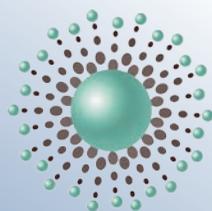


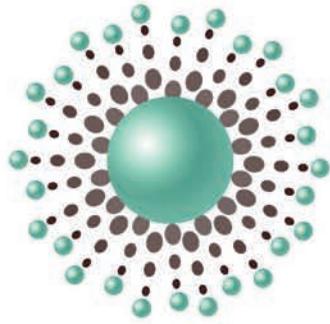
# 2014

## MEMORIA ANUAL



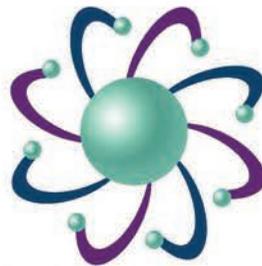
COMPUTAEX





COMPUTAEX

MEMORIA  
2014



CÉNITS

© Fundación COMPUTAEX

EDICIÓN: Fundación COMPUTAEX

DISEÑO: Fundación COMPUTAEX

Impreso en España

Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-608-2915-7

DEPOSITO LEGAL: BA-556/2015



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

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

# Contenido

2014.....	7
Organización.....	11
Fundación COMPUTAEX .....	13
Objeto y fines.....	14
Patronato .....	14
Equipo CénitS.....	15
Agradecimientos .....	16
Organizaciones colaboradoras .....	17
Proyectos de investigación en curso.....	19
TaxonomTIC.....	21
Estirpex-2 .....	24
Aplicación de técnicas Big Data a la predictibilidad de flujos de tráfico urbano en Ciudades Inteligentes.....	28
Smart Green Data Center.....	31
SIATDECO – Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones en Energías Ecológicas .....	34
MITTIC – Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales.....	38
FI4VDI – Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo.....	40
Proyectos de investigación soportados .....	43
Ciencias de la tierra.....	45
Ciencias de la vida.....	48
Ciencias informáticas y de comunicaciones.....	62
Proyectos de innovación tecnológica .....	65
Plan de innovación tecnológica en el área de las TIC.....	67
Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación .....	81
Propuesta para participación en convocatoria H2020 .....	83
Factoría de Innovación.....	84
Unidad interactiva 3D .....	85
Proyectos concluidos.....	87
Ciencias de la vida.....	89
Ciencias de la tierra.....	96
Ciencias informáticas y de comunicaciones.....	104



<b>Resultados de investigación</b> .....	<b>131</b>
Publicaciones en congresos .....	133
Publicaciones en revistas .....	137
Capítulos de libro .....	144
<b>Proyectos competitivos</b> .....	<b>145</b>
Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS .....	147
Adecuación de la red de comunicaciones para CénitS.....	147
EISTER - e-Infranet Sustainability Training and Educational Resource .....	147
FÉNIX-RIEP para la factoría de innovación .....	148
FI4VDI - Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo .....	148
MITTIC - Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales.....	149
RITECA-II.....	150
S4I .....	150
INRETEL.....	151
SGDC - Smart Green Datacenter .....	152
Estudio de olas de calor en Extremadura: clima actual y futuro.....	153
<b>Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión</b> .....	<b>155</b>
Convenios de colaboración .....	157
Colaboración en los másteres TIC de la Universidad de Extremadura .....	159
Trabajos Final de Máster .....	160
Becas de formación.....	163
7ª Jornada CénitS – TIC: La importancia de un sector troncal y transversal .....	167
II Feria Tecnológica.....	170
Noche de los Investigadores 2014 .....	171
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos .....	173
Portal web.....	175
Difusión y Divulgación.....	178
<b>Recursos tecnológicos</b> .....	<b>179</b>
Hardware .....	181
Consumos de recursos .....	186
Usuarios .....	189
Software.....	190
<b>Notas de prensa</b> .....	<b>193</b>
CénitS-COMPUTAEX en los medios .....	195



2014



José Luis González Sánchez  
Director General

## *“La Ciencia es la cultura de nuestro siglo”*

(Sydney Brenner,  
biólogo sudafricano,  
premio Nobel de fisiología o medicina en 2002)

**E**n marzo de 2014 se cumplieron cinco años de la constitución de la Fundación COMPUTAEX y en julio cumplió el mismo periodo su centro CénitS. En esa tendencia ya establecida de realizar evaluación al cumplir quinquenios o décadas, parece oportuno reflexionar sobre los resultados que el proyecto de la supercomputación ha alcanzado en Extremadura en el lustro que acaba de cumplir.

Aunque en sus inicios pudiera haber alguna duda en cuanto a la necesidad de un supercomputador en Extremadura, el tiempo y los resultados han terminado constatando que la necesidad no sólo era demostrable, sino que el retorno obtenido en este corto periodo de tiempo ha dado la razón a quienes tomaron la decisión de constituir la Fundación COMPUTAEX marcando una misión mucho más ambiciosa que la propia supercomputación. Aunque el fin básico de la Fundación fue la creación, explotación y gestión de su Centro CénitS, ésta tiene como fines todos aquellos que promuevan el desarrollo de las tecnologías de la información y el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas, como instrumentos para el desarrollo socioeconómico sostenible, estimulando la participación de la sociedad civil, movilizándolo sus recursos y dedicando especial atención a las relaciones de cooperación entre los centros de investigación públicos y privados y del sector productivo.

En estos cinco años se ha dado soporte a más de 70 proyectos regionales, nacionales e internacionales de muy diversos campos, que han supuesto para un buen número de investigadores y de empresas el haber logrado acometer sus aspiraciones y, en muchos casos, con la necesaria financiación que habría llegado a otras regiones de no haber tenido la oportunidad de emprender los proyectos en Extremadura. Gracias a esos proyectos se han alcanzado resultados investigadores e innovadores de elevado impacto que han dado una destacable visibilidad materializada en cinco reconocimientos internacionales,



un premio nacional y dos distinciones de alcance regional. Todo ello en una época de crisis muy poco propicia que, a pesar de todo y con mucho esfuerzo, ha logrado cerrarse con unas cuentas saneadas.

En 2014 ha tenido lugar una circunstancia muy destacable como ha sido el traslado de los recursos humanos de CénitS al edificio del Centro de Cirugía de Mínima Invasión en Cáceres que nos acoge mientras se encuentra una solución a nuestra situación de ser, tal vez, el único centro tecnológico de la Comunidad Autónoma sin sede propia donde desarrollar su potencialidad sin las limitaciones que supone el ser huéspedes, tanto para los recursos humanos (en CCMI de Cáceres), como para los técnicos (en CETA-CIEMAT de Trujillo).

Desde CénitS se ha liderado y/o participado de forma directa este año en un total de 23 proyectos financiados por diferentes convocatorias (POCTEP, SUDOE, FEDER, ININTERCONECTA, COINVESTIGA, PRI, Vales tecnológicos, contratos, convenios, etc.), que han dado lugar a muy destacados resultados. A estos se unen los 17 proyectos de investigadores e innovadores que utilizan los recursos del Centro. En total se han consumido 955.165 horas de CPU y se han requerido 35 máquinas virtuales específicamente configuradas para ajustarse a los requisitos concretos de cada proyecto. Los trabajos de cómputo masivo han usado 23.575 GB de memoria principal y consumido 9,2 TB de memoria secundaria para almacenar los resultados obtenidos por todos los proyectos.

CénitS logró este año ser homologado por Extremadura Avante como proveedor de servicios de innovación tecnológica en el área de las TIC dentro del programa de Vales tecnológicos del Plan de Innovación para las PYME. Esto ha permitido que nueve empresas extremeñas hayan podido iniciar sus proyectos tecnológicos y mejorar sus modelos de negocio contando con la experiencia de los ingenieros de CénitS que han aportado asesoramiento, consultoría y acompañamiento para mejorar la competitividad de estas empresas. A éstas se une otra veintena de empresas y organizaciones que, de un modo u otro, han usado los recursos técnicos y humanos, por lo que podemos decir que 2014 representa el año en que el sector productivo más ha recurrido a CénitS.

No se puede obviar en un Centro tecnológico como CénitS un aspecto tan fundamental para construir su futuro como es la formación y mejora continua de su principal valor que es el equipo humano. Este ejercicio los ingenieros de CénitS han logrado gestionar todos los recursos técnicos del Centro y, a la vez, emprender innovaciones e investigaciones que les han permitido continuar con su cualificación técnica y con su formación científica, presentando los resultados obtenidos en revistas y congresos internacionales de impacto. Hemos organizado la 7ª Jornada CénitS y continúa nuestra colaboración en los másteres TIC de la UEx, participando en la formación de sus estudiantes, tres de los cuales han sido además becados este ejercicio por la propia Fundación.



Los presupuestos regionales han aportado a la Fundación para sus gastos de funcionamiento en 2014 idénticas transferencias nominativas que los dos ejercicios precedentes, lo que nos ha llevado a buscar el crecimiento y la sostenibilidad económica mediante la firma de contratos y convenios con empresas; mediante la participación en proyectos de concurrencia competitiva; y mediante la prestación de servicios a empresas y organismos. De este modo se han captado unos fondos propios adicionales del 40% de lo percibido por transferencias nominativas de los presupuestos regionales. Esto ha permitido presentar unas cuentas anuales que al cierre del ejercicio 2014 han arrojado un resultado positivo de 18.549,40 €.

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

Concluimos destacando que coincidimos con los investigadores convencidos de que la ciencia es la forma más universal de cultura que tenemos y por ello debemos tratar de acercarla a la sociedad civil. Desde organismos como COMPUTAEX y CénitS hacemos todo lo posible para lograrlo y para servir de ayuda a la investigación y a la innovación, aunque también necesitamos del apoyo institucional porque constantemente nos enfrentamos a una realidad tecnológica que conocemos perfectamente y que Sydney Brenner supo reflejar muy bien con otro acertado razonamiento, "The modern computer hovers between the obsolescent and the nonexistent".

Fdo. José Luis González Sánchez



COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---

# ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



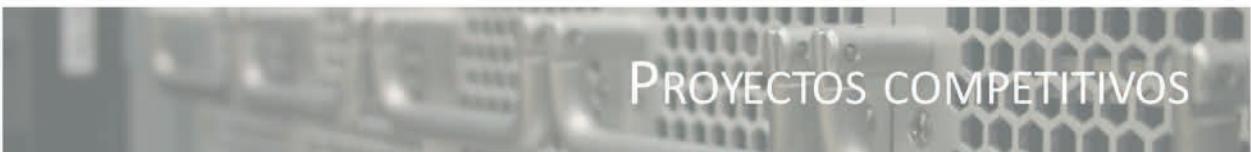
PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



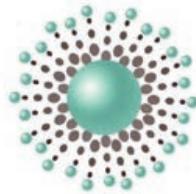
NOTAS DE PRENSA



La Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX) es una organización pública de naturaleza fundacional, compuesta por un grupo de ingenieros que, día a día, desempeñan sus funciones para cumplir los fines para los que la Fundación fue creada. Cuenta también con la inestimable colaboración de un valioso conjunto de profesionales.

# Organización

## FUNDACIÓN COMPUTAEX



## COMPUTAEX

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





## EQUIPO CÉNITS 2014

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 2014 se han producido nuevas incorporaciones de carácter técnico e investigador para ampliar las capacidades de acción y dar respuesta a las necesidades del Centro y a sus usuarios.



José Luis González Sánchez  
Director General  
joseluis.gonzalez@cenits.es



César Gómez Martín  
Jefe equipo de  
supercomputación  
cesar.gomez@cenits.es



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



Alicia Provedo Pisano  
Técnico en admon y  
gestión de proyecto  
alicia.provedo@cenits.es



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



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



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



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



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



Manuel Alfonso López Rourich  
Técnico de apoyo a la I+D+i  
alfonso.lopez@cenits.es



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



Jesús Calle Cancho  
Técnico de apoyo a la I+D+i  
jesus.calle@cenits.es



Noelia Alonso Sánchez  
Becaria de investigación  
noelia.alonso@cenits.es



Francisco Antonio Díaz Redondo  
Becario de investigación  
franciscoantonio.diaz@cenits.es

## AGRADECIMIENTOS

Para poder alcanzar los logros que se recogen resumidamente en este anuario de 2014 ha sido muy valiosa la colaboración de muchas personas, de entre las cuales queremos destacar:

- Los Patronos de la Fundación, especialmente a María Guardiola Martín, por su apoyo y compromiso.
- El personal del CCMI que nos acoge con suma hospitalidad en Cáceres.
- El personal del CETA-CIEMAT que acoge los equipos de cómputo en Trujillo.
- El personal de GPEx que nos ayuda en las tareas administrativas.
- El personal de la Secretaría de Ciencia y Tecnología que colabora estrechamente en tareas burocráticas y administrativas.
- El personal de la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación.
- Los técnicos del Protectorado de Fundaciones de Extremadura.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones que han colaborado en proyectos comunes.
- Los empleados del nutrido número de empresas privadas con las que se ha tenido la oportunidad de trabajar.





COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



Durante 2014, el equipo de CénitS ha seguido liderando y colaborando en distintos proyectos de investigación y desarrollo tecnológico, conseguidos en convocatorias públicas competitivas de diverso ámbito, y en variadas líneas de investigación, para aportar soluciones en ámbitos como la secuenciación genética, smart cities, big data, cloud computing y ahorro energético en centros de proceso de datos, entre otros.

# Proyectos de investigación en curso

## TAXONOMTIC

### DESCRIPCIÓN

El objetivo inicial de TaxonomTIC consistió en identificar las TIC, los elementos que las componen, describirlos y clasificarlos, para poder estudiar su impacto en Extremadura y servir de fuente de información para conocer a los profesionales, empresas y organismos vinculados al sector.

Sin embargo, algunos aspectos importantes no pudieron ser tratados. Por ello, como parte del proyecto CENITAL-2 se ha continuado con el subproyecto TaxonomTIC durante el año 2014, enmarcado específicamente en el área de excelencia TIC de la Estrategia RIS3 y cuyo objetivo principal era extender los trabajos realizados en el proyecto durante el año 2013.



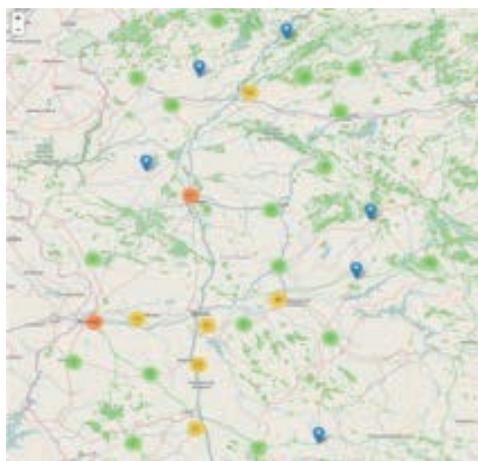
### OBJETIVOS

- Actualización de la información recopilada en el proyecto TaxonomTIC. Puesto que el sector TIC es un sector emergente, y teniendo en cuenta la situación socioeconómica actual, es necesario un seguimiento de la evolución del sector con el fin de detectar desviaciones en la misma que permita apoyar la toma de decisiones futuras.



- Aumento del conocimiento sobre el sector. Conocer la realidad del Sector TIC extremeño no es posible sin realizar un seguimiento del mismo a escala nacional y europea que permita comprobar su estado y evolución a lo largo del tiempo. Además, conocer la visión que se tiene de un sector a través de los responsables técnicos más cualificados es una de las aspiraciones que el Sector TIC tiene desde hace tiempo.
- Desarrollo e implementación de una plataforma Open Data de empresas proveedoras de servicios TIC. Se pretendía crear una plataforma web que proporcionara acceso a información relativa a las empresas del Sector TIC extremeño y que permitiera conocer a las empresas y los servicios que ofrecen a la sociedad.

## METODOLOGÍA



Ámbito	2010	2011	2012
	<b>Número de empresas</b>		
Regional	658	701	744
Nacional	63.210	63.774	65.170
Europeo	877.368	912.265	958.663
<b>Número de empleados</b>			
Regional	2.900	3.000	2.800
Nacional	396.543	399.783	403.422
Europeo	5.798.876	5.888.277	5.953.795
<b>Aportación al PIB</b>			
Regional	2,17%	2,11%	1,99%
Nacional	3,94%	3,89%	3,89%
Europeo	4,8%	4,7%	4,7%

Sector TIC en el periodo 2010-2012.

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

Posteriormente, se actualizó la información disponible respecto a la formación TIC en Extremadura a partir de los datos suministrados por el Observatorio de Indicadores de la UEx. El siguiente paso del proyecto consistió en analizar exhaustivamente un gran número de estadísticas extraídas del INE y del EUROSTAT referentes al sector TIC en España y Europa, respectivamente. Esto, unido a la información extraída y analizada del sector en Extremadura, ha permitido la realización de una comparativa del sector TIC en cada uno de los ámbitos. Como parte del proyecto se elaboró una encuesta especialmente dirigida a los CEOs del sector TIC y se distribuyó con la finalidad de conocer la opinión de los directivos del sector respecto a la situación del mismo. El último paso del proyecto, y



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

## RESULTADOS

---

- Disposición de información veraz y actualizada del sector TIC en Extremadura.
- Análisis del sector TIC en España y Europa y comparativa con el sector en Extremadura.
- Visión de los directivos del sector en la región.
- Piloto de la plataforma web en Drupal, homónima al proyecto, que permite acceder a la información recopilada por el equipo CénitS a lo largo de los años 2013 y 2014.
- La memoria de este proyecto puede consultarse en la siguiente dirección web: <http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/taxonomtic-taxonomia-sector-tic-extremadura>.

## FINANCIACIÓN

---

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



## ESTIRPEX-2

### DESCRIPCIÓN



El proyecto Estirpex supuso el despliegue de software libre en la infraestructura de LUSITANIA para procesar la secuencia genética de determinados exomas, almacenar la información generada y filtrar y visualizar los resultados obtenidos; pero también la apertura de una serie de líneas de trabajo destinadas a la optimización de los procesos de obtención de información de alto nivel relacionada con los estudios de secuenciación masiva realizados.

Estirpex-2 perseguía ampliar las investigaciones y los trabajos realizados durante el proyecto Estirpex desplegando de un catálogo de servicios de ultra-secuenciación, que permitiera a los sectores económicos más relevantes de la región el acceso a las ventajas que ofrece la secuenciación masiva.



El despliegue de dichos servicios suponía la asunción de responsabilidades en materia de seguridad, debido a la naturaleza sensible de la información que podía tratarse. Por tanto, era necesaria la realización de un estudio de seguridad que estableciera las medidas que debían implementarse para un adecuado cumplimiento legal.

## OBJETIVOS

- Realización de un análisis de viabilidad de la provisión de servicios de ultra-secuenciación genética en el centro CénitS.
- Realización de un análisis de riesgos y establecimiento de las medidas de seguridad a implementar con el fin de asegurar la preservación del denominado modelo CIA (Confidencialidad, Integridad y Disponibilidad).
- Análisis del estado del arte de la secuenciación genética en el mundo animal y vegetal y las posibles aplicaciones que pueden llevarse a cabo desde CénitS.
- Desarrollo e implementación de una herramienta software de apoyo al Consejo Genético.

## METODOLOGÍA

La primera fase del proyecto consistió en analizar la viabilidad de proveer servicios de procesamiento de secuencias genéticas obtenidas por medio de técnicas de secuenciación masiva. Para ello se han estudiado los secuenciadores genéticos existentes en el mercado y las características de los mismos.

Posteriormente fue necesario un análisis de las herramientas software existentes (libres, principalmente) para el procesamiento y análisis de las secuencias para cada uno de los estudios disponibles (secuenciación deNovo, resecuenciación, RNA-Seq, etc.).



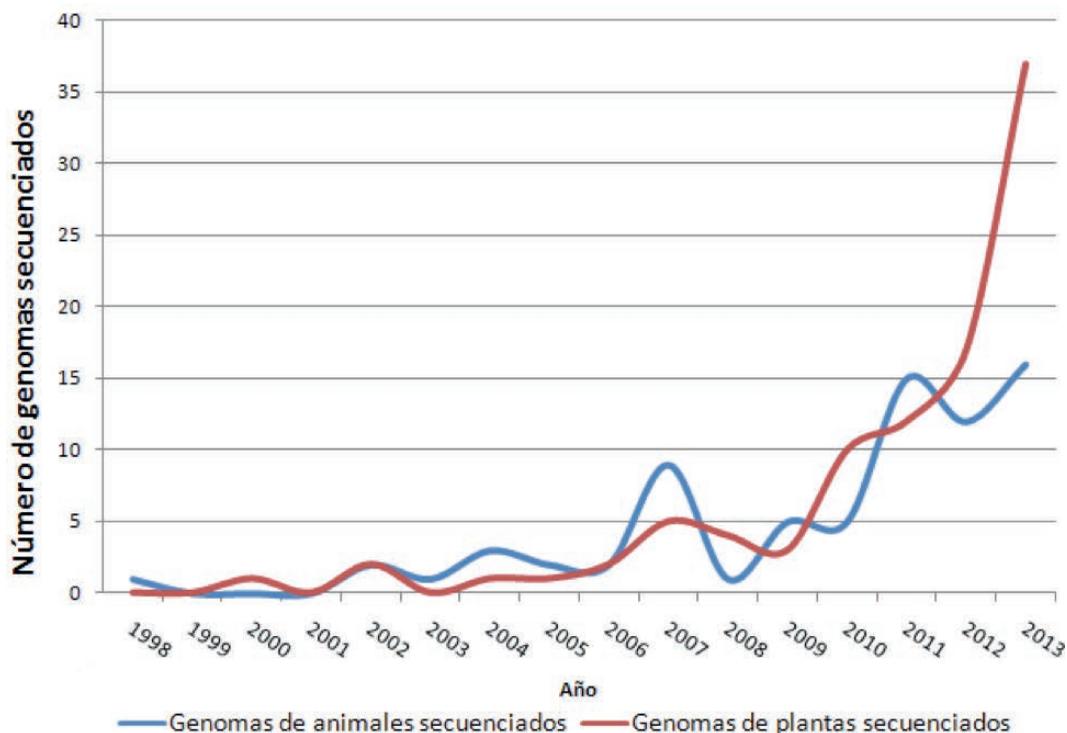


La primera fase del proyecto concluyó con la realización de un análisis de viabilidad centrado en tres ámbitos: económico, tecnológico y operacional. Estableciendo para ello un catálogo con los servicios disponibles y el precio asociado a ellos para asegurar dicha viabilidad.

Una vez establecido el catálogo de posibles servicios, se procedió a realizar un análisis de riesgos asociados a los sistemas de información envueltos en la prestación de dichos servicios, el cual permitió el establecimiento de las medidas de seguridad necesarias, con el fin de preservar la seguridad de la información y alcanzar unos límites tolerables de riesgo.

Las técnicas de ultra-secuenciación aplicadas al reino animal y vegetal tienen un gran potencial y por ello el siguiente paso del proyecto consistió en el estudio del estado del arte de la secuenciación genética de animales y plantas. Se evidencia en este sentido un aumento exponencial de las especies secuenciadas gracias a la aparición y proliferación de las técnicas de ultra-secuenciación.

De manera paralela al proyecto se desarrolló la herramienta software PedigreeX que permite representar pedigrís de forma interactiva.





## RESULTADOS

---

- Establecimiento de un catálogo de servicios de procesamiento y análisis de secuencias genéticas obtenidas mediante técnicas de ultra-secuenciación en el centro CénitS.
- Establecimiento de las medidas de seguridad necesarias para preservar la seguridad de la información de los activos envueltos en la provisión de servicios de ultra-secuenciación.
- Estado del arte del uso de técnicas de ultra-secuenciación de especies animales y vegetales y sus posibles aplicaciones en Extremadura, tales como la caracterización de denominaciones de origen o la catalogación de especies autóctonas.
- Desarrollo de la herramienta PedigreeX, la cual facilita la realización de pedigríes de manera interactiva facilitando esta labor a los consejeros genéticos.
- Se puede consultar más información del proyecto en el siguiente enlace: <http://www.cenits.es/enlaces/publicaciones/estirpex>.

## FINANCIACIÓN

---

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



## APLICACIÓN DE TÉCNICAS BIG DATA A LA PREDICTIBILIDAD DE FLUJOS DE TRÁFICO URBANO EN CIUDADES INTELIGENTES

### DESCRIPCIÓN



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

El principal objetivo de este proyecto era poner al servicio de las ciudades extremeñas entornos de Cloud Computing y Big Data para una gestión eficaz, eficiente y sostenible del tráfico rodado.

Estudios previos, desarrollados dentro del proyecto CENITAL, nos 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. En este proyecto cobraban especial relevancia: la alta disponibilidad, la seguridad de la información, la capacidad de cómputo, las posibilidades de Big Data y de Open Data. Conformando todo ello un ecosistema

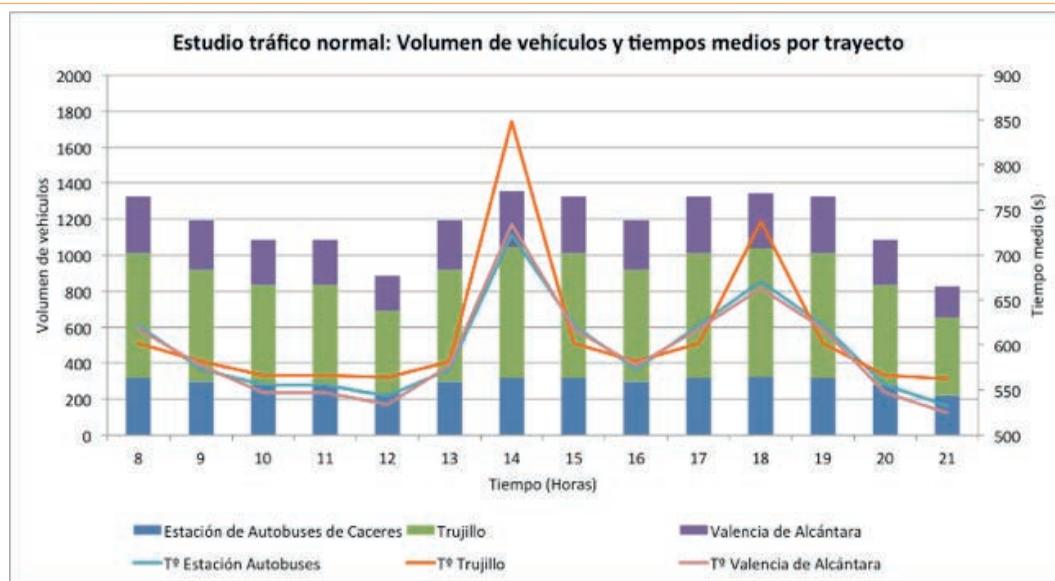


software capaz de simular situaciones de emergencia, obras inesperadas y cualquier otra anomalía que pueda producirse en las vías de las ciudades y pueblos extremeños.

