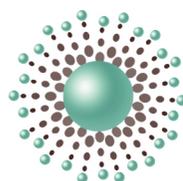




X ANIVERSARIO DE  
CénitS - COMPUTAEX  
10 Años de Supercomputación en Extremadura

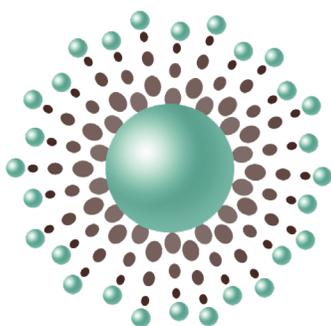


COMPUTAEX

# MEMORIA ANUAL 2019

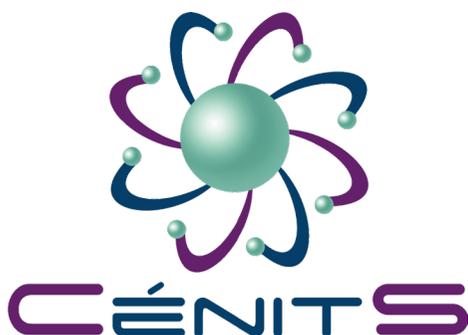






COMPUTAEX

MEMORIA  
2019



CÉNITS

© Fundación COMPUTAEX

Edición: Fundación COMPUTAEX

Diseño: Fundación COMPUTAEX

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

Impreso en España  
Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-09-21652-9

Depósito Legal: BA-345-2020



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

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



<b>2019. “Quien adelante no mira, atrás se queda” .....</b>	<b>6</b>
<b>1. Fundación COMPUTAEX.....</b>	<b>8</b>
Objeto y fines.....	8
Patronato.....	9
Equipo CémitS 2019.....	9
RES (Red Española de Supercomputación) .....	12
Mapa de capacidades de tecnologías de Inteligencia Artificial de España.....	12
Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS).....	13
Organizaciones colaboradoras.....	14
Agradecimientos.....	15
<b>2. Proyectos de investigación e innovación tecnológica participados y dirigidos por CémitS.....</b>	<b>17</b>
CultivData.....	18
HeritaGen.....	20
CONECTA PYME 4.0.....	22
Predictibilidad de enfermedades oncológicas mediante ultrasecuenciación .....	24
Identificación de patrones de comportamiento en aerogeneradores .....	26
TaxoTIC 2019.....	28
Adquisición de equipamiento científico-tecnológico .....	30
CémitS-CPD: equipamiento científico tecnológico.....	30
CémitS-CPD: consolidación de infraestructuras de supercomputación .....	31
SmartNet5G .....	32
5G-CLOPS.....	32
Red de excelencia RES.....	33
Red-Integra .....	33
Go2Edge .....	34
Spanish Digital Innovation Hub for HPC.....	34
Prospéctica.....	35
Optimización de algoritmos y aplicaciones paralelas.....	35
<b>3. Proyectos de investigación soportados .....</b>	<b>37</b>
Ciencias de la Tierra .....	38
Ciencias de la Vida .....	40
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.....	45

<b>4. Resultados de investigación.....</b>	<b>47</b>
Publicaciones en revistas.....	48
Publicaciones en libros.....	55
Publicaciones en congresos.....	56
Trabajos Finales de Grado.....	58
<b>5. Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión.....</b>	<b>61</b>
Convenios de colaboración.....	62
Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC.....	64
Derecho tecnológico e Informática forense.....	64
Jornada de presentación del proyecto TaxonomTIC 2018.....	65
Noche Europea de los Investigadores.....	66
Semana de la Ciencia.....	66
Jornadas de puertas abiertas.....	67
Concurso de diseño del logotipo del X Aniversario.....	68
Concurso “El reto de fotografiar el software”.....	68
Jornada de celebración del X Aniversario.....	70
Becas de formación del convenio COMPUTAEX - UEx.....	72
Portal web.....	74
Redes sociales.....	76
Difusión y divulgación.....	76
CénitS-COMPUTAEX en los medios.....	77
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos.....	78
<b>6. Recursos tecnológicos.....</b>	<b>81</b>
CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III.....	82
Consumo de recursos.....	85
Usuarios.....	87
Software.....	88
<b>7. Proyectos concluidos.....</b>	<b>91</b>



## 2019

*“Quien adelante no mira, atrás se queda”*

(Refranero español)

La Fundación COMPUTAEX y su Centro CénitS han celebrado en 2019 el X aniversario de su creación, con varias actividades de gran significación por el apoyo y consolidación que supone al proyecto de la supercomputación en Extremadura, y por la oportunidad para reflexionar sobre la trayectoria de esta iniciativa a la que le ha tocado vivir numerosas satisfacciones alcanzadas con notable esfuerzo e ilusión.

Desde 2009 hemos desarrollado, colaborado o dado soporte a más de 160 proyectos clasificados en tres grandes líneas de investigación: Ciencias de la Vida, Ciencias de la Tierra y Ciencias Informáticas y de las Comunicaciones, destacando, sobre todo, los proyectos centrados en la sanidad, en la eficiencia energética y en el sector agroganadero. CénitS ha colaborado en la captación competitiva de fondos por un importe superior a los 17 millones de euros, más de la tercera parte concedidos y gestionados por la Fundación. Más de 300 usuarios han consumido 24 millones de horas de CPU y superado los 208 TB de almacenamiento. No sólo damos cobertura a investigadores, científicos, innovadores y tecnólogos extremeños, sino que también recurren a CénitS desde el resto de España y de otros países. Se han firmado convenios, contratos y colaboraciones con más de 200 organizaciones públicas y privadas y recibido casi 5.000 visitas.

Gracias a los proyectos acometidos en el Centro se han alcanzado resultados investigadores e innovadores de relevancia que le han dado una destacable visibilidad materializada principalmente en: más de 130 publicaciones científicas, 90 de ellas de impacto; cinco reconocimientos internacionales; cuatro de alcance nacional y dos de ámbito regional; participaciones en redes temáticas y de excelencia y en el reconocimiento como ICTS (Instalación Científica y Técnica Singular). Hemos recibido las distinciones y logros alcanzados como la aspiración por alcanzar la misión que tenemos encomendada.

2019 ha supuesto además otro importante hito como ha sido la incorporación de LUSITANIA III que ha venido a resolver necesidades que hace tiempo teníamos en el Centro. LUSITANIA III es una arquitectura de computación heterogénea que hemos diseñado para disponer de un equipo con procesadores y cores HPC y CUDA cores aceleradoras de cómputo, especialmente indicados para la inteligencia artificial y machine o deep learning. También incorpora un sistema de archivos compartido GPFS para el almacenamiento en toda la arquitectura existente. LUSITANIA III aporta además otra característica fundamental como es un cloud con 250 máquinas virtuales pensadas para usos específicos mediante una solución de hiperconvergencia con almacenamiento adicional. En esencia, con LUSITANIA III se incorporan a CénitS-CPD: 160 cores puramente HPC para uso científico; 40.960 CUDA cores GPU para aceleración de cómputo; un cloud para uso más empresarial; y casi un Petabyte de almacenamiento, todo ello interconectado con una red Infiniband de baja latencia de 100 Gbps.

Los usuarios de CénitS han consumido en 2019 un total de 11.839.235 horas de CPU (casi cuatro veces más que las 3.048.781 horas de 2018). Los trabajos de cómputo masivo ejecutados han usado 11.675 TB (4.415 TB en 2018) de memoria principal y consumido 88 TB (8,8 TB en 2018) de memoria secundaria para almacenar los resultados obtenidos por los proyectos. Además, se han resuelto un total de 66 consultas de asesoramiento técnico planteadas por los usuarios y 8 incidencias hardware.

CénitS continua con su Observatorio del sector TIC a través del proyecto TaxoTIC que sigue constatando la carencia de ingenieros, debida al escaso número de egresados TIC de nuestra Universidad. Contrasta esto con la elevada demanda de profesionales del sector y la escasez de

nuevos perfiles en todos los países desarrollados. La plataforma OLISTIC desarrollada en CénitS muestra que el número de empresas TIC crece en Extremadura más que el de cualquier otro sector y los datos de TaxoTIC demuestran que es necesario actuar para resolver las carencias existentes. Convencidos de la importancia de la necesidad de formación especializada, continuamos con el patrocinio de sendas becas de estudiantes de Ingenierías Informáticas en la Escuela Politécnica de Cáceres y en el Centro Universitario de Mérida que imparten esos grados universitarios. Hemos acogido a una estudiante que ha realizado en CénitS sus prácticas curriculares; se han codirigido tres Trabajos Final de Grado y se continúa codirigiendo tres tesis doctorales.

La Fundación ha recibido este ejercicio transferencias de los presupuestos regionales para sufragar sus gastos corrientes por importe de 505.000 €; una transferencia específica para actualización de infraestructuras por 653.400 €. De forma individual y conjuntamente con otros socios presenta un total de 2.245.000 € en convocatorias competitivas de financiación activa plurianual. Por la prestación de servicios ha obtenido 26.092 €, y las Cuentas Anuales de 2019 reflejan este ejercicio el efecto de la amortización de equipos con un resultado negativo de 5.224 € antes de impuestos.

El grupo de investigación CénitS, que forma parte del catálogo de grupos de investigación de la Junta de Extremadura, ha continuado con su actividad centrada en sus seis líneas de investigación que han permitido este año continuar investigando en 17 proyectos de investigación financiados y participar en 9 convocatorias competitivas de las cuales se confirmaron 7 proyectos (2 europeos, 3 nacionales y 2 regionales). Los miembros del grupo han impartido 24 ponencias; participado en 3 libros y realizado 4 publicaciones de impacto.

La Fundación se consolida como organismo que colabora y apoya la celebración de actividades técnicas, científicas o de divulgación, dando respuesta a otro de los encargos que tiene. Este año la Fundación ha patrocinado de diferentes formas doce eventos (jornadas, congresos, retos y concursos) colaborando con el emprendimiento y la divulgación de actividades de ámbito regional, nacional e internacional.

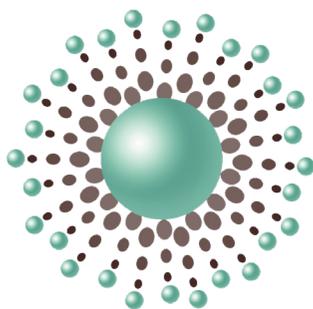
Pero la meta no está aquí, quedan muchos retos por alcanzar. Los Objetivos de Desarrollo Sostenible han identificado los 17 principales retos de la humanidad para 2030 y en la mayor parte de ellos la computación y las nuevas tecnologías están directa o indirectamente implicadas para resolver esos retos en las próximas décadas y se trabaja con la ilusión de aportar lo que esté a nuestro alcance.

COMPUTAEX, CénitS y LUSITANIA emprendieron en 2009 el proyecto de la supercomputación en Extremadura y desde entonces muchas cosas han pasado. La tecnología evoluciona -o revoluciona- a una velocidad que apenas nos da un respiro. Llevamos muchos años escuchando que el futuro ya está aquí, pero no acaba de llegar pues se aleja a medida que nos acercamos. Cuando aún no están completamente desplegados el 3G, el 4G, o la Industria 4.0, ya se está anunciando 5G; cuando cloud computing está aún sin madurar, ya estamos trabajando en Edge computing. Hemos pasado de la sociedad de la información a la del conocimiento, de ahí a la de la imaginación y estamos entrando en la de la invención. Todo esto, de un modo u otro, está relacionado con las actividades que tiene encomendadas el Centro CénitS y la Fundación, y es evidente que, o lo hacemos en Extremadura u otros lo harán desde fuera, y estamos convencidos que la información es de los patrimonios más importantes que tenemos en la sociedad actual y para poder gestionarla necesitamos de las adecuadas infraestructuras y de los profesionales con las mejores destrezas y competencias.

Agradecemos a la Junta de Extremadura y al Patronato el apoyo recibido. Percibimos que la acción de gobierno regional tiene presente la computación avanzada y se alinea con las estrategias nacional y europea que han apostado decididamente por proyectos como Euro HPC.

El refranero, que no por popular es menos sabio, recomienda “*Paso corto y vista larga*” nos inspira para intentar llegar lejos con el jugador más valioso que tiene nuestro Centro que es su magnífico equipo humano.

José Luis González Sánchez  
D. G. Fundación COMPUTAEX



# COMPUTAEX

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

En julio de 2011 se produjo la reestructuración del Gobierno de la Comunidad Autónoma de Extremadura, pasando la Fundación a depender de la Dirección General de Modernización en Innovación Tecnológica perteneciente a la Consejería de Empleo, Empresa e Innovación. En octubre de 2012, con el fin de coordinar el proceso de constitución y puesta en marcha del Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura (CICYTEX), creado por la Ley 10/2010 de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación de Extremadura, se atribuyen las funciones propias de la Dirección General de Modernización e Innovación Tecnológica a la Secretaría General de Empleo y Actividad Empresarial, que pasa a denominarse Secretaría General de Empleo, Actividad Empresarial e Innovación Tecnológica, dependiendo COMPUTAEX de la misma. En agosto de 2013, de acuerdo al decreto 135/2013 de 30 de julio, la Fundación se adscribe a la Secretaría General de Ciencia y Tecnología. El decreto 262/2015 de 7 de agosto, asignó a la Consejería de Economía e Infraestructuras las competencias que se encontraban asignadas a la anterior Consejería de Economía, Competitividad e Innovación, quedando la Fundación COMPUTAEX adscrita a la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación. El Decreto 16/2019 de 1 de julio, modificó la denominación y las competencias de la anterior consejería a la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital, pasando la Fundación a ser adscrita en la Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad.

## Objeto y fines

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

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

**Patronato**

<b>PATRONATO</b> <b>D. RAFAEL ESPAÑA SANTAMARÍA</b> <b>Presidente de la Fundación COMPUTAEX</b> Ilmo. Sr. Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital
<b>D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ</b> <b>Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX</b> Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad
<b>DÑA. ANA VEGA FERNÁNDEZ</b> Ilma. Sra. Directora General de Empresa Patrona de la Fundación COMPUTAEX
<b>D. ANTONIO RUÍZ ROMERO</b> Ilmo. Sr. Secretario General de Economía y Comercio Patrón de la Fundación COMPUTAEX
<b>D. PABLO GARCÍA RODRÍGUEZ</b> Ilmo. Sr. Director General de Agenda Digital Patrón de la Fundación COMPUTAEX
<b>DÑA. CARMEN GONZÁLEZ RAMOS</b> Ilma. Sra. Directora General de CICYTEX Patrona de la Fundación COMPUTAEX
<b>D. PEDRO MARÍA FERNÁNDEZ SALGUERO</b> Ilmo. Sr. Vicerrector de Investigación y Transferencia de la UEx Patrón de la Fundación COMPUTAEX
<b>DÑA. INÉS MARÍA DEL PUERTO GARCÍA</b> Profesora Titular de la Universidad de Extremadura Patrona de la Fundación COMPUTAEX
<b>D. JOSÉ MANUEL PÉREZ MORALES</b> Director del Departamento de Tecnología del CIEMAT Patrón de la Fundación COMPUTAEX
<b>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ</b> Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato

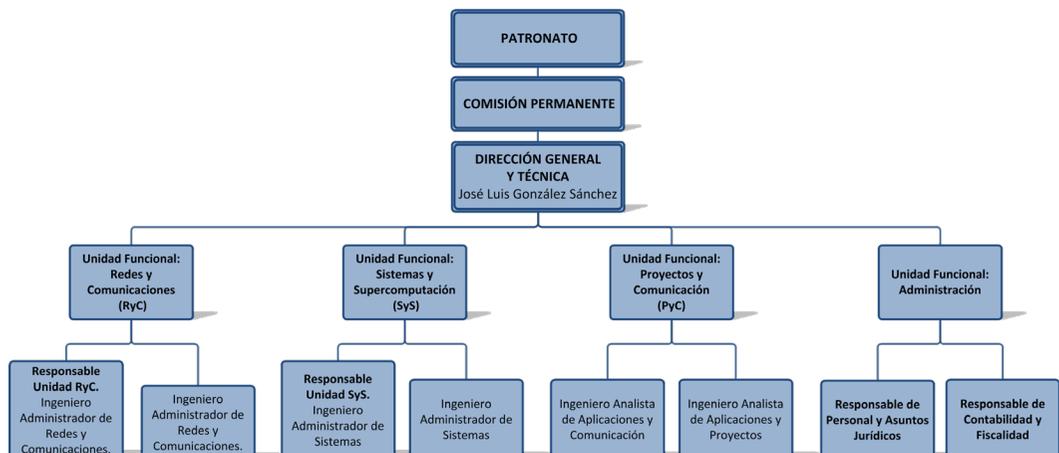
<b>DIRECCIÓN GENERAL</b> <b>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ</b> Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato
--

<b>COMISIÓN PERMANENTE</b> <b>D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ</b> <b>Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX</b> Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad
<b>DÑA. ANA VEGA FERNÁNDEZ</b> Ilma. Sra. Directora General de Empresa Patrona de la Fundación COMPUTAEX
<b>DÑA. CARMEN GONZÁLEZ RAMOS</b> Ilma. Sra. Directora General de CICYTEX Patrona de la Fundación COMPUTAEX
<b>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ</b> Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato

**CONSEJO ASESOR**

**Equipo CénitS 2019**

CénitS es el Centro Extremeño de iNvestigación Innovación Tecnológica y Supercomputación y el principal instrumento de la Fundación COMPUTAEX para llevar a cabo sus fines.





