercomputadora Lusitania ha culminado medio centenar de proyectos en sus cuatro años de vida, entre ellos algunos relacionados con la radiofrecuencia, el cambio climático o la investigación farmacéutica contra el cáncer o el sida. El próximo otoño, esta super-

computadora será trasladada del Ceta-Ciemat de Trujillo al Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón (CCMIJU) de Cáceres, según confirmó a Efe el director general del Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CénitS), José Luis González.

Este súper ordenador extremeño, que costó a la anterior Consejería de Comercio, Industria e Innovación 7,7 millones de euros, ha culminado unos 50 proyectos nacionales e internacionales con

un balance "positivo" según el director del CénitS. Entre ellos destacan proyectos relativos a la oncología, el cambio climático, la innovación de la propia supercomputación, proyectos de ingeniería industrial o del ámbito de la economía.

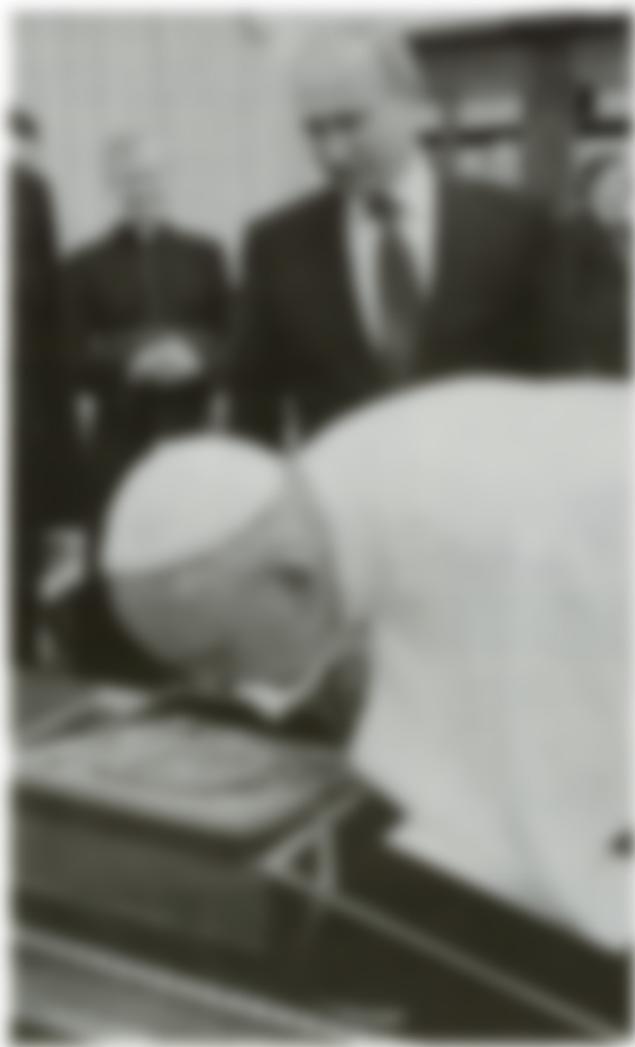
De manera más concreta, se ha podido demostrar que la radiación de las microondas no es nociva para la salud, el impacto que tiene la radiofrecuencia en enfermos oncológicos, la previsión de modelos climáticos hasta



►► Supercomputadora.

el año 2.200, la influencia de las variables climáticas en producciones como el corcho o la investigación sobre fármacos contra el cáncer o el sida. ■

Símbolos y palabras



Telefónica, en la Noche de las Telecomunicaciones

Cáceres o Cáceres acogió el viernes la X edición de La Noche de las Telecomunicaciones en Extremadura, organizado por la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicaciones con el patrocinio de Telefónica, Unify y Aberti Telecom. Asistieron más de cien personas y durante el evento recibieron el premio a la iniciativa empresarial más innovadora Computaex y Genits.



**Centro Extremeño
de iNvestigación,
Innovación Tecnológica
y Supercomputación**

**Carretera N-521, km 41
10071 - Cáceres**

Tel.: +34 927 04 90 70



GOBIERNO DE EXTREMADURA



Unión Europea

Fondo Europeo de Desarrollo Regional