## OBJETIVOS

- Un producto software resultante de un cuidado análisis comparado de herramientas existentes y de la modelización del tráfico.
- Un informe técnico que recoge los puntos más conflictivos del tráfico urbano de Cáceres.
- Un producto software operativo sobre las instalaciones de CénitS que almacena y muestra la información histórica del tráfico de la ciudad de Cáceres y el estudio de viabilidad de extenderlo a todas las ciudades extremeñas.
- Un documento que recoge y divulga los resultados del proyecto.

## METODOLOGÍA



La primera fase del proyecto consistió en analizar las diferentes herramientas de modelización de tráfico para obtener los datos simulados del tráfico en cualquier ciudad estudiada.

Posteriormente fue necesario el desarrollo de herramientas que permitieran el volcado automático de los escenarios de estudio, de manera que, a través de cartografías obtenidas de los sistemas de mapas abiertos, se pudieran buscar los puntos conflictivos de cualquier ciudad.



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

## RESULTADOS

---

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

## FINANCIACIÓN

---

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



## SMART GREEN DATA CENTER

### PARTICIPANTES

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

### DESCRIPCIÓN



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

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

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

Esto implica dos grandes problemas, por un lado, el coste económico para mantener la infraestructura y, por otro la huella ecológica que se está dejando en el planeta debido a la contaminación que conlleva la generación de tal cantidad de energía.

Por tanto, el proyecto Smart Green Data Center busca reducir la huella ecológica a través del desarrollo de un Datacenter experimental que permita realizar pruebas y desarrollar tecnología que reduzca el consumo energético de estos grandes consumidores.



Para ello se ha construido un demostrador móvil, modular y monitorizable que permite múltiples configuraciones para adaptarse a diferentes escenarios de prueba. Además, cuenta con un sistema de climatización y de cómputo gestionable y configurable de manera que se pueden desarrollar múltiples aplicaciones de gestión y monitorización sobre hardware abierto para la gestión y monitorización de los servidores de manera que se pueda realizar una gestión inteligente de los elementos que integran un CDP.

## OBJETIVOS

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

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

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

La movilidad del prototipo permite trasladarlo a diferentes situaciones geográficas para realizar pruebas reales que se unan a simulaciones realizadas para extrapolar estos datos y aplicarlos a la construcción de CPD reales que permitan optimizar la sostenibilidad ecológica y económica.

En el proyecto se han identificado los siguientes objetivos:

- Desarrollar, diseñar, fabricar, e implementar un novedoso demostrador de Data Center (CPD) modular, monitorizable y móvil.
- Testear y controlar diferentes factores que influyen en el funcionamiento del CPD así como en su consumo energético.



- Maximizar su eficiencia y minimizar los impactos que experimentan los edificios que albergan los CPD (consumo energético, ruidos, vibraciones, radiaciones, cableados, etc.).

Entre los principales beneficiarios del proyecto se encuentran empresas del sector, comunidad investigadora y fabricantes que puedan aprovechar el conocimiento generado en este proyecto y hagan uso de las ventajas que presenta un demostrador para probar e integrar diferentes estándares y soluciones.

### METODOLOGÍA

La metodología ha consistido en el estudio, diseño, desarrollo y establecimiento gradual de los elementos necesarios para la construcción del demostrador, midiendo el grado de cumplimiento de los objetivos científico-tecnológicos marcados en el proyecto (entre los cuales se encuentra maximizar la eficiencia energética o minimizar los ruidos y vibraciones).

### RESULTADOS OBTENIDOS

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

### FINANCIACIÓN

CDTI - FEDER INTERCONECTA, COBRA INSTALACIONES Y SERVICIOS, S.A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i





disponer de un sistema de información para la toma de decisiones donde se consideran 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 son útiles para la planificación de inversiones, de infraestructuras y de actividades logísticas.

La implementación del proyecto ha sido 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

- Simulación de diversos modelos climáticos a 2, 5, 10, 20 y 30 años vista, y estudio de 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 permitiesen la toma de decisiones en diversos ámbitos.
- Inventario de las plantas y fuentes de energía ecológica existentes en la actualidad en la Euroregión EUROACE.
- Definición y detección de las variables a analizar en el modelo climático.
- Obtención de un modelo climático piloto en la zona transfronteriza de La Raya. Se recurrió a datos climáticos de carácter histórico y se captaron nuevos datos durante el ciclo de vida del proyecto, en diferentes estaciones meteorológicas de la zona (principalmente de La Raya) donde se proponía aplicar el proyecto.
- Captación de datos climáticos 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.
- Implementación de un SIATD (Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones) para ser usado en el contexto de las energías ecológicas.
- Investigación de la potencialidad de otras energías ecológicas alternativas a las que están ya implantadas.

## METODOLOGÍA

En primer lugar, se recabó toda la información relativa a los distintos tipos de energía y aspectos a tener en cuenta para determinar la ubicación de la instalación de una planta de energías renovables. Una vez que el sistema dispone de toda la información, se procede a realizar una evaluación en etapas mediante la superposición de mapas sobre un Sistema

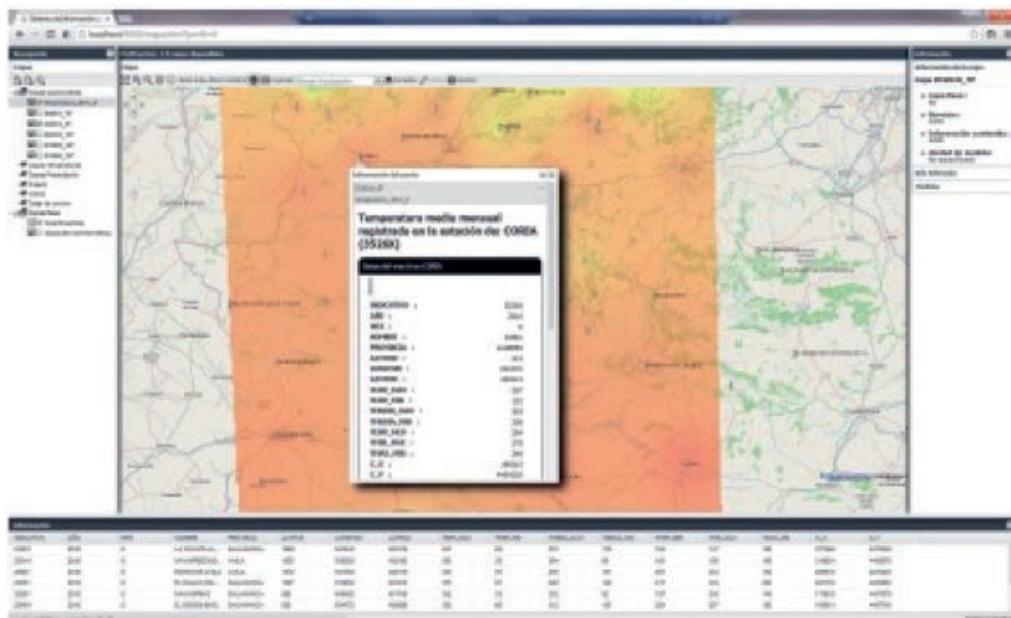




de Información Geográfica. Cada uno de estos mapas representa la información relativa a un dato: clima, altitud, pendiente, recursos hídricos, núcleos de población, producción estimada, etc.

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.

## RESULTADOS



- 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 la regiones Centro y Alentejo en Portugal, y en la región de Extremadura en España. El inventario servirá de apoyo al sistema de ayuda a la toma de decisiones para determinar el potencial de generación eléctrica de plantas productoras de energía renovable en función de su ubicación. Según el trabajo realizado, las 242 plantas de este tipo que funcionan en Extremadura disponen de una potencia total instalada de 3.110,8 megavatios.
- Definición de las variables a analizar en el modelo climático. Entre las variables analizadas se encuentran la temperatura media mensual, la precipitación media mensual, la velocidad media del viento, etc. Se ha elaborado un informe donde se recogen todas estas variables.



- Recopilación de datos climáticos históricos de las estaciones meteorológicas de la AEMET 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 para 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 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 elevados. 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 un Sistema de Información Geográfica integrado que facilita el acceso a todos los datos recopilados para el proyecto. Estos datos son 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 era el de investigar la potencialidad de otras energías ecológicas alternativas a las que estuvieran 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.
- En la siguiente dirección se puede acceder al folleto informativo de los resultados del proyecto: [http://www.cenits.es/sites/cenits.es/files/noticias/folleto\\_informativo\\_de\\_los\\_resultados\\_del\\_proyecto\\_siatdeco.pdf](http://www.cenits.es/sites/cenits.es/files/noticias/folleto_informativo_de_los_resultados_del_proyecto_siatdeco.pdf).

## FINANCIACIÓN

El proyecto SIATDECO forma parte del proyecto RITECA-II, cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.



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

### PARTICIPANTES

Junta de Extremadura, 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, surgió de la necesidad de generar crecimiento económico y empleo mediante el aumento de la competitividad en sectores tradicionales y estratégicos de la región Extremadura-Centro-Alentejo; proponiendo e implementando modelos y procesos innovadores de organización y producción, basados en la aplicación de Tecnologías de la Información y la Comunicación.

Estos sectores están basados en recursos y capacidades 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.

Dentro del proyecto MITTIC, desde la Fundación COMPUTAEX se van a desarrollar actividades en dos ámbitos bien diferenciados. En relación a las acciones de modernización y desarrollo tecnológico con base TIC en sectores productivos se está desarrollando una herramienta de gestión integral de la trazabilidad en las industrias corcheras y de la piedra natural, con el objetivo de asegurar la identificación del origen del producto y garantizar su



procedencia. Por otro lado, en el marco de las acciones de intercambio de conocimiento para la innovación y el emprendimiento se está desarrollando una herramienta virtual para dar a conocer las dehesas y montados en la Euroregión Extremadura-Centro- Alentejo.

## OBJETIVOS

El objetivo principal es estimular el incremento de la competitividad de los 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:

- Incremento de la capacidad innovadora en materia de Tecnologías de la Información y la Comunicación de los actores presentes en el desarrollo económico mediante una mejor gestión del conocimiento basada en estructuras compartidas que optimicen la utilización de los recursos en I+D+i y que permita la detección de necesidades y oportunidades conjuntas.
- Modernización tecnológica de la cadena de producción de los sectores tradicionales basados en la utilización de recursos naturales y otros sectores estratégicos, a través de la estimulación de factores de competitividad y de creación de empleo mediante la aplicación de nuevos modelos de negocio o mejora de los existentes basados en el conocimiento y la aplicación de las TIC.
- Intercambio 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.



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

### PARTICIPANTES

FCSCl, COMPUTAEX, UDL, Université Montpellier 2, AEI, Inova-ria y Consorcio PCiTAL

### DESCRIPCIÓN



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

El acceso a las TIC se ha concebido siempre a través de puestos de trabajo físicos mediante la utilización de hardware individualizado por parte de cada uno de los usuarios.

Frente a este paradigma, un modelo innovador, cada vez más generalizado, es el que permite realizar este acceso proporcionando servicios de escritorio virtual y Cloud Computing. Este tipo de servicios no están siendo implantados con suficiente agilidad, tanto en empresas como en instituciones públicas, debido fundamentalmente a la falta de conocimiento suficiente y, como consecuencia, a la falta de confianza. Por esto, se hace necesario demostrar a proveedores y usuarios la eficiencia de los servicios basados en escritorios virtuales y Cloud.

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



Además, los 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 portfolios 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.

## METODOLOGÍA

La metodología ha consistido en el establecimiento, en colaboración con el tejido empresarial público y privado, de las herramientas que permitirán optimizar sus estructuras productivas. Ello se conseguirá mediante el diseño y desarrollo de una estructura federada de infraestructuras de cloud computing, procedente de Centros de Supercomputación, así como mediante el establecimiento, a través de la federación, de prototipos de puestos de trabajo virtualizados.

## RESULTADOS OBTENIDOS HASTA AHORA

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



- Establecimiento de un entorno de trabajo en el que se pueda desplegar soluciones de cloud computing, a través de la infraestructura federada, destinada a que entidades puedan optimizar su trabajo.

## FINANCIACIÓN

---

INTERREG IV B Sudoeste Europeo



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



Esta sección contiene la relación de proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2014.

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 doctorales, 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”.

# Proyectos de Investigación Soportados

## CIENCIAS DE LA TIERRA

### ESTUDIOS COMPUTACIONALES EN REACCIONES MULTICOMPONENTES

#### Investigadores

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

#### Descripción

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

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

Los métodos computacionales son una herramienta muy útil para explicar y fundamentar los resultados experimentales, así como para hacer previsiones con un alto grado de fiabilidad.

#### Objetivos

- Estudio teórico de nuevas RMCI y, en concreto, se plantea el estudio computacional de dos tipos de reacciones: reacciones tipo Ugi con enoles y procesos tándem de cicloadición de isonitrilos para la obtención de aminas aromáticas.

#### Metodología

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



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

Estas fases serán aplicadas a las distintas líneas de trabajo.

#### **Publicaciones y congresos**

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

### **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 consiste en 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 de 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**

- Se han realizado dos simulaciones del clima, una con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y la otra con el modelo CESM (Community earth system model). La primera se ha realizado para complementar una realizada el año anterior pero con un forzamiento externo de  $8.5 \text{ W/m}^2$  en 2100. La segunda se ha realizado para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional.
- Se está trabajando también en la simulación mediante un modelo regional. Esta segunda integración se espera que será útil entre otros proyectos, al proyecto RITECA, en el que se encuentra involucrado el propio CénitS.
- Se puso a punto y se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Así mismo, se realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (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 indica que, efectivamente, los resultados son comparables a los obtenidos en los ordenadores del NCAR.

### **Publicaciones y congresos**

- 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.

---

## CIENCIAS DE LA VIDA

---

### 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

- El objetivo es calcular el perfil radial de la corriente de bootstrap en el stellarator TJ-II. Ésta es una corriente neoclásica, paralela al campo magnético, que aparece en todos los dispositivos de confinamiento magnético de plasmas. Se forma debido a la combinación de dos efectos: atrapamiento de partículas debido a la variación en la fuerza del campo magnético y gradientes radiales de temperatura y/o densidad.
- El control de la corriente de bootstrap podría dar lugar a la posibilidad de operación continua en los dispositivos tokamaks. Por otra parte, en stellarators, permite un mejor control de la transformada rotacional y, por tanto, el acceso a regímenes de transporte mejorado.
- El cálculo preciso de la bootstrap es un desafío numérico. Para ello, la Universidad Técnica de Graz (TU Graz, Austria) ha creado el nuevo código NEO-MC. Este código hará posible, por primera vez, el cálculo de la corriente de bootstrap en el stellarator TJ-II, sito en Madrid.

#### Metodología

Como efecto neoclásico que es, el cálculo de la bootstrap requiere resolver la Ecuación Cinética de Deriva (DKE, en inglés), que describe la evolución de la función de distribución de una partícula en presencia de campos magnéticos y eléctricos y de un operador de colisión que describe colisiones de pares de partículas.

Bajo la hipótesis de transporte local y difusivo, válida bajo ciertas condiciones en TJ-II, uno puede simplificar la DKE. Tras esta simplificación, los flujos de partículas son proporcionales a los gradientes de temperatura y densidad, y al campo eléctrico. La constante de proporcionalidad se llama “coeficiente de transporte”.



El objetivo es calcular el coeficiente de transporte de la bootstrap en varias posiciones del dispositivo. Una vez calculado, obtener el perfil radial de la corriente será inmediato. En una posición radial dada, se calculará el coeficiente de la bootstrap como una convolución de coeficientes monoenergéticos correspondientes a diferentes energías, calculados con el valor adecuado del campo eléctrico. Se hace, por tanto, un barrido en los parámetros colisionalidad ( $\nu$ , ~10 valores logarítmicamente equiespaciados entre  $1e-5$  y  $3e-0$ ) y campo eléctrico normalizado ( $E_r$ , ~5 valores entre 0 y  $3e-3$ ).

El cálculo de estos coeficientes monoenergéticos se hace siguiendo las trayectorias de partículas de test en el plasma. Esto es numéricamente muy complicado, ya que los coeficientes son números muy pequeños que resultan de la resta de dos números muy grandes: uno debido a las partículas que se mueven paralelamente al campo y otro debido a las que se mueven antiparalelamente. Esto hace que, especialmente para baja colisionalidad, las barras de error sean muy grandes y haga falta muchísima estadística. Esta limitación ha hecho imposible calcular la corriente de bootstrap en TJ-II hasta ahora.

El nuevo código, NEO-MC, combina el método estándar de seguimiento de partículas de test con un algoritmo de “rediscretización” de la distribución de partículas de test. A las partículas de test se les asigna un peso y el espacio de fases se divide en celdillas. Periódicamente, se reemplazan las partículas existentes en cada celda por una sola partícula con peso igual al peso total de éstas. Este método reduce el ruido estadístico sin introducir sesgo. El método es más eficiente cuantas más partículas de test se simulan simultáneamente, y esto lo hace adecuado para un ordenador como LUSITANIA. Además, incluso con el método de rediscretización, los tiempos de CPU necesarios son muy altos.

#### **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.

### **EFECTO 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 .



### 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.

### GCYDEX. 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).
- Alberto Cabello Sánchez (UEx).
- 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 en Fortran.
- La calibración de estas superficies se basa en cálculos de estructura electrónica de alto nivel.

### **Objetivos alcanzados**

- Investigaciones sobre el sistema  $\text{Cl}+\text{NH}_3$ , el cual 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.



## GLICOCONJUGADOS BASADOS EN EL ESQUELETO DE AMINOPOLIOL. 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 aminopolioltris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G\* y M06-2X/6-311++G\*\* se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación ( $< 8 \text{ kcal.mol}^{-1}$ ). A través de un complejo y costoso protocolo computacional se ha modelado la estructura cristalina, lo que ha puesto de manifiesto la mayor estabilidad de la forma enamínica en el retículo cristalino, hecho que concuerda totalmente con los datos obtenidos a través de difracción de rayos X de monocristal.
- Se ha estudiado también la tautomería imina-enamina en derivados de anilinas y o-hidroxinaftaldehídos, tanto en estado sólido como en disolución. Se han realizado cálculos DFT (a nivel B3LYP/6-31G\*\* y M06-2X/6-311++G\*\*) que han permitido obtener las energías relativas de las formas imínicas, enamínicas y de los estados de transición implicados en su transformación. En este caso se ha encontrado que las diferencias de energía entre iminas y enaminas es mucho menor, tanto en estado sólido como en disolución. También se ha cuantificado la proporción de imina presente en todos los equilibrios, mostrando una buena concordancia con las proporciones obtenidas experimentalmente mediante resonancia magnética nuclear. La simulación de la estructura cristalina de un derivado del naftaldehído ha puesto de manifiesto que la estructura imínica es ligeramente más estable que la enamínica, lo cual vuelve a estar de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.
- Se ha estudiado, además de los equilibrios tautoméricos, los perfiles conformacionales de varias hidrazonas derivadas de naftaldehídos y N-aminoheterociclos. Se ha analizado la variación de energía en función del ángulo diedro C-N-N-C a nivel DFT (B3LYP/6-31G\* y M06-2X/6-311++G\*\*) incluyendo el efecto del disolvente mediante el método SMD. Con independencia del disolvente, las formas imínicas son en todos los casos las más estables. Sin embargo, la presencia de dos grupos metilo en posiciones orto en el anillo de anilina implica una menor diferencia de energía entre ambos tautómeros. Además, en todos los casos, ha quedado demostrado que la presencia del par de electrones del nitrógeno adyacente al grupo imino es clave en la estabilización de dicha forma tautomérica.



- Simulación de la reactividad química en el interior de cápsulas moleculares. En los últimos años se ha desarrollado un nuevo método para catalizar reacciones químicas. Se trata de los denominados “matraces” o “cápsulas” moleculares. Éstos consisten en estructuras moleculares que forman una cavidad en su interior, donde se alojan los reactivos y tienen lugar las transformaciones, de forma similar a lo que ocurre en la naturaleza en el caso de las reacciones biocatalizadas por enzimas. El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. Sin embargo, su estudio a través de métodos computacionales no se había abordado hasta el momento debido al elevado número de átomos que son necesarios para la modelización, lo que hace que el coste computacional sea demasiado elevado. Los cálculos realizados han permitido modelar por primera vez una reacción química en el interior de una de estas macromoléculas. Concretamente, se ha estudiado la cicloadición de alquinos con azidas, que da lugar a triazoles, compuestos muy valiosos desde el punto de vista biomédico.
- Hidrogenación de amidas mediante catalizadores basados en rutenio. La reacción de hidrogenación es una de las más importantes en química. Se trata de un proceso que requiere elevadas presiones y temperaturas así como catalizadores específicos. Los catalizadores basados en complejos de rutenio se encuentran entre los más estudiados. Sin embargo, su mecanismo de actuación era desconocido hasta el momento. Los cálculos realizados han permitido conocer todos los pasos a través de los cuales transcurre el proceso, los cambios de energía implicados, así como explicar la formación de los diferentes compuestos químicos a que da lugar la hidrogenación.
- Descubrimiento de un nuevo organocatalizador para la síntesis de tetrazoles por cicloadición de azidas y nitrilos. Los tetrazoles son compuestos de gran importancia ya que intervienen en la preparación de antibióticos y otros fármacos. La síntesis de estos compuestos es compleja, ya que requiere temperaturas muy elevadas y prolongados tiempos de reacción. Los cálculos realizados han permitido diseñar y preparar, en colaboración con el equipo que dirige el Prof. Oliver Kappe en la Universidad Karl-Franzens de Graz, el primer organocatalizador para esta reacción. Su utilización permite preparar tetrazoles de forma muy rápida, lo que hará posible que su producción a gran escala sea más eficiente y barata de lo que es actualmente.

#### **Publicaciones y congresos**

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



- Markus Damm, Christoph 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.



## NUEVAS SUSTANCIAS GELIFICANTES DERIVADAS DE MONOSACÁRIDOS E HIDRAZIDAS DERIVADAS DE DIÁCIDOS

---

### Investigadores

Pedro Cintas Moreno. Grupo de investigación “Química Orgánica” (QUOREX). Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Extremadura.

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

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

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

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

---

### Investigadores

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

### Descripción

Air pollution is attracting an increasing attention through-out the world. SO<sub>2</sub>, mainly emitted from fossil-fuel combustion, is one of the main air pollutants. Besides, SO<sub>2</sub> is also an important and useful source for many intermediates in chemical synthesis. Thus,



to develop efficient techniques to control the emissions of SO<sub>2</sub> would have a pivotal role for the use of fossil fuels from an environmental point of view. Nowadays, the most effective methods to control SO<sub>2</sub> emissions from fossil fuel combustion are based on flue gas desulphurization (FGD) using several technologies such as water scrubbing, metal ion solution, catalytic oxidation, activated carbon adsorption, wet lime or limestone scrubbing, double alkali process, ammonia scrubbing, NH<sub>3</sub> gas injection, and organic solvent absorption.

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

### **Objetivos**

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



## Metodología

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

Finally, pure HF and MP2 calculations will also be carried out. The Pople's 6-31+G\*\* and 6-311+G\*\* basis sets have been selected. Thus, we can also test the effect of the basis sets. Due to the high computational cost, MP2 would be done over B3LYP geometries, and obtained MP2/6-311+G\*\* energies will be considered as reference energies. From this systematic work, we should be also able to select a suitable functional based on calculated properties and computational cost. For this purpose a set of common alkyl-imidazolium cation based ILs amply used to capture acid gases have been selected. Although this project is devoted to SO<sub>2</sub> capture, this kind of study is also required for CO<sub>2</sub> capture. For our calculations, our model is constituted by the anion and the cation corresponding to the IL and the absorbed molecule. At the beginning all calculation will be done in gas phase. Actually, sulfonated gases from fossil-fuel combustion are mixture of several gases besides SO<sub>2</sub>, such as CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, or N<sub>2</sub>. In this sense, obtain information about the selectivity of the ILs is also important. Therefore, the next step in our work



is considered a molecule of another gas (CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, or N<sub>2</sub>) along and without SO<sub>2</sub> to obtain information about the selectivity of a concrete ILs from a molecular point of view. So far, all proposed computational works would be 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 SO<sub>2</sub> capture in a most realistic liquid environment through continuum solvation model (CPCM).

### Publicaciones y congresos

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

## CONSTRUCCI N DE SUPERFICIES DE ENERG A POTENCIAL

### Investigadores

Elo sa Gonz lez Lavado. Departamento de Ingenier a Qu mica y Qu mica F sica (GCYDEX) de la Universidad de Extremadura.

### Objetivos

- Construcci n de superficies de energ a potencial en sistemas poliat micos basada en c lculos ab initio de alto nivel.

### Metodolog a

Programas escritos en lenguaje FORTRAN.



## 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 físico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.

### Metodología

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

## CIENCIAS INFORMÁTICAS Y DE COMUNICACIONES

---

### 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 han comparado los resultados con otras implementaciones bien conocidas como MPICH2, Intel MPI o HP-MPI, y se ha mejorado, 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 consistió 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.



COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



En esta sección se relacionan los proyectos de innovación tecnológica que han sido desarrollados o soportados por CénitS durante el año 2014. Cabe destacar el aumento en el número de proyectos y colaboraciones con diferentes organismos, con especial atención al gran número de proyectos en colaboración con empresas regionales y nacionales.

Aunque los proyectos tienen una importante carga investigadora, se caracterizan principalmente por aportar innovaciones tecnológicas a empresas y organismos que pueden usar los resultados obtenidos para mejorar sus métodos y productividad.

# Proyectos de Innovación Tecnológica

## PLAN DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA EN EL ÁREA DE LAS TIC

El Plan de Innovación para la PYME es una iniciativa de la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación del Gobierno de Extremadura, gestionado por Extremadura Avante y cofinanciado con Fondo Social Europeo (FSE), Programa Operativo de Extremadura 2007-2013. Sus cuatro objetivos estratégicos son:

- Impulsar proyectos y acciones innovadoras en las microempresas y las pymes.
- Dinamizar la innovación y la mejora continua en la organización del trabajo de las microempresas y pymes.
- Fomentar las capacidades y habilidades de las pymes para la gestión de la innovación y adaptación a las necesidades de los mercados.
- Fortalecer el tejido empresarial, favoreciendo la creación de nuevos modelos de negocios asociados a las TIC, y apoyar el comercio electrónico.

La Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS fueron homologados por Extremadura Avante como proveedores de servicios de innovación tecnológica en el área de las TIC (servicio tipo 10).

Esto permitió que nueve microempresas y pymes regionales pudieran solicitar, de forma totalmente gratuita, vales tecnológicos para que COMPUTAEX estudiase las necesidades y carencias de su empresa en materia de innovación tecnológica.

Estos servicios, sin coste para las empresas, posibilitaron la ejecución de proyectos de I+D+i muy concretos, pero con un importante impacto en la mejora competitiva e innovadora de los procesos y productos de las empresas extremeñas.

Los proyectos correspondientes a los vales tecnológicos se desarrollaron prioritariamente en los siguientes ámbitos de actividad de la I+D+i:

- Gestión de datos.
- Cloud Computing.
- Computación de alto rendimiento.
- Redes y sistemas móviles.
- Desarrollo tecnológico.



- Ciberseguridad y confianza digital.
- Modelos de sostenibilidad y prestación avanzada de servicios, comunicaciones y otras aplicaciones para ciudades y entornos inteligentes.
- Contenidos digitales y audiovisuales.
- Redes sociales.

Cada uno de los servicios ofrecidos constó de tres fases: auditoría, diseño del proyecto y desarrollo del mismo.

#### 1. Primera fase. Auditoría

Durante esta primera fase se efectuó un exhaustivo análisis de la demanda tecnológica de la empresa solicitante y se identificaron las posibles soluciones a ejecutar. Esto permitió a CénitS conocer los antecedentes, situación actual y el proceso a seguir para poder tomar la mejor decisión con respecto a la estrategia de innovación y a la determinación del proyecto que produjera un impacto en la mejora competitiva de la entidad.

#### 2. Segunda fase. Diseño del proyecto de I+D+i

En esta fase se determinaron el contenido y el alcance del servicio, seleccionando el proyecto a realizar de entre los recomendados en la auditoría. Se definieron el alcance, los objetivos y los resultados de dicho proyecto. Se llevó a cabo una definición de actividades, la secuencia y duración de las mismas, el desarrollo del calendario, la planificación de los recursos, la planificación de la calidad, la planificación organizativa, la adquisición y asignación de recursos, la planificación de comunicación, la identificación y evaluación de riesgos y planes de contingencia. Asimismo, se identificaron necesidades tecnológicas y demandas, al mismo tiempo que se determinaron debilidades y aspectos de mejora en los procesos productivos de la cadena de valor, tratando, no sólo de ajustar el sistema al momento actual, sino poder crear la estructura necesaria para determinar escenarios futuros.

#### 3. Tercera fase. Desarrollo del proyecto de I+D+i

En esta fase, los técnicos de COMPUTAEX llevaron a cabo el desarrollo del proyecto diseñado, teniendo en cuenta las siguientes actuaciones:

- Asistencia tecnológica que cubrirá aspectos como el control de calidad, análisis y ensayos, homologaciones, diseño y solución de problemas puntuales de rápida ejecución.



- Licencia tecnológica: se autorizará a la empresa receptora del servicio a utilizar su tecnología de conformidad con ciertos términos y condiciones previamente acordados.
- Asesoramiento en la adopción de una tecnología innovadora, incluyendo técnicas, herramientas y metodologías de conocimiento e innovación, para que en el futuro se puedan implantar otros proyectos innovadores que permitan generar nuevas oportunidades de negocio y productos innovadores.
- Asesoramiento en el uso de normas para la adopción de medidas o mejoras derivadas de necesidades concretas de innovación.
- Seguimiento y control de la innovación durante el desarrollo del proyecto.

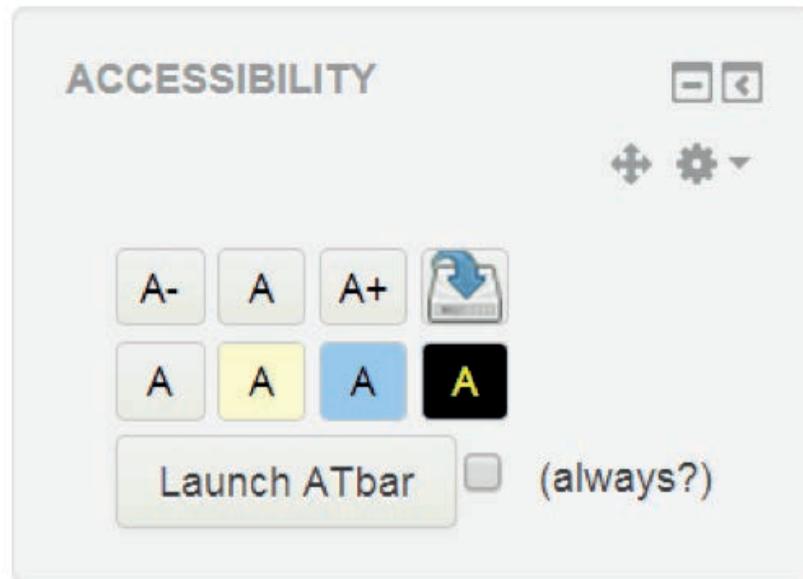
Se detallan a continuación los nueve vales tecnológicos desarrollados por la Fundación COMPUTAEX en 2014, junto las necesidades tecnológicas detectadas y los resultados obtenidos para las empresas solicitantes.

## MÉNTOR E-LEARNING

MÉNTOR E-LEARNING es una empresa dedicada a: soluciones de eLearning, dirigidas a empresas, organismos o entidades que desean trasladar su formación presencial a la modalidad online; soluciones de formación a terceros, dirigidas a quienes ya disponen de un aula virtual propia; y soluciones de consultoría, dirigidas a quienes buscan asesoramiento en el ámbito de proyectos e-learning.

En dicha empresa se detectaron las siguientes necesidades tecnológicas que se muestran a continuación:

- Necesidad de asesoramiento sobre el cumplimiento en las aulas virtuales (LMS Moodle) desplegadas por la empresa, en cuanto a la normativa WCAG 2.0 sobre accesibilidad web, y sobre las modificaciones necesarias para cumplir los niveles de accesibilidad A y AA.
- Se precisaba de un análisis de accesibilidad completo de toda la plataforma web con la que cuenta MÉNTOR E-LEARNING y proponer técnicas para resolver dichos problemas.
- La empresa necesitaba evaluar la accesibilidad web en Moodle, ya que se trata de una plataforma cerrada, muy diferente a una web normal. Se pretendía proponer una serie de principios y herramientas para mejorar la accesibilidad.



#### Resultados:

- Desarrollo de un análisis de accesibilidad centrado en los criterios que se deben seguir para la consecución de certificados de profesionalidad en la modalidad de teleformación homologados por el Servicio Público de Empleo Estatal. Los requisitos se basan en el cumplimiento de las medidas de accesibilidad (Norma UNE 139803, cumpliendo A y AA).
- Proponer técnicas para subsanar los posibles errores que aparecieran durante el análisis de accesibilidad.
- Satisfacer una labor de consultoría web en normas de accesibilidad. Lo realmente innovador es tratar de asegurar la accesibilidad en Moodle, ya que Moodle se trata de una plataforma cerrada.
- Implantación de herramientas sobre la propia plataforma web para mejorar la accesibilidad.
- Proponer recomendaciones innovadoras que ayuden a mejorar la accesibilidad en Moodle.

En resumen, se ha realizado un asesoramiento sobre el grado de cumplimiento en un aula virtual LMS Moodle de la normativa WCAG 2.0 sobre accesibilidad web, así como sobre las modificaciones necesarias para cumplir otros niveles de accesibilidad. Como resultado, se consiguió contar con un aula virtual completamente accesible para personas con cualquier tipo de discapacidad que, junto a unos contenidos accesibles, permite que cualquier alumno pueda realizar formación online.



## OMICRÓN ELEVADORES S.A.

OMICRON ELEVADORES es una empresa dedicada al sector de la elevación, especializada en proporcionar soluciones de transporte vertical en edificios y teniendo como actividad principal el diseño, venta, instalación, mantenimiento y reparación de todo tipo de aparatos elevadores tales como ascensores, montacoches, plataformas industriales, salvaescaleras, montacargas, elevadores unifamiliares, etc.



### Necesidades:

- Se necesitaba diseñar un sistema de información final que una vez desarrollado y desplegado mejorara notablemente el rendimiento de los servicios prestados por la empresa.
- La gerencia de OMICRON necesitaba asesoramiento para poder ejercer un mejor control sobre sus empleados. En este sentido, necesitaban alternativas para llevar a cabo este control de la manera menos invasiva posible.

### Resultados:

- Diseño de un sistema de información que incremente la eficiencia y eficacia de los servicios de OMICRON:
  - Eliminando papel.
  - Eliminando duplicidades.
  - Utilizando mayormente recursos tecnológicos disponibles.
  - Reduciendo el coste económico asociado.
  - Valiéndose de nuevas tecnologías.
- Análisis del despliegue del sistema de información diseñado:
  - Despliegue local
  - Despliegue en la nube.
- Estudio de soluciones para un mejor control del personal.
- Valoración de oferta de despliegue de Binsa (suministradora del software de gestión interna de OMICRON) para satisfacer las necesidades tecnológicas.

Nombre ▾	Tipo	Modificado
 Partes de trabajo	carpeta	--
 Facturas	carpeta	--
 Contrato	carpeta	--



Resumiendo, en este vale tecnológico se ha realizado el desarrollo de un sistema de innovación que mejorase la productividad y la competitividad de las actividades cotidianas en la empresa. Como resultado, se ha conseguido eficacia y eficiencia en los servicios de instalación y mantenimiento de equipos elevadores.

### PROIGAM INSTALACIONES S.L.

PROIGAM INSTALACIONES es una empresa dedicada al estudio, ejecución y gestión de instalaciones térmicas con propuestas basadas en energías renovables. Las propuestas de esta empresa siempre estarán basadas en la mayor eficiencia solar, térmica, geotérmica, aerotérmica o de biomasa según el tipo de instalación.



Las necesidades tecnológicas detectadas en esta empresa fueron las siguientes::

- PROIGAM, junto con otras empresas especializadas, deseaban comercializar un proyecto de calderas de biomasa y gas que denominaron Biokonex.
- Pretendían ofrecer a sus usuarios un sistema integral de gestión de calderas mediante la implantación de un software o sistema de control y monitorización de las mismas.
- La solución debía ser alojada preferiblemente en la nube, usando tecnologías de Cloud Computing, y accesible desde cualquier lugar del mundo.
- Debía ser una solución para consulta desde ordenadores personales, pero también desde dispositivos móviles tales como tabletas, teléfonos y similares.
- El sistema de control debía disponer de diferentes perfiles de acceso, en función de las necesidades de cada tipo de usuario.
- Se contemplaba la posibilidad de examinar el prototipo para que los técnicos pudieran estudiar usar sus características y así poder realizar una consultaría con mayores garantías de éxito.

A continuación, se muestran los resultados a los que se han llegado en la realización de este proyecto:

- Estudio de un modelo de transformación de los datos provenientes del prototipo, y almacenados en una base de datos MySQL, hacia un sistema manejable por parte de PROIGAM que permita su fácil consulta y representación.
- Obtención de un sistema de representación de dicha información transformada, centrandó el interés en la representación de un conjunto de valores de temperaturas y potencias obtenidos a partir de los datos en crudo enviados por el prototipo.
- Redacción de un documento de referencia a modo de manual de puesta en marcha.



En resumen, se ha ofrecido asistencia tecnológica para el desarrollo de un proyecto innovador, con servicio de transformación de datos, representación de los mismos e implantación de licencia tecnológica y formación de empleados para una mejor explotación del producto.

### NETWORK LANGUAGES FORMACIÓN S.C.

NETWORK LANGUAGES es una empresa especializada en el aprendizaje de las habilidades comunicativas y en el desarrollo y potenciación del talento de las personas y organizaciones que desempeñan su labor en un entorno



Internacional. Esta empresa acelera las habilidades de comunicación en diferentes idiomas para empresas, organizaciones o profesionales que trabajan en entornos internacionales. El principal problema que se detectó en esta empresa estaba relacionado con su página web (incluida en el gestor de contenidos Drupal) debido a las siguientes razones::

- Era necesario aportar herramientas que permitieran generar contenido de manera más versátil y fácil.
- Se necesitaba modificar los tipos de contenido existentes en Drupal para incluir funcionalidades extra.
- Se debía simplificar y reorganizar el contenido de la página principal, centrándose en destacar la información de mayor interés o más beneficiosa para la empresa, con el fin de dar a conocer los servicios de manera más efectiva y potenciar su contratación.
- Se precisaba simplificar y reorganizar el contenido secundario, aportando además funcionalidades que permitan crear y gestionar el contenido de manera más versátil.
- Era adecuado mejorar la accesibilidad y usabilidad en dispositivos móviles.

Se ha llegado a los siguientes resultados mediante el servicio ofrecido:

- Configuración de una herramienta más versátil para la generación de contenido: fue necesario revisar el sistema de edición de contenido, reconfigurarlo para que permitiera incluir contenido enriquecido (full html) y realizar una nueva asignación de permisos para el nuevo tipo de contenido enriquecido.
- Modificación de tipos de contenido:
  - Asesoramiento: se realizó un análisis de los tipos de contenido, presentación y posibles mejoras para enriquecerlo y ganar en usabilidad.
  - Banner: el cambio más importante se realizó sobre este tipo de contenido, ya que inicialmente sólo incluía la posibilidad de añadir una imagen. Ahora se puede interconectar con cualquier tipo de contenido existente, de tal forma que, al hacer



- clic sobre un banner, se redirigió hacia el contenido seleccionado, presentándose además el banner como cabecera del contenido seleccionado.
- Noticias: se reconfiguró el tamaño de las imágenes asociadas y la cantidad de texto presentada en formato resumen y completo.
  - Blog: se reconfiguró el tamaño de las imágenes asociadas y la cantidad de texto presentada en formato resumen y completo.
- Modificación de vistas: las vistas permiten agrupar contenido y configurar la presentación del mismo:
    - Banner rotativo: se reconfiguró por completo para permitir la navegación entre banners y el acceso al contenido asociado a cada uno.
    - Noticias y Blogs: se unificó el formato de presentación de contenido.
    - Soluciones: las soluciones equivalen a los servicios ofertados por la empresa. En la página principal se presentaban con duplicidad de información, lo que suponía que se perdiera capacidad de focalización en los puntos de interés. Por este motivo, se eliminó la información innecesaria y se reconfiguraron las dimensiones de las imágenes asociadas con el objetivo de atraer la atención de los visitantes.
  - Adaptación a dispositivos móviles y pantallas pequeñas:
    - Modificación de menú: el módulo utilizado para construir los menús no se comportaba de manera adecuada en dispositivos móviles ni en aquellos con pantallas pequeñas. Se ha sustituido por un módulo más versátil, capaz de reconocer el tipo de dispositivo con el que se visita la página y adaptarse para garantizar la usabilidad y accesibilidad.
    - Limpieza de la plantilla del gestor de contenidos: se eliminaron líneas y espacios que delimitaban el contenido y que no se ajustaban correctamente cuando se accedía a la web desde dispositivos con pantallas pequeñas.
    - Reubicación de bloques: determinados tipos de información se incluyen dentro de bloques de contenido, que se puede ubicar en las distintas zonas de la pantalla. Se reconfiguraron para que se comportasen de manera adaptativa al redimensionar la pantalla del navegador.

Resumiendo, en este vale tecnológico se ha realizado un asesoramiento y una actualización en la mejora de un gestor de contenidos (Drupal), y se ha llevado a cabo el desarrollo del prototipo de una aplicación relacionada con el aprendizaje de inglés, con el objetivo de captar nuevos clientes y fidelizar los actuales.



## ISATEX, CEE.

ISATEX es una empresa que dedica su actividad a la personalización de ropa y obsequios mediante técnicas de bordado, serigrafía, sublimación, vinilos de impresión y corte, tampografía y transfers. También ofrecen servicios de fotografía e impresión digital en gran formato.



En esta empresa se detectaron las necesidades tecnológicas que se muestran a continuación:

- ISATEX buscaba una remodelación de la página web para ajustarse a los tiempos que corren.
- Era necesario desarrollar una implantación ligada al cliente, en la había que elaborar un plan para que el usuario aprendiera cómo utilizar los aspectos básicos de la web.
- Se tenía que llevar a cabo un análisis de la página web existente y desarrollar un sitio web nuevo para subsanar los errores y aspectos no deseados del sitio utilizado hasta ese momento.
- Había que llevar a cabo todo el proceso de migración de una web a otra.
- Se buscaba también ver algún ejemplo de tienda online que se pudiera desarrollar para ISATEX.

Los resultados obtenidos con el servicio se corresponden con los siguientes:

- Desarrollo de una nueva página web para ajustarse a los tiempos que corren, utilizando un gestor de contenidos (Wordpress), con el que la propia empresa pueda interactuar de forma sencilla, añadiendo sus productos, modificando el aspecto dependiendo de la campaña que esté realizando en un momento determinado, etc.
- Labores de consultoría web.
- Implantación ligada al cliente, mediante la elaboración de un plan para que el usuario aprendiera cómo utilizar los aspectos básicos del gestor utilizado, y así poder hacer cambios de forma sencilla.
- Análisis de la página web existente y desarrollar un sitio web nuevo de manera que se subsanaran todos los errores y aspectos no deseados del sitio utilizado hasta el momento.



- Proceso de migración de una web a otra, sin que el cliente sufra pérdidas de servicio, examinando el plan de hosting que tenga contratado, y adecuarlo al nuevo sitio web.
- Presentación de un esqueleto de tienda online (con Prestashop) por si está interesado en montarla sobre su espacio web en un futuro.

En resumen, para este proyecto de innovación se ha realizado un asesoramiento en campaña de marketing para la distribución de productos on-line y se ha creado un nuevo sitio web mediante un gestor de contenidos adaptado a las necesidades de la empresa.

### BOBIMEX S.L.

BOBIMEX es una empresa que se dedica a distribución, instalaciones y reparaciones centrándose en: la venta y suministro de material industrial; instalaciones de aire comprimido certificadas; y reparación y mantenimiento de máquinas eléctricas.



Las necesidades básicas que se detectaron en esta empresa fueron las siguientes::

- Necesidad de una mejor presencia en la red. La actual se consideraba insuficiente.
- La web corporativa realizaba su cometido pero no cumplía los estándares de usabilidad y accesibilidad: era preciso un análisis SEO (Search Engine Optimization) completo de la web con el objetivo de identificar sus debilidades.
- No existía una estrategia social-media definida: había que desarrollar una estrategia social-media.
- No se utilizaba ninguna herramienta de análisis de la actividad web, de manera que no se utilizaban palabras claves adecuadas y se desconocían aquellos servicios que más interés despertaban en los visitantes de la página: se necesitaba una herramienta de análisis de perfiles de navegación.
- La página web no ofrecía capacidades de edición y gestión de contenidos adecuados, y tampoco fue diseñada pensando en dispositivos móviles: era necesario migrar la web a una plataforma adaptable a dispositivos móviles.

A continuación se muestran los resultados obtenidos del servicio ofrecido:

- Se definió la estrategia de remodelación de la estructura web para comenzar a utilizar el gestor de contenidos Wordpress con adaptación responsable a dispositivos móviles. De esta forma BOBIMEX podrá interactuar con la plataforma de una manera sencilla, añadiendo productos en promoción, modificando el aspecto o tema en función de la campaña, introducción de novedades en su catálogo on-line, etc.



- Se ha instalado la herramienta Google Analytics para permitir a BOBIMEX analizar aspectos relativos a los perfiles de navegación.
- Se ha incluido conectividad social-media para permitir el desarrollo de una estrategia social media adecuada. Se elaboró un plan de trabajo en el que la formación del empresario le permitiera continuar con la gestión del CMS (Content Management System) una vez concluido el desarrollo del vale tecnológico.
- Se estableció también un plan de migración, que han llevado a cabo los técnicos de COMPUTAEX. Se examinó el plan de hosting actual de BOBIMEX y se corroboró que era suficiente para el alojamiento de un sistema de base de datos junto con un CMS.
- Se han proporcionado al cliente todas las credenciales para la gestión del CMS, de esta forma será la empresa la que pueda realizar las modificaciones en los contenidos una vez analizado el proyecto.

En definitiva, en este vale se ha realizado el desarrollo de un sistema de innovación que mejorase la productividad y la competitividad de las actividades de la empresa, mediante un estudio sobre la implantación de una herramienta para gestionar toda la organización y de un sistema informático de apoyo a la gestión de las relaciones con los clientes, la venta y el marketing.

### AFIMEC CENTRO DE FORMACIÓN PROFESIONAL

AFIMEC es una empresa que dedica su actividad principal a la enseñanza, abarcando a numerosos colectivos y campos de la formación. Para ello, y desde sus inicios se ha ido consolidando un grupo humano altamente profesional y cualificado para el desarrollo de su actividad. AFIMEC Formación, posee dos sedes (Badajoz y Almendralejo) donde realizan sus actividades e imparten cursos de formación a sus alumnos.



En esta empresa existían unas necesidades tecnológicas que se muestran a continuación:

- Disponían de un ERP (Enterprise Resource Planner) que conllevaba una infraestructura común para permitir el acceso a los recursos compartidos. Ese servidor requería de un tratamiento y estudio muy exhaustivo ya que la información que contenía es muy importante para el grupo empresarial.
- Se requería el estudio y la evaluación de mecanismos de copia de seguridad para mantener la información del servidor replicada y segura ante posibles ataques a sus servicios o ante fallos.



- Se requería un estudio de las comunicaciones locales, así como los caminos que sigue la información para verificar que no exista ningún punto de fuga o de acceso a la información privada de la empresa.
- Los responsables de la empresa, expusieron la necesidad de un CRM (Customer Relationship Management).
- Necesidad de implantar un mecanismo para compartir documentos entre diferentes empresas con las que vienen colaborando.
- Necesidad de implementar un mecanismo con permisos para los usuarios de manera que se restrinja el acceso a los documentos.
- Interés en la implantación de pizarras digitales en sus clases que fueran compatibles tanto con plataformas Windows como Linux.
- Estudiar la mejora que conllevara la implantación de una plataforma Moodle en sus servidores para poder ofrecer los cursos a sus alumnos tanto en local (dentro de sus instalaciones) como en el hogar del alumno.
- Necesidad de mantener un gran número de licencias para desarrollar las labores docentes en las aulas, buscando el ahorro de las mismas a través de despliegue de plataformas SAAS (Software as a Service).

Los resultados obtenidos del servicio pueden resumirse en los siguientes:

- Realización de un análisis de la infraestructura, evaluación de los riesgos y desarrollo de una política de seguridad adecuada al centro.
- Desarrollo de políticas de seguridad para compartir la información.
- Creación de un mecanismo de políticas de copias de seguridad, tanto locales, como remotas.
- Análisis de diferentes CRM que puedan ser modificados e implantados como lógica de negocio con los clientes del conglomerado de empresas a las que AFIMEC Formación pertenece.
- Evaluación de mejoras para la docencia en las aulas de formación virtuales a través de plataformas de cursos virtuales.
- Análisis de herramientas que permitan el ahorro de costes a la hora de implantar los cursos de formación sin necesidad de una instalación dedicada en cada máquina.
- Estudio de plataformas de pizarra digital que permitan una mayor interacción del profesor y los alumnos con los contenidos en clase.

Recapitulando, se ha desarrollado un sistema de innovación que mejorase la productividad y la competitividad de las actividades del centro de formación, mediante el estudio de



implantación de herramientas cloud para la gestión de toda la organización y ahorro de costes con el uso de SaaS (Software as a Service) e IaaS (Infraestructure as a Service) para unificar las infraestructuras informáticas de sus diferentes sedes.

### INSTITUTO STETICA S.L.

INSTITUTO STETICA es un centro de cirugía plástica y estética que ofrece diferentes servicios: depilación y tratamientos con láser; nutrición; medicina estética; tratamientos de alopecia; cirugía plástica y estética corporal; y cirugía vascular.



La principal posibilidad de mejora que se detectó en esta empresa estaba relacionado con su página web debido a las siguientes razones:

- La web corporativa realizaba su cometido pero se querían mejorar los estándares de usabilidad y accesibilidad: era preciso un análisis SEO completo de la web con el objetivo de identificar sus debilidades.
- Había que desarrollar una estrategia de social-media.
- Se necesitaba una herramienta de análisis de perfiles de navegación.
- Era necesario migrar la web a una plataforma adaptable a dispositivos móviles.