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



**María Jesús Martínez**  
Responsable de personal  
y asuntos jurídicos



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



**Jesús Calle**  
Responsable de la Unidad Funcional  
de sistemas y supercomputación



**Felipe Lemus**  
Administrador de redes  
y comunicaciones



**Javier Corral**  
Analista de aplicaciones  
y comunicación



**Luis Ignacio Jiménez**  
Administrador de sistemas  
y supercomputación



**Juan Francisco Bermejo**  
Analista de aplicaciones y proyectos



**Blanca Pérez**  
Responsable de contabilidad  
y fiscalidad



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



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



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



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



**María Peguero**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Miguel Mahillo**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Álvaro Huertas**  
Becario de investigación



**Álvaro Rodríguez**  
Becario de investigación



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



**Fátima Dávila**  
Estudiante en prácticas del Grado en  
Ingeniería Informática en  
Ingeniería del Software de la UEx

## RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS) distribuida por toda la geografía española, consistente en la interconexión en 2019 de 12 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica. La RES gestiona estos recursos con el fin de impulsar el avance de la ciencia y la innovación en España. Para alcanzar este propósito, ofrece sus recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización óptima de todos los recursos disponibles en la red. El tiempo de cómputo en las máquinas de la RES es concedido a través de convocatorias competitivas. Las propuestas recibidas son evaluadas cada cuatro meses por el Comité de Acceso, que es asesorado por un Panel de Expertos formado por reconocidos investigadores. Por otra parte, la RES también promueve acciones de interés común para sus nodos, como planes de inversión, actividades de formación y divulgación, o participación conjunta en proyectos nacionales e internacionales.



## Mapa de capacidades de tecnologías de Inteligencia Artificial de España



El Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades publicó en 2019 el mapa que recoge el estado actual del ecosistema de Inteligencia Artificial (IA) en España, mostrando información detallada sobre aquellas entidades públicas y privadas que desarrollan, investigan, utilizan o prestan servicios relacionados con tecnologías de IA. Su objetivo es fomentar las sinergias entre las entidades españolas y abrir un camino de colaboración europeo e internacional, identificando y visualizando capacidades y fortalezas españolas en dicha área.

CénitS y la Fundación COMPUTAEX fueron reconocidos como nodos de este mapa, que supone una pieza clave para el diseño de la estrategia Nacional de Inteligencia Artificial, que persigue alinear las políticas nacionales destinadas a fomentar el desarrollo y el uso de la IA en España, aumentando la inversión, reforzando la excelencia en tecnologías y aplicaciones de IA y fortaleciendo la colaboración entre el sector público y privado para producir un impacto significativo en la sociedad y la economía. Entre la información disponible destacan las actividades desarrolladas por las distintas entidades, su experiencia en tecnologías habilitadoras como 5G o blockchain, el sector económico de su actividad o la comunidad autónoma en la que se ubican. Este mapa es además uno de los objetivos de la Prioridad 1 de la Estrategia Española de I+D+I en IA lanzada por el ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades y un compromiso de los Estados Miembros con la UE con el objetivo de fortalecer la Inteligencia Artificial.

## Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)



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

Aunque el Supercomputador extremeño ya era de facto una ICTS desde que en 2015 pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES), el mapa

no había sido actualizado desde 2014, dada la complejidad que supone el proceso de evaluación para formar parte del mismo, en el que se tienen en cuenta exigentes criterios de calidad científica, tecnológica y de innovación. Cabe destacar asimismo que el nuevo Mapa está integrado por 29 ICTS que aglutinan un total de 62 instalaciones distribuidas por todo el territorio nacional.

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

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

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

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

Este hecho refleja además el compromiso con la I+D+i que la Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS mantienen desde su creación en el año 2009, promoviendo el desarrollo de las tecnologías de la información, el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas como instrumentos para el desarrollo socioeconómico sostenible, habiendo dado ya respuesta a más de 160 proyectos de investigación y recibiendo varios reconocimientos regionales, nacionales e internacionales.



## Agradecimientos

En 2019 se ha cumplido el décimo aniversario de COMPUTAEX y ha sido un año muy intenso para el personal de CénitS que se ha volcado con toda su energía y esfuerzo para sacar adelante un ejercicio de consolidación tecnológica, procurando afectar lo mínimo indispensable a nuestros usuarios.

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

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



# PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN TECNOLÓGICA PARTICIPADOS Y DIRIGIDOS POR CénitS

Durante 2019, el equipo de CénitS ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, aportando soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.

Destacan *CultivData*, centrado en la aplicación de las TIC al sector agropecuario, *HeritaGen*, que persigue la unificación del patrimonio genealógico y genético extremeño, y *CONNECTA PYME 4.0*, orientado a la transformación digital de las pymes.

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

## CultivData

Extremadura es reconocida como una región que produce productos agrícolas y ganaderos de gran calidad. Además, en los últimos años, se ha caracterizado por el notable esfuerzo que ha realizado para no perder la revolución tecnológica y así, las TIC se han incorporado a todos los ámbitos de la sociedad. Aún así, el desarrollo del sector agropecuario y la adopción de nuevas técnicas, comparado con otras áreas, podría avanzar de forma más dinámica. Este hecho, unido al reto que se le plantea para los próximos años, en los que necesitará abastecer a una población mundial en crecimiento, al mismo tiempo que se disminuyen las hectáreas cultivables por persona, hace necesario un avance significativo en sus procedimientos. Partiendo de estas premisas, es evidente que se deben unir los esfuerzos del ámbito tecnológico y agrario para aumentar considerablemente la productividad, sin que ello suponga una merma en la calidad, reconocida internacionalmente a los productos de la región. CultivData pretende aportar esa eficiencia, así como eficacia, productividad, sostenibilidad y calidad al sector agropecuario extremeño. La propuesta presenta una investigación de carácter transversal de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones, y su aplicación en la sociedad, que conlleva la interacción con áreas del conocimiento como la agricultura, la eficiencia en la utilización de los recursos naturales y la optimización de la calidad de los productos derivados de las explotaciones agrícolas.



### ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación COMPUTAEX - CénitS.

### OBJETIVOS

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

### METODOLOGÍA

La metodología para cumplir los objetivos del proyecto aborda una realización cíclica de las tareas planteadas para cada actividad. Ello es consecuencia, por una parte, del carácter plurianual del proyecto, y por otra, de la necesidad de que los entregables reflejen al máximo la visión experta que las entidades del sector agropecuario tienen del problema al que se enfrenta el proyecto. Con el fin de obtener una herramienta lo más útil posible para los grupos de interés del sector agroalimentario extremeño, se propone un desarrollo ágil de la plataforma CultivData. Se trata de un desarrollo cíclico

en el que en cada iteración se incluyen todas las fases de un desarrollo tradicional: planificación, análisis de requisitos, diseño, codificación, pruebas y documentación. Esta metodología apuesta por el desarrollo rápido de versiones del producto o servicio, las cuales se presentan a los usuarios finales, de forma que, a partir del feedback proporcionado por éstos, se inicia una nueva iteración del desarrollo.

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

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

#### **OBJETIVOS ALCANZADOS**

Durante la primera anualidad del proyecto, se trabajó en el estudio, análisis y captación de los datos de las diferentes fuentes abiertas disponibles, como AEMET, REDAREX o el INE, entre otros. También se desarrollaron dispositivos de sensorización de bajo coste, siguiendo la filosofía DIT (Do it Yourself o hágalo-usted- mismo), para complementar los datos más generales que aportan las fuentes. Por último, se trabajó en el diseño e implementación de un primer prototipo de la plataforma CultivData, desde la que se podían ya consultar datos de diversas fuentes, así como recoger los datos de las redes de sensorización.

En la segunda anualidad, correspondiente al año 2019, se han continuado las colaboraciones con empresas dedicadas a la agricultura en Extremadura. De esta manera, se han podido desplegar las primeras redes de sensorización en explotaciones de albaricoques, melocotones y paraguayos, entre otros. Estas redes recogen datos de diferentes magnitudes ambientales y físicas que se envían a los servidores desplegados para el proyecto, donde son almacenadas. También se han desarrollado los primeros análisis de datos procedentes de las fuentes abiertas, de forma que se han podido obtener ya algunas conclusiones sobre la incidencia que tienen las magnitudes estudiadas en los diferentes cultivos de la Comunidad Autónoma.

Se ha continuado trabajando en la plataforma CultivData, haciendo accesible al público su primera versión, la cual incluye información sobre el proyecto, así como la posibilidad de realizar consultas a las fuentes de datos incorporadas. Además, para los colaboradores, se incluye también la posibilidad de gestionar los datos de sus explotaciones, de forma que pueden incluir redes de sensores y visualizar los datos recogidos por las mismas.



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



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

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

### ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación COMPUTAEX-CénitS, Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara y FundeSalud (Fundación para la Formación e Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura).

### OBJETIVOS

El objetivo del proyecto es estudiar los beneficios de la unificación de fuentes de información heterogéneas en el estudio de enfermedades hereditarias (patrimonio genealógico e información genética), con el fin de reducir la ratio de variantes de significado incierto detectadas en estudios de secuenciación masiva, enfocado todo ello a una medicina de precisión.

Para ello, basándonos en los resultados de un cribado previo, se ha llevado a cabo la secuenciación del genoma de muestras significativas de la población, y posteriormente, se ha unificado con su información genealógica, obtenida mediante distintas fuentes (registros eclesiásticos, registro civil, etc). Se pretende así, demostrar que la disposición de toda esta información conjunta puede facilitar el estudio y diagnóstico de enfermedades hereditarias.

### METODOLOGÍA

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

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

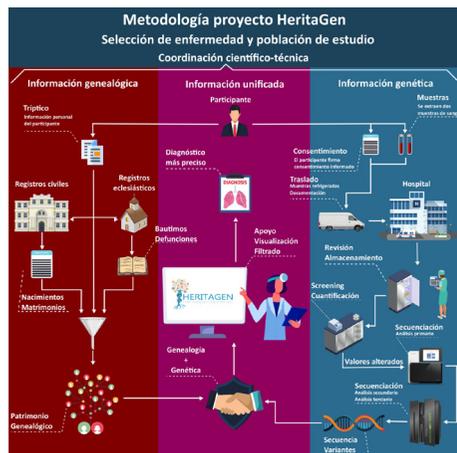
El proyecto HeritaGen ha seguido dos líneas de investigación paralelas. Por un lado, la obtención de la información genealógica de la población, con el fin de estudiar la relación de parentesco entre sus habitantes. Para ello, se ha recopilado información precedente de los Registros Civiles y los Archivos Parroquiales. Estos datos se encuentran digitalizados y almacenados en un nodo de LUSITANIA II con el fin de facilitar el acceso y la interpretación de dicha información mediante el uso de una base de datos NoSQL de tipo documental. Para la segunda línea de investigación, se procedió a la obtención de los datos genéticos de las muestras más significativas. Tras la realización de un screening previo a todas las muestras de los participantes, se seleccionaron las más relevantes para el estudio, procediendo a su secuenciación genética y análisis de las variantes halladas.

La creación de la base de datos y la aplicación web ha servido de base para la unificación de la información genética y genealógica

### OBJETIVOS ALCANZADOS

El proyecto, llevado a cabo en el Valle del Jerte, en el norte de Extremadura, se basa en el estudio del conjunto de enfermedades de índole hereditaria que conforman las Inmunodeficiencias Primarias, concretamente, las relacionadas con alteraciones en el Sistema del Complemento y las de déficit de Inmunoglobulinas séricas. Aunque la metodología desarrollada perfectamente podría ser aplicada a cualquier otra enfermedad de origen genético.

Para ello, se ha realizado un cribado de las 394 muestras recopiladas, mediante la determinación de C3 y C4 y de cuantificación de inmunoglobulinas, mediante nefelometría. Además de un segundo cribado, mediante inmunodifusión radial de factores del complemento (FH, FI). También, se ha realizado la secuenciación del exoma de varias muestras y se han analizado las variantes resultantes en la Fundación COMPUTAEX, mediante la aplicación creada en el proyecto



Asimismo, se ha creado una base de datos con información clínica y personal de los participantes, una aplicación web para facilitar la consulta de los datos anteriores, una aplicación para la visualización de los pedigrís de los participantes así como otra aplicación para el análisis de las variantes genéticas de las muestras que sean secuenciadas.

Se ha presentado el proyecto y los resultados en varias ocasiones, como en el Congreso Internacional ISUM de México, marzo de 2019, y en las Jornadas de puertas abiertas de la Fundación COMPUTAEX que se celebraron en diciembre de 2019.

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

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

## CONECTA PYME 4.0: La transformación digital como estrategia de gestión del cambio hacia la PYME conectada en la Región EUROACE



### CONECTA PYME

Tecnologías disruptivas como Big Data, Business Intelligence o Machine Learning, implican importantes cambios en las estrategias de negocio de las empresas, así como cambios sustanciales en el desarrollo de sus actividades, que generan un importante valor añadido en los procesos productivos y en los propios servicios y productos ofrecidos. El mundo digital e hiperconectado en el que nos encontramos en la actualidad hace necesaria la adaptación de las empresas, para la mejora en la competitividad de las mismas. Este proceso de adaptación a un nuevo escenario digital y a nuevos procedimientos de trabajo se conoce como transformación digital.

Dado que esta transformación va más allá de la implementación de las nuevas tecnologías en los procesos productivos de las empresas, esto implica además la transformación en todas sus áreas y en la propia cultura empresarial.

El modelo de negocio, las personas, los procesos, las infraestructuras, así como los productos y servicios, son susceptibles de los cambios que pueda suponer la transformación digital, para la adaptación de éstos a las nuevas necesidades y a la sociedad digital. Por ello, sobre estas cinco áreas se centrará el estudio para la evaluación de la madurez digital de las Pymes de la eurrregión EUROACE.

De este modo, entre los objetivos del proyecto CONECTA PYME 4.0, se encuentra el de aumentar la competitividad de las empresas del territorio EUROACE mediante la incorporación de conocimiento, tecnologías e innovaciones destinadas a la digitalización de los procesos que redunden en la creación de productos y servicios de mayor valor añadido para las empresas, además de mejorar las condiciones necesarias y propicias para la aparición de nuevas iniciativas empresariales, en concreto aquellas que respondan a las necesidades de la economía digital de los territorios, Extremadura, Centro y Alentejo.

Para ello se desarrollarán iniciativas, programas y herramientas que contribuirán a potenciar la innovación y competitividad en las empresas a través de la aplicación del conjunto de tecnologías de la empresa conectada en toda la cadena de valor de la empresa, teniendo como pilares fundamentales de la misma las personas y estrategias, los procesos y los productos. Estas iniciativas además contribuirán al desarrollo de nuevos proyectos empresariales basados en la economía digital.

#### ENTIDADES PARTICIPANTES



Dirección General de Empresa (Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital, Junta de Extremadura), Dirección General de Formación Profesional y Formación para el Empleo (Consejería de Educación y Empleo, Junta de Extremadura), CIEBI/BIC (Centro de Inovação Empresarial da Beira Interior), Extremadura Avante, Instituto Pedro Nunes, Universidad de Évora y Fundación COMPUTAEX-CénitS.