Para solucionar las necesidades detectadas en la empresa se llegó a los siguientes resultados:

- Migración de la web inicial a la plataforma Wordpress, poniendo especial énfasis en la utilización de un diseño visual innovador, la reestructuración del contenido actual, la adaptación responsable a dispositivos móviles y una mayor capacidad de edición y gestión del contenido.
- Instalación de la herramienta Google Analytics para permitir a INSTITUTO STETICA analizar, entre otros, los siguientes aspectos relativos a los perfiles de navegación: contenidos más visitados, páginas de entrada al sitio web, puntos de origen de las visitas, palabras claves e impacto de las redes sociales en la web.
- Ampliación de la plataforma de gestión de contenidos con conectividad social-media que permita desarrollar una estrategia social-media adecuada.
- Formación especializada a INSTITUTO STETICA en la utilización de la nueva plataforma web.

El plan de innovación llevado a cabo con INSTITUTO STETICA ha consistido en: la creación de un gestor de contenidos adaptado, un asesoramiento para el cumplimiento de los



estándares web de usabilidad y accesibilidad (con compatibilidad con dispositivos móviles), el desarrollo de una estrategia social media, así como una mejora de posicionamiento web, junto con la incursión profesional en las principales redes sociales.

### DEGUSTA SAN JUAN S.L.

DDEGUSTA SAN JUAN es una empresa dedicada a la consumición y venta al por menor de productos alimenticios y bebidas típicos de Extremadura. Las ventas son realizadas, en general, a cualquier cliente, pero en particular están interesados en los visitantes de Cáceres. La empresa dispone de una gran variedad de productos, siendo los más importantes los embutidos y los vinos. En esta empresa también se pueden encontrar: jamones, quesos, aceites, pimentón, miel, mermeladas, patés, dulces, conservas y cosmética elaborada con aceite.



En esta empresa existían unas necesidades tecnológicas que se muestran a continuación:

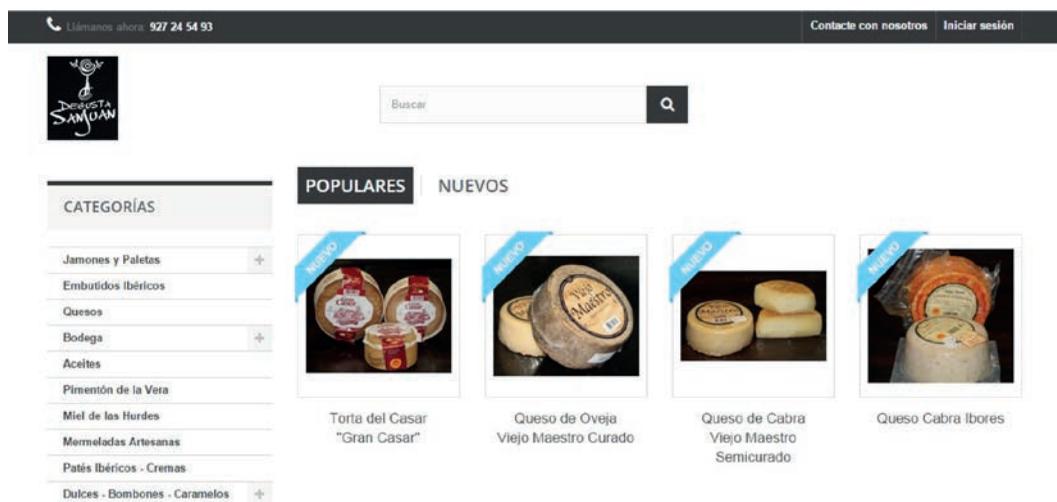
- Los responsables se mostraron interesados en disponer de un gestor de contenidos que permitiera dar a conocer el catálogo de servicios y los productos que ponen a disposición de sus posibles clientes.
- Los clientes se mostraban interesados en encargar algún producto, aunque algunos se encontraban con que el proceso para hacerlo, una vez que habían abandonado la ciudad era complicado.
- Se disponía de un perfil para la tienda en Facebook, aunque se utilizaba ocasionalmente, por lo que la difusión de la actividad del negocio no era tan eficaz como debería serlo.
- En general, había desconocimiento de las actividades que la tienda ofrecía.

Los resultados obtenidos con el servicio ofrecido se corresponden con los siguientes:

- Despliegue de herramientas que permitan difundir la actividad del negocio en la red.
- Desarrollo de un sitio web para mostrar la potencia del CMS Prestashop en lo que a la mencionada difusión se refiere.
- Creación de un prototipo de tienda virtual, para mostrar a los responsables de DEGUSTA SAN JUAN cual sería la funcionalidad generada por Prestashop.
- Enseñar a los responsables de DEGUSTA SAN JUAN a gestionar las herramientas usadas durante el desarrollo del vale tecnológico, de forma que puedan apoyarse en ellas para llevar a cabo la difusión de su actividad, con la frecuencia deseada.
- Añadir funcionalidad referente a la fidelización de clientes del negocio en el sitio web, para permitir la personalización de los encargos de productos.



- Crear una forma de contacto rápido y sencillo para que los usuarios puedan hacer uso de los servicios del catálogo de DEGUSTA SAN JUAN.
- Prestar el servicio de consultoría, y atender las peticiones de los clientes.
- Proporcionar vías adicionales de difusión de la actividad del negocio, así como algunas de pago para que los responsables del mismo las valoren.
- Mostrar la capacidad del CMS para poder utilizar las redes sociales, así como la potencialidad de las mismas para poder ayudar a la difusión del negocio.
- Aconsejar sobre el uso de las herramientas proporcionadas, de forma que la difusión sea lo más eficaz y eficientemente posible.



En definitiva, DEGUSTA SAN JUAN necesitaba una mejora en la visibilidad del negocio en Internet y como resultado se ha conseguido ofrecer un servicio más personalizado a los clientes, con el objetivo de aumentar las ventas.

## ULTRASECUENCIACIÓN GENÉTICA MEDIANTE TÉCNICAS DE SUPERCOMPUTACIÓN

### DESCRIPCIÓN

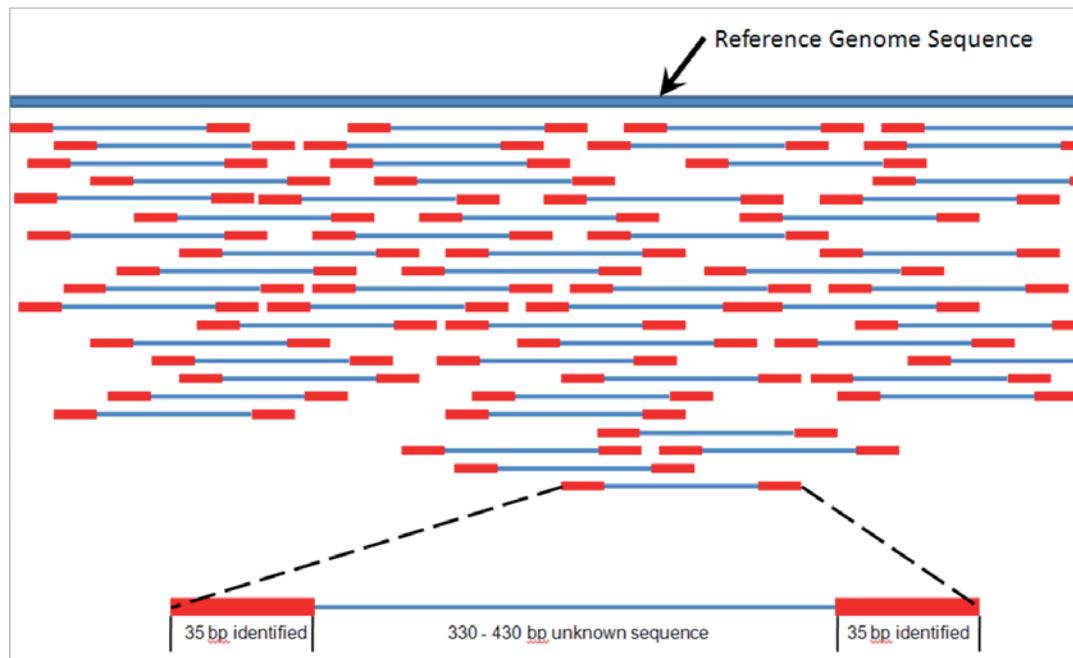
Este proyecto, asistencial y de investigación, está siendo desarrollado por el Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres (Servicio Extremeño de Salud) en colaboración con investigadores de la Fundación COMPUTAEX. Las nuevas técnicas de secuenciación masiva de ADN, cuyo uso se está imponiendo en el ámbito de la genética y la bioinformática, permiten secuenciar el genoma de un ser



humano con una reducción en términos de tiempo y coste económico cada vez mayor. Por ello, se hace necesaria la utilización de supercomputadores como LUSITANIA, que además de procesar la ingente cantidad de datos generada, para poder estudiar la información contenida en el ADN, permite simular rasgos complejos de genes, estructuras subatómicas y tridimensionales, así como aminoácidos de las proteínas.

## OBJETIVOS

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





## OBJETIVOS ALCANZADOS

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

## PROPUESTA PARA PARTICIPACIÓN EN CONVOCATORIA H2020

### DESCRIPCIÓN

Gracias a los trabajos e investigaciones realizados durante el desarrollo de los proyectos “ULTRASECUENCIACIÓN GENÉTICA MEDIANTE TÉCNICAS DE SUPERCOMPUTACIÓN” y “Estirpex-2”, se está trabajando en una propuesta para la convocatoria de Proyectos Europeos H2020-PHC-2015 (Personalising health and care), topic “Digital representation of health data to improve disease diagnosis and treatment” (PHC-30-2015).

Siendo su nombre HEREDITY: “HPC to reduce VUS rates in genetic counseling”, la propuesta sería desarrollada por un consorcio liderado por la Fundación COMPUTAEX, formado por 10 entidades tecnológicas y del ámbito de la salud de 5 países.

El objetivo de la propuesta sería desplegar un servicio gratuito para la reducción del porcentaje de VUS (Variants of Uncertain Significance) obtenidas en consejo genético. El servicio estará soportado por un sistema de apoyo a la toma de decisiones en el diagnóstico de enfermedades de origen genético, así como en la integración de fuentes heterogéneas de datos genéticos y la aplicación de técnicas de big data, para lograr predecir, cuando sea posible, la patogenicidad de una VUS.

Además, para satisfacer las demandas de los proveedores de servicios NGS, se pretende desplegar una red federada de recursos HPC entre los centros tecnológicos del consorcio.



## 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.

En concreto, la aportación de CénitS en este proyecto fue la siguiente:

- Servidor dedicado cloud con capacidad y ancho de banda para hacer videoconferencia de varias personas simultáneas.
- Acceso concurrente garantizado de 5.000 usuarios.
- Ancho de banda 1.000 Mbps.
- Acceso seguro y copias de seguridad diarias.
- Acceso seguro de administración a través de VPN.
- Centro de proceso de datos con tolerancia a fallos, seguridad perimetral y alta disponibilidad.
- Asistencia técnica y atención personal 10x5.

### 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

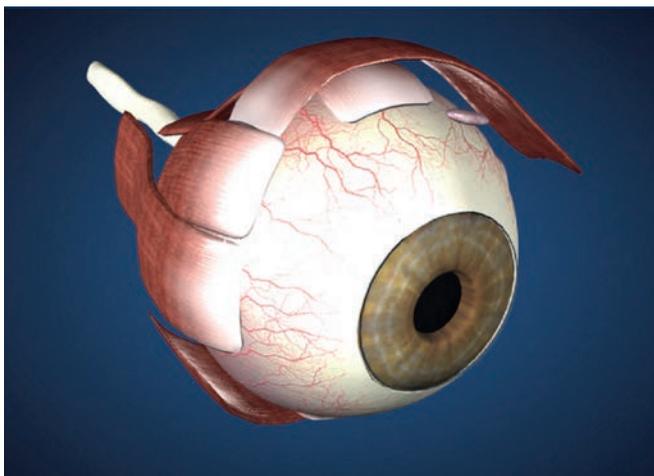
Dr. Jesús Usón Gargallo, coordinador de proyecto. Personal de las unidades de Laparoscopia, Microcirugía y Terapia Celular. Mario Suárez, especialista en diseño y animación 3D. Daniel Peguero, especialista en software. Pablo García Tres Palacios, profesional de marketing.

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





COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



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

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

# Proyectos concluidos

## CIENCIAS DE LA VIDA

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

#### Centros de investigación

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

#### Descripción

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

#### Objetivos

Estudio de Exoma completo en 3 pacientes seleccionados:

- SigAD esporádico.
- Asociado a autoinmunidad.
- Con asociación familiar.
- Valoración de las variantes en el número de copias génicas (CNVs) en los tres grupos de pacientes anteriores.
- Estudio integral de la prevalencia de enfermedades autoinmunes, alérgicas e infecciosas de toda la serie.
- Valoración de la infección por Helicobacter Pyori de los pacientes adultos mediante test de la ureasa.
- Estudio de los niveles de Inmunoglobulinas, subclases de IgG, autoanticuerpos y poblaciones B memoria como marcadores predictivos de evolución.
- Constituir un registro de pacientes asintomáticos dispuestos a donar sangre en caso de necesidad (Banco de Sangre “virtual”).
- Creación de una genoteca y seroteca de pacientes.



## 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

- Cálculo de 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.

## CONSOLIDER TECNO\_FUS

### Investigadores

José M<sup>a</sup> Gómez Ros CIEMAT.

### Objetivos

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

## 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.

## 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 perseguía 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 consistió 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, fue 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 fue 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 procesamiento 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”.

## **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, Ruth Maria Barata Morgado y Samuel Frutos Puerto.

### **Objetivos**

- Desarrollo de un software (ASEP/MD) que permite la combinación de programas de cálculo cuántico como Gaussian o Molcas con programas de dinámica molecular como Moldy o Gromacs.



- Como elementos distintivos, el programa permite, además de aplicar el método del mismo nombre, realizar optimizaciones de geometría en coordenadas internas e incorporar simulaciones con moléculas flexibles.

## EXPEDICIÓN SHELIOS 2009

---

### Objetivos

- El principal objetivo de la expedición SheliOS 2009 fue la observación y retransmisión del eclipse total de sol que tuvo lugar el 22 de julio de 2009 y cuya banda de totalidad tenía su máximo de duración en el océano Índico.

### Metodología

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

## IFMIF-EVEDA ESPAÑA

---

### 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.

## MEDIDAS 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.

**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.

**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 físico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.



## SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

### Investigadores

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

### Objetivos

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

## SIMULACIONES GIROCINÉTICAS GLOBALES DE PLASMAS DE FUSIÓN CON EUTERPE

### Investigadores

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

### Objetivos

- Simulación para estudiar la dependencia de la calidad de las simulaciones no lineales realizadas con EUTERPE con parámetros de entrada como paso de tiempo del integrador, número de marcadores y número de nodos en la malla espacial. Se estudiaron inestabilidades ITG en el stellarator TJ-II a través de simulaciones en régimen lineal en la configuración estándar (100\_44\_64), para plasmas con  $\beta = 0\%$ . Se caracterizaron las tasas de crecimiento de estas inestabilidades en esta configuración.
- Estudio del confinamiento de impurezas en plasmas turbulentos en simulaciones en geometría cilíndrica usando perfiles de densidad y temperatura similares a los medios experimentales en el stellarator W7AS en modos de alto confinamiento (IC). Se encontraron inestabilidades numéricas que impidieron avanzar en estos regímenes.
- Para el estudio de la topología de flujos turbulentos, se realizaron simulaciones lineales en geometría cilíndrica usando un perfil de transformada rotacional de tipo tokamak. Cambiando los perfiles de densidad y temperatura se encontraron regímenes con diferentes grados de inestabilidad ITG y diferentes espectros, que posteriormente fueron analizados en el régimen no lineal y caracterizados desde el punto de vista topológico.



## CIENCIAS DE LA TIERRA

---

### ABAQUS

---

#### Investigadores

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

#### Objetivos

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

#### Metodología

Para alcanzar el objetivo anteriormente mencionado se ha simulado, 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 han analizado los fenómenos de transferencia de energía, momento y materia en los procesos termoquímicos a los que se somete la biomasa (combustión, gasificación, etc.), prestando especial atención a la reducción de la exergía perdida. 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 ha utilizado el Método de los Elementos Finitos para resolver los complejos sistemas de ecuaciones diferenciales que se plantean en los objetivos anteriores. En concreto, se ha utilizado el programa COMSOL Multiphysics que permite el análisis simultáneo de principales procesos físicos y químicos que tienen lugar en la naturaleza. Esto permite 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 ha permitido 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 ha desempeñado 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

## **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.



## 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.

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

---

### Investigadores

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



## Descripción

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

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

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

## Objetivos

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

## Metodología

El núcleo de la metodología son los modelos meteorológicos de mesoscala. En particular el modelo Weather Research and Forecasting (WRF) es uno de los más usados dentro de la comunidad científica. Posee un conjunto amplio de esquemas físicos que permiten



adaptarlo mejor a las características particulares de cada región y es capaz de trabajar con resoluciones espaciales y temporales muy altas.

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

## PROCESAMIENTO PARALELO DE IMÁGENES HIPERESPECTRALES DE LA SUPERFICIE TERRESTRE

---

### Investigadores

Antonio Plaza Miguel de la Universidad de Extremadura.

### Objetivos

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

### Metodología

El principal problema que surge a la hora de caracterizar los elementos que aparecen en una imagen hiperespectral se basa en el hecho de que muchos 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.

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

---

## CIENCIAS INFORMÁTICAS Y DE COMUNICACIONES

---

### 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**

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



## ALOJAMIENTO DE PLATAFORMAS VIRTUALES Y WEBTV (ALDEALAB C3)

### 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 en la ciudad de Cáceres.

### Objetivos

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

## CEDIN (CENTRO EXTREMEÑO DE DISEÑO INDUSTRIAL)

### Investigadores

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)

### Descripción

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

### Objetivos

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



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

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

## COLABORACIÓN CON EL OBSERVATORIO TECNOLÓGICO UEX-HP

### Descripción

COMPUTAEX firmó el 7 de mayo un acuerdo con la multinacional HP mediante el cual la Fundación albergó la infraestructura de productos hardware que HP aportará para llevar a cabo un Proyecto de Cloud Computing. De este modo COMPUTAEX y su centro CénitS colaboran en el desarrollo del Observatorio Tecnológico creado por la Universidad de Extremadura y Hewlett Packard para el fomento de la I+D+IT.



## Objetivos

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

## 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).

### **CREACIÓN DE UN ECOSISTEMA DE NEGOCIO EN CLOUD COMPUTING. GESTIÓN AUTOMATIZADA DE LA INFRAESTRUCTURA**

---

#### **Investigadores**

Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.

#### **Objetivos**

- Investigación exhaustiva sobre el paradigma de cloud computing y sus diferencias con el grid computing.



- Estudio y asistencia a la preparación de la infraestructura de cloud computing montada para la consecución del proyecto.
- Estudio teórico y práctico sobre el manejo de herramientas vanguardistas para la administración de infraestructuras cloud y software ofrecido por HP.
- Adquisición de experiencia en el seguimiento de las fases 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.

## 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 proponía 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 CO<sub>2</sub> se reducirían 270 Kg por día.
- Los 26.000 usuarios se ahorrarían 79.083 horas al año si utilizaran la rotonda a diario.



### **Financiación**

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

## **ELECTROMAGNETIC SCATTERING FROM CANONICAL AND COMPLICATED OBJECTS**

### **Investigadores**

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

### **Objetivos**

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

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

### **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 nanoantenas plasmónicas directivas a frecuencias ópticas.
- Diseño de nanoenlaces directivos para comunicaciones intra/intercircuitales de gran interés para los futuros circuitos integrados ópticos en escalas nanométricas.
- Diseño de capas de invisibilidad para la ocultación de estructuras arbitrarias compuestas por materiales arbitrarios (PECs, dieléctricos, plasmónicos, metamateriales).
- Diseño de pócimas de invisibilidad para la ocultación de estructuras penetrables arbitrarias (dieléctricos, plasmónicos, metamateriales).

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 October 2012. Ponencia invitada.

## ENGAGE. BANDA ANCHA DE ALTA VELOCIDAD EN ZONAS RURALES

### Descripción

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

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



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

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

**Objetivos:**

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

**Metodología:**

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



## 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.

## FUTURE INTERNET: EFICIENCIA EN LAS REDES DE ALTAS PRESTACIONES

### **Descripción**

FIERRO es una red temática patrocinada por el Ministerio de Ciencia e Innovación y formada por 21 Grupos de investigación de Universidades, Centros de Investigación y Empresas españolas cuya finalidad consiste en estudiar las limitaciones actuales de las redes IP de altas prestaciones (redes de alta velocidad, metro y troncal) para diseñar la Internet del Futuro.

Los retos principales surgen en todas las capas de red ante la esperada demanda de tráfico en cuestiones de volumen, granularidad, variabilidad y movilidad, y la necesidad de construir un sistema escalable que soporte dicha demanda.

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

## GREEN CODE

### **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 abrió 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.

### **Metodología**

Partiendo de trabajos previos realizados en CénitS, 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 presentó un extenso recorrido sobre el estado del arte actual de la optimización de código fuente de ámbito general dentro del desarrollo del código para computadores de altas prestaciones. Los resultados 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”.

---

## **MEDIANELL VIRTUAL PRESS**

### **Descripción**

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

### **Objetivos**

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



## 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.
- MGAraujo, JMTaboada, F.Obelleiro, JMBertolo, LLandesa, JRivero 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 HETEROGENEUS 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 multispectrales sobre la nueva estructura, de tal manera, que las unidades de procesamiento más rápidas pueden hacerse cargo de las hojas con más mediciones, y las más lentas, de las hojas con menos mediciones.

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

#### **Objetivos alcanzados**

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

#### **Publicaciones y congresos**

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

## **PROYECTO SEDE**

### **Descripción**

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

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



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

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

#### **Objetivos alcanzados**

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

---

### **PROYECTO SYSGOBEX**

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

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

---

### **SIBE**

#### **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.

## **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.



## 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 utilizó 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 evaluó la capacidad de los mecanismos avanzados implementados en OpenSimRIPCA para reducir el tiempo de cómputo por LSP así como el volumen global de recursos empleados para ello.

## SOLUCIÓN DE PROBLEMAS ELECTROMAGNÉTICOS DE GRANDES DIMENSIONES

---

### 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”.



## SOPORTE EN PORTING A USUARIOS DEL CIEMAT EN LA PLATAFORMA DE LUSITANIA

### Investigadores

Antonio Muñoz Roldán perteneciente al Departamento de Informática del CIEMAT.

### Objetivos

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

## TAXONOMTIC

### 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 consistía 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 establecieron 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 consistió 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 fue 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 estudió 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 realizó 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”.



COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



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 durante el año 2014.

# Resultados de investigación

## PUBLICACIONES EN CONGRESOS

### ANÁLISIS Y EVALUACIÓN EXPERIMENTAL DE PROTOCOLOS DE GESTIÓN DE LA MOVILIDAD BASADOS EN IPV6

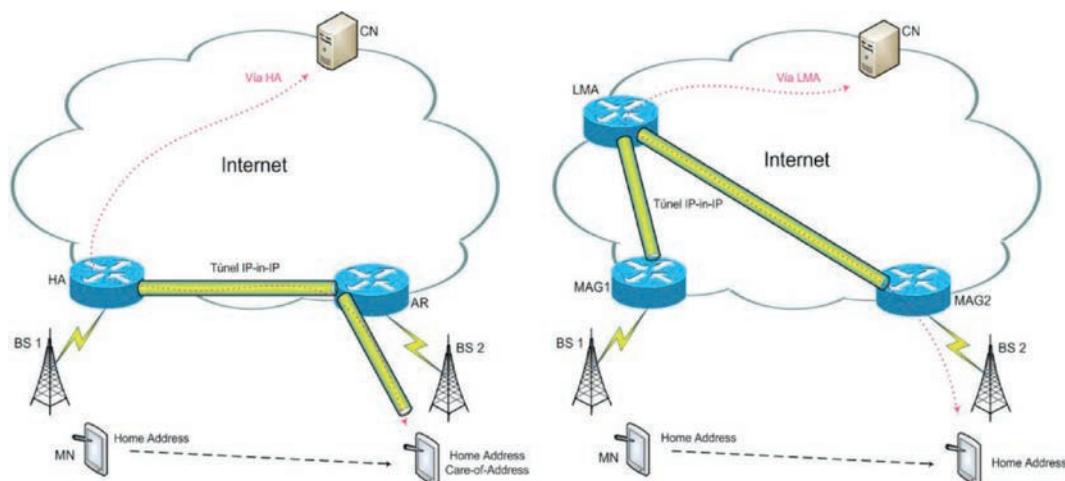
**Jesús Calle-Cancho, David Cortés-Polo, Javier Carmona-Murillo, José-Luis González-Sánchez, and Francisco-Javier Rodríguez-Pérez. Proc. IADIS Ibero-American Conference on WWW/Internet 2014, pp. 35-42, October 2014. ISBN: 978-989-8704-12-2. Eds. C. Costa, L.B. Martínez, F. M. Santoro, P. Isaias. Oporto, Portugal.**

Debido al continuo desarrollo de las comunicaciones móviles y de Internet, uno de los principales retos es conseguir la gestión eficiente de la movilidad IP en redes inalámbricas. Además, dichas redes inalámbricas no proporcionan conexiones fiables a los usuarios móviles para comunicaciones multimedia en tiempo real. En este sentido, el IETF (Internet Engineering Task Force) ha desarrollado varios protocolos de gestión de movilidad IP, tales como Mobile IPv6 y Proxy Mobile IPv6, cuyo objetivo principal es ofrecer movilidad transparente a los nodos en Internet.

La posibilidad de disponer de escenarios de pruebas para este tipo de tecnologías de última generación es fundamental para poder analizar y aplicar distintas propuestas, que permitan la optimización de dichos protocolos. En este trabajo se ha presentado un estudio experimental de Mobile IPv6 y Proxy Mobile IPv6, usando las implementaciones Universal Mobile IP for Linux y Open Air Interface PMIPv6, respectivamente.

Sobre los testbeds desarrollados, se ha llevado a cabo un análisis del handover latency; y se han realizado pruebas de throughput con tráfico en tiempo real, analizando el comportamiento de las comunicaciones multimedia cuando se introducen delays en la red de acceso.

Este trabajo de investigación fue distinguido por el comité de la conferencia como best paper de la misma, considerándolo como artículo de máxima calidad.



## AUTOMATIC GENETIC SEQUENCES PROCESSING PIPELINE IN THE CLOUD FOR THE STUDY OF HEREDITARY DISEASES

**Manuel Alfonso López Rourich, José-Luis González Sánchez, Pablo García Rodríguez y Felipe Lemus Prieto. IBERGRID 2014, 8th Iberian Grid Infrastructure Conference, First Edition. IBERGRID 2014. Aveiro, Portugal. 8-10 Septiembre 2014. ISBN: 978-84-9048-246-9. pp. 129-142.**

Processing genetic sequences is a very complex task whose success depends on the appropriate orchestration of many tools with the objective of obtaining high-level genetic information to study hereditary diseases. To achieve this objective, geneticists perform a resequencing experiment which consists of mapping intermediate genetic sequences against a consensus reference to obtain variations which can influence the development of diseases whose origin is genetic.

When performing a resequencing workflow, it is very important to know not only what are its different phases and the purpose of each task but to configure properly the used software. Determining whether the intermediate and especially the final results are correct is extremely important because in many cases this kind of analyses can be used within a clinic scope.

In addition, when it comes to Next-Generation Sequencing (NGS) platforms, it is necessary to count on infrastructure which performs well during all processing tasks, includes significant storage capacity, strong Data Center security and the ability to manage access to user data.

For these reasons, we proposed a pipeline with which geneticists can complete the



computational phases of a resequencing experiment, regardless of their knowledge of bioinformatics, in an automated manner so that at the end of the process high-level genetic information, useful to the study of hereditary diseases, can be obtained.

## RED DE INFRAESTRUCTURAS FEDERADAS APLICADA A LA ULTRASECUENCIACIÓN GENÉTICA

Javier Corral-García, César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez, y Felipe Lemus-Prieto. *Sistemas y Tecnologías de la Información, Actas de la 9ª Conferencia Ibérica de Sistemas y Tecnologías de la Información, Vol. II. CISTI 2014. Barcelona, España. 18-21 junio 2014. ISBN: 978-989-98434-3-1. pp 395-396.*

La utilización conjunta de Supercomputación y Cloud Computing (HPCC: High Performance Cloud Computing) aún no está siendo aplicada adecuadamente en sectores de la Administración y la Industria. Basado en ambas tecnologías, se ha desarrollado el proyecto FI4VDI, que persigue la creación de una red de infraestructuras federadas transfronteriza, para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo. La aplicabilidad de dicha red a la ultrasecuenciación genética es también propuesta, con el objetivo de proporcionar a genetistas un importante apoyo en el estudio de enfermedades genéticas.

En el proyecto se ha creado de una infraestructura federada y transfronteriza basada



en Cloud Computing, que utiliza los recursos disponibles en diferentes centros de supercomputación ubicados en distintas regiones del sudoeste europeo, que está destinada a generar servicios innovadores, que permitan la virtualización de puestos de trabajo para usuarios del sector público y privado. La infraestructura, gracias a otros destacables proyectos, proporciona importantes herramientas a especialistas de diversos ámbitos.

En relación a la ultrasecuenciación genética, CénitS dispone de la infraestructura tecnológica y los conocimientos necesarios para realizar el análisis secundario y el terciario con garantías. Concretamente, el centro aporta: acceso al sistema desde cualquier lugar del mundo; gran capacidad de almacenamiento de información genética; reducción del tiempo de procesado en el alineamiento de secuencias genómicas; disposición de una base de datos diseñada y desarrollada específicamente para el almacenamiento de variaciones y que otorga inteligencia adicional al sistema; disposición de una herramienta propia de filtrado y visualización de variaciones genéticas; y apoyo técnico en cada una de las fases involucradas en los análisis secundario y terciario.

rsID	Cromosoma	Posición	Alelo referencia	Alelo alterado	Longitud	Tipo	Cigotidad	GERP
-	1	94544805	T	A	1	SNV	heterozygous	11.6
-	1	145302745	A	T	1	SNV	heterozygous	0.0
-	1	146215138	A	G	1	SNV	heterozygous	0.0
-	1	146232614	A	T	1	SNV	heterozygous	7.52
-	1	146395447	A	G	1	SNV	heterozygous	9.9
-	1	146466146	G	T	1	SNV	homozygous	0.0
-	1	152128081	A	G	1	SNV	heterozygous	9.49
-	1	240371295	G	A	1	SNV	heterozygous	0.953
-	1	240371298	C	A	1	SNV	heterozygous	6.39
-	1	248801550	C	T	1	SNV	homozygous	3.41



## PUBLICACIONES EN REVISTAS

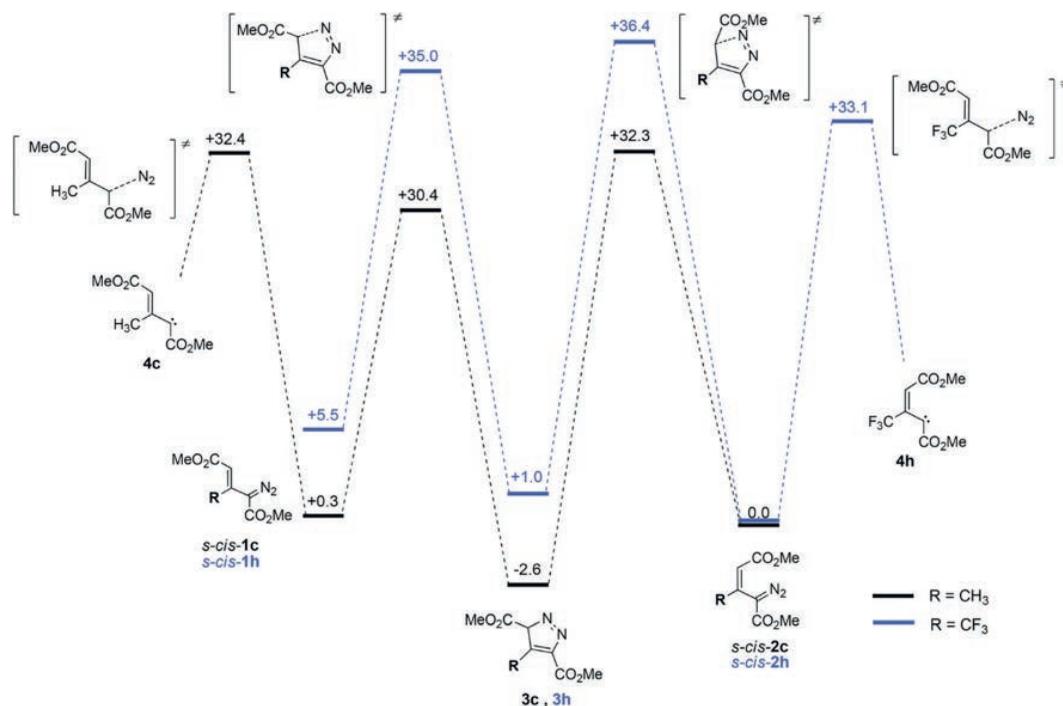
## EFFECT OF CONFIGURATION OF 2-VINYLDIAZOCARBONYL COMPOUNDS ON THEIR REACTIVITY: EXPERIMENTAL AND COMPUTATIONAL STUDY

Murat B. Supurgibekov, David Cantillo, C. Oliver Kappe, G. K. Surya Prakash and Valerij A. Nikolaev

Org. Biomol. Chem., 2014, vol 12 (4), pp. 682-689 DOI: 10.1039/C3OB42102C

Non-fluorinated vinyl diazo compounds with trans-configuration irrespective of the nature of 3-R(1)-substituent (R(1) = H, Me, TBSO) even under ambient conditions easily cyclize to produce pyrazoles, while cis-stereoisomers undergo similar ring closure only at elevated temperatures or decompose to produce vinyloxocarbene reaction products.

The 3-CF<sub>3</sub>-substituted analogues with cis- or trans-configuration do not produce pyrazoles at all, but on heating furnish only vinylcarbene derived products. DFT calculations of theoretical energy barriers adequately explain the different experimental reactivity found for stereoisomeric vinyl diazocarbonyl compounds, and a new model for their interconversion through the corresponding pyrazoles has been suggested.



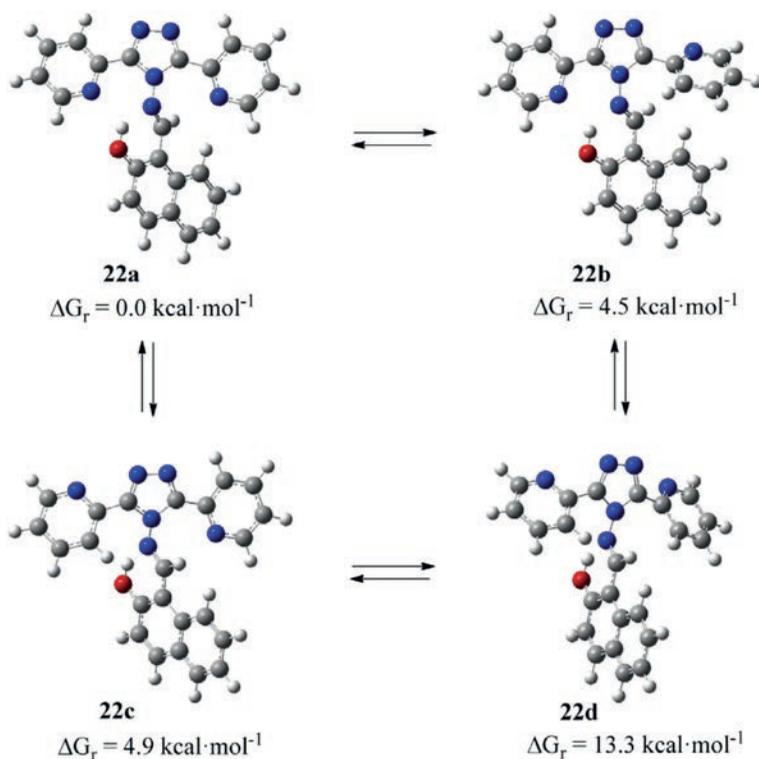


## HYDRAZONES FROM HYDROXY NAPHTHALDEHYDES. PART 2. CONDENSATIONS WITH AROMATIC N-AMINOHETEROCYCLES AND ELUCIDATION OF TAUTOMERIC STRUCTURES

R. Fernando Martínez, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, Mark E. Light, José L. Jiménez, Juan C. Palacios. *Tetrahedron* 70 (2014) pp. 2319-2329

This paper extends previous studies on hydrazones derived from hydroxyl naphthaldehydes to aromatic N-aminoheterocycles (exemplified herein by triazole derivatives), in an attempt to freeze enamine structures either by altering the electronic properties of the non-iminic nitrogen or through steric hindrance leading to coplanar dispositions between the lone pairs.

By comparing experimentally obtained results (NMR in solution and crystal data) to computationally simulated ones (via DFT calculations in the gas phase and CHCl<sub>3</sub>), the structures of the preferential conformers and tautomers can be confidently assigned. All data are consistent with enhanced stability of imine forms with respect to their enamine counterparts. DFT calculations have the ability to identify the orbital interactions responsible for electron delocalization and the energy of intramolecular hydrogen bonding. In addition, all transition structures for conformational and tautomeric equilibria are located and characterized.

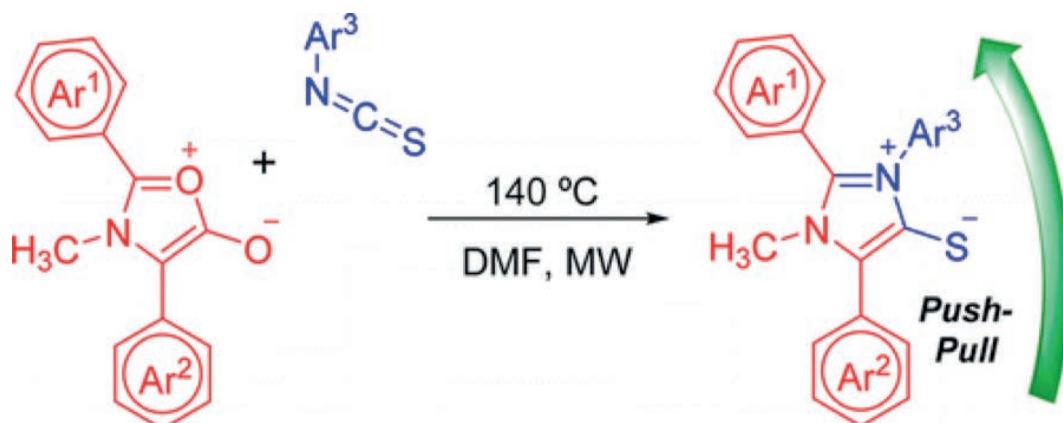




### STEPWISE FORMATION OF 1,3-DIAZOLIUM-4-THIOLATES BY MÜNCHNONE CYCLOADDITIONS: PROMISING CANDIDATES FOR NONLINEAR OPTICS

David Cantillo, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light, Juan C. Palacios, and Rocío Porro *J. Org. Chem.*, 2014, 79 (9), pp 4201–4205

An improved preparation of mesoionic heterocycles 1,3-diazolium-4-thiolates by [3 + 2] cycloadditions of münchnones with aryl isothiocyanates is reported. The process takes place with high or complete regioselectivity, and fast and clean transformations are observed under microwave heating in DMF. DFT calculations support that this cycloaddition proceeds preferably through a stepwise mechanism. Given the pattern substitution around the mesoionic ring resulting in a push–pull system, theoretical estimations predict large hyperpolarizabilities in some cases, which is typical of molecules exhibiting nonlinear optical responses.



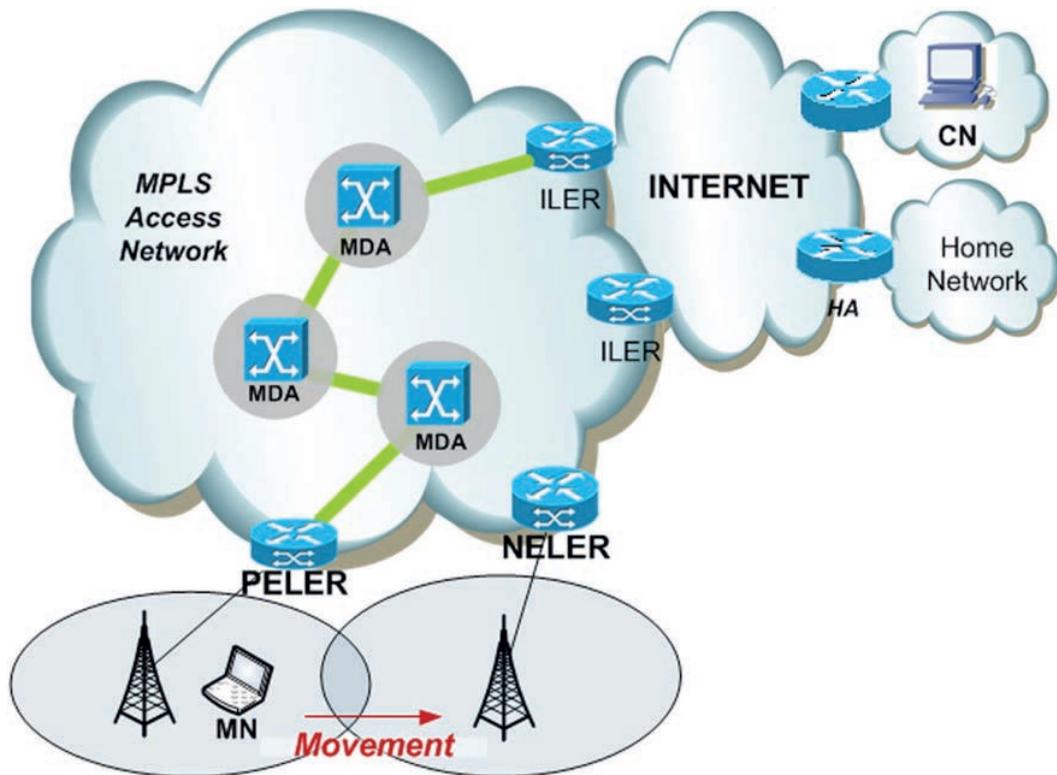
### DM3: DISTRIBUTED MOBILITY MANAGEMENT IN MPLS-BASED ACCESS NETWORKS

Javier Carmona-Murillo, José-Luis González-Sánchez, David Cortés-Polo and Francisco-Javier Rodríguez-Pérez. *International Journal of Network Management*. Volume 24, Issue 2, pages 85–100, March/April 2014

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.

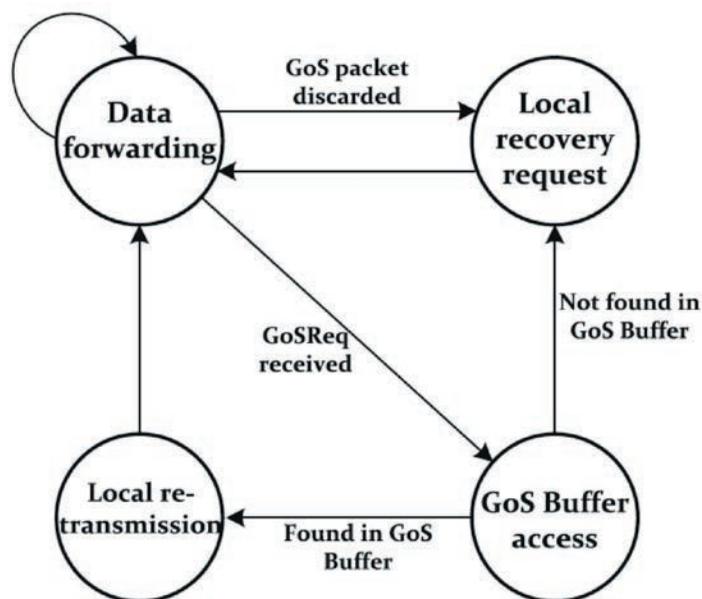


### A DELAY-ORIENTED PRIORITIZATION POLICY BASED ON COOPERATIVE LOSSLESS BUFFERING IN PTN DOMAINS

**Francisco-Javier Rodríguez-Pérez, José-Luis González-Sánchez, David Cortés-Polo, Javier Carmona-Murillo. Journal of Network and Systems Management**

New kinds of services and data flows, such as cloud computing, server virtualization, or quality of service (QoS)-aware Internet services, have led to higher demands on network resources. Thus, they have also led to increased bandwidth consumption and unexpected

congestion, especially in backbones. In this article a novel proposal is studied, with the aim of improving the performance of delay-sensitive flows. The congestion impact on those QoS-aware flows that require a high level of reliability and delay is analyzed. This management proposal has been implemented on multiprotocol label switching transport profile (MPLS-TP), which is a packet transport networks technology that provides QoS by means of flow differentiation in Internet backbones. In order to improve performance in congested networks, a guarantee of service is proposed. It allows local recovery of lost traffic of MPLS-TP privileged flows, and in order to fulfill the requirements for implementation on MPLS-TP, a minimum set of extensions to RSVP-TE has also been proposed to provide self-management capable routes. Finally, in this paper we have carried out a performance improvement measurement by means of an analytical model and simulations.



### ON THE DETECTION OF THE SOLAR SIGNAL IN THE TROPICAL STRATOSPHERE

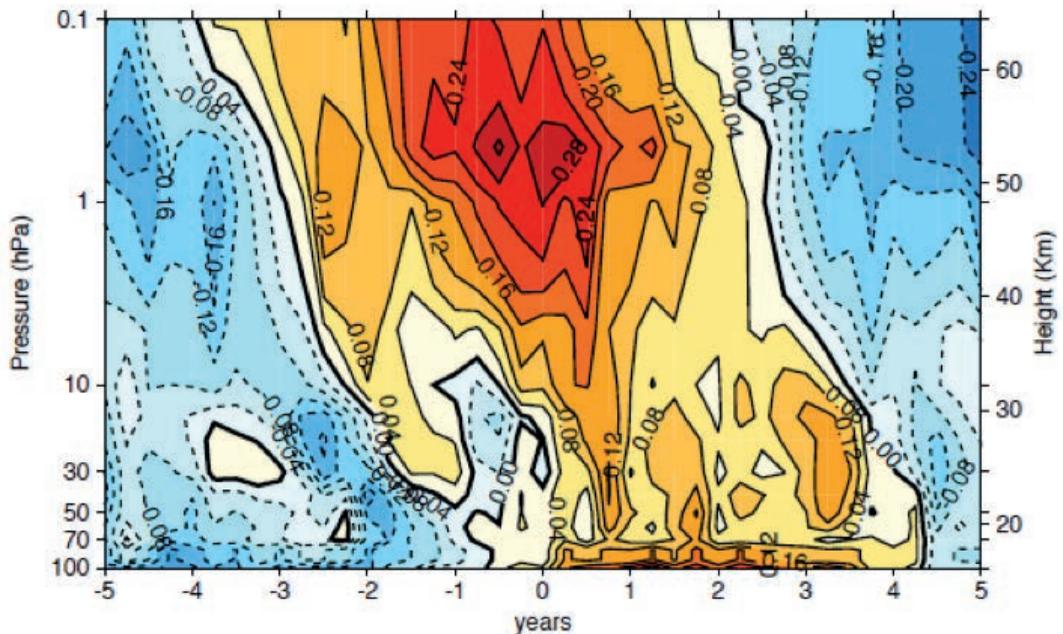
G. Chiodo, D. R. Marsh, R. Garcia-Herrera, N. Calvo, and J. A. García. *Atmos. Chem. Phys.*, 14, 5251-5269, 2014

We investigate the relative role of volcanic eruptions, El Niño–Southern Oscillation (ENSO), and the quasi-biennial oscillation (QBO) in the quasi-decadal signal in the tropical stratosphere with regard to temperature and ozone commonly attributed to the 11 \ unit{yr} solar cycle. For this purpose, we perform transient simulations with the Whole



Atmosphere Community Climate Model forced from 1960 to 2004 with an 11 yr solar cycle in irradiance and different combinations of other forcings. An improved multiple linear regression technique is used to diagnose the 11 yr solar signal in the simulations. One set of simulations includes all observed forcings, and is thereby aimed at closely reproducing observations. Three idealized sets exclude ENSO variability, volcanic aerosol forcing, and QBO in tropical stratospheric winds, respectively. Differences in the derived solar response in the tropical stratosphere in the four sets quantify the impact of ENSO, volcanic events and the QBO in attributing quasi-decadal changes to the solar cycle in the model simulations. The novel regression approach shows that most of the apparent solar-induced lower-stratospheric temperature and ozone increase diagnosed in the simulations with all observed forcings is due to two major volcanic eruptions (i.e., El Chichón in 1982 and Mt. Pinatubo in 1991). This is caused by the alignment of these eruptions with periods of high solar activity. While it is feasible to detect a robust solar signal in the middle and upper tropical stratosphere, this is not the case in the tropical lower stratosphere, at least in a 45 yr simulation. The present results suggest that in the tropical lower stratosphere, the portion of decadal variability that can be unambiguously linked to the solar cycle may be smaller than previously thought.

T',UV' [all forcings]

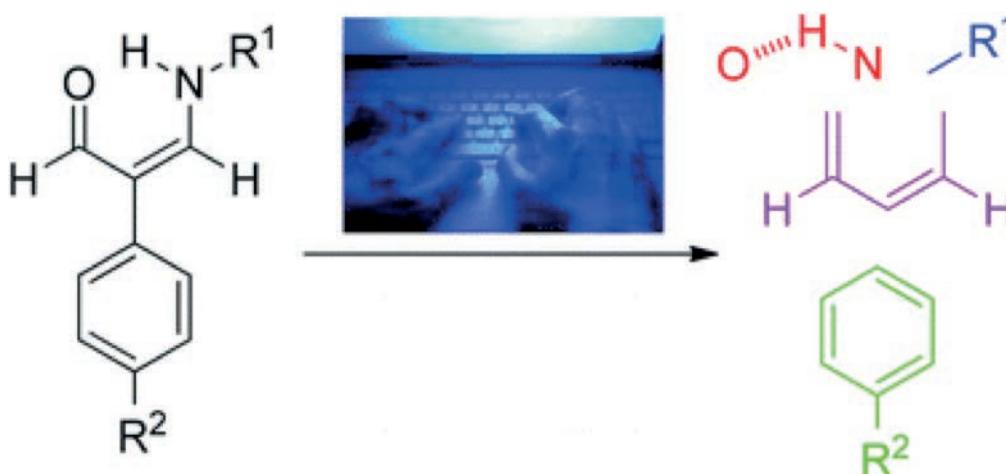




## PSEUDO-CYCLIC STRUCTURES OF MONO- AND DI-AZADERIVATIVES OF MALONDIALDEHYDES. SYNTHESIS AND CONFORMATIONAL DISENTANGLEMENT BY COMPUTATIONAL ANALYSES

María P. Romero-Fernández, Martín Ávalos, Reyes Babiano, Pedro Cintas, José L. Jiménez, Mark E. Light and Juan C. Palacios. *Org. Biomol. Chem.*, 2014,12, 8997-9010

Mono- and diaza-derivatives of malondialdehydes, namely 3-alkyl(aryl)amino-2-arylacroleins and 1,5-dialkyl(aryl)-3-arylvinamidines are open-chain systems in which extended electron delocalization and pseudoaromaticity can be envisaged. A set of diversely functionalized compounds has been synthesized and characterized by spectroscopic data and X-ray diffractometry. Quantum-chemical calculations were performed for all possible neutral tautomers and conformers in the gas phase and compared to those in polar solvents (CHCl<sub>3</sub>, DMSO, and EtOH) at the M06-2X/6-311++G(d,p) level. Tautomeric equilibria and conformational preferences can be rationalized in terms of structural factors, which can be roughly estimated as summation or subtractions of intramolecular interactions. As expected, a key role is played by intramolecular hydrogen bonds whose strength varies from the gas phase to polar ethanol. This issue also delves into the concept of resonance-assisted H-bond, where the donor and acceptor atoms are connected by a  $\pi$ -conjugated system. The most stable conformers (structures a and c) possess a high degree of pseudoaromaticity as inferred from HOMA indexes and other delocalization parameters.