## OBJETIVOS

El objetivo general de CONECTA PYME 4.0 es el de mejorar el posicionamiento competitivo de las Pymes del territorio EUROACE mediante la incorporación de conocimientos, tecnologías e innovaciones destinadas a la digitalización y remodelación de los procesos que redunden en la creación de productos y servicios de mayor valor añadido para las empresas.

## METODOLOGÍA

A continuación se describen las actividades a desarrollar en el marco del proyecto:

- La organización y las personas como prioridad en el proceso de transformación digital de las pymes en el territorio EUROACE.
- Digitalización de los procesos productivos de las pymes.
- Incorporación y mejora del diseño de producto para la pyme conectada
- Fomento de la cooperación empresarial a través de la creación de entornos colaborativos.

## OBJETIVOS ALCANZADOS

Actualmente, se está trabajando en el desarrollo y ejecución de la actividad 2: “digitalización de los procesos productivos de las Pymes”.

Inicialmente, se definieron las áreas de actuación de cada uno de los socios participantes en la actividad, para posteriormente trabajar en el desarrollo de un modelo y herramienta para el diagnóstico de la madurez digital, con la que se evaluará el grado de digitalización y cultura digital de las pequeñas y medianas empresas de la eurorregión que participen en el proyecto. Entre ellas, se hará una selección para realizar diversos estudios personalizados y elaborar planes de transformación digital con los que mejorar la competitividad de las pymes de la EUROACE.



## FUENTES DE FINANCIACIÓN



**Interreg**  
España - Portugal

Fondo Europeo de Desarrollo Regional  
Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional



UNIÃO EUROPEIA  
UNIÓN EUROPEA

Proyecto cofinanciado en un 75% por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través de la Segunda Convocatoria del Programa Interreg VA España-Portugal 2014-2020 (POCTEP).

Que promueve los proyectos de cooperación en la línea transfronteriza entre España y Portugal. CONECTA PYME 4.0 se enmarca dentro del eje prioritario 2 “Crecimiento integrador a través de una cooperación transfronteriza a favor de la competitividad empresarial”, Objetivo temático 3 “Mejorar la competitividad de las pequeñas y medianas empresas”.

## Análisis de datos genéticos, ambientales y de comportamiento para la predictibilidad de enfermedades oncológicas mediante ultrasecuenciación genética y aplicando paradigmas HPC, Cloud Computing, Big Data y Open Data

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

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

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

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



**ENTIDADES PARTICIPANTES**

Fundación COMPUTAEX - CénitS y Cloudex, S.L.

**OBJETIVOS**

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

**METODOLOGÍA**

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

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

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

**OBJETIVOS ALCANZADOS**

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

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

**FUENTES DE FINANCIACIÓN**

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

## Identificación de patrones de comportamiento en el funcionamiento ordinario de aerogeneradores de un parque eólico mediante técnicas de Advanced Analytics basadas en Big Data

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

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

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

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

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

### ENTIDADES PARTICIPANTES

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

### OBJETIVOS

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

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



## **METODOLOGÍA**

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

1. En primer lugar se hace un preprocesado de los datos, eliminando outliers u otros datos que no sean significativos debido a fallos de sensores y comprometan el resultado final.
2. Análisis de la información procesada, con la consecuente obtención de fallos y análisis de riesgos.
3. Una vez realizado el estudio anterior, y utilizando parte de las series de datos anteriores como datos test, se implementarán algoritmos de Machine Learning para la obtención de predicciones de las mismas a corto plazo de diferentes variables.
4. El último paso del proyecto trata sobre la documentación y divulgación del trabajo realizado.

## **FUENTES DE FINANCIACIÓN**

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

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

TaxoTIC 2019

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



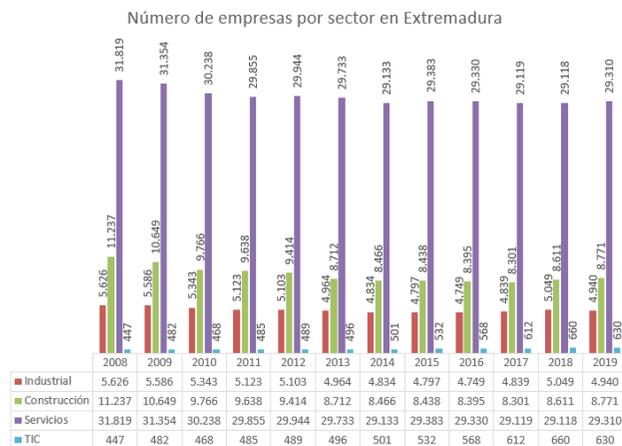
El trabajo realizado desde el año 2013 ha permitido el desarrollo de un observatorio del Sector TIC en la región, en el que se incluye información de las empresas y profesionales del sector, así como de la formación TIC profesional y universitaria. Durante el año 2013 se identificaron y clasificaron aquellas actividades que, desde el punto de vista del equipo de CénitS, podrían ser consideradas TIC. Partiendo de dicha clasificación, se identificó y caracterizó el sector, analizando todas las posibles empresas cuyas actividades principales estuvieran entre las establecidas como TIC para, finalmente, analizar el sector en Extremadura desde un punto de vista interno y externo (comparándolo con otros sectores más tradicionales de la región).

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

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

En 2016 se añadió a la plataforma OLISTIC información sobre los perfiles profesionales TIC y sus competencias asociadas. Para su elaboración se utilizó como referencia el e-CF (European e-Competence Framework) que en 2016 se transformó en un estándar europeo y que fue publicado oficialmente como la norma EN 16234-1. El marco e-CF define 23 perfiles profesionales y 40 competencias.

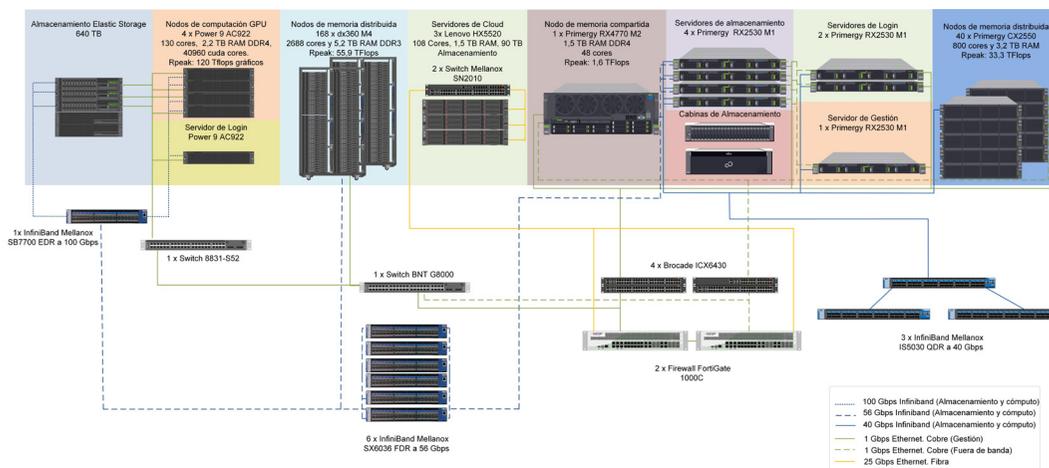
En el momento de la elaboración del proyecto no se contaba con ninguna traducción oficial del mismo al castellano y ésta fue realizada, en el marco del proyecto, por los propios técnicos de CénitS.



En 2017 se decidió ampliar la información relacionada con la formación TIC en la región incluyendo la formación profesional. La formación profesional que está adquiriendo mayor protagonismo en



## Adquisición de equipamiento científico-tecnológico de la Fundación COMPUTAEX



### JUNTA DE EXTREMADURA

Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital  
Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad

Desde diciembre de 2019, Extremadura cuenta con un nuevo supercomputador, LUSITANIA III, alojado en Cáceres. Esto supone una destacable ampliación de los recursos de cómputo ofrecidos por COMPUTAEX, aumentando considerablemente la potencia de cálculo de la que ya disponía. La actuación llevada a cabo se

encuadra dentro de las medidas recogidas en el Programa Operativo del Fondo Europeo de Desarrollo Regional 2014-2020 de Extremadura en el Objetivo Temático 1 “Potenciar la investigación, el desarrollo tecnológico y la innovación” Prioridad de Inversión (PI0102) 1b “La mejora de las infraestructuras de investigación e innovación (I+i) y de la capacidad para desarrollar excelencia en materia de I+i, y el fomento de centros de competencia, en especial los de interés europeo” y dentro del Objetivo Específico 1.1.2 “Fortalecimiento de las instituciones de I+D+i y la Estrategia de Investigación e Innovación para la Especialización Inteligente de Extremadura, 2014-2020 (RIS3 Extremadura).

#### FUENTES DE FINANCIACIÓN

El Supercomputador LUSITANIA III ha sido financiado por la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura, a través de la Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad, con fondos FEDER.

## CénitS-CPD: Equipamiento científico tecnológico

### JUNTA DE EXTREMADURA

Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital  
Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad

COMPUTAEX ha realizado en los últimos años una notable ampliación y renovación de los equipos de computación de elevadas prestaciones (HPC) para fortalecer los servicios de supercomputación ofrecidos. Gracias a la construcción de un nuevo CPD será posible cubrir las expectativas más inmediatas de

CénitS, de cara a seguir contribuyendo decididamente al desarrollo regional, permitiendo que la ciencia y tecnología cuenten con un recursos avanzado para poder acometer nuevos retos que hasta

ahora no han podido ser emprendidos dentro de nuestra región. No sólo el entorno investigador será más competitivo, sino que también el sector productivo se beneficiará de esta instalación de forma directa, permitiendo que muchas empresas puedan acometer proyectos de innovación tecnológica en CénitS y convertirse en socios tecnológicos del mismo, siendo proveedores y clientes de un centro avanzado, único en Extremadura y muy singular en el ámbito nacional y europeo. En definitiva, el principal objetivo que se pretende conseguir con este proyecto es la creación del Centro de Proceso de Datos de Supercomputación de Extremadura, CénitS-CPD, donde alojar, proteger y gestionar todos los equipos HPC de los que dispone la Fundación COMPUTAEX, para fortalecer los servicios de supercomputación gestionados por su centro CénitS.

#### FUENTES DE FINANCIACIÓN

Este proyecto será financiado por la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura, a través de la Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad, con fondos FEDER (Fondo Europeo de Desarrollo Regional).

### CénitS-CPD: Consolidación de Infraestructuras de Supercomputación para el Progreso de la Investigación Científico-Técnica



Se solicitó financiación para acometer la construcción de un Centro de Proceso de Datos (CPD) gestionado por CénitS, donde se consolidarán todas las herramientas informáticas y de comunicaciones con que cuenta el centro, entre las que destacan los supercomputadores

LUSITANIA, LUSITANIA II y LUSITANIA III. Se perseguía, por tanto, diseñar, construir y equipar CénitS-CPD con las infraestructuras necesarias para acoger y consolidar con las esperadas garantías de alta disponibilidad, seguridad, fiabilidad, velocidad de acceso y eficiencia energética los equipos de supercomputación que ya gestiona CénitS.

Para lograr las garantías de calidad de servicio que merecen los usuarios de los recursos de cómputo era necesario contar con un suministro eléctrico de calidad y estable; con una red de datos fiable y de alta capacidad; con un sistema de enfriamiento eficaz y eficiente; con las adecuadas medidas de seguridad; con el espacio suficiente que permita su desarrollo y toma de decisiones futuras y con el conjunto de características técnicas que todo CPD dedicado a la supercomputación debe satisfacer.

Este centro de proceso de datos es la base para que los equipos de cómputo que conforman los tres supercomputadores puedan funcionar correctamente. De esta manera, la actuación reflejada en el proyecto es de vital importancia para el buen funcionamiento de dichos equipos. Así, el principal valor añadido que se obtendrá de la adquisición del equipamiento es la capacidad para mejorar la calidad del servicio que actualmente se presta a los usuarios de la infraestructura del centro, a la vez que permitirá el incremento de los recursos de cómputo para fortalecer las líneas de investigación que actualmente se están ejecutando en el centro, así como abrir nuevas líneas de investigación que por sus requerimientos no se pueden abarcar actualmente.

#### FUENTES DE FINANCIACIÓN

Este proyecto será financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, a través de la convocatoria de Adquisición de Equipamiento Científico-Técnico correspondiente al año 2018, con fondos FEDER (Fondo Europeo de Desarrollo Regional).

## SmartNet5G: Desarrollo de nuevos mecanismos de gestión en redes programables de próxima generación

SmartNet 5G tiene como objetivo general gestionar de forma eficiente servicios de red, así como diseñar e implementar mecanismos de gestión automática de la red utilizando para ello técnicas novedosas de virtualización de funciones de red en redes programables, que estarán presentes en las redes de próxima generación. SmartNet está concebido para servir de plataforma a empresas del sector TIC y a administraciones públicas extremeñas que gestionan una red de telecomunicaciones y que necesitarán adaptarse al nuevo entorno 5G. Este contexto, de las redes de próxima generación, estará gobernado por redes de muy alta velocidad y alta fiabilidad en el que el aumento de las conexiones será exponencial y la generación de tráfico se producirá desde multitud de dispositivos y con tecnologías heterogéneas. SmartNet5G prestará especial atención a la gestión de las redes inalámbricas y móviles, dada su creciente relevancia en la actualidad y en los próximos años.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

GÍTACA (Grupo de Investigación de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas) de la Universidad de Extremadura y Fundación COMPUTAEX-CénitS.

### FINANCIACIÓN

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

## Cross-Layer Optimization in 5G Networks (5G-CLOPS)

This ground-breaking proposal precisely suggests an holistic approach in which network resources allocation in the UE-BS (User Equipments and Base Stations) association is undertaken by taking into consideration not only the propagation channel condition but also the operation of the IP mobility management protocols that allow a seamless mobility and avoid service disruption during the user's movement among heterogeneous networks. This cross-layer solution could lead to a better utilisation of the network resources and to an optimised network performance. The goal is to devise a set of specialized metaheuristic algorithms for 5G networks capable of scheduling ultradense networks (UDNs) efficiently and engineering mechanisms for the automatic service management of SDN/NFV-based (Software-Defined Network / Network Function Virtualization) access networks.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

3 (Universidad de Granada, Universidad de Extremadura, Fundación COMPUTAEX).

### FINANCIACIÓN

Proyecto financiado por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades en la convocatoria de Proyectos I+D+i "Retos Investigación" del Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad.

## Red de Excelencia RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una infraestructura distribuida consistente en la interconexión en 2019 de 12 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica. La RES gestiona recursos de computación de alto rendimiento con el objetivo de impulsar el avance de la ciencia y la innovación en España. Para alcanzar este propósito, ofrece dichos recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización óptima de todos los recursos disponibles en la red.

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

### ENTIDADES PARTICIPANTES

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

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

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

## Red-Integra

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

### ENTIDADES PARTICIPANTES

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

## Go2Edge: diseñando las futuras redes, sistemas y servicios de computación seguros en el extremo



Red temática de excelencia formada por 15 entidades para combinar su experiencia, coordinar esfuerzos de investigación y compartir resultados sobre tecnologías que permiten acercar los recursos computacionales y de almacenamiento al extremo de la red. Para ello se desarrolla una visión multidisciplinar con capacidades complementarias e intereses diversos en las tecnologías involucradas: computación distribuida; cloud y fog computing; redes de comunicaciones; ciberseguridad; y aplicaciones finales que permitan explotar estas tecnologías.

### ENTIDADES PARTICIPANTES:

Universidad de Valladolid, Universidad Carlos III de Madrid, Universitat Politècnica de Catalunya CRAAX, Universidad Politècnica de Cartagena, Universidad Politècnica de Madrid, Universitat de Girona, Universitat Politècnica de València, Universidad de Vigo, Universitat Politècnica de Catalunya CCABA, Universidad de Salamanca, Universidad de Granada, Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya, Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación, Instituto Nacional de Ciberseguridad de España (INCIBE) y Fundación COMPUTAEX.