## CAPÍTULOS DE LIBRO

### EL PERSONAL Y SU IMPLICACIÓN / LA DIRECCIÓN COMO MOTOR DE CALIDAD

**Felipe Lemus Prieto, José-Luis González Sánchez, David Cortés Polo. El personal y su implicación / La dirección como motor de calidad. Diez Pasos hacia la Calidad. 1 - 1, pp. 23 - 33. Cáceres, Extremadura(España). Fundación Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, 01/09/2014. ISBN 978-84-617-2121-4**

En noviembre de 2012 se celebró una reunión en las instalaciones del CCMIJU con el objetivo de difundir la calidad en los centros tecnológicos de investigación de la región. Fruto de dicha reunión, se acordó la realización de un libro que recogiera un decálogo de pasos que condujeran a la calidad de las organizaciones con la colaboración de todos los centros tecnológicos de la región.

La Fundación COMPUTAEX fue encargada de la realización de los capítulos 3 y 4, que versaban sobre la implicación del personal y el papel de la dirección en el compromiso para alcanzar la excelencia en términos de calidad.





ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



En 2014, 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.

En esta sección se relacionan los proyectos más importantes para los que se ha recibido financiación en 2014, aunque algunos de ellos tienen temporalidad de varios años.

# Proyectos competitivos

## ADQUISICIÓN, TRASLADO E INSTALACIÓN DE INFRAESTRUCTURA CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA PARA CÉNITS

Proyecto financiado en 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.

Importe financiado: 517.253,99 €

Financiado a COMPUTAEX: 362.077,79 €

## 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.

Importe financiado: 306.800 €

Financiado a COMPUTAEX: 214.760 €

## EISTER - E-INFRA NET SUSTAINABILITY TRAINING AND EDUCATIONAL RESOURCE

CénitS trabajó en el proyecto e-InfraNet junto a 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 de con otros 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).

Este proyecto fue presentado a una *call* de un proyecto encuadrado dentro 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 fue el desarrollo de 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.

Financiación total: 50.000 €

---

## 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 €

---

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

Proyecto financiado por el Programa de Cooperación Territorial del Espacio Sudoeste Europeo, SUDOE INTERREG IV B. El principal objetivo de este programa es consolidar



el Sudoeste europeo como un espacio de cooperación territorial en los ámbitos de la competitividad y la innovación, el medio ambiente, el desarrollo sostenible 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.

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

Financiación total: 859.403 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 124.850 €

## **MITTIC - MODERNIZACIÓN E INNOVACIÓN TECNOLÓGICA CON BASE TIC EN SECTORES ESTRATÉGICOS Y TRADICIONALES**

Proyecto financiado por el Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España – Portugal, FEDER-POCTEP. Aprobado por la Comisión Europea el 25 de octubre de 2007, el Programa de Cooperación Transfronteriza España-Portugal 2007-2013 promueve el desarrollo de las zonas fronterizas entre España y Portugal, reforzando las relaciones económicas y las redes de cooperación existentes entre las cinco Áreas definidas en el Programa. Este Programa permite aprovechar las amplias redes de cooperación existentes que se han venido desarrollando desde 1989, con ejecución de proyectos de infraestructuras materiales, a las que se han incorporado progresivamente otros sectores como el turismo, servicios sociales, medio ambiente, innovación tecnológica, sanidad, educación o cultura.

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.

El proyecto está desarrollado por los siguientes socios: Junta de Extremadura, ICMC, INTROMAC, CCMIJU, FEVAL, Fundación COMPUTAEX, FUNDECYT-PCTEX, CTAEX, Universidade de Évora, IPP, CEBAL, CEVALOR, ADR-IPP y CATAA.

Financiación total: 1.521.964,84 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 48.000 €

---

## **RITECA-II**

Proyecto financiado por el Programa FEDER-POCTEP. Aprobado por la Comisión Europea el 25 de octubre de 2007, el Programa de Cooperación Transfronteriza España-Portugal 2007-2013 promueve el desarrollo de las zonas fronterizas entre España y Portugal, reforzando las relaciones económicas y las redes de cooperación existentes entre las cinco Áreas definidas en el Programa. Este Programa permite aprovechar las amplias redes de cooperación existentes que se han venido desarrollando desde 1989, con ejecución de proyectos de infraestructuras materiales, a las que se han incorporado progresivamente otros sectores como el turismo, servicios sociales, medio ambiente, innovación tecnológica, sanidad, educación o cultura.

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.

Financiación total: 5.593.432,45 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 195.000 €

---

## **S4I**

Proyecto financiado por el Programa Coinvestiga, destinado a financiar la realización de proyectos de de investigación industrial y/o desarrollo experimental por agrupaciones



de empresas, con la participación efectiva de un Centro de I+D perteneciente al Sistema Extremeño de Ciencia y Tecnología e Innovación (SECTI), en las áreas estratégicas establecidas en el V Plan Regional de I+D+i.

S4I es liderado por Set Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., y cuenta con la colaboración de las empresas como Grupo OHL: Obrascon Huarte Lain S.A. y Auditoriza Diagnóstico de Sistemas S.L.P., la Universidad de Extremadura a través de su grupo de investigación Hypercomp y el centro tecnológico de supercomputación CénitS.

El objetivo principal es la aplicación de Tecnologías TIC's utilizando redes neuronales y sistemas de comunicación inalámbricos, para el desarrollo de nuevas técnicas y metodologías de monitorización de la salud estructural (Structural Health Monitoring SHM), basadas en el concepto de Software Sensor, adaptadas a las necesidades de conocimiento de información clave de las estructuras durante los procesos de construcción, explotación y mantenimiento de infraestructuras, que permiten adelantarse a la presentación de anomalías y eventos que pudieran tener repercusiones sobre el funcionamiento normal o afectar al nivel de exigencias del servicio que prestan.

Es necesario desarrollar sistemas de monitorización para garantizar la seguridad de las infraestructuras, permitiendo una evaluación de la seguridad continuada durante su vida útil. Dicho esto, el propósito de este proyecto es el desarrollo de un sistema que permita la monitorización inteligente de infraestructuras mediante sensores y redes neuronales con el fin de detectar/predecir tempranamente anomalías o daños estructurales en infraestructuras y poder aplicarlo a estructuras reales.

Financiación total: 669.242,81 €

Financiación COMPUTAEX: 113.546,40 €

## INRETEL

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

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



El objetivo principal es el desarrollo de nuevos procesos para la detección, comprobación, validación y tratamiento de incidencias (errores, mermas, etc) en los servicios de telecomunicaciones, que permitan la gestión conjunta de reclamaciones de usuarios a través una solución de software (prototipo) superando las limitaciones de los sistemas actuales que desincentivan la reclamación de los usuarios por la complejidad y el gran esfuerzo que exigen, fomentando además la reclamación masiva de usuarios. El resultado final permitirá la puesta en funcionamiento de potentes procesos de inteligencia colectiva donde los individuos actúan de manera simbiótica para conseguir objetivos inalcanzables de forma individual.

Actualmente, muchos de los usuarios de telefonía están afectados por diversos errores de las compañías como facturaciones indebidas, interrupciones del servicio, permanencias, bajas, etc., y se hace necesario desarrollar un sistema de reclamaciones efectivo. Por tanto, el propósito de este proyecto es desarrollar un prototipo TIC que permita a los usuarios detectar y generar reclamaciones para que otros usuarios puedan unirse en un clic generándose reclamaciones masivas. El propio sistema se hará responsable del resto del proceso modelando tipos de incidencias y creando protocolos que generen evidencias para asegurar la procedencia de las reclamaciones y la gestión de las mismas, para finalmente lograr un reembolso económico para los usuarios afectados que podrán quedarse o bien donarlo a una ONG.

Financiación total: 667.059 €

Financiación COMPUTAEX: 24.805 €

---

## SGDC - SMART GREEN DATACENTER

---

Proyecto financiado por el programa FEDER INNTERCONECTA, 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.



Las entidades participantes en el proyecto son: Cobra Instalaciones y Servicios, S.A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS, CETIEX e INTROMAC.

Financiación total: 1.292.423 €

Financiación beneficiario COMPUTAEX: 211.051 €

### **ESTUDIO DE OLAS DE CALOR EN EXTREMADURA: CLIMA ACTUAL Y FUTURO**

Proyecto financiado por el V Plan Regional de I+D+i, para el estudio de las series de temperaturas disponibles en la región extremeña, eligiendo aquellas más largas y con menos lagunas.

El objetivo principal es el cálculo de los niveles de retorno de temperatura extrema en una situación de cambio climático, y analizar la variabilidad espacio-temporal de los eventos de olas de calor a partir de salidas de modelos climáticos globales y regionales para periodos actuales y futuros.

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

Financiación total: 59.950 €



COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



La Fundación COMPUTAEX tiene también entre sus actividades la organización de cursos, seminarios, reuniones y la materialización de convenios con diferentes organismos.

Esta sección muestra los convenios de colaboración y las actividades realizadas por la Fundación a lo largo de 2014 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación

Al amparo del convenio firmado entre la Universidad de Extremadura y COMPUTAEX se ha becado en 2014 a dos estudiantes a tiempo parcial en CénitS, dichas becas han estado ligadas a tareas de investigación, desarrollo, implantación y provisión de servicios en CénitS.

# Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión

## 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 redes informáticas (estudio y evaluación de mecanismos de gestión de la movilidad en redes de próxima generación) e investigación en secuenciación genética (desarrollo de una herramienta automatizada de generación de pedigrís).

### HP

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

### CESGA

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

## EXTREMADURA AVANTE

---

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

## REDIRIS

---

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

Esta afiliación permite a COMPUTAEX acceder a un gran número servicios que provee RedIRIS para la 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

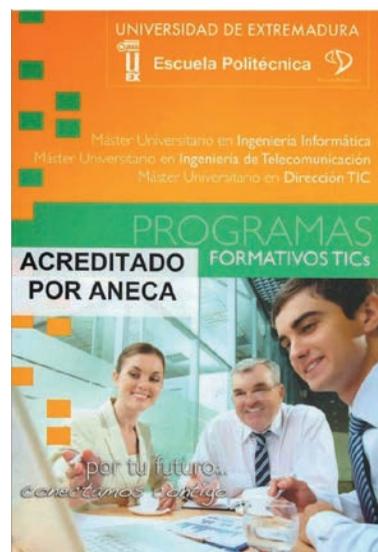
La Fundación COMPUTAEX y la Fundación CCMI han llegado a un acuerdo de colaboración para la cesión de espacios en el edificio del CCMI, que acogerá a los recursos técnicos y humanos de CénitS.

### COLABORACIÓN EN LOS MÁSTERES TIC DE LA UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

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

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

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





---

## TRABAJOS FINAL DE MÁSTER

---

### MÁSTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN. OPTIMIZACIÓN DE LA RED DE ACCESO CONMUTADA PARA PROVISIÓN DE QOS A DISPOSITIVOS MÓVILES MEDIANTE PROGRAMACIÓN LINEAL

---

#### Investigador

David Miguel Cortés Polo

#### Descripción

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

### MÁSTER EN DIRECCIÓN TIC. PROPUESTA Y ANÁLISIS DE VIABILIDAD DE UN SERVICIO ASISTENCIAL PARA LA DISPOSICIÓN DE ULTRA-SECUENCIACIÓN GENÉTICA EN UN CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN

---

#### Investigador

Manuel Alfonso López Rourich

#### Descripción

Este trabajo surge del proyecto de la Fundación COMPUTAEX “Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación con LUSITANIA”, en donde se procesan secuencias genéticas procedentes de pacientes de la región para estudiar enfermedades hereditarias y desarrollar tratamientos médicos personalizados.



La motivación para el desarrollo del Trabajo vino dada principalmente por la capacidad de aportar valor (en forma de servicios) a ciertos sectores de la región de Extremadura, gracias al desarrollo de las tecnologías de secuenciación de siguiente generación (NGS), y con el apoyo de infraestructuras de supercomputación dadas por el supercomputador LUSITANIA.

Gracias a ello, se consiguió la capacidad de poder llevar a cabo un flujo de trabajo general que permitiera la aportación de valor a los usuarios de los servicios propuestos, por el uso de los experimentos que un secuenciador de esas características puede realizar.

También se realizó un análisis de viabilidad para comprobar la posibilidad de implantar los servicios propuestos para la región.

### MÁSTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN. PROPUESTA Y ANÁLISIS DE VIABILIDAD DE UN SISTEMA AUTOMATIZADO DE DIAGNÓSTICO E INVESTIGACIÓN APLICADO A LA TECNOLOGÍA DE ULTRA-SECUENCIACIÓN GENÉTICA EN UN CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN

#### **Investigador**

Manuel Alfonso López Rourich

#### **Descripción**

Dentro de toda la gama de experimentos de secuenciación genética que la tecnología actual permite llevar a cabo, el más utilizado por los genetistas es el de resecuenciación genética. Es en sus dos últimas fases donde la bioinformática puede ser de gran ayuda, ya que se requiere la correcta orquestación de una serie de elementos software para la obtención de información genética de alto nivel, que sea útil para el diagnóstico e investigación de enfermedades cuyo origen es genético.

Con el desarrollo de este trabajo se ha llevado a cabo un estudio de viabilidad, con el objetivo de saber:

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

Desde el punto de vista del procesamiento de la información:

- Se han analizado aquellos tratamientos de secuencias genéticas que permitan un automatismo y una mejora de la eficacia en los análisis de estas, utilizando HPC (High Performance Computing).



- Se ha proporcionado a los especialistas el nivel de aplicabilidad requerido para su trabajo.
- Se ha tenido en cuenta el tratamiento personalizado que debe aplicarse a las secuencias genéticas en materia de seguridad de la información.

## MÁSTER EN INGENIERÍA INFORMÁTICA. ESTUDIO Y EVALUACIÓN DE LOS MECANISMOS DE GESTIÓN DE LA MOVILIDAD EN REDES DE PRÓXIMA GENERACIÓN

---

### **Investigador**

Jesús Calle Cancho

### **Descripción**

With the continuous development of mobile communications and Internet technology, one of the major challenges is to achieve efficient mobility management in wireless networks. IP mobility management is a key function that allows mobile nodes to continue their communications even when their point of attachment to the IP network changes. Internet protocols do not support mobility and wireless networking does not provide reliable connections to mobile users for real-time communications.

For this reason, the Internet Engineering Task Force (IETF) developed various protocols for IP mobility management such as Mobile IPv6 (MIPv6) and Proxy Mobile IPv6 (PMIPv6). These protocols employ a centralized mobility management scheme where all intelligence is concentrated in one end-point system, rather than being distributed through the internet. However, centralized mobility solutions are prone to several problems and limitations: longer (sub-optimal) routing paths, scalability problems, signaling overhead,.. This motivates Distributed Mobility Management (DMM) whose purpose is to overcome the limitations of the traditional centralized mobility management.

We focus on DMM approach that is currently being considered by the IETF: PMIPv6 based DMM. The possibility of testing scenarios for these latest technologies is essential to analyze and implement proposals to optimize and verify the results of researches.

An analysis of distributed mobility management has been carried out with this project: designing and configuring testbeds, configuring protocols and devices, analyzing critical process (handover) and analyzing exchange messages.

Moreover, a proposal has been developed for improving tunneling management in Distributed Mobility Management called TE-DMM (Tunneling Extension to Distributed Mobility Management), based in the improvement of control plane (signaling). In conclusion, TE-DMM will conduct an efficient management of control plane.



## MÁSTER EN INGENIERÍA INFORMÁTICA. PEDIGREEX: GESTIÓN AUTOMATIZADA DE PEDIGRÍS HUMANOS EN CONSEJO GENÉTICO

### Investigador

Noelia Alonso Sánchez

### Descripción

El Consejo Genético es una de las actividades propias de la Genética Clínica y consiste en un proceso comunicativo para informar, educar y dar soporte a individuos y familias que tienen una enfermedad genética o el riesgo de tenerla. El Consejo Genético les brinda a los pacientes información acerca de su enfermedad y les ayuda a tomar decisiones informadas. Un aspecto fundamental en dicho Consejo Genético es la generación y análisis del Pedigrí del paciente afecto, pero la carencia de una herramienta automatizada para ello complica la labor del especialista. Tras identificar las necesidades de los propios genetistas de nuestra región se han analizado diferentes herramientas, ya desarrolladas, para trabajar con Pedigrís tanto de carácter privativo como libre (Cyrillic, Progeny Clinical, GRAMPS, Madeline 2.0 PDE, GenoPro, PED, PELICAN, etc.), y ninguna de ellas integra totalmente las necesidades de los especialistas.

Para solventar esta carencia y mejorar la eficiencia en su trabajo diario de Consejo Genético, se ha desarrollado una herramienta de software libre y de escritorio, la cual:

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

## BECAS DE FORMACIÓN

### BECARIO

Jesús Manuel Calle Cancho. Máster en Dirección TIC y Máster en Ingeniería Informática.

### Descripción

Uno de los principales resultados del acuerdo firmado entre la Universidad de Extremadura y la Fundación COMPUTAEX ha sido la realización de un estudio y evaluación



de mecanismos de gestión de la movilidad en redes de próxima generación, cuyo principal objetivo fue estudiar y evaluar la gestión de movilidad distribuida basada en implementaciones *open source*, y su puesta en marcha en entornos reales para analizar procesos críticos como el *handover*, diseñando e implementando una propuesta para la mejora de dicho proceso.

Durante el desarrollo de la beca se llevó a cabo la elaboración y presentación de un artículo en la 12ª IADIS Ibero-American Conference on WWW/Internet 2014 titulado “Análisis y evaluación experimental de protocolos de gestión de la movilidad basados en IPv6”. Dicho artículo fue considerado por el Comité Rector de la Conferencia como *Best Paper* del congreso, tomando en consideración el resultado del proceso ciego de revisión.

Por otro lado se ha participado en diversos proyectos TI y de innovación, en los que se encuentra trabajando la Fundación COMPUTAEX, como TaxonomTIC (un estudio sobre la situación de un sector clave en Extremadura) o el Programa de Vales Tecnológicos.

Por último se han impartido charlas en las instalaciones del Centro I.E.S. Sáenz de Buruaga en el III Campus Informático EnRed@ con la ciencia y en la Noche Europea de los investigadores.

### **Objetivos**

- Revisar el estado actual de la gestión de la movilidad distribuida en Internet, estudiando implementaciones *open source*.
- Diseñar un entorno de pruebas real basado en el paradigma *Distributed Mobility Management (DMM)*, para poder llevar a cabo pruebas sobre él.
- Diseñar una nueva propuesta centrada en la extensión de túneles en DMM e implementar la propuesta de tunelización basada en la gestión eficiente del plano de control.
- Realizar una prospectiva nacional y europea, para dar a conocer la realidad del sector TIC extremeño en relación a España y Europa, que permita conocer su estado y evolución a lo largo del tiempo.
- Realizar un informe de accesibilidad de la plataforma de Méntor E-learning englobado dentro del Programa de Vales Tecnológicos.
- Apoyo en actividades de difusión realizadas por CénitS.



### Objetivos alcanzados

- Presentación del Trabajo Fin de Máster en Ingeniería Informática denominado: “Estudio y evaluación de los mecanismos de gestión de la movilidad en redes de próxima generación”.
- Desarrollo y presentación de un artículo de investigación a la 12ª IADIS Ibero-American Conference on WWW/Internet 2014, en el que se analizan enfoques de movilidad centralizada desde un punto de vista experimental.
- Se ha colaborado en actividades impartidas por el centro tales como: “Enredos con la ciencia” o la “Noche de los Investigadores 2014”.
- Realización de una prospectiva nacional y europea del sector TIC, englobada dentro de uno de los proyectos de CENITAL-2 llamado TaxonomTIC.
- Por último se ha trabajado el Programa de Vales Tecnológicos realizando un análisis de accesibilidad web.

### BECHARIA

Noelia Alonso Sánchez. Máster en Ingeniería Informática.

#### Descripción

La presente beca ha tenido como objetivo principal ayudar a los genetistas de nuestra región en el estudio de enfermedades hereditarias de sus pacientes, es decir, se pretende optimizar el trabajo diario de estos especialistas en Consejo Genético, automatizándolo lo máximo posible, y por extensión ayudar a sus pacientes, los ciudadanos de nuestra región.

Con ello se ha participado en cierta medida en el subproyecto Estirpex-2 llevado a cabo en CénitS, y que se centra en el estudio de enfermedades hereditarias a través de la obtención y el análisis de variaciones en la secuencia genética de determinados exomas, obtenida mediante tecnologías NGS (*Next-Generation Sequencing*).

Además de este subproyecto, se ha colaborado activamente en el desarrollo de un vale tecnológico llevado a cabo en COMPUTAEX, y centrado en la elaboración de un prototipo de aplicación de representación de datos en formatos de tabla y gráficos.

Por último, se han realizado tareas de apoyo en el centro, colaborando en las diferentes actividades desarrolladas en CénitS.

#### Objetivos

- Introducirse y profundizar en el consejo genético. Elaboración de herramienta de pedigrís como herramienta para consejo genético.



- Conocer y profundizar en el marco legal vigente para el tratamiento de los datos clínicos de los pacientes de consejo genético con los que trabajarán los médicos implicados en la investigación de enfermedades hereditarias.
- Desarrollar una herramienta software de apoyo al trabajo diario de los especialistas de nuestra región en consulta de consejo genético cuando deban estudiar una enfermedad hereditaria y realizar su diagnóstico.
- Apoyo en tareas cotidianas en CénitS.

#### **Objetivos alcanzados**

- Presentación del Trabajo Fin de Máster en Ingeniería Informática denominado: “PedigreeX: Gestión Automatizada de Pedigrís Humanos en Consejo Genético”.
- Adaptación a la Norma CVN.
- Asistencia a la Noche de los Investigadores 2014.
- Participación en las VII Jornadas CénitS. TIC: la importancia de un sector troncal y transversal.
- Por último se ha colaborado en el Programa de Vales Tecnológicos ayudando en el despliegue de un servicio de transformación de datos.

#### **BECARIO**

---

Francisco Antonio Díaz Redondo. Máster en Ingeniería Informática.

#### **Descripción**

Con esta beca se pretendía conocer el centro de supercomputación y sus proyectos y dar cobertura y apoyo a dos proyectos de innovación del programa de Vales Tecnológicos 2014.

Además, se han llevado a cabo otras tareas de apoyo en el centro, colaborando en las diferentes actividades desarrolladas en CénitS, tales como las 7ª Jornadas CénitS.

#### **Objetivos**

- Implantar un software en la empresa Proigam para una mejor gestión de la explotación de sus productos, ya sea mediante un CRM o un plan de negocio.
- Aumentar la formación de los empleados de Proigam en lo relativo a la explotación de proyectos.
- Análisis de las posibilidades de la utilización de Cloud Computing para lograr una mayor estabilidad, más adaptabilidad y reducción de costes en la empresa Bobimex.
- Unificación y actualización automática de los datos de los clientes, datos históricos y preferencias de la empresa Bobimex.



## Objetivos alcanzados

- Estudio y análisis de principales sistemas CRM de código abierto con su consiguiente elaboración de informe para la empresa Proigam.
- Migración, actualización y replanteamientos del portal web de Bobimex.
- Consultoría, implantación y migración de blogs.
- Estudio y puesta en marcha de un entorno Wordpress.
- Realización de estudio de viabilidad del despliegue de la plataforma de la empresa Bobimex.
- Participación en la 7ª Jornadas Cénits.

## 7ª JORNADA CÉNITS – TIC: LA IMPORTANCIA DE UN SECTOR TRONCAL Y TRANSVERSAL



La 7ª Jornada Cénits, presentada bajo el título “TIC: la importancia de un sector troncal y transversal”, se celebró el día 4 de diciembre de 2014 en el Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón, en Cáceres. La apertura se realizó a las 10:00 por parte de María Guardiola Martín (Secretaria General de Ciencia y Tecnología del Gobierno de Extremadura), Pilar Gómez de Tejada Díaz (Directora General de Administración Electrónica y Tecnologías de la Información del Gobierno de Extremadura) y José Luis González Sánchez (Director General de la Fundación COMPUTAEX).

La jornada contó con 8 horas de duración, dividida en mañana y tarde y logró reunir a algo más de medio centenar de asistentes, entre los que se encontraban empresarios, investigadores y estudiantes.



El programa contó con las siguientes 10 ponencias:

- *Extremadura, Hub Mundial Agrotech.* María Guardiola Martín. Secretaria General de Ciencia y Tecnología del Gobierno de Extremadura.
- *TaxonomTIC: Taxonomía de un sector prioritario para Extremadura.* José Luis González Sánchez. Director General de la Fundación COMPUTAEX.
- *Mujer, tecnología e igualdad.* Pilar Gómez de Tejada Díaz. Directora General de Administración Electrónica y TI del Gobierno de Extremadura.
- *Las TIC como herramienta fundamental del marketing actual. Caso Whatsred.* Andrés García Carranza. CEO de Whatsred.
- *Remotte, un sueño hecho realidad.* Juan Carlos Ramiro Barambones y Diana López Salas. CEO y COO en Remotte Labs.
- *La importancia de la formación.* Luis Arévalo Rosado y Pedro J. Clemente Martín. Centro Universitario de Mérida y Escuela Politécnica de Cáceres.
- *Revisión del sector TIC desde el punto de vista de las Profesionales Informáticos.* Markus Hernández Droth. Presidente del Colegio profesional de Ingenieros en Informática de Extremadura.
- *El papel de los telecos en la sociedad.* Paula Lema Camean. Vocal del la Junta del Colegio Oficial Ingenieros de Telecomunicación.
- *No sabíamos que era imposible así que lo hicimos.* Abraham Holgado García. Responsable de Investigación y Desarrollo de Mobbeel.
- *CO-Cluster: desarrollando nuevas oportunidades.* Jaime Rubio Rincón. Vicepresidente del Cluster del Conocimiento de Extremadura.