### FINANCIACIÓN:

Convocatoria 2018 de acciones de dinamización *Redes de Investigación* del Programa estatal de generación de conocimiento y fortalecimiento científico y tecnológico del sistema de I+D+i. Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

## Spanish Digital Innovation Hub for HPC



En el marco de sus iniciativas de digitalización de la industria (DEI), la Comisión Europea está apostando por los hubs de innovación digital (DIHs, Digital Innovation Hubs), promoviendo la cooperación y la creación de redes entre ellos, como medio de apoyo a la transformación digital de las empresas. Así, se creó un programa de capacitación para el establecimiento de una red de colaboración entre DIHs centrada en la Inteligencia Artificial, con el fin de servir de apoyo para la preparación de políticas relevantes para futuros programas como, por ejemplo, el de Europa Digital. Se persigue así reforzar la competitividad de la Unión Europea en tecnologías digitales y garantizar que cualquier empresa europea, independientemente de su sector, ubicación o tamaño, pueda aprovechar los beneficios de la innovación digital.

La RES, de la que forma parte COMPUTAEX, fue seleccionada entre otros 29 DIHs para participar en esta acción, gestionada por PwC junto con Carsa e Innovalia, de forma que todos recibirán asesoría sobre desarrollo empresarial, financiación y gestión de la innovación para ayudar a empresas europeas en su labor de digitalización. La red apoyará además la colaboración entre los distintos DIHs, contribuyendo a crear una comunidad que pueda aumentar la competitividad europea. Se pretende además desarrollar un plan para la colaboración transfronteriza basado en la evaluación exhaustiva de los modelos empresariales, sistemas comunes, y las estructuras de colaboración y gobierno. La acción también apoyará el desarrollo de un plan de acción concreto para la colaboración entre los DIHs seleccionados, mediante actividades de tutoría y coaching.

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

El objetivo general consistió en aplicar tecnologías informáticas con carácter prospectivo para enfrentarse a la influencia que las condiciones del entorno tienen en la aparición y prevalencia de ciertas enfermedades oncológicas, y el papel que desempeña el sistema inmunológico. La epigenética demuestra que existen factores de entorno que juegan un papel fundamental para la aparición de algunas enfermedades oncológicas, por lo que se decidió aplicar Big data, Machine Learning y Open Data, entre otras tecnologías, a la información existente para analizarla y estudiarla con la intención de explorar las posibilidades de predicción de ciertas enfermedades en función de los hábitos, costumbres, alimentación, zonas geográficas, nivel cultural y económico, etc.

### ENTIDADES PARTICIPANTES:

Cloudex, S.L. y CénitS.

### FINANCIACIÓN

El programa de Innovación y Talento (PIT), de la Consejería de Educación y Empleo de la Junta de Extremadura combina la formación de tecnólogos con las prácticas profesionales. La formación impartida en CénitS tuvo por objeto la mejora y adquisición de competencias y capacidades, para el desempeño posterior de actividades como tecnólogos en la empresa seleccionada.

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

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

### ENTIDADES PARTICIPANTES

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

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

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



# PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS

CénitS ofrece su infraestructura, sus recursos y apoyo técnico para acometer proyectos (científicos, técnicos o empresariales). En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2019.

Estos proyectos son llevados a cabo por universidades, centros de investigación, centros tecnológicos y todo tipo de organizaciones, que requieren una gran cantidad de recursos informáticos (elevada capacidad de cómputo, almacenamiento, equipamiento, etc). En este sentido, se valen de la infraestructura de los Supercomputadores LUSITANIA para realizar simulaciones, extrapolar resultados, demostrar hipótesis y diseñar innovaciones.

Los proyectos son clasificados en tres categorías: Ciencias de la Tierra, Ciencias de la Vida y Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.

## Ciencias de la Tierra



### ***Ab-initio based data mining techniques for studying the emergent phenomena in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3/\text{BaTiO}_3$ heterojunctions***

*Juan Ignacio Beltrán Fínez. Universidad Complutense de Madrid.*

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

Oxide heterojunctions (OH) constitute a material framework where interfaces often exhibit new phenomena unrelated to its constituents bulk properties. Involved mechanisms arise from the complex interrelation between lattice, charge, orbital and spin where no experimental technique can unravel the whole complexity. However, the increasingly large information density (called datacubes) acquired in scanning transmission electron microscopy and electron energy-loss spectroscopy contains more and more details of the subtle mechanisms involved. We tackle the problem using “big data” techniques applied to ab-initio simulations which can help rationalizing those datacubes into a reduced set of configurations in the real (energy) space towards a realistic description of structural distortions (oxidation states) at the interface of OH.

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

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

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

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

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

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

## **Relationship between thermoelectric features and dimensionality in monochalcogenide compounds**

Gregorio Garcia Moreno. Universidad Politécnica de Madrid. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]

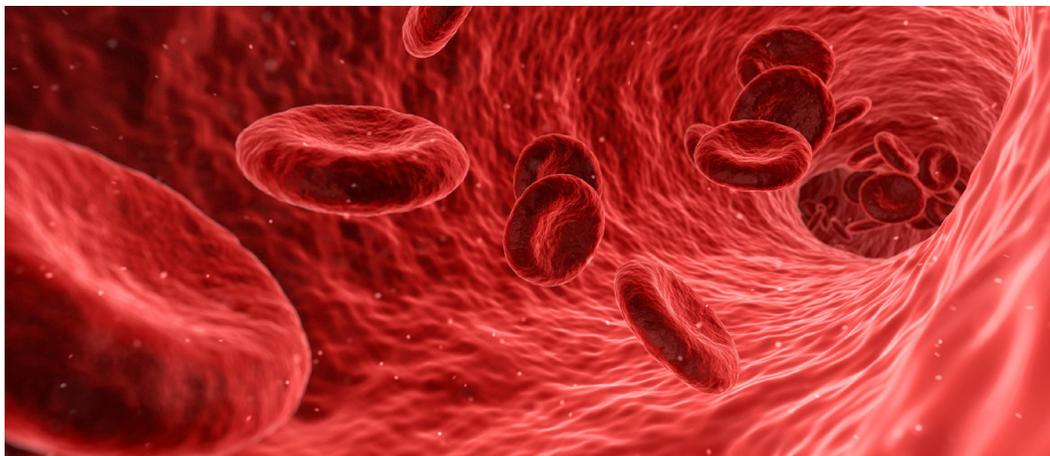
In recent years, semiconductor materials based on chalcogenides have received great attention owing to their wide applications in numerous fields. In addition, chalcogenide elements are earth abundant, cheap and non-toxic. One of the main potential applications for chalcogenide-based semiconductor is the thermoelectricity. Although compounds here studied (concretely  $\text{SnX}$  and  $\text{SnX}_2$  with  $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) have been extensively characterized, theoretical studies on the relationships between the electronic structure, dimensionality and thermoelectric features are very scarce. Herein, we propose a comprehensive study on the electronic structure and thermoelectric properties in chalcogenides-based semiconductor materials by using first-principles calculations combined with the Boltzmann transport theory.

## **Simulación del clima mediante el modelo WACCM**

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

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

## Ciencias de la Vida



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

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

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

### ***Discovery of p53 tetramer stabilization peptides***

*Ernest Giralt Lledó. Institute for Research in Biomedicine (IRB). [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación].*

Tetramer formation of p53 (TP53) is essential for its tumor suppressor function. The p53 not only acts as a tumor suppressor protein by inducing cell cycle arrest and apoptosis. More than 50% of human tumors have TP53 gene mutations, and most of them are missense mutations that reduce tumor suppressor activity of p53 by destabilizing the TP53 formation. A new therapeutical intervention where an active peptide is able to stabilize TP53 tetramers and re-store functional protective activity of p53 is pursued in this project by combining state-of-the-art experimental and computational approaches.

## ***Elucidación y estudios mecanísticos en reactividad orgánica y organometálica***

*Jesús Díaz Álvarez. Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas. Universidad de Extremadura.*

Los objetivos de los estudios computacionales que se pretenden llevar a cabo son los de apoyar, estudiar y prever la reactividad orgánica que se está realizando en el Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas de la Universidad de Extremadura.

Por un lado las reacciones multicomponentes para la síntesis de productos con potencial actividad biológica son objeto de este grupo de investigación desde hace unos años. Este proyecto ha reportado la publicación de bastantes artículos en los últimos años, existiendo un campo amplio aun por explorar. La exploración debe ser experimental pero una aproximación teórica puede ayudar a enfocar el problema, o a su vez a explicar los resultados experimentales obtenidos. Por ello en los últimos artículos científicos publicados siempre ha habido una parte importante dedicada a los cálculos computacionales realizados.

En segundo lugar y no menos importante, la incorporación de distintos metales de transición unidos a ligandos orgánicos hace variar la reactividad de manera muy dependiente del metal así como del ligando, lo que abre la puerta a química muy novedosa y de gran interés.

## ***Estudio computacional de la reactividad de los compuestos orgánicos***

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

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

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

### **Metodología**

- Optimización de las estructuras de moléculas mediante cálculos teóricos.

## Objetivos alcanzados

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

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

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

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

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

El campo de investigación se centra en el estudio cinético y dinámico teórico de sistemas poliatómicos en fase gaseosa, basado en el conocimiento de las superficies de energía potencial (SEP). Un reto importante en esta investigación es la evolución desde los bien estudiados sistemas átomo+diátomo a los sistemas poliatómicos. Las superficies de energía potencial desempeñan un papel central en la completa descripción de un sistema reactivo.

Las SEP se construyen como formas funcionales describiendo los modos de tensión, flexión y torsión, y se ajustan a cálculos ab initio de estructura electrónica de alto nivel. Basados sobre estas SEP, la información cinética se obtiene usando la Teoría Variacional del Estado de Transición (VTST) con inclusión del efecto túnel mecanocuántico; mientras que la información dinámica se obtiene usando cálculos de trayectorias cuasi-clásicas (QCT). Las áreas de aplicación incluyen química de combustión y atmosférica, catálisis y bioquímica.

#### **Objetivos**

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

## Metodología

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

## Objetivos alcanzados

- Cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de una Tesis Doctoral.
- Investigaciones sobre el sistema Cl+NH<sub>3</sub>, con una complicada topología en la superficie de energía potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH<sub>3</sub>, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica sobremanera la construcción de la superficie.

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

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

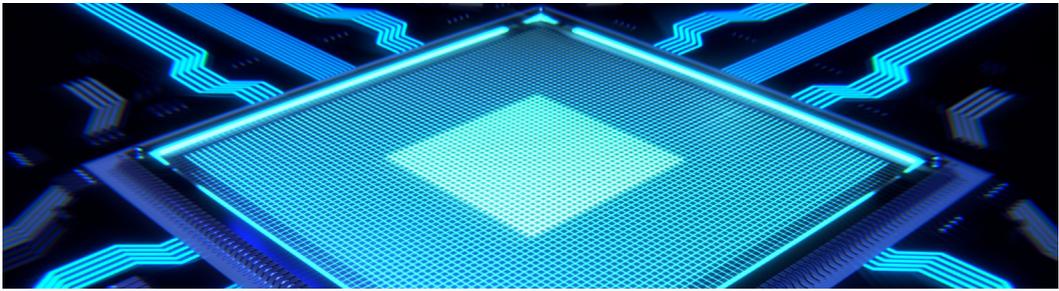
Photovoltaics, PV, devices performance are based on 3 main features: a) efficient light absorption, b) effective charge separation and c) fast transport and charge extraction. Conventional solar cells are good light harvesters but are limited by the Shockley-Queisser limit because carriers are separated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

## ***Predicting temperature-dependent elastic constants for ultra-high temperature ceramics***

*Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación].*

Ultra-high temperature ceramics, UHTCs, are key components of materials used in extreme conditions for aerospace applications. However, the characterisation of these materials at working conditions is extremely expensive and there are few laboratories over the world with the required facilities for that task. Although elastic constant at 0 K are calculated routinely by first principles, temperature-dependent elastic constant calculations are still a difficult challenge because of the lack of well established approaches and the high computational cost of these methodologies. In this activity, we strive to calculate the temperature-dependent elastic constants of UHTC materials.

## Ciencias Informáticas y de Comunicaciones



### ***Factoría de Innovación / Aldealab***

*Excmo. Ayuntamiento de Cáceres.*

Comunidad virtual de emprendedores, que busca conectar innovación y talento para generar nuevas oportunidades de negocio, permitiendo encontrar información sobre lo último en innovación, creatividad, tecnológica, modelos de negocio, y posibilidades para pymes y emprendedores.

### ***Optimization of five Active Flow Control parameters on a SD7003 wing profile at several angles of attack from 4 to 16 and at Reynolds number 60000***

*Josep M Bergada Granyo. Universitat Politècnica de Catalunya. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]*

Increasing airfoils efficiency will reduce CO2 emissions, being a key point when considering the rise in air traffic expected in the future. During taking off, landing and under several airplane maneuvering, airfoils work near stall conditions, therefore using (AFC) to increase lift and security under these critical operating conditions is crucial. The present research is using an in-house code linked with the OpenFoam package, to optimize for six angles of attack, five (AFC) operating parameters, the momentum coefficient, jet inclination angle, frequency, groove width and location. The baseline cases and some of the optimized ones, will be run in LES to assess the (AFC) advantages. This knowledge will help manufacturers to decide where to locate (AFC) devices and which parameters need to be tuned for each angle of attack.

### ***Prestación de servicios de almacenamiento de datos***

*Fundecyt-PCTEX*

Prestación de servicios y recursos para almacenamiento de datos en discos sobre un sistema de ficheros distribuido, con asistencia técnica y atención personalizada.

### ***Servicio Central de Apoyo a la Investigación (SCAI)***

*Universidad de Córdoba (UCO)*

Prestación de recursos al Servicio Central de Apoyo a la Investigación (SCAI) de la Universidad de Córdoba (UCO), una estructura dinámica que permite a investigadores y empresas disponer de equipamiento de alto coste necesario para el desarrollo de sus líneas de investigación.



# RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

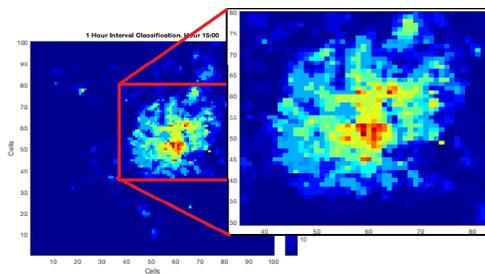
La obtención de resultados de investigación es esencial para un centro de investigación e innovación tecnológica como CénitS, que permite a un destacado número de investigadores e innovadores acometer sus actividades. Muchos de estos proyectos alcanzan una notable visibilidad con publicaciones de diverso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

Esta sección presenta los resultados más destacables que han sido publicados en congresos y revistas durante el año 2019, además de los Trabajos Finales de Grado desarrollados.

## Publicaciones en revistas

***A Novel Methodology Based on Orthogonal Projections for a Mobile Network Data Set Analysis***

**D. Cortés-Polo, L. I. Jiménez, J. Calle-Cancho and J. González-Sánchez.** A Novel Methodology Based on Orthogonal Projections for a Mobile Network Data Set Analysis. *IEEE Access*, vol. 7, pp. 158007-158015, 2019. doi: 10.1109/ACCESS.2019.2949804.



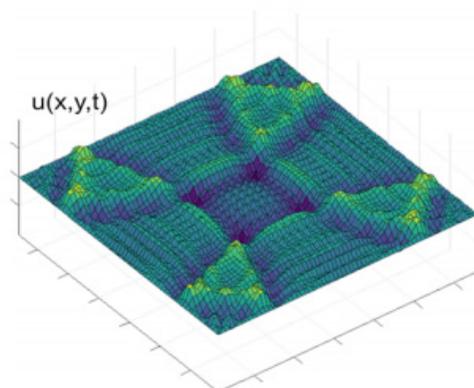
Nowadays, networks are at the center of the next industrial revolution. In fact, 5G in a short time will connect people, industries and things, so understanding how the network is performing its critical mission in this new paradigm is a key aspect. Network analytics increases the knowledge of the network and its users, leading the network managers to make smarter, data-driven decisions about the operations that they will execute in the network. In this article, a new methodology is introduced to analyze real data contained in a Call Details Record of a mobile network.