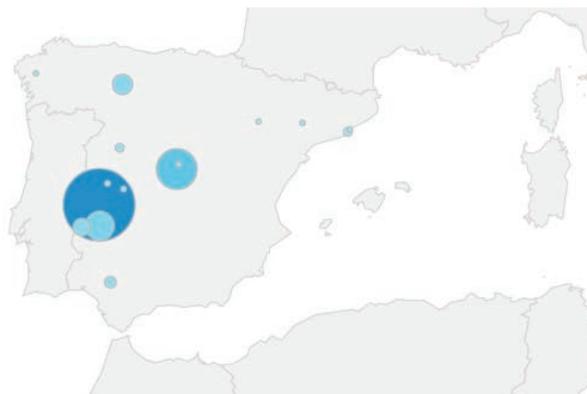
La Fundación COMPUTAEX comenzó la difusión del evento el día 19 de Noviembre a través de la página web oficial y los medios sociales a su disposición, obteniendo un impacto notable en los distintos medios llegando a más de media docena de impactos en medios de comunicación.

El tráfico web generado por el evento supuso un 1 % 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 (%)
489	123	52	48

Además, el tráfico web generado por el evento supuso un 6,97% del tráfico comprendido entre el inicio de la difusión y fin de año, obteniéndose además un incremento del 10% de la duración media de las visitas un 7,68% más de páginas por visita y reduciéndose casi un 21 % el porcentaje de llegadas a la web sin estar buscando el contenido exactamente.

A continuación se muestra la procedencia de las visitas recibidas:





## II FERIA TECNOLÓGICA

**2ª Feria Tecnológica: "SmartX"**  
Festividad de la Escuela Politécnica 2014 #semanaEPCC

**Lunes 5 mayo**  
10h-17h  
En el Pabellón de Informática de la EPCC (por la mañana) y en las instalaciones de INSA, a la entrada del campus (por la tarde)

**9:30** Apertura

**10h-10:15** Acto de inauguración: Vicerrectora de la UEX "Universidad Digital", Carmen García González

**10:15h-12h** Exposición: 11 empresas (5 minutos exposición + 2 minutos preguntas: 5 diapositivas máximo): Computaex, Cenatic, Gloin, Oficina de Orientación Laboral, Reinn, Asociación Española de Ingenieros de Telecomunicación (Asiit), Acontel-Cecor, Soluciones Infytel, Dinsa, Nee, D5multimedia-ASPgems.

**12:00h-12:30h** descanso café

**12:30h-14:30h** Exposición: 12 empresas (5 minutos exposición + 2 minutos preguntas: 5 diapositivas máximo): Cátedra Telefónica de la UEX, Tuwika, Proyecto EDEA, Sensolog, Canal Extremadura, Playflytweet, Campus Virtual UEX, Ceta-Cemat, Joca, Intromac, Soluciones, Intesmedia.

**14:30-15:30h** Cóctel patrocinado por la empresa INSA en sus instalaciones a la entrada del campus de Cáceres, al lado de la EPCC (edificio de cristal)

**15:30-16:00h** Insa

**16:00h-17:00h** Debate-Tertulia con mesa redonda: "Las tecnologías SMARTX en las empresas y en Extremadura"

**17:00h** Cierre de la Feria

Logos: insa, SmartPoliTech, Escuela Politécnica

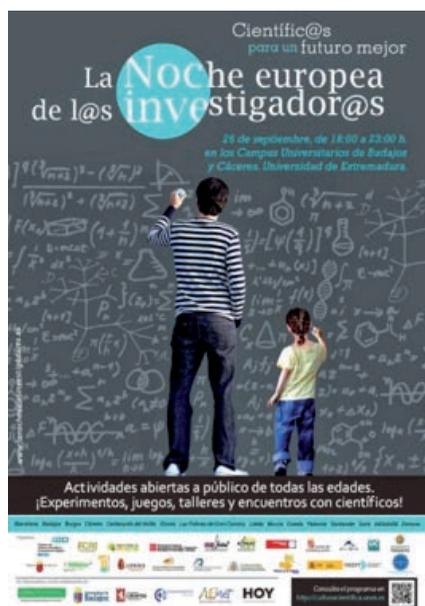
La Escuela Politécnica de Cáceres organizó la II Feria Tecnológica durante la semana cultural del centro, en la que participaron empresas e instituciones de la región con el fin de realizar charlas informativas y acercar las actividades que desarrollan a la comunidad estudiantil, docente e investigadora. En esta ocasión la feria tenía como principal objetivo profundizar en las tecnologías SMARTX en las empresas y en Extremadura.

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, realizó una ponencia donde se expusieron los proyectos en los que participa CénitS relacionados con tecnologías SMARTX.





## NOCHE DE LOS INVESTIGADORES 2014



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

El programa de la edición de 2014 se celebró el 26 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 “Informática: Del ábaco al supercomputador LUSITANIA”, en el que se mostraron ejemplos de uso de los supercomputadores, con ejemplos visuales tales como el cálculo de fractales, el número pi, el problema de las ocho reinas o el problema del viajante.

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.



**ASISTENCIA A CONGRESOS, JORNADAS, CURSOS Y EVENTOS**

Fecha	Lugar	Nombre	Participación
23/01/14	Facultad de Ciencias de la UEx, Badajoz	Jornada de presentación del nuevo programa MARCO de I+D+i de la Unión Europea: Horizonte 2020	Asistentes
23/01/14	Mérida	Jornada sobre fondos europeos EXTREMADURA 2020	Asistentes
21/02/14	Mérida	Presentación Neurona	Asistentes
05/03/14	Escuela de Administración Pública, Mérida	Programa Coinvestiga: financiación de proyectos de I+D en cooperación	Asistentes
19/03/14	EPCC, Cáceres	Proceso de Acreditación Piloto de Aneca: MIT y MDT	Asistentes
20/03/14	MEIAC, Badajoz	Jornada de presentación del proyecto MITTIC, Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales	Asistentes
01/04/14	PCTEX, Badajoz	Taller práctico 04i Horizonte 2020	Asistentes
29/04/14	Mérida	III Campus informático IES Saenz de Buruaga	Ponentes
29/04/14	Mérida	Día de Europa en Mérida	Participantes
05/05/14	EPCC, Cáceres	II Feria tecnológica	Participantes
07/05/14	Fundecyt-PCTEX, Badajoz	Salud y Envejecimiento Activo. Oportunidades de financiación en Europa	Asistentes
12/05/14	Edificio Embarcadero, Cáceres	Asamblea General y Asamblea General Extraordinaria del Cluster del Conocimiento de Extremadura	Asistentes
12/05/14 14/05/14	Cáceres	La luz al servicio del hombre	Asistentes
30/05/14	Badajoz	Premios grada 2014	Asistentes
11/06/14	Feval, Don Benito	Tecnologías que impulsan la competitividad de las PYMEs	Asistentes
18/06/14	Palacio de Congresos Manuel Rojas, Badajoz	Foro de cooperación empresarial Cavatrans	Asistentes
20/06/14	Barcelona	CISTI 2014	Ponentes
21/06/15	Leipzig, Alemania	HP-CAST-22	Asistentes



Fecha	Lugar	Nombre	Participación
25/06/15	PCTEX, Badajoz	Jornada de presentación de resultados del proyecto SIATDECO	Ponentes
01/07/14 03/07/14	Asamblea Extremadura, Mérida	Curso internacional de verano "Las ciudades inteligentes y las oportunidades asociadas"	Ponentes
08/09/14 09/09/14	Aveiro	IBERGRID 2014	Ponentes
09/09/14	Cáceres	Apertura del Curso Académico 2014/2015	Asistentes
12/09/14	Cáceres	Workshop Europeo - Advanced Technologies for Training in Minimally Invasive Surgery	Asistentes
15/09/14	Badajoz	Encuentro "Cloud Computing Extremadura"	Asistentes
26/09/14	EPCC, Cáceres	Noche Europea de los Investigadores 2014	Ponentes
23/10/14	Granada	III HPC Users Group	Asistentes
24/10/14	Badajoz	Seminario "Soluciones innovadoras para el renacimiento industrial"	Asistentes
25/10/14 27/10/14	Oporto	IADIS WWW/Internet 2014	Ponentes
03/11/14 06/11/14	Mérida	Cursos de Certificación Fortinet FCNSA & FCNSP v5.1	Asistentes
24/11/14 27/11/14	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	Jornadas técnicas de RedIRIS 2014	Ponentes
27/11/14	Instalaciones del BBVA en Tres Cantos, Madrid	HPCast Iberica: 7º encuentro de usuarios de Supercomputación	Ponentes
11/12/14	EPCC, Cáceres	Taller AgroTech Startup	Asistentes
04/12/14	Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón	7ª Jornada CénitS	Organizadores
15/12/14	Complejo asistencial universitario de León	Jornada de presentación de resultados del proyecto FI4VDI	Ponentes
16/12/14	Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón	I Jornada de investigación en salud	Ponentes



## PORTAL WEB



El Centro Extremeño de iInvestigación, 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.



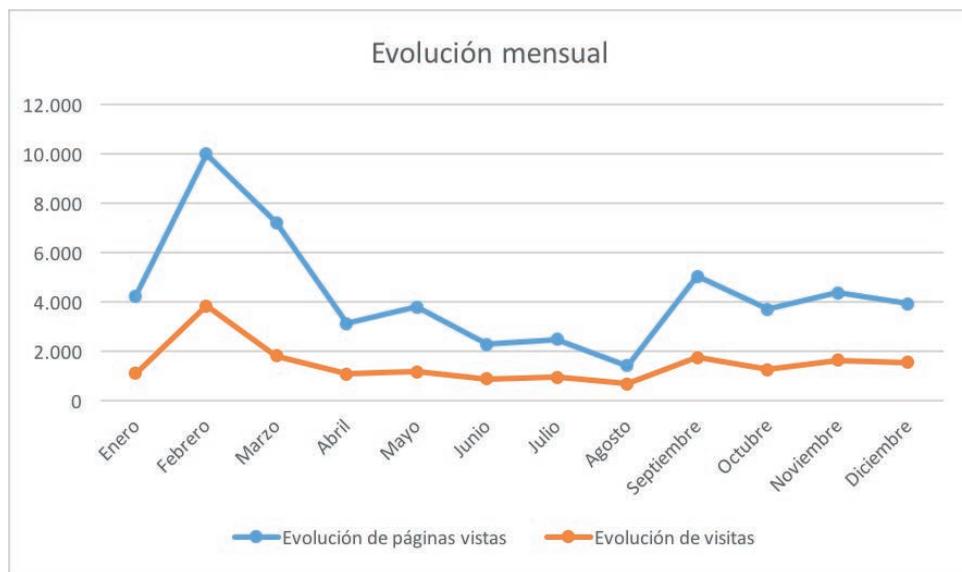
- **Zona de eventos:** agenda informativa que recoge los eventos que se realizan, en los que se colabora, participa o se consideran de interés.
- **Zona multimedia:** contenido digital de tipo texto, audio, gráfico y vídeo, enlaces de interés, premios y reconocimientos.
- **Documentación:** información relacionada con cuestiones generales y manuales de usuario (uso y acceso a los sistemas, resolución de los problemas comunes, etc).

## DATOS ESTADÍSTICOS

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

### - Evolución mensual

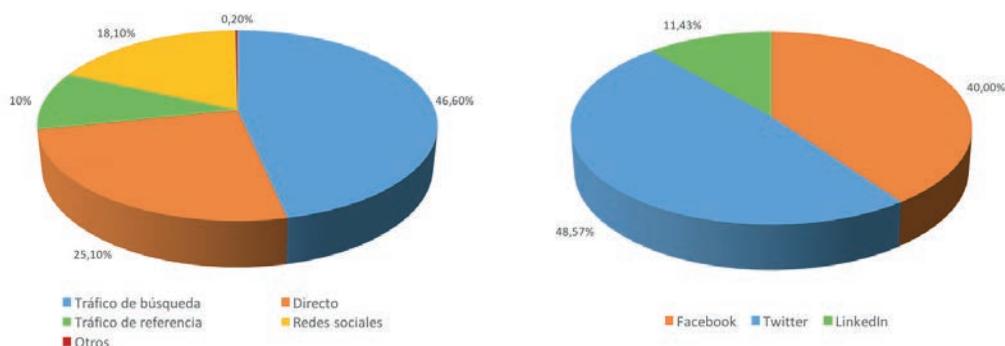
En la siguiente tabla, se muestran los datos de acceso a la web corporativa organizados por meses y según las variables más representativas:



### - 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

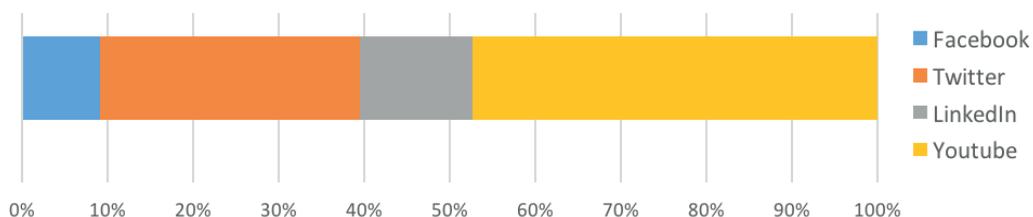
Conociendo la importancia de las redes sociales en cuestiones de difusión de información, se ha seguido trabajando en la presencia en las distintas redes sociales más populares con el fin de dar a conocer las noticias más relevantes entorno al centro CénitS y a las investigaciones e innovaciones que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

Durante el año 2014 el Centro ha recibido a más de 400 visitantes entre investigadores, empresarios, innovadores, universitarios y estudiantes de educación secundaria. Esas visitas se traducen en colaboraciones futuras en proyectos de investigación, en prestación de servicios o en la difusión de conocimiento a todos los agentes regionales, nacionales e internacionales.





ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



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

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

# Recursos tecnológicos

## HARDWARE

CénitS alberga el Supercomputador LUSITANIA, uno de los supercomputadores con más memoria compartida de España y Europa.



Sus características se detallan a continuación:



## NODOS DE CÓMPUTO

- **2 HP Integrity SuperDome SX2000** con 64 procesadores de doble núcleo cada uno (128 procesadores/256 cores).
- **Itanium2 Montvale @ 1.6 GHz**, 18 MB cache.
- 2x 1TB de memoria en una sola imagen = 2TB de memoria.
- 2x 40x146GB discos SAS = 3,6TB para “scratch”.
- Sistema Operativo **Suse Linux “SLES 10”** (con posibilidad de ejecutar simultáneamente **Windows Server, HP-UX, Red Hat, SLES, ..**).
- **Alta disponibilidad:** N+1 ventiladores OLR, N+1 suministradores de energía OLR, doble suministro de corriente, OLAR para celdas, OLAR para tarjetas I/O, ECC en CPUs, memoria y todos los caminos de datos, Dynamic Processor Resilience, Dynamic Memory Resilience (Chip Kill doble) y dos caminos entre los switches y el controlador de celda, la memoria y las CPUs.
- Hasta **16 particiones físicas y 64 particiones virtuales.**

## NODOS DE SERVICIO

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

## NODOS DE GESTIÓN

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

## NODOS DE CLOUD COMPUTING

- 2 x **HP ProLiant DL-380-G7** cada uno con 2 procesadores **Intel Xeon Quad Core E5630**, uno con 32 GB de RAM y otro con 64 GB de RAM, y 2 discos SAS de 146 GB.
- 1 x **HP ProLiant DL-380-G5** con 2 procesadores **Intel Xeon Quad Core E5450** con 16 GB de RAM y 2 discos SAS de 146 GB.



- 2 x **HP ProLiant BL465c Gen8 Server Blade** con procesadores **HP BL465c Gen8 AMD Opteron 6276** (2.3GHz/16-core/16MB), 256 GB de memoria RAM por servidor y 4 x discos SAS de 300GB



(2 por servidor). Estos servidores y el software **Intel Cluster Studio for Linux** incluido en ellos, pertenecen al proyecto Siatdeco (RITECA II), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.



- 4 x **HP ProLiant BL460c Gen6 Server Blade** con procesadores **Intel Xeon 5600** (2.93Ghz), 128 GB de memoria RAM por servidor y 8 x discos SAS de 300GB (2 por servidor). Estos servidores pertenecen al proyecto FI4VDI (Desarrollo de una

red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional.

- 2 x **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. Estos servidores pertenecen al proyecto FI4VDI (Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).
- 4 x **HP ProLiant BL465c Gen8 Server Blade** con procesadores **AMD Opteron 6376** (2.3GHz/16-core/16MB), 128 GB de memoria RAM por servidor y 8 x discos SAS de 300GB (2 por servidor).



- 1 x **Fujitsu Server PRIMERGY RX350 S8**, con procesadores **Intel Xeon E5 2620v2** (2,10GHz/12cores/15MB), 256 GB de memoria RAM y dos discos duros SAS de 300GB. Este servidor pertenece al proyecto MITTIC (Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.



## UNIDADES ACELERADORAS DE CÓMPUTO



- 2 x **HP ProLiant WS460c G6 Workstation Blade** con procesadores **HP BL460c G7 Intel Xeon E5645** (2.40GHz/6-core/12MB), 96 GB de memoria RAM por servidor, cuatro discos SAS de 300 GB y dos **NVIDIA Tesla M2070Q** (448 cuda cores y 6GB GDDR5). Estos servidores pertenecen al proyecto Siatdeco (RITECA II), que está cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del Programa Operativo de Cooperación Transfronteriza España-Portugal (POCTEP) 2007-2013.



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

## ALMACENAMIENTO

- Red **Fiberchannel con multipathing activo-activo** (8 puertos x 4 controladoras).
- 2 **EVA8100** x [(208 discos **FC** x 450GB) + (128 discos **FATA** x 1TB)] = **265,6TB**.
- 2 **DL380-G5** servidores NAS ejecutando el sistema de ficheros distribuido **HP StorageWorks PolyServe**.



- **HP 3PAR StoreServ 7200** x (14 discos **SAS** 10k x 900GB) = 12,5TB. Esta unidad dealmacenamiento pertenece al proyecto FI4VDI (Desarrollo de una red de infraestructuras federadas para la generación de servicios de virtualización de puestos de trabajo), correspondiente al Programa Interreg IV B SUDOE, financiado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional.



## COPIAS DE SEGURIDAD

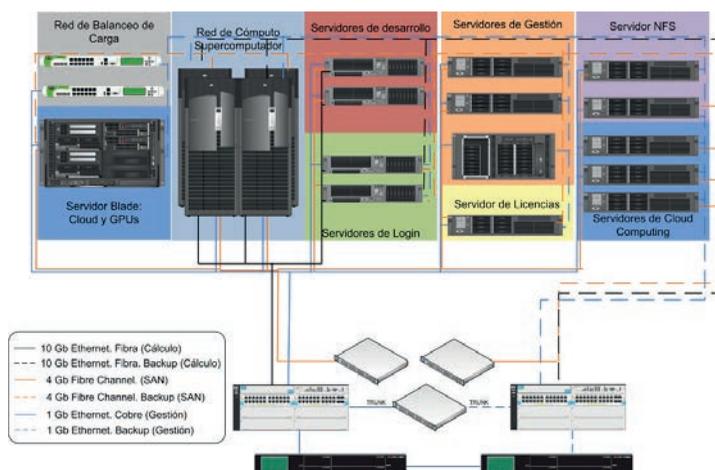
- Sistema de backup basado en la librería de cintas **HP Storageworks EML 245e**.
- Capacidad para **245 cintas** de tecnología **LTO-4 Ultrium 1840**, lo que ofrece una capacidad de **392 TB** en comprimido 2:1.
- Software de gestión y planificación de backups desatendidos **HP StorageWorks DataProtector**.

## TOPOLOGÍA DE RED

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

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

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





## CONSUMOS DE RECURSOS

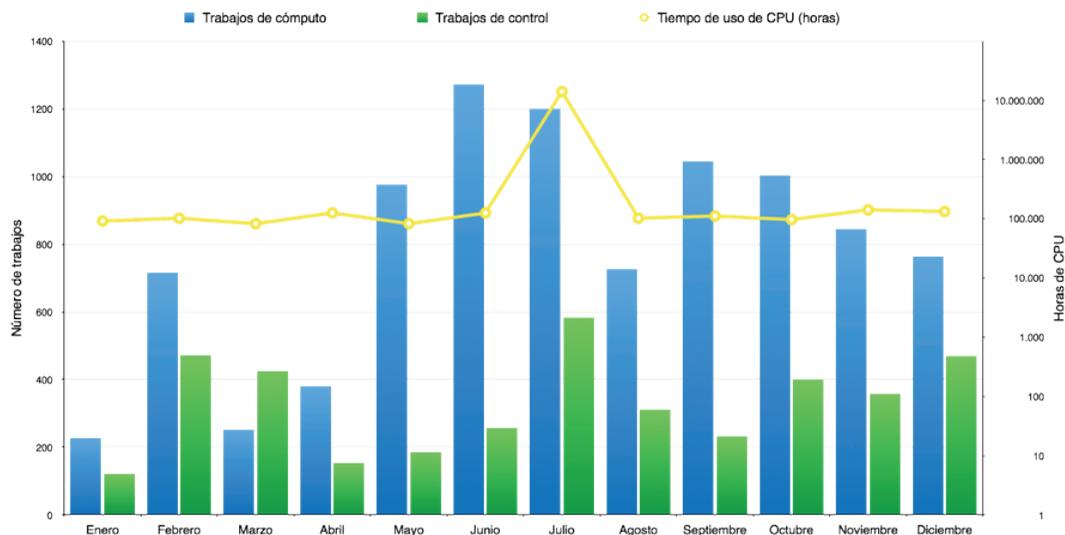
### USO DE RECURSOS

Durante el año 2014, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura hardware y software de LUSITANIA. La gráfica que se presenta a continuación muestra los datos relacionados con el consumo de los recursos en los nodos principales de LUSITANIA, que son los que soportan la mayoría de la carga de computación del Centro, en base a todos los trabajos ejecutados sobre ellos.

Durante el ejercicio de 2014, se han ejecutado un total de 13.374 trabajos de usuarios, divididos en dos categorías:

- **Trabajos generales:** 9.409. Estos trabajos están destinados a generar datos para su posterior análisis.
- **Trabajos de control:** 3.965. Estos trabajos son ejecutados por los usuarios para optimizar el entorno de ejecución de cada trabajo.

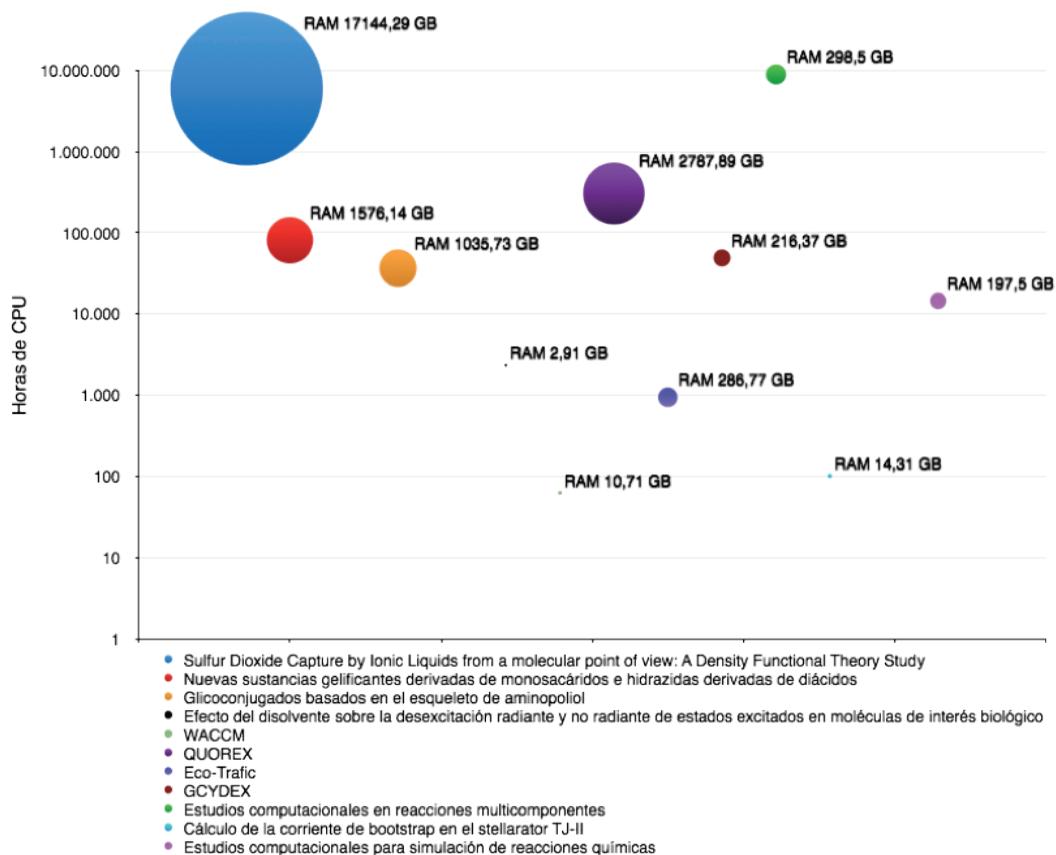
En la siguiente gráfica se muestra la relación mensual de los trabajos finalizados, tanto de cómputo como de control, y el uso de CPU. Como se puede apreciar, existen trabajos con necesidades muy dispares ya que no hay una relación directa entre el número de trabajos y las horas de CPU requeridas para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





## RELACIÓN DE RECURSOS POR PROYECTO

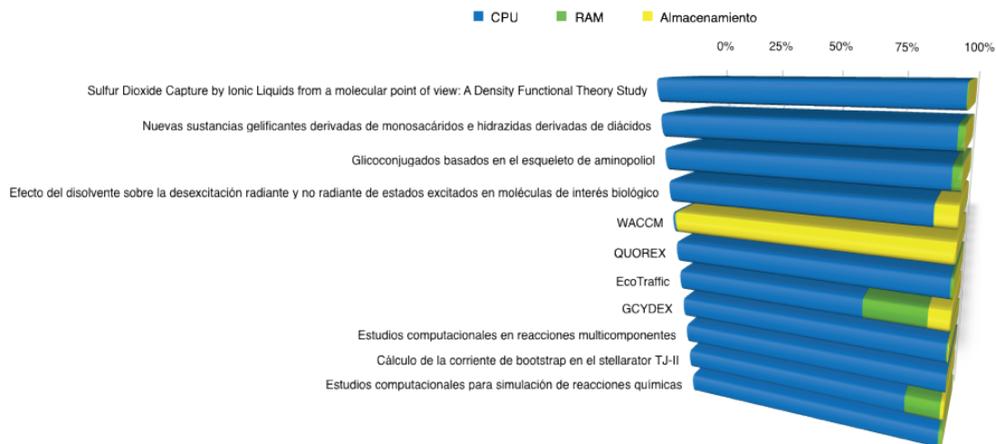
A continuación se muestran las gráficas que relacionan los distintos consumos de los proyectos que más recursos emplean, agrupados por proyecto.