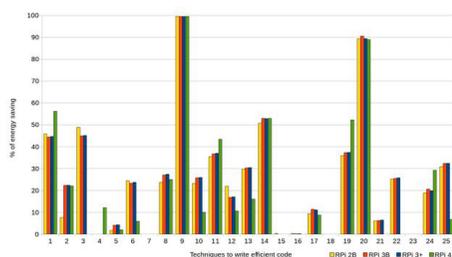
With this novel methodology, the extraction of extreme points using the orthogonal projection decrease the complexity of the classification algorithm to obtain key information about network usage. Experimental results show how the proposed methodology selects and classifies network behavior patterns using a simple classification algorithm and how these patterns could be used to find, for instance, anomalies in the network, track human mobility, undertake network planning, detect events in the network, etc.

***A Tool to Assess the Communication Cost of Parallel Kernels on Heterogeneous Platforms***

**Rico-Gallego, J.A., Moreno-Álvarez, S., Díaz-Martín, J.C. et al.** A tool to assess the communication cost of parallel kernels on heterogeneous platforms. *J Supercomput* (2019). <https://doi.org/10.1007/s11227-019-02919-1> 05 June 2019

Ensuring applications to achieve an efficient usage of resources and fast execution time in the complex current heterogeneous high-performance computing platforms is a paramount problem. Essential efforts to reach the goal are the optimal partitioning of the data space between the processes composing a typical task/data-parallel application, and their right mapping and deployment on the platform. The computational and communication performance modeling describing the platform and the application behaviors is an increasingly recognized approach. This paper discusses the utility of the  $\tau$ -Lop analytic communication performance model in facing these issues and contributes with a practical symbolic computation tool that represents, manipulates and accurately evaluates the formal communication cost expression derived from a hybrid kernel. We identify a set of scenarios where the tool could be applied, provide with both basic and advanced use examples and evaluate the tool on real-life kernels.





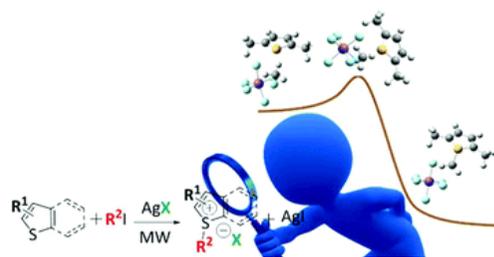
### Analysis of Energy Consumption and Optimization Techniques for Writing Energy-Efficient Code

Javier Corral-García, Felipe Lemus-Prieto, José-Luis González-Sánchez and Miguel-Ángel Pérez-Toledano. Analysis of Energy Consumption and Optimization Techniques for Writing Energy-Efficient Code. *Electronics* 2019, 8, 1192 (21 pages). doi:10.3390/electronics8101192.

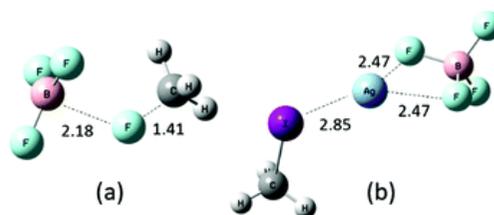
The unprecedented growth of connected devices, together with the remarkable convergence of a wide variety of technologies, have led to an exponential increase in the services that the internet of things (IoT) can offer, all aimed at improving quality of life. Consequently, in order to meet the numerous challenges this produces, the IoT has become a major subject of research. One of these challenges is the reduction of energy consumption given the significant limitations of some devices. In addition, although the search for energy efficiency was initially focused on hardware, it has become a concern for software developers too. In fact, it has become an intense area of research with the principal objective of analyzing and optimizing the energy consumption of software systems. This research analyzes the energy saving that can be achieved when using a broad set of techniques for writing energy-efficient code for Raspberry Pi devices. It also demonstrates that programmers can save more energy if they apply the proposed techniques manually than when relying on other automatic optimization options offered by the GNU compiler collection (GCC). Thus, it is important that programmers are aware of the significant impact these techniques can have on an application's energy consumption

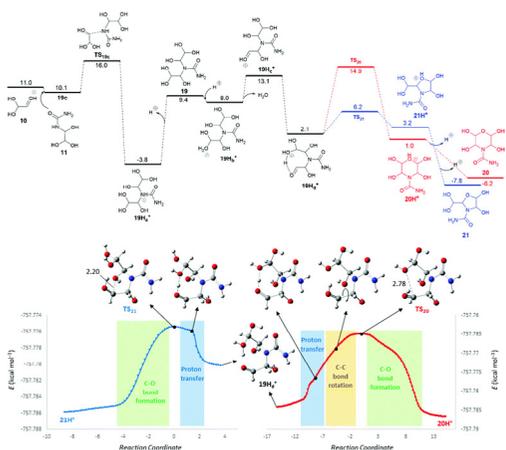
### Formation of S-alkyl thiophenium ionic liquids: mechanistic rationale and structural relationships

Schiel, M. A., de la Concepción, J. G., Domini, C. E., Cintas, P., & Silbestri, G. F. (2019). Formation of S-alkyl thiophenium ionic liquids: mechanistic rationale and structural relationships. *Organic & biomolecular chemistry*, 17(33), 7772-7781. doi: 10.1039/C9OB01181A



The quaternization of thiophenes through S-alkylation reactions with iodoalkanes in the presence of silver salts opens the door to a new family of room-temperature ionic liquids, yet relatively unexplored in terms of chemical reactivity and applications. This computational study provides a mechanistic rationale that accounts for their formation. The results are consistent with the calculated energy barriers of the corresponding transition structures. Calculations indicate that the geometry at the sulfur atom goes from flat to tetrahedral during salt formation, and the electron delocalization of thiophene is greatly reduced, if not lost, as inferred from aromaticity indexes. Moreover, the rationale explains the influence of polarizable anions on S-alkylation and why alkyl substitution at the  $\alpha$ -position of thiophenes gives rise to more stable species than unsubstituted derivatives.





### From prebiotic chemistry to supramolecular oligomers: urea–glyoxal reactions

Lavado, N., de la Concepción, J. G., Gallego, M., Babiano, R., & Cintas, P. (2019). From prebiotic chemistry to supramolecular oligomers: urea–glyoxal reactions. *Organic & biomolecular chemistry*, 17(23), 5826–5838. doi: 10.1039/C9OB01120J

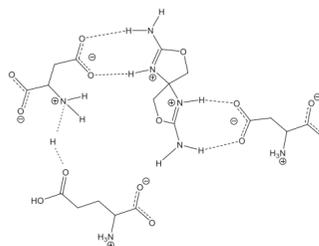
A fundamental question in origin-of-life studies and astrochemistry concerns the actual processes that initiate the formation of reactive monomers and their oligomerization. Answers lie partly in the accurate description of reaction mechanisms compatible with environments plausible on early Earth as well as cosmological scenarios in planetary factories. Here we show in detail that reactions of urea—as archetypal prebiotic substance—and reactive carbonyls—exemplified by glyoxal—lead to a vast repertoire of oligomers, in which different five- and six-membered non-aromatic heterocycles self-assemble and insert into chains or dendritic-like structures with masses up to 1000 Da. Such regular patterns have been interpreted by experimental and computational methods.

A salient conclusion is that such processes most likely occur through  $S_N$ -type mechanisms on hydrated or protonated species. Remarkably, such supramolecular oligomeric mixtures can be easily isolated from organic solvents, thus opening the door to the generation of novel urea-containing polymers with potential applications in materials chemistry and beyond.

### Interactions of Amino Acids and Aminoxazole Derivatives: Cocystal Formation and Prebiotic Implications Enabled by Computational Analysis

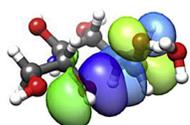
Lavado, N., de la Concepción, J. G., Babiano, R., Cintas, P., & Light, M. E. (2019). Interactions of Amino Acids and Aminoxazole Derivatives: Cocystal Formation and Prebiotic Implications Enabled by Computational Analysis. *Origins of Life and Evolution of Biospheres*, 49(3), 163–185. doi: 10.1007/s11084-019-09582-9

In line with the postulated intermediacy of aminoxazoles derived from small sugars toward the direct assembly of nucleoside precursors, we show here a potential prebiotic scenario where aminoxazolines might have also played further roles as complexing and/or sequestering agents of other primeval blocks, namely amino acids. To this end, a bis-aminoxazoline derivative, generated from dihydroxyacetone and cyanamide, gives rise to stable co-crystal forms with dicarboxylic amino acids (Asp and Glu), while ionic interactions owing to proton transfer are inferred from spectroscopic data in aqueous solution. The structure of a 1:2 aminoxazoline: aspartic acid complex, discussed in detail, was elucidated by X-ray diffractometry. Optimized geometries of such ionic structures with bulk aqueous solvation were assessed by DFT calculations, which disclose preferential arrangements that validate the experimental data. Peripherally, we were able to detect in a few cases amino acid dimerization (i.e. dipeptide formation) after prolonged incubation with the bis-aminoxazole derivative. A mechanistic simulation aided by computation provides some predictive conclusions for future explorations and catalytic design.

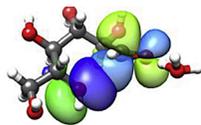


### ***Mutarotation of aldoses: Getting a deeper knowledge of a classic equilibrium enabled by computational analyses***

de la Concepción, J. G., Martínez, R. F., Cintas, P., & Babiano, R. (2020). Mutarotation of aldoses: Getting a deeper knowledge of a classic equilibrium enabled by computational analyses. *Carbohydrate Research*, 107964. doi: 10.1016/j.carres.2020.107964



Orbital overlap  
n(O5)-π\*(C1-O1)  
22.8 kcal/mol



Orbital overlap  
n(O5)-π\*(C1-O1)  
4.0 kcal/mol

The mutarotation equilibrium, by which reducing carbohydrates exist in solution as the  $\alpha$  and  $\beta$  anomers of cyclic (furanoid and pyranoid) structures, along with open-chain (aldehyde and hydrate) forms, and whose ratios are depending on factors such as temperature, pH and solvent, portrays a phenomenon involved in numerous processes of chemical and biological importance.

Herein, we have developed a DFT-based rationale that provides a broader landscape for anomerizations and ring-open chain interconversions, together with the pivotal role exerted not only by the aldehyde intermediate (essentially the only acyclic structure taken into account so far), but also the hydrate form (often more abundant at the equilibrium). These calculations reveal a more complex and richer scenario than was thought, and identify different mutarotation mechanisms that hinge on every monosaccharide. It is noteworthy that pyranose-furanose interconversion may actually occur without the intermediacy of open-chain forms. For the aldoses evaluated, namely d-glucose, d-ribose, and d-xylose, all structures involved in mutarotation undergo interconversion pathways, whose energy barriers calculated at the M06-2X/6-311++G(d,p) level, are in good agreement with previous experimental measurements.

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

Ruiz-Torres, V., Losada-Echeberría, M., Herranz-López, M., Barrajión-Catalán, E., Galiano, V., Micol, V., & Encinar, J. A. (2018). New mammalian target of rapamycin (mTOR) modulators derived from natural product databases and marine extracts by using molecular docking techniques. *Marine drugs*, 16(10), 385. doi: 10.3390/md16100385

Mammalian target of rapamycin (mTOR) is a PI3K-related serine/threonine protein kinase that functions as a master regulator of cellular growth and metabolism, in response to nutrient and hormonal stimuli. mTOR functions in two distinct complexes—mTORC1 is sensitive to rapamycin, while, mTORC2 is insensitive to this drug.

Deregulation of mTOR's enzymatic activity has roles in cancer, obesity, and aging. Rapamycin and its chemical derivatives are the only drugs that inhibit the hyperactivity of mTOR, but numerous side effects have been described due to its therapeutic use. The purpose of this study was to identify new compounds of natural origin that can lead to drugs with fewer side effects.

We have used computational techniques (molecular docking and calculated ADMET (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity) parameters) that have enabled the selection of candidate compounds, derived from marine natural products, SuperNatural II, and ZINC natural products, for inhibitors targeting, both, the ATP and the rapamycin binding sites of mTOR.

We have shown experimental evidence of the inhibitory activity of eleven selected compounds against mTOR.

We have also discovered the inhibitory activity of a new marine extract against this enzyme. The results have been discussed concerning the necessity to identify new molecules for therapeutic use, especially against aging, and with fewer side effects.

***QCT study of the vibrational and translational role in the H+C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>( $v_1, v_2, v_3, v_7, v_9$  and  $v_{10}$ ) reactions***

**Espinosa-Garcia, J., Calle-Cancho, J., & Corchado, J. C. (2019). QCT study of the vibrational and translational role in the H+ C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> ( $v_1, v_2, v_3, v_7, v_9$  and  $v_{10}$ ) reactions. *Theoretical Chemistry Accounts*, 138(10),116. doi: 10.1007/s00214-019-2504-4**

Two important issues were analysed in the title reaction: the effects of vibrational excitation, associated with mode selectivity, and the role of translational energy, associated with Polanyi's rules. Based on a global analytical potential energy surface, PES-2018, recently developed in our group, quasi-classical trajectory (QCT) calculations were performed at total energy of 35 kcal mol<sup>-1</sup>, either as translation or as a combination of translation and vibration energy. Independent vibrational excitation by one quantum of any of the CH<sub>3</sub> stretching modes in ethane leads to similar dynamics pictures of reaction cross sections and H<sub>2</sub>( $v', j'$ ) rovibrational and scattering distributions, ruling out mode selectivity. Normal mode analysis showed a cold, non-inverted, H<sub>2</sub>( $v'$ ) product vibrational distribution, while the C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>( $v'$ ) co-product presented many vibrational states, all of them with a low population, practically simulating a classical behaviour. An equivalent amount of energy as translation raises reactivity somewhat less effective than vibrational energy, contrary to that found for the O(<sup>3</sup>P)+CH<sub>4</sub> reaction. Both reactions present "central" barriers, so this opposite behaviour shows the difficulties for a straightforward application of the Polanyi's rules. The role of vibrational and translational energy on dynamics has been rationalized by the coupling between vibrational modes, which makes analysis of vibrational excitation difficult in polyatomic systems. Finally, the role of the total energy on reactivity and mode selectivity was analysed, concluding that at lower energy, 15 kcal mol<sup>-1</sup>, translational energy is much more effective than vibrational energy to enhance reactivity, while at intermediate energy, 20 kcal mol<sup>-1</sup>, the situation is more confusing and strongly

dependent on the counting methods used in the QCT calculations. Therefore, very small mode selectivity is found, and translation seems to be more effective in enhancing reactivity than vibration at low collision energies, while this behaviour is reversed as we increase the collision energy, being the turning point around 20 kcal mol<sup>-1</sup>.

***Photo-sensitizing thin-film ferroelectric oxides using materials databases and high-throughput calculations***

**Plata, J. J., Suárez, J. A., Cuesta-López, S., Márquez, A. M., & Sanz, J. F. (2019). Photo-sensitizing thin-film ferroelectric oxides using materials databases and high-throughput calculations. *Journal of Materials Chemistry A*, 7(48), 27323-27333. doi: 10.1039/C9TA11820A**

Conventional solar cell efficiency is usually limited by the Shockley–Queisser limit. This is not the case, however, for ferroelectric materials, which present spontaneous electric polarization that is responsible for their bulk photovoltaic effect. Even so, most ferroelectric oxides exhibit large band gaps, reducing the amount of solar energy that can be harvested. In this work, a high-throughput approach to tune the electronic properties of thin-film ferroelectric oxides is presented.

Materials databases were systematically used to find substrates for the epitaxial growth of KNbO<sub>3</sub> thin films, using topological and stability filters. Interface models were built and their electronic and optical properties were predicted.

Strain and substrate–thin-film band interaction effects were examined in detail, in order to understand the interaction between both materials. We found substrates that significantly reduce the KNbO<sub>3</sub> band gap, maintain KNbO<sub>3</sub> polarization, and potentially present the right band alignment, favoring electron injection in the substrate/electrode.

This methodology can be easily applied to other ferroelectric oxides, optimizing their band gaps and accelerating the development of new ferroelectric-based solar cells.

**Quantum Roaming in the Complex-Forming Mechanism of the Reactions of OH with Formaldehyde and Methanol at Low Temperature and Zero Pressure: A Ring Polymer Molecular Dynamics Approach**

del Mazo-Sevillano, P., Aguado, A., Jiménez, E., Suleimanov, Y. V., & Roncero, O. (2019). Quantum roaming in the complex-forming mechanism of the reactions of OH with formaldehyde and methanol at low temperature and zero pressure: A ring polymer molecular dynamics approach. *The journal of physical chemistry letters*, 10(8), 1900-1907. doi:10.1021/acs.jpcllett.9b00555

The quantum dynamics of the title reactions are studied using the ring polymer molecular dynamics (RPMD) method from 20 to 1200 K using recently proposed full dimensional potential energy surfaces which include long-range dipole-dipole interactions.

A V-shaped dependence of the reaction rate constants is found with a minimum at 200–300 K, in rather good agreement with the current experimental data. For temperatures above 300 K the reaction proceeds following a direct H-abstraction mechanism. However, below 100 K the reaction proceeds via organic-molecule...OH collision complexes, with very long lifetimes, longer than  $10^{-7}$  s, associated with quantum roaming arising from the inclusion of quantum effects by the use of RPMD.

The long lifetimes of these complexes are comparable to the time scale of the tunnelling to form reaction products. These complexes are formed at zero pressure because of quantum effects and not only at high pressure as suggested by transition state theory (TST) calculations for OH + methanol and other OH reactions.

The zero-pressure rate constants reproduce quite well measured ones below 200 K, and this agreement opens the question of how important the pressure effects on the reaction rate constants are, as implied in TST-like formalisms. The zero-pressure mechanism is applicable only to very low gas density environments, such as the interstellar medium, which are not repeatable by experiments.

**SR-DMM: A SDN-Based DMM Solution For Future Mobile Networks**

J. Mendoza-Rubio, J. Carmona-Murillo, J. González-Sánchez, J. Calle-Cancho and D. Cortés-Polo, "SR-DMM: A SDN-Based DMM Solution For Future Mobile Networks," in *IEEE Latin America Transactions*, vol. 17, no. 05, pp. 734-741, May 2019, doi: 10.1109/TLA.2019.8891941.

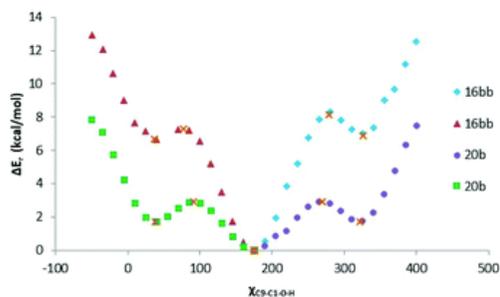
The exponential growth in the number of mobile subscribers, as well as the data traffic generated by them is showing a major challenge in wireless Internet. Existing mobile networks are starting to be insufficient in meeting this demand, in part due to their inflexible and expensive equipment as well as complex and non-agile control plane. In this context, in which the heterogeneity on the access is even more extended, the mobility support becomes more crucial. Thus, the mobility management mechanisms need to evolve to fit with the cutting-edge technologies that are going to rule next generation mobile networks. A key enabler to 5G will be SDN (Software-Defined Networking), which brings a natural solution to decouple the network control plane from the data plane, allowing higher flexibility and programmability to the network. Based on SDN and following the recommendations of the DMM (Distributed Mobility Management) approach, this article presents the SR-DMM solution (SDN Redirection DMM), a mobility management mechanism that takes full advantages of the softwarization capabilities of the network.

This proposal avoids the use of IP-IP tunnels and it adds the dynamic flow management capability provided by SDN. In order to analyse the performance of SR-DMM, an analytical model is developed to compare it with NB-DMM (Network-based DMM), one of the main DMM solutions. Additionally, SR-DMM performance is also evaluated with an experimental testbed. The results allow to measure the handover latency in real scenarios and numerical investigations, also shows that SR-DMM achieves better efficiency in terms of signalling and routing cost than NB-DMM solution.

### Tautomerism and stereodynamics in Schiff bases from gossypol and hemigossypol with N-aminoheterocycles

Matamoros, E., Cintas, P., & Palacios, J. C. (2019). Tautomerism and stereodynamics in Schiff bases from gossypol and hemigossypol with N-aminoheterocycles. *Organic & biomolecular chemistry*, 17(25), 6229-6250. doi: 10.1039/C9OB01011D

Tautomerism plays a pivotal role in structural stabilization and reactivity. Herein we investigate in detail, aided by DFT simulations, the case of gossypol, a naturally occurring atropisomeric dialdehyde showing promising properties as a male contraceptive and an antineoplastic agent. Its toxicity linked to reactive aldehyde groups can be reduced through amino conjugation. The occurrence of either imino or enamino structures is puzzling indeed and a clear-cut rationale is missing yet. N-enamine–N-enamine structures are prevalent or exclusive tautomers for Schiff bases from gossypol, while their corresponding hydrazones only possess N-imine–N-imine structures both in solution and the solid state. The modification of interactions between the lone pairs on the nitrogen atoms by altering the steric hindrance of the non-iminic nitrogen can favor enamine tautomers. This assumption has now been confirmed and, in the solid state, hydrazones from N-aminopiperidine and their cis-2,6-dimethyl derivative present bis-imine and bis-enamine structures, respectively. In solution, these compounds exist in equilibrium between both structures. The tautomerization mechanism, analysis of axial chirality and aromaticity in such H-bonded pseudorings are discussed as well.



### Thermoradiative Cells Based on a p-type Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> Semiconductor: Application of a Detailed Balance Model

García, G., Fernández, J.J., Palacios, P. et al. Thermoradiative Cells Based on a p-type Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> Semiconductor: Application of a Detailed Balance Model. *Journal of Elec Materi* 48, 6777–6785 (2019). doi: 10.1007/s11664-019-07485-z

Thermoradiative cells (TRCs) are power generators that efficiently convert low temperature waste heat into electricity. Although there is a growing interest in this potential technology, most of the works dealing with the study of efficient TRCs are focused on the theoretical analysis of their performance. In this work, a Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> semiconductor is proposed to be applied in TRCs. Firstly, the electronic structure of Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> has been obtained by using density functional theory (DFT) calculations. Then, DFT calculated bandgap values are employed to assess the efficiency of TRCs based on Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub>. For this purpose, the power conversion efficiency has been calculated by using the Shockley–Queisser framework through a detailed balance model adapted to TRCs that includes the doping level through its effect on the energy barrier appearing at the pn-junction.

### Zero-and High-Pressure Mechanisms in the Complex Forming Reactions of OH with Methanol and Formaldehyde at Low Temperatures

Naumkin, F., del Mazo-Sevillano, P., Aguado, A., Suleimanov, Y. V., & Roncero, O. (2019). Zero-and high-pressure mechanisms in the complex forming reactions of OH with methanol and formaldehyde at low temperatures. *ACS Earth and Space Chemistry*, 3(7), 1158-1169. doi:10.1021/acsearthspacechem.9b00051

A recent ring polymer molecular dynamics study of the reactions of OH with methanol and formaldehyde at zero pressure and below 100 K has shown the formation of collision

complexes with long lifetimes, longer than 100 ns for the lower temperatures studied, 20–100 K (del Mazo-Sevillano et al., 2019). These long lifetimes support the existence of multicollision events with the He buffer-gas atoms under experimental conditions, as suggested by several transition state theory studies of these reactions. In this work, we study these secondary collisions, as a dynamical approach to study pressure effects on these reactions. For this purpose, the potential energy surfaces of He with H<sub>2</sub>CO, OH, H<sub>2</sub>O, and HCO are calculated at highly accurate ab initio level. The stability of some

of the complexes is studied using path integral molecular dynamics techniques, determining that OH–H<sub>2</sub>CO complexes can be formed up to 100 K or higher temperatures, whereas the weaker He–H<sub>2</sub>CO complexes dissociate at approximately 50 K. The predicted IR intensity spectra show new features which could help the identification of the OH–H<sub>2</sub>CO complex. Finally, the He–H<sub>2</sub>CO + OH and OH–H<sub>2</sub>CO + He collisions are studied using quasi-classical trajectories, finding that the cross section to produce HCO + H<sub>2</sub>O products increases with decreasing collision energy, and that it is ten times higher in the He–H<sub>2</sub>CO + OH case.

### Publicaciones en libros

#### *High Performance Computing, Big Data, and Cloud Computing: The Perfect De Facto Trio or Converging Technological Mantras?*

González-Sánchez, J., Calle-Cancho, J., Cortés-Polo, D., Jiménez Gil, L., & López-Rourich, A. (2019). A. Guerra Guerra (Ed.), *Organizational Transformation and Managing Innovation in the Fourth Industrial Revolution* (pp. 165-182). Hershey, PA: IGI Global. doi:10.4018/978-1-5225-7074-5.ch009



With the growth and advancement of business and industry, there is a growing need for the advancement of the strategies that manage these modernizations. Adaptation to advancement is essential

for the success of these organizations and using the proper methods to accomplish this essential adaptation is paramount. *Organizational Transformation and Managing Innovation in the Fourth Industrial Revolution* provides innovative insights into the management of advancements and the implementation of strategies to accommodate these changes. The content within this publication examines social engagement, cyber-journalism, and educational innovation. It is designed for managers,

consultants, academicians, researchers, and professionals, and covers topics centered on the growth of businesses and how they change alongside the economy and infrastructure.

#### *Memoria Anual 2018 de COMPUTAEX.*

Juan Francisco Bermejo Martín, Jesús Calle Cancho, Javier Corral García, David Cortés Polo, José Luis González Sánchez, Luis Ignacio Jiménez Gil, Felipe Lemus Prieto, María Jesús Martínez Polo y Blanca Pérez Mariño. ISBN-13: 978-84-09-12810-5. Depósito Legal: BA-414-19.



COMPUTAEX presentó en junio su memoria de actividades del ejercicio 2018. Este anuario muestra de forma detallada toda la información relativa a: los proyectos de investigación e innovación tecnológica desarrollados y soportados en CénitS; los resultados de investigación alcanzados; las financiaciones de proyectos competitivos obtenidas; los convenios de colaboración firmados; las acciones formativas y de difusión realizadas; así como los recursos de CénitS que la Fundación COMPUTAEX pone a disposición de investigadores, tecnólogos e innovadores.

## Memoria conmemorativa del X Aniversario

### CénitS-COMPUTAEX.



COMPUTAEX publicó una memoria especial titulada “10 Años de Supercomputación en Extremadura” con motivo de su décimo aniversario. Ésta recoge de forma resumida las principales actividades llevadas a cabo por CénitS y COMPUTAEX en la última década.

De este modo, detalla la infraestructura y los recursos tecnológicos puestos a disposición de investigadores, tecnólogos e innovadores; algunos de los proyectos de investigación e innovación tecnológica más representativos desarrollados y soportados en CénitS; los resultados de investigación alcanzados; los convenios de colaboración firmados; las acciones formativas y de difusión realizadas; así como los reconocimientos de ámbito nacional e internacional recibidos y los casos de éxito publicados.

## Publicaciones en congresos

### *Análisis de costes del despliegue de una arquitectura de red basada en SDN/NFV*

**Jesús Calle Cancho, David Cortés Polo, Javier Carmona Murillo, José Luis González Sánchez and Francisco Javier Rodríguez Pérez.** Análisis de costes del despliegue de una arquitectura de red basada en SDN/NFV. XIV Jornadas de Ingeniería Telemática (JITEL 2019), Zaragoza, octubre 2019.

El incremento exponencial del tráfico de datos móviles unido al despliegue de nuevos servicios sobre las redes actuales, han propiciado que los operadores de red busquen nuevas tecnologías para adaptarse. Entre éstas, destacan especialmente las redes definidas por software (SDN) y la virtualización de funciones de red (NFV), como dos de las tecnologías que se ajustan a la naturaleza dinámica de las redes de próxima generación. Dado que la migración a estas nuevas tecnologías conlleva un coste elevado para los operadores, éstos buscan soluciones que ofrezcan un aumento de las capacidades de la red, reduciendo lo máximo posible los costes de infraestructura y de operación. Este trabajo desarrolla un análisis y evaluación de costes sobre la Red Científico Tecnológica de Extremadura (RCT), de forma que se puedan cubrir las necesidades de las redes de próxima generación, reduciendo costes y proporcionando agilidad en el despliegue de sus servicios.

### *Efficiency Analysis in Code Development for High-Performance Computing Centers*

**Javier Corral-García, José-Luis González-Sánchez, and Miguel-Ángel Pérez-Toledano.** 2019. Efficiency Analysis in Code Development for High Performance Computing Centers. In Proceedings of the Seventh International Conference on Technological Ecosystems for Enhancing Multiculturality (TEEM 2019) (León, Spain, October 16-18, 2019), ACM, New York, NY, USA, pp 539-547. doi: 10.1145/3362789.3362865.

La computación de alto rendimiento (HPC, High-Performance Computing) se ha convertido en una herramienta indispensable para resolver proyectos de gran complejidad que de otra forma no podrían ser abordados. Sin embargo, desarrollar programas paralelos que aprovechen realmente sus beneficios, mediante un uso adecuado y eficiente de los recursos disponibles, resulta complicado para usuarios noveles o investigadores de ramas de la ciencia muy alejadas de la programación informática. Con el objetivo de ayudar a estos usuarios y lograr mejores rendimientos en centros HPC, en CénitS se ha desarrollado un transcompilador para la paralelización automática de códigos secuenciales. Los esfuerzos actuales se centran en ampliar dicho transcompilador con un módulo adicional para la optimización

de códigos secuenciales y paralelos, con el objetivo de acelerar sus tiempos de ejecución. Para ello, se evaluaron diversas técnicas para la escritura de código eficiente, con el fin de ser integradas en el transcompilador en el futuro. De este modo, este trabajo discute la importancia de estas técnicas para disminuir los tiempos de ejecución de los programas HPC. Además, muestra un conjunto de pruebas desarrolladas para analizar y medir las mejoras obtenidas al aplicar cada una de las técnicas, consiguiendo todas ellas un significativo impacto en los tiempos de ejecución.

### ***Medición de overheads para el uso eficiente de recursos en centros de computación de alto rendimiento***

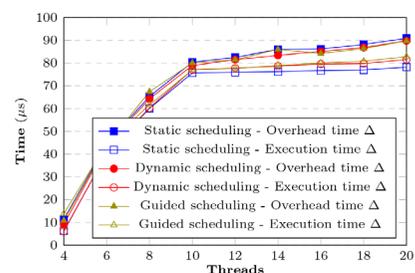
**Javier Corral García, José Luis González Sánchez y Miguel Ángel Pérez Toledano. Medición de overheads para el uso eficiente de recursos en centros de computación de alto rendimiento. Avances en Arquitectura y Tecnología de Computadores, Actas de las Jornadas SARTECO 2019. Cáceres, España. 18-20 septiembre, 2019. ISBN: 978-84-09-12127-4. pp 326-333.**

El desarrollo de códigos para su ejecución en infraestructuras de computación de alto rendimiento (HPC) puede resultar una ardua tarea para científicos que no son expertos en programación paralela, pero que necesitan estas infraestructuras para el desarrollo de sus investigaciones. A menudo intentan ejecutar sus códigos utilizando tantos núcleos como sea posible, sin considerar el overhead asociado, creyendo, en muchos casos erróneamente, que de ese modo obtendrán antes sus resultados, con el consecuente e innecesario gasto que esto puede suponer en términos de tiempo, energía y recursos. Éste es un problema común en los centros de HPC, donde las decisiones de planificación eficiente y el ahorro energético se convierten en desafíos clave que afrontar diariamente. Para ayudar a resolverlos, se presenta un método de medición de overhead, centrado en la eficiencia, para analizar los efectos producidos, tanto por el incremento del número de cores de ejecución, como por la planificación paralela escogida en cada caso.