El centro de cada esfera representa el consumo anual de CPU (2014), medido en horas de procesamiento por proyecto. El volumen de la esfera indica el total de la memoria RAM (GB) utilizada por proyecto, durante el tiempo que ha estado consumiendo CPU.

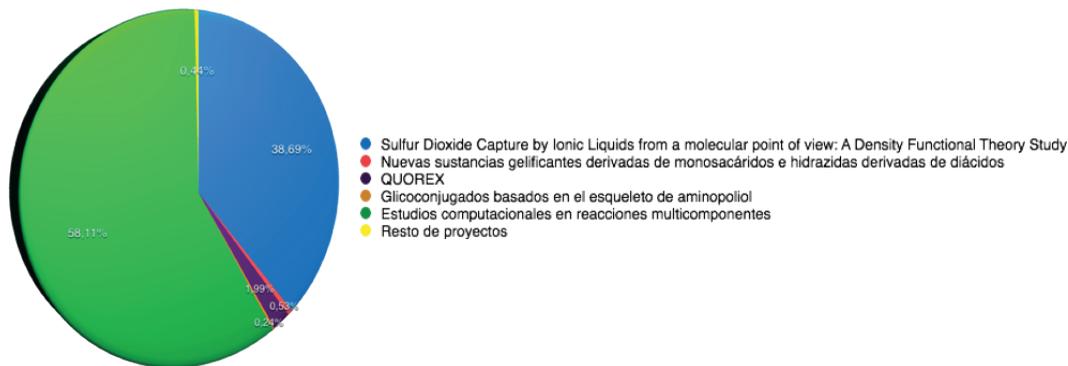
Claramente se pueden visualizar los proyectos que han hecho uso intensivo de los recursos de CénitS. También se puede apreciar la capacidad de que dispone el supercomputador LUSITANIA para albergar proyectos heterogéneos, gracias a su singular infraestructura.

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



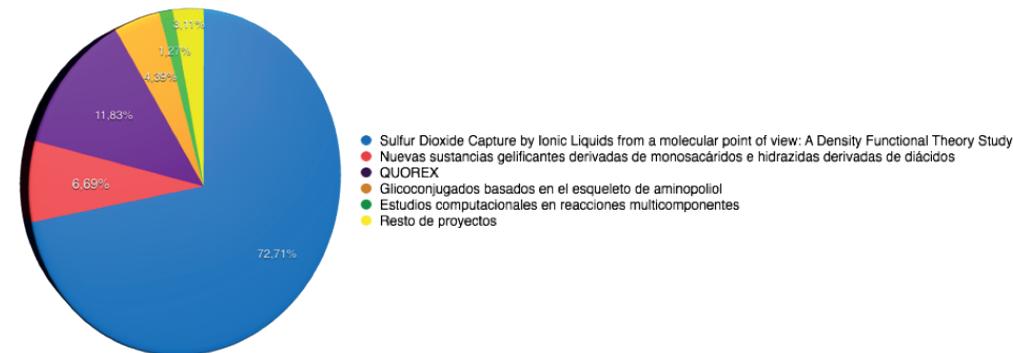
### USO DE CPU

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



### USO DE MEMORIA PRINCIPAL

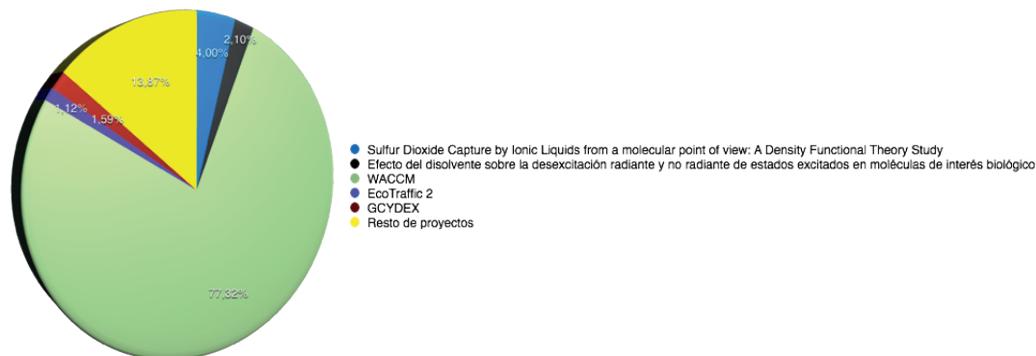
La gráfica que se presenta a continuación muestra la relación de consumo anual de memoria RAM de LUSITANIA de los proyectos de investigación que más recursos consumen.





## USO DE ALMACENAMIENTO

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



## USUARIOS

Durante el año 2014, 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.

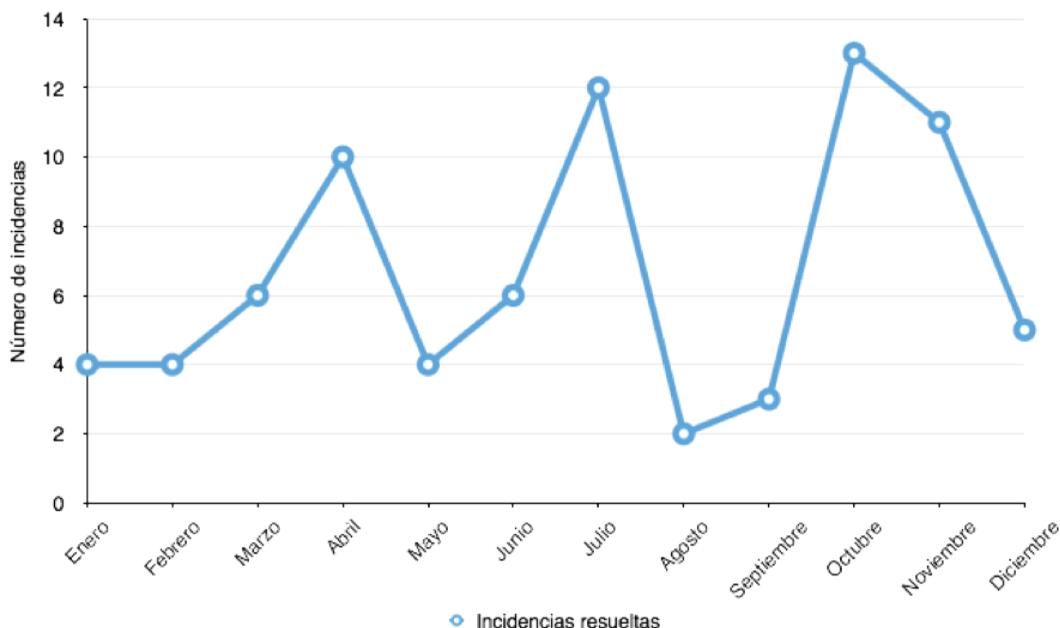
## INCIDENCIAS

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. Se han resuelto un total de 80 incidencias de usuario.



## SOFTWARE

### SISTEMAS OPERATIVOS

SISTEMAS OPERATIVOS
Suse Linux Enterprise Server
Debian
CentOS
Ubuntu

### LIBRERÍAS

LIBRERÍAS
HP-MPI
Platform MPI
Intel MPI Library
OpenMP



Intel Math Kernel Library (MKL)
NetCDF
PETSc
Meep
GSL
..

## COMPUTACIÓN TÉCNICA

Software científico
Octave
Matlab
Gaussian
IDL

## COMPILADORES

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

## HERRAMIENTAS

Herramienta
Intel Debugger
Intel Trace Analyzer and Collector
Intel Vtune
Platform LSF



COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2014

---



ORGANIZACIÓN



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CURSO



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INNOVACIÓN TECNOLÓGICA



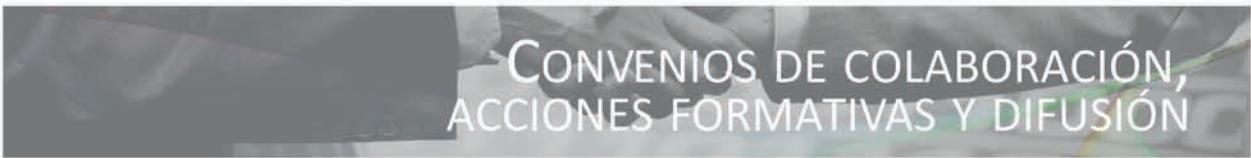
PROYECTOS CONCLUIDOS



RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN



PROYECTOS COMPETITIVOS



CONVENIOS DE COLABORACIÓN,  
ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN



RECURSOS TECNOLÓGICOS



NOTAS DE PRENSA



La repercusión alcanzada en los medios de comunicación, 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.

# Notas de prensa

## CÉNITS-COMPUTAEX EN LOS MEDIOS

### ESTADÍSTICAS GENERALES

Televisión	Radio	Prensa escrita	Prensa digital
6	4	6	85

### TELEVISIÓN

Fecha	Titular	Fuente
14/02/14	Técnico de administración	Canal Extremadura
14/02/14	Técnico de apoyo	Canal Extremadura
20/02/14	Franquicias	Tu empleo (Canal Extremadura)
21/02/14	El agua como motor de empleo	Tu empleo (Canal Extremadura)
21/11/14	Sobre investigación en COMPUTAEX	Canal Extremadura
11/12/14	I+D+i	Tu empleo (Canal Extremadura)

### RADIO

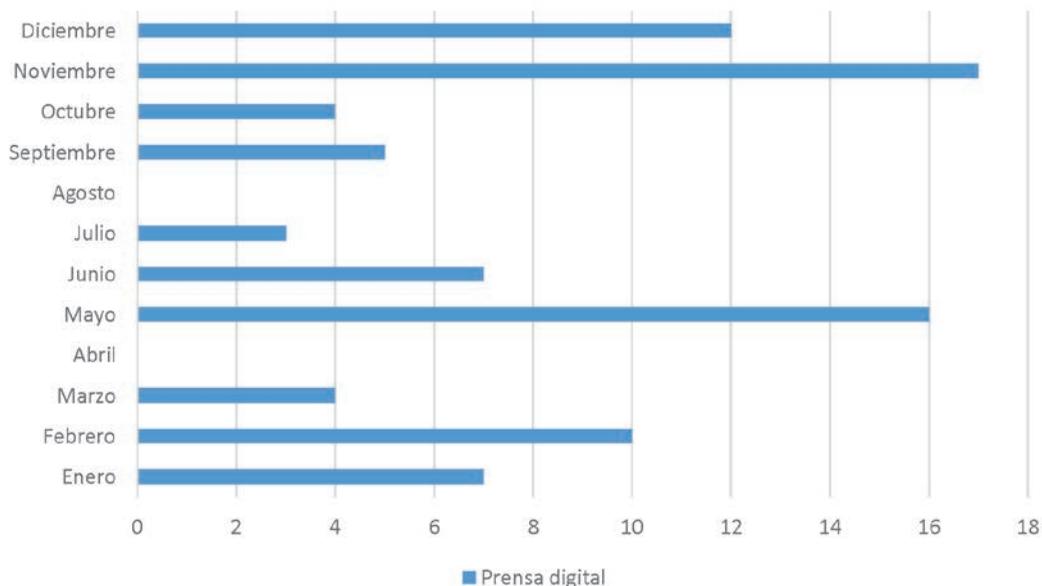
Fecha	Titular	Fuente
16/01/14	Sobre últimas investigaciones del grupo QUOREX	El sol sale por el este (Canal Extremadura Radio)
03/03/14	Sobre Proyecto TaxonomTIC	Canal Extremadura Radio
16/09/14	Sobre secuenciación genética	Cadena Ser
01/10/14	Sobre secuenciación	Canal Extremadura Radio



### PRENSA ESCRITA

Fecha	Titular	Fuente
05/02/14	Un estudio aconseja una rotonda en el cruce de Pinilla en lugar de semáforos	Diario HOY
05/02/14	Un proyecto muestra cómo bajar emisiones en las ciudades	El Periódico Extremadura
22/02/14	Neurona aglutinará datos sobre 13 centros regionales	El Periódico Extremadura
27/02/14	1.528535047x10^5	Diario HOY
01/11/14	Supercomputación en Extremadura: LUSITANIA	Revista Grada
03/11/14	Tecnología máxima, presupuesto mínimo	Diario HOY
05/2014	Mesa y mantel con José Luis González Sánchez	Revista Grada

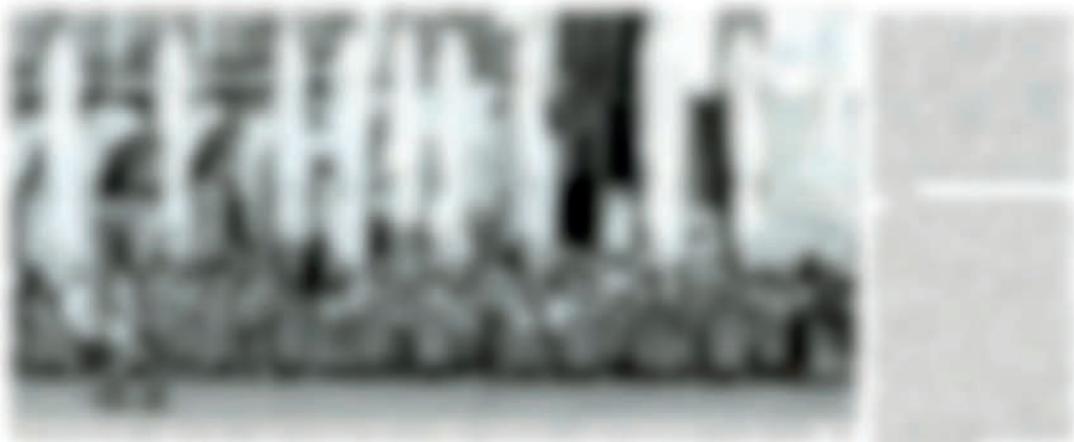
### PRENSA DIGITAL





Miércoles 05.02.14  
**HOY**

**CÁCERES 3**



## Los beneficios posibles con un sistema de control de tráfico y vehículos

[The text in this section is heavily blurred and illegible.]

### Un estudio aconseja una rotonda en el cruce de Pinilla en lugar de semáforos

El proyecto 'Eco-Traffic' utiliza el supercomputador Lusitania para diseñar ciudades inteligentes

**REDACCIÓN**

CÁCERES. El proyecto 'Eco-Traffic' desarrollado por la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (Computaex), ha permitido determinar que los 26.000 ciudadanos que transitan a diario

con sus vehículos por el cruce entre Pinilla y San Blas podrían ahorrar 108 litros de combustible cada día si el actual sistema de semáforos que regula esta intersección fuera sustituido por una rotonda. Además, también se ahorrarían 216 horas en tiempos de espera y se reducirían las emisiones de CO2 a la atmósfera en 270 kilogramos.

El estudio, que aborda cómo deben ser las ciudades inteligentes y del que informó ayer la Junta, refleja que con la construcción de esa rotonda mejora la velocidad de circula-

ción y el tiempo invertido en superar este cruce casi un 50%.

Son conclusiones que se desprenden de las simulaciones realizadas en el supercomputador Lusitania a partir de 3.000 datos individuales de número de vehículos, tiempos de trayecto, velocidades medias, etc.

Para el director general de Computaex, José Luis González, «los resultados del proyecto muestran que ahora es posible gestionar las ciudades de otra manera, porque se dispone de recursos, como el supercomputador Lusitania».



Cruce entre San Blas y Pinilla. :: HOY



DE LA FUNDACIÓN COMPUTACIÓN Y TECNOLOGÍAS AVANZADAS DE EXTREMADURA

## Un proyecto muestra cómo bajar emisiones en las ciudades

Plantea soluciones para que los ciudadanos ahorren tiempo y combustible

REDACCIÓN  
CÁCERES

Que los ciudadanos ahorren tiempo y sus vehículos optimicen el consumo de combustible y con ello se reduzcan las emisiones contaminantes que contribuyan a hacer de las ciudades un entorno de vida más saludable. Son los objetivos que se ha planteado la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (Computaex). Una iniciativa que, según la Junta, "ha demostrado una vez más que las tecnologías de alta computación constituyen la herramienta con la que definir las ciudades inteligentes del futuro, cuyas infraestructuras habrán sido diseñadas".

El balance que se desprende de la ejecución del Proyecto Eco-Traffic "demuestra que todos ellos son objetivos posibles gracias a un control adecuado y eficaz de los flujos de tráfico, cruces, semáforos, rotondas, aparcamientos y alumbrado nocturno en el entorno urbano, que los servicios de cloud computing y supercomputación gestionados desde Extremadura pueden proporcionar", se indicó ayer a través de una nota.

A juicio del director general de Computaex, José Luis González, "los resultados de este tipo de proyectos muestran que, en muchos aspectos, estamos obligados a desarrollarnos bajo los esquemas de otro tiempo en el que se concedía un valor dis-

tinto al tiempo disponible, al gasto de combustible o al impacto que nuestro modo de vida podía provocar en el entorno". El Proyecto Eco-Traffic ha permitido determinar que los 26.000 ciudadanos que transitan con sus vehículos por una determinada intersección de las vías urbanas de Cáceres podrían ahorrar en conjunto cada día 108 litros de combustible; 216 horas en tiempos de espera y reducir en 270 kilos las emisiones de CO2 a la atmósfera si se sustituyese por una rotonda el sistema de semáforos que actualmente regula el tráfico en ese cruce. El estudio refleja que con la construcción de esa rotonda mejora en torno al 50% tanto la velocidad de circulación como el tiempo invertido en superar esta intersección. ▢





Conéctate a Internet: <http://www.elperiodicoextremadura.com>

SÁBADO 22 DE FEBRERO DEL 2014 el Periódico Extremadura 23

# EXTREMADURA

Más información en: [www.elperiodicoextremadura.com](http://www.elperiodicoextremadura.com)

## La red de centros de investigación de Extremadura se aglutina en una plataforma de colaboración



NUEVA RED EN MATERIA DE INVESTIGACIÓN

### Neurona aglutinará datos sobre 13 centros regionales

Lo primordial es que las empresas sepan en qué se trabaja en la región

REDACCIÓN / EFE GACENES / IMPIGA

La Junta presentó ayer el nuevo Proyecto Neurona, una plataforma de colaboración que aglutina en un único portal web información relativa a las investigaciones y estudios que realizan 13 centros tecnológicos y de investigación pública y privada de Extremadura. La herramienta busca corregir los

problemas detectados en la elaboración de la Estrategia de Especialización Inteligente, como la falta de conocimiento por parte de la sociedad de lo que realiza el sistema extremeño de ciencia, tecnología e innovación y la escasa inserción empresarial en este sector, según indicó el secretario general de Empleo, Sergio Vilasqueiras.

La plataforma está integrada por el Centro de Creación de Minima Inversión Justo Utrilla, el Centro Nacional de Referencia de Aplicación de las TIC basadas en Fuentes Abiertas, el Centro Extremeño de Investi-



Presentación de la red Neurona, ayer en Mérida.

ción, Innovación Tecnológica y Supercomputación, el Centro Tecnológico Iteval y el Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas, entre otros.

Vilasqueiras señaló que en la red se va a volcar "toda la información

científica y tecnológica" relativa a las investigaciones que elaboran estas instituciones con la finalidad de que se produzca una colaboración interna entre centros y externa con la sociedad en general y las empresas.

Se trata de que las empresas conozcan de primera mano en qué se trabaja en los centros para que así se incremente su inserción en investigación, desarrollo e innovación, a través de esta plataforma interactiva en todas las redes sociales.



EXNOVADORES

ALEJANDRO HERNÁNDEZ RENNER

@alrenner

$1.528535047 \times 10^5$

**M**E quedé la semana pasada con las ganas de explicar para qué sirven las dos supercomputadoras que tenemos en Extremadura. Estas criaturas de metal y cables viven en los sótanos de un antiguo y precioso convento renacentista de Trujillo, donde trabajan día y noche, dirigidas por dos sólidos equipos humanos de investigadores que recorren sin ruido el hermoso claustro herretero. Las supercomputadoras son máquinas con mucha más capacidad de cálculo que las normales, y se dedican, fundamentalmente, a mover enormes cantidades de datos, en lo que llamamos HPC o computación de altas prestaciones, con destino a un negocio (por ejemplo, las transacciones bancarias) o a la investigación científica. Que una máquina reciba este supernombre depende de haber sido diseñadas y construidas específicamente para este uso. Las supercomputadoras extremeñas están administradas por dos centros de investigación que cohabitan en el Conventual de San Francisco, Computaex y CETA-Cimat, y como todas las de su especie, son capaces de ejecutar en poco tiempo muchas operaciones de las llamadas de punto flotante o Flops, (del tipo de una división entre dos números como  $1.528535047 \times 10^5$ ). Entre ambos bicharracos devoradores de electricidad suman una fuerza que permite ejecutar cálculos al alucinante ritmo de unos 50 Teraflops o millones de millones (billones) de estas operaciones... por segundo. Ya vimos que a un ordenador de sobremesa nuevo le 'cabén' 200.000 ordenadores de los del Apolo 11; estos armarios calculadores trujillanos que nunca duermen equivalen, para entendernos, a unos 5.000 ordenadores de los que usa-

mos en casa o en la oficina. Y la supercomputadora más potente del mundo, que se encuentra en la Universidad Nacional de Tecnologías para la Defensa en Tianjin, China, es unas 650 veces más potente que las nuestras. ¿Para qué usamos tanta fuerza, y tantas horas de personas cualificadas pastoreándola? La investigación realizada en los dos Centros extremeños es apabullante. Dos de los puntos fuertes del CETA son la computación grid y la voluntaria, o cómo lograr que miles o incluso millones de ordenadores operen eficientemente en forma colaborativa a través de Internet, fórmula utilizada por proyectos mundiales muy conocidos como SETI@home. Otras especialidades de la casa son la programación de las tarjetas gráficas, y la creación de código y algoritmos para la investigación. Computaex tiene a la supercomputadora Lusitania como loca calculando modelos climáticos, simulando procesos químicos, y diseñando nuevos componentes nanotecnológicos. Máquinas construidas para generar nuevo conocimiento, útil para crear cosas nuevas o resolver problemas muy complejos. Si escucha en la tele, o lee en una revista o en Internet, que avanzan las fronteras de lo que sabemos, en temas tales como interpretar radiaciones que provienen del fondo del Universo, el análisis de nuevas proteínas, o la deconstrucción de segmentos del genoma que están en la base de enfermedades, piense que posiblemente una parte del trabajo hecho provenga de aquellas cabezas brillantes que, como contemporáneos monjes silenciosos y concentrados delante de sus pantallas, fabrican y guardan en Trujillo los códigos electrónicos del siglo XXI en que se escribe el futuro.





[Faded article text, likely bleed-through from the reverse side of the page]

### SUPERCOMPUTACIÓN EN EXTREMADURA: LUSITANIA



Ramón Mª Palacios Leytón  
Profesor E.S.O.  
ramonpalacios@grada.es

En 2009 la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (Computaex) adquirió el superordenador 'Lusitania', fabricado por HP. Desde entonces, la gestión y explotación de Lusitania está a cargo de Cénits (Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación), cuyo objetivo es fomentar, difundir y prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a las comunidades investigadoras extremeñas, o a empresas o instituciones que lo soliciten, para contribuir mediante el perfeccionamiento tecnológico y la innovación a la mejora de la competitividad de las empresas. Desde que Lusitania aterrizó en el conventual de San Francisco en Trujillo no ha parado de realizar tareas de un nivel de complejidad muy elevado, en las que su enorme capacidad de cómputo y rapidez de procesamiento de información ha sido decisiva para obtener resultados a una velocidad espectacular y completamente fiables. A pesar de su reciente adquisición ya ha sido pieza clave para desarrollar proyectos de las más diversas áreas: física, distribución de contenidos a través de telefonía móvil, fotoquímica, gestión eficiente del tráfico, electromagnetismo, banda ancha de alta velocidad en entornos rurales, procesamiento de imágenes de la superficie terrestre... Lo que hace de Lusitania uno de los ordenadores más potentes y con más memoria compartida de España y Europa son sus dos teras de memoria principal y su gran capacidad de almacenamiento (300 teras en cinta). Por su extraordinaria capacidad de resolución en un tiempo extremadamente reducido ha sido reconocido y avalado por la comunidad científica nacional e internacional; además tiene el récord del mundo del objeto más grande jamás analizado en electromagnetismo, con un modelado de 620 millones de incógnitas, gracias al cual los investigadores de la Universidad de Extremadura que trabajan con Lusitania han recibido el galardón 'Titanium Innovation Award' en la categoría de Aplicaciones de Computación Intensiva.

[www.computaex.es/cenits/lusitania](http://www.computaex.es/cenits/lusitania)





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  
"Una manera de hacer Europa"