### ***Gestión de la seguridad de las comunicaciones para entornos de HPC en centros de supercomputación***

**David Cortés-Polo, Felipe Lemus-Prieto, Jesús Calle-Cancho, Luis Ignacio Jiménez y José-Luis González-Sánchez. Gestión de la seguridad de las comunicaciones para entornos de HPC en centros de supercomputación. Avances en Arquitectura y Tecnología de Computadores, Actas de las Jornadas SARTECO 2019. Cáceres, España. 18-20 septiembre, 2019. ISBN: 978-84-09-12127-4. pp 437-443**

La búsqueda de la eficiencia por parte de los centros de supercomputación para adaptarse a las necesidades de los usuarios, en cuanto a los recursos de cómputo, está llevando a integrar múltiples tecnologías que deben convivir de forma heterogénea, de manera que la gestión de los recursos, así como, la seguridad de la infraestructura de cómputo se está volviendo más compleja que en los escenarios tradicionales. En este marco, tecnologías como las redes definidas por software o la virtualización de funciones de red están siendo adoptadas como mecanismos que facilitan la gestión de las comunicaciones, y como soluciones que introducen un buen número de herramientas a la hora de gestionar la seguridad de los clústers de computación. En este trabajo se describen las principales características de la evolución de estas redes de comunicaciones y su aplicación a la seguridad de la información y las comunicaciones de un centro de cómputo, de forma que se expone un ejemplo de uso donde se aplican estas tecnologías de nueva generación para detectar y mitigar un problema de seguridad mediante funciones de red virtualizadas desplegadas en contenedores.



## Trabajos Finales de Grado

### Plataforma de integración y gestión de datos geolocalizados destinados a mejorar la eficiencia agraria de los cultivos

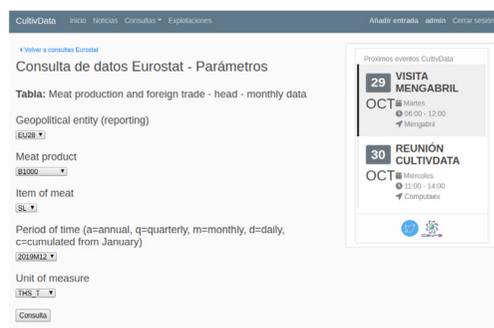
**Álvaro Huertas Martín. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx. Codirigido por Félix Rodríguez Rodríguez y José Luis González Sánchez.**

Es un hecho que las nuevas tecnologías están llegando con retraso al sector agropecuario en Extremadura, creando una gran desigualdad respecto a otros sectores como la industria alimentaria. Este problema se ve acrecentado ante una demanda de productos del sector agrícola y ganadero que va en aumento y que resulta en un mercado basado en la importación de productos del exterior y en la producción de productos de baja calidad. Esto supone un reto para el sector tecnológico de la región. Es por ello que se deben proponer soluciones para la mejora de la producción agrícola y ganadera y paliar esta desigualdad entre la oferta y la demanda.

Entre todos los objetivos que pueden ser acometidos por la tecnología para avanzar en este sector, este Trabajo de Fin de Grado se centra en los datos abiertos que, junto a tecnologías tan actuales como el Big Data o el aprendizaje automático ponen al alcance de cualquiera el desarrollo de herramientas beneficiosas para el entorno.

Su finalidad es la creación de un sistema que aporte valor al desarrollo de tecnologías vinculadas a la agricultura de precisión nutriéndose de medios como las fuentes de datos abiertos. Los objetivos específicos que se persiguen son los siguientes:

- Análisis, diseño, implementación y evaluación de rendimiento de una plataforma de fuentes de datos públicas y abiertas en el sector agrario y agroalimentario.
- Estudio de la viabilidad de uso de repositorio centralizado, distribuido o híbrido en la plataforma Open Data.
- Evaluación técnica para la elección del Sistema Gestor de Bases de Datos (SGBD).



El proceso de desarrollo completo de la plataforma se culmina satisfactoriamente. Se realiza la implementación completa de un sistema para consultas en el portal Eurostat y el portal INE, mientras que se han dejado sentadas las bases para que en futuras fases del proyecto se añadan el resto de fuentes de datos abiertos con los que se desee trabajar. Para favorecer la ampliación de la plataforma se sigue un diseño modular. En lo referente al estudio de viabilidad de uso de un repositorio centralizado, distribuido o híbrido, se decide usar un repositorio centralizado. El resultado del modelo seleccionado es satisfactorio para las fuentes de datos elegidas, además, debido al diseño que ha adoptado el repositorio, será fácilmente ampliable en futuras fases del proyecto. Por último, en lo referente a la elección del Sistema de Bases de Datos, se utiliza un sistema no relacional, siguiendo un modelo NOSQL, donde los datos se almacenan en forma de documentos. Éstos presentan una estructura flexible, sin un esquema prefijado, lo cual favorece la inclusión de datos de diversas fuentes de forma sencilla. Actualmente la base de datos del repositorio cuenta con unos 300.000 registros y el rendimiento es óptimo, pero si el proyecto crece, el número de registros irá aumentando y siempre se podrá cambiar el modelo del repositorio al tipo híbrido.

## Sistema bioinformático de apoyo a la investigación en la unificación del patrimonio genealógico y genético

**Álvaro Rodríguez San Pedro. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx. Codirigido por Félix Rodríguez Rodríguez y José Luis González Sánchez.**

El desarrollo en el campo de la genética ha abierto nuevas puertas en el estudio de enfermedades y en el diagnóstico clínico. La medicina de precisión pretende aprovechar esas nuevas capacidades. Aunando el estudio de la variabilidad genética de los individuos, su entorno y sus hábitos de vida, pretende identificar estrategias de tratamiento y prevención de enfermedades para grupos concretos. En Extremadura, la aplicación de tales técnicas está supeditada a la disponibilidad de la información. Para ello, es necesaria una plataforma que permita la unificación del patrimonio genealógico y genético, conjuntamente con los datos clínicos.

Este TFG pretende responder a esta necesidad, desarrollando un sistema bioinformático que permita la mencionada integración y, además, que dé soporte a la investigación médica. El objetivo es estudiar los beneficios de la unificación de fuentes de información heterogéneas, como registros civiles, eclesiásticos, o historiales clínicos, al estudio de enfermedades hereditarias. El estudio se ha enfocado a un conjunto de personas de una población relevante desde el punto de vista genético, para secuenciar su genoma (concretamente los genes asociados a la enfermedad elegida) y unificarlo con su información genealógica. La zona a estudio es la del Valle del Jerte debido a las características que presenta en cuanto a su población y entorno.

Para gestionar y analizar la información, así como para extraer conocimiento de la misma, se plantea el uso de recursos de supercomputación en combinación con técnicas de Big Data y de

inteligencia artificial.

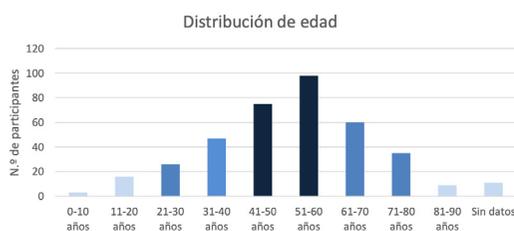
El objetivo se materializa en la implantación de una infraestructura de apoyo a la investigación genética con las siguientes funcionalidades:

- Unificación de la información genealógica y personal e información genómica.
- Gestión de grandes volúmenes de datos.
- Facilitar el acceso y el análisis de la información.
- Extracción de información a partir de la integración de todas las fuentes de datos.

Los resultados obtenidos muestran que se cuenta con 637 documentos almacenados en la base de datos, de los cuales 380 son de participantes y 257 de pedigríes. Esto representa aproximadamente un 4% del total de la población a estudio.

La diferencia de documentos pone de manifiesto que a pesar de ser pocas personas, un número elevado de las mismas están relacionadas. Analizando la relación de participantes de cada población, es posible sospechar que, retrotrayéndose lo suficiente, se pueden encontrar ancestros comunes para casi todos los participantes. Además, se cuenta con otros datos que proporcionan información útil de la población estudiada y que podrían incorporarse al estudio, proporcionando otro tipo de conclusiones. Éstos son la edad, la actividad profesional, etc. Hay que considerar que para cada gen hay información de hasta cinco bases de datos (aunque no siempre hay información de todas) y que los riesgos están organizados en grupos de cáncer, que a su vez se dividen en cánceres específicos.

Con todo, se ha conseguido una base de datos que aúna múltiples fuentes, aportando valor extra al proyecto. La última base de datos es la de variantes. En ella, hay información de 2 runs, un total de 559.374 variantes y 1.283.123 análisis de cobertura para transcritos, para un total de 1.842.499 documentos.





Premio Cénits  
a la humanización de la tecnología  
Marco Antonio Sánchez Becerra  
COMPUTAEX 2009-2019

Premio Cénits  
a la humanización de la tecnología  
Marco Antonio Sánchez Becerra  
COMPUTAEX 2009-2019

# CONVENIOS DE COLABORACIÓN, ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN

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

Esta sección muestra los convenios de colaboración en vigor y las actividades realizadas por la Fundación a lo largo de 2019 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación, destacando los eventos relacionados con la celebración del X Aniversario de CénitS-COMPUTAEX.

## Convenios de colaboración

**AEXIT**, la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación, tiene como objetivo potenciar y fomentar el desarrollo de las TIC en la sociedad extremeña y servir de punto de referencia a los ingenieros que desarrollan su trabajo en la región. COMPUTAEX firmó un convenio para impulsar, entre otras actividades, el evento “*XVI Encuentro de las Telecomunicaciones de Extremadura*”.



**Appentra Solutions** está centrada en el desarrollo de herramientas software que permitan un uso extensivo de las técnicas de computación de alto rendimiento. Este convenio potencia el desarrollo de proyectos de I+D+i que permitan explotar la potencia de los sistemas HPC de forma más eficiente y productiva, aumentando la rentabilidad de las inversiones realizadas en los sistemas disponibles en CénitS.



**Canalytics Big Data Experts S.L.**, especializada en I+D+i, big data y machine learning, firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto “*Identificación de patrones de comportamiento en el funcionamiento ordinario de aerogeneradores de un parque eólico mediante técnicas de Advanced Analytics basadas en Big Data*”, en la convocatoria destinada al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en Extremadura.



El **CCMIJU** (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón) es una institución dedicada a la investigación, formación e innovación sanitaria, con experiencia en investigación traslacional en diversos campos de especialización. COMPUTAEX y la Fundación CCMI firmaron un acuerdo para la cesión de espacios en su edificio para acoger los recursos técnicos y humanos de CénitS.



El **CESGA** (Centro de Supercomputación de Galicia) es el centro de cálculo, comunicaciones de altas prestaciones y servicios avanzados de la Comunidad Científica Gallega, Sistema Académico Universitario y del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). CESGA y CénitS firmaron un convenio de colaboración para realizar acciones específicas conjuntas en diversos ámbitos.



**CLOUDEX S.L.**, empresa de servicios de cloud computing, firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto “*Análisis de datos genéticos, ambientales y de comportamiento para la predictibilidad de enfermedades oncológicas mediante ultrasecuenciación genética y aplicando paradigmas HPC, Cloud Computing, Big Data y Open Data*”, en la convocatoria destinada al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en Extremadura.



**Extremadura Avante**, como modelo integrado para la implementación, crecimiento y desarrollo de la innovación en las empresas extremeñas, ha aportado a COMPUTAEX importantes colaboraciones. Avante tiene como objetivo prestar servicios a las empresas extremeñas con el fin de que sean más competitivas, impulsando el desarrollo industrial y empresarial de Extremadura.



La asociación Everyone’s Digital Day organiza anualmente el evento **Extremadura Digital Day** (EDD) con el objetivo principal de unir a la comunidad tecnológica extremeña, contando con todo tipo de empresas y profesionales del sector. COMPUTAEX firmó un convenio de colaboración para promover y patrocinar este evento, así como difundir otras actividades de interés tecnológico.





**FUNDESALUD** (Fundación para la Formación en Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura) formalizó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en proyectos de investigación, con acciones específicas, como planes de formación, de difusión y de divulgación de la aplicación de la supercomputación como apoyo a las ciencias de la salud.



**INTROMAC**, el Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción, tiene como objetivo mejorar la competitividad de las empresas, en sectores de construcción y piedras naturales de Extremadura, a través de I+D y actividades de innovación. INTROMAC y CénitS mantienen una fluida relación y cooperación en numerosos ámbitos comunes de actividad.



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



COMPUTAEX forma parte de **RedIRIS** (Red Española para la Interconexión de los Recursos Informáticos de universidades y centros de investigación), la red académica y de investigación española, integrada dentro de Red.es. Esta afiliación permite a COMPUTAEX acceder a servicios que provee RedIRIS para la comunidad científica.



La **Red Nacional de e-Ciencia** persigue coordinar e impulsar el desarrollo de la actividad científica en España mediante el uso colaborativo de recursos geográficamente distribuidos e interconectados mediante Internet. Participan usuarios y expertos en aplicaciones de diversas disciplinas científicas, investigadores y centros proveedores de recursos.



CénitS forma parte de la **RES** (Red Española de Supercomputación), una infraestructura distribuida que da servicio a la comunidad científica, con la voluntad de cubrir las necesidades de supercomputación de los grupos de investigación. Ofrece un servicio optimizado y unificado a usuarios de la supercomputación en España, mediante la aplicación de criterios homogéneos de acceso a su uso.



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



La Universidad Internacional de la Rioja (**UNIR**) tiene entre otros objetivos el impulsar la investigación, el desarrollo y la innovación. COMPUTAEX y UNIR firmaron un convenio de colaboración con el objetivo de promover y fomentar la empleabilidad entre los estudiantes y egresados de la universidad, pasando además CénitS a ser centro de prácticas de la formación académica de la Universidad.

## Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC



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

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

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

Además, desde el año 2009, se han concedido 27 becas de formación a estudiantes de distintas titulaciones de la Universidad de Extremadura, directamente relacionadas con las Tecnologías de la Información y la Comunicación. Estas becas tienen como objetivo la colaboración en proyectos de investigación desarrollados en CénitS.

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



## Derecho tecnológico e Informática forense



La Fundación COMPUTAEX participa en la impartición del curso universitario de Experto Profesional en Derecho Tecnológico e Informática Forense (DTIF), de 30 créditos (300 horas). Se trata de un título universitario de experto profesional orientado a profesionales del mundo de derecho tecnológico, de la informática forense, así como de las Fuerzas y Cuerpos de Seguridad del Estado, para que conozcan las técnicas y metodologías que usan los profesionales de estos sectores, y profundicen en las de su propio campo de conocimiento.

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

## Jornada de presentación del proyecto TaxonomTIC 2018

El lunes 1 de julio de 2019, COMPUTAEX ofreció en el salón de actos de la Escuela Politécnica de Cáceres una jornada en la que expuso los resultados del proyecto TaxonomTIC 2018, desarrollado en CénitS y centrado en el análisis de la evolución del sector de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (TIC) en Extremadura, que además abarca la formación TIC profesional y universitaria. También se presentó la plataforma OLISTIC, realizada por los ingenieros de CénitS y que, bajo la filosofía Open Data, permite localizar las empresas extremeñas relacionadas con el sector TIC e identificar los servicios que ofrecen. El acceso fue libre, sin necesidad de inscripción previa.

**CÉNIT S**

**2009 - 2019**  
X ANIVERSARIO DE  
CénitS - COMPUTAEX  
10 Años de Supercomputación en Extremadura

**JORNADA DE PRESENTACIÓN DEL PROYECTO  
TaxonomTIC 2018**

Observatorio regional del Sector TIC en Extremadura  
<https://olistic.cenits.es>

Lunes 1 de julio de 2019, 10:00 horas  
Salón de actos de la Escuela Politécnica de Cáceres

**COMPUTAEX**

Jornada dirigida a empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores. Aula de la Universidad y/o - 10.003 - Cáceres. Acción libre, información en [www.cenits.es](http://www.cenits.es)

Organización: CÉNIT S COMPUTAEX Colaboración: Junta de Extremadura, Unión Europea, Gobierno de España, Junta de Extremadura Información: QR code

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

**JUNTA DE EXTREMADURA**



**Mapa TIC**

**Categorías TIC**  
Internet  
Fabricación Hardware  
Consultoría y Asesoramiento  
Sistemas de Información

**Actividades TIC**  
Sistemas de Telecomunicaciones  
Sistemas Informáticos  
Sistemas de Información  
Seguridad de la Información  
Sistemas de Telecomunicación

Nombre o razón social:

Provincia:

Localidad:

Constitución:

**Taxonom TIC**  
Actividades TIC  
Porcentaje de Actividades TIC  
Directorio de Empresas  
Evolución de Empresas  
Mapa de Empresas  
Perfiles TIC  
Competencias TIC  
Encuesta Profesional TIC  
Memorias Anuales  
Aviso Legal  
Política de Privacidad  
Mapa Web  
Contacto  
Administrador

The map shows a geographical area with various locations marked by blue pins, representing TIC companies. Labels on the map include: Polígono Ganadero, Industrial Mojizilla, El Gredos, Nueva Ciudad, Campus Universitario, Campus Universitario, Residencia de la Universidad, La Sierrilla, Los Colchales, Industrial Los Yapanaluz, El Junquillo, Estación, La Bondad, Espirotu Santo, Las Triguillas, Vocahermonia, Industrial Aldea Nueva, La Cañada, Bécitón Ferral, Ceres Golf, and Ceres. Major roads like N-430, A-66, and A-58 are also visible.



## Jornada de puertas abiertas

En diciembre, la Fundación COMPUTAEX ofreció una nueva jornada de puertas abiertas, con el título **“Una década de supercomputación en Extremadura”**, estuvo dirigida a empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores, interesados en la actualidad y el trabajo diario del centro de supercomputación, las tecnologías de vanguardia y los proyectos de I+D+i de CénitS.

D. Diego Riesco García, Technical Sales Manager for Power Systems and Channel de IBM Systems Hardware, ofreció la ponencia **“IBM Data Centric Computing: Plataformas diseñadas para explotar eficientemente el Big Data con técnicas de Supercomputación e Inteligencia Artificial”**. Tras una visita al Centro de Procesamiento de Datos (CPD), D. José Luis González Sánchez, Director General de COMPUTAEX presentó la conferencia **“CénitS-COMPUTAEX. Una década de supercomputación en Extremadura”**. A continuación, los investigadores e ingenieros de CénitS, Juan Francisco Bermejo Martín, Analista de aplicaciones y proyectos, y D. Felipe Lemus Prieto, Administrador de redes y comunicaciones, presentaron la ponencia **“CultivData: nuevas tecnologías al servicio del sector agropecuario extremeño”**, tras la cual, D<sup>a</sup> Ana María Núñez Cansado, D<sup>a</sup> María Peguero Ramos y D. Bernabé Diéguez Roda, técnicos de apoyo a la I+D+i en CénitS, presentaron el proyecto HeritaGen con la conferencia: **“Ultrasecuenciación y supercomputación aplicadas al estudio de enfermedades hereditarias en Extremadura”**.

**2009 - 2019**  
X ANIVERSARIO DE CénitS - COMPUTAEX  
10 Años de Supercomputación en Extremadura

**JORNADA DE PUERTAS ABIERTAS**  
Una década de supercomputación en Extremadura

Martes 17 de diciembre de 2019

09:30 h. Acreditación y recepción de asistentes.

10:00 h. Acto de apertura:  
• Diego Riesco García, Technical Sales Manager for Power Systems and Channel, IBM Systems Hardware.  
• D. José Luis González Sánchez, Director General de la Fundación COMPUTAEX.

10:30 h. **IBM Data Centric Computing: Plataformas diseñadas para explotar eficientemente el Big Data con técnicas de Supercomputación e Inteligencia Artificial.**  
• Diego Riesco García, Technical Sales Manager for Power Systems and Channel, IBM Systems Hardware.

11:30 h. Café y visita a CénitS-CPD.

12:00 h. **CénitS-COMPUTAEX. Una década de supercomputación en Extremadura.**  
• D. José Luis González Sánchez, Director General de la Fundación COMPUTAEX.

13:00 h. **CultivData: nuevas tecnologías al servicio del sector agropecuario extremeño.**  
• D. Felipe Lemus Prieto, Administrador de redes y comunicaciones de CénitS.  
• D. Juan Francisco Bermejo Martín, Analista de aplicaciones y proyectos de CénitS.

13:30 h. **HeritaGen: ultrasecuenciación y supercomputación aplicadas al estudio de enfermedades hereditarias en Extremadura.**  
• D<sup>a</sup> Ana María Núñez Cansado, Técnico de apoyo a la I+D+i en CénitS.  
• D<sup>a</sup> María Peguero Ramos, Técnico de apoyo a la I+D+i en CénitS.  
• D. Bernabé Diéguez Roda, Técnico de apoyo a la I+D+i en CénitS.

14:00 h. Acto de clausura.

COMPUTAEX

Jornada dirigida a empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores. Carretera Nacional 523, km 41,8 - 10.071 - Cáceres. Acceso libre. Información en [www.computaex.es](http://www.computaex.es)

Organización: CénitS, COMPUTAEX, Fondo Europeo de Desarrollo Regional, JUNTA DE EXTREMADURA, CIBITE, IBM. Colaboración: Información: QR

Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital  
Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad

**JUNTA DE EXTREMADURA**



## Concurso de diseño del logotipo del X Aniversario de COMPUTAEX



## X ANIVERSARIO DE CénitS - COMPUTAEX 10 Años de Supercomputación en Extremadura

Con motivo de su décimo aniversario, que fue celebrado mediante la realización de diversas actividades durante todo el año 2019, la Fundación COMPUTAEX convocó en el mes de enero un concurso para elegir el logotipo destinado a ser la imagen representativa de dicho aniversario.

Las bases del concurso, de carácter abierto y público, solicitaban trabajos originales e inéditos, siendo libres los temas o motivos de los trabajos presentados.

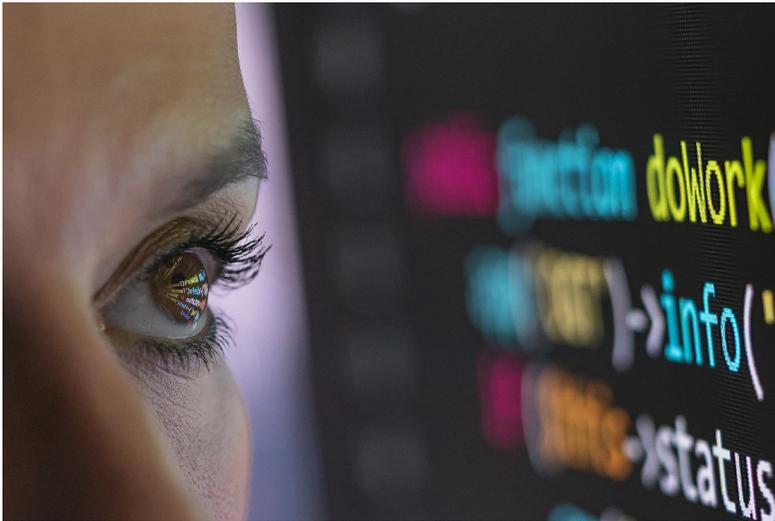
El logotipo propuesto por D. Enrique Rodríguez, Director Creativo del estudio de diseño gráfico Extremeño, resultó ganador del certamen, recibiendo un premio de 600 euros. En total se recibieron un total de 52 obras, cuya calidad fue especialmente destacada por el Jurado, que estuvo compuesto por personal de CénitS.

## Concurso “El reto de fotografiar el software”

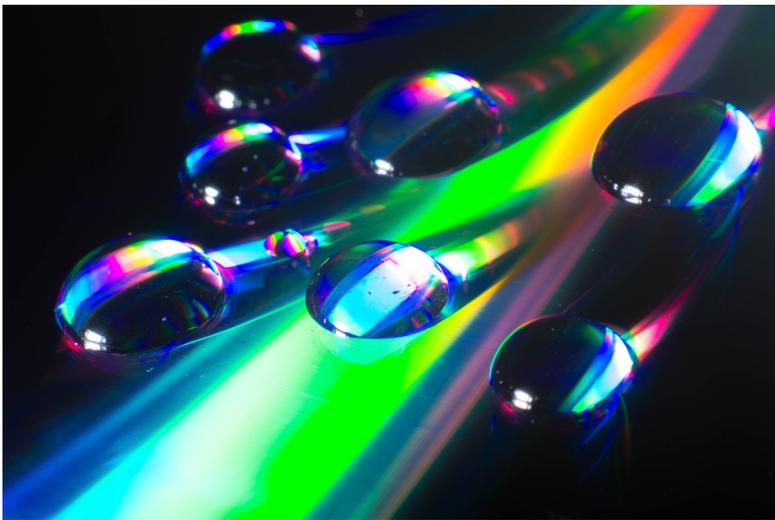
En abril, y también con motivo de su décimo aniversario, la Fundación COMPUTAEX convocó el concurso “El reto de fotografiar el software”. Los Centros de Supercomputación se caracterizan por disponer de equipos informáticos de gran poder computacional, siendo la infraestructura hardware la que suele atraer toda la atención. Sin embargo, este equipamiento sin el software no resulta de mucha utilidad. Por ello, este concurso pretendió poner el foco en lo menos evidente, siendo conscientes del carácter inmaterial e intangible del software y de la dificultad que ello implicaba. Se trataba, por tanto, de un reto no exento de imaginación y completamente abierto a la creatividad de los participantes, que tuvieron plena libertad para realizar propuestas artísticas y originales.

Las bases del concurso, de carácter abierto y público, solicitaban trabajos originales e inéditos, y no suponer, en todo o en parte, copia o plagio de obras publicadas propias o de otros artistas. Se permitía el procesamiento de las fotografías, admitiendo cualquier técnica de manipulación digital sin límite alguno, pudiendo presentarse imágenes compuestas que agreguen o eliminen elementos que no estaban en la escena original.

La obra “Artesana”, propuesta por Joaquín González, resultó ganadora del certamen según el fallo del jurado, compuesto por personal de CénitS. El segundo puesto correspondió a la obra “System running” de Félix Cantero, mientras que el tercer puesto fue para “Ramificación”, de Luis Pérez. El ganador recibió 600 € en metálico y un premio CénitS (escultura conmemorativa del X Aniversario de la Fundación COMPUTAEX), que también fue entregado a los otros dos finalistas. En total se recibieron un total de 51 obras, cuya calidad fue especialmente destacada por los miembros del Jurado.



**Primer Premio**  
*Artesana*  
Joaquín González



**Segundo Premio**  
*System running*  
Félix Cantero



**Tercer Premio**  
*Ramificación*  
Luis Pérez

## Jornada de celebración del X Aniversario de la Fundación COMPUTAEX

El 22 de marzo de 2019 tuvo lugar la Jornada de Celebración del X Aniversario de la Fundación COMPUTAEX que, bajo el título “Una Década de Supercomputación en Extremadura”, se realizó en la sede social de la Fundación. El evento fue inaugurado a las 10:00 h. de la mañana por D. Guillermo Fernández Vara, Presidente de la Junta de Extremadura; Dña. Elena Nevado del Campo, Alcaldesa de Cáceres; D. Antonio Hidalgo García, Rector de la Universidad de Extremadura; Dña. Olga García García, Presidenta de la Fundación COMPUTAEX y Consejera de Economía e Infraestructuras; y D. José Luis González Sánchez, Director General de la Fundación COMPUTAEX.



Tras el acto de apertura se proyectó un breve vídeo conmemorativo del X Aniversario, tras el cual, el Profesor Mateo Valero Cortés, Director del Centro Nacional de Supercomputación BSC-CNS, ofreció su conferencia “BSC y lo que la Supercomputación Puede Hacer por Nosotros”.





Posteriormente se hizo entrega de los premios CénitS a las siguientes categorías: Excelencia Investigadora, Actividad Científica y Humanización de la Tecnología; con la intervención de los galardonados, que fueron, respectivamente, el Prof. Mateo Valero Cortés, el grupo de investigación QUOREX de la Universidad de Extremadura y D. Marco Antonio Sánchez Becerra, de la Asociación ELA Extremadura.

Finalmente se realizó una visita al Centro de Procesamiento de Datos de CénitS y las instalaciones del proyecto de investigación Smart Green Data Center, un novedoso demostrador de data center modular, monitorizable y móvil, en cuyo desarrollo participó CénitS.



## Álvaro Huertas Martín

---

Estudiante del Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software en la Escuela Politécnica de Cáceres. Durante su beca en la Fundación, colaboró en el desarrollo del proyecto CultivData, formándose en el ámbito de las fuentes de datos abiertas (Open Data), el trabajo con sistemas gestores de bases de datos enfocados al Internet de las cosas y el almacenamiento masivo de datos, así como el desarrollo de aplicaciones web.

Apoyó en la tarea de recolección de datos de fuentes abiertas y públicas que conforman el repositorio de datos de CultivData, analizando cómo realizar la captación, tratamiento y almacenaje de forma eficaz y eficiente, conformando la base para el futuro análisis e interpretación de los mismos. Para ello, desarrolló diferentes herramientas que consultan, capturan y almacenan los datos de las citadas fuentes, usando diferentes tecnologías y conformando un repositorio de datos sobre los que trabajará el proyecto. Además, participó en el desarrollo de la primera versión de la plataforma web del proyecto CultivData, que facilita la visualización de los datos por parte de los usuarios. Esta plataforma posteriormente se ampliará para incorporar otras fuentes de datos públicas y propias. Para el desarrollo de los trabajos, además, se formó en el uso de diferentes tecnologías que complementaron su formación obtenida en el Grado. Algunas de ellas fueron la programación de scripts y el tratamiento de datos con Python 3, el desarrollo de aplicaciones web con los frameworks Flask y Django y la realización de técnicas de web scraping con Selenium. Además, se introdujo en la elaboración de documentos científicos mediante el uso del lenguaje LaTeX.

Respecto a su colaboración con la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación de CénitS, participó en la organización de varios eventos, entre los que destacan la presentación de resultados del proyecto TaxoTIC y la jornada de celebración del X Aniversario de la Fundación COMPUTAEX, así como diferentes visitas al centro.

En el ámbito académico, desarrolló su Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software, titulado “*Plataforma de integración y gestión de datos geolocalizados destinados a mejorar la eficiencia agraria de los cultivos*”, como parte del proyecto CultivData, desarrollado por CénitS.

Entre los objetivos marcados para esta beca, se encontraban los siguientes: análisis, diseño, implementación y evaluación de rendimiento de una plataforma de datos públicos y abiertos en el sector agrario y agroalimentario; estudio de la viabilidad de uso de un repositorio centralizado, distribuido o híbrido en plataformas Open Data; y evaluación de técnicas para la elección de Sistemas Gestores de Base de Datos.

Entre los objetivos alcanzados destacan principalmente los siguientes:

- Participación en el desarrollo software de un proyecto de gran tamaño, frente a los proyectos aislados realizados durante la formación universitaria.
- Ampliación de conocimientos en el desarrollo web, uso de protocolos de comunicación y definición de requisitos.
- Ampliación de conocimientos de programación en Python o JavaScript, así como el uso de frameworks y librerías.
- Participación en despliegues de producción usando máquinas virtuales.
- Desarrollo de documentación técnica sobre software

## Álvaro Rodríguez San Pedro

---

Estudiante del Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software en la Escuela Politécnica de Cáceres. Durante el período de beca en la Fundación colaboró en el proyecto HeritaGen. Durante el período de la beca en la Fundación, colaboró en el desarrollo del proyecto HeritaGen, formándose en el ámbito de la supercomputación, el Big Data y técnicas de HPC (High Performance Computing) para el procesado de datos de secuencias genéticas.

Su trabajo se centró en la implantación de una infraestructura de apoyo a la investigación genética con el objetivo de unificar y relacionar la información base del estudio para facilitar su análisis y tratamiento, incluyendo información genealógica, personal, genética y genómica. Asimismo, la infraestructura mejoró la gestión de los datos facilitando su acceso y análisis. Para ello, mejoró el backend del sistema previo existente, añadiendo múltiples operaciones y separándolo efectivamente del frontend. Éste consta de tres APIs (Application Programming Interface) que ofrecen operaciones para la gestión de datos de participantes, datos genéticos y de variantes.

Trabajó también en el sistema de almacenamiento, aumentando su rendimiento para favorecer la gestión del gran volumen de datos a manejar. Además, dado que la información a almacenar es de carácter sensible y de especial protección, diseñó e implementó un plan de seguridad para cumplir con las pautas marcadas por el Reglamento General de Protección de Datos. Éste incluye el establecimiento de medidas de seguridad concretas, el cumplimiento con la licitud del tratamiento y la posibilidad del ejercicio de los derechos ARCO (Acceso, Rectificación, Cancelación y Oposición) sobre los datos personales almacenados. Por último, desarrolló además una herramienta de elaboración de pedigríes que aúna un editor gráfico junto con utilidades para la generación de árboles genealógicos, integrando dicha herramienta en la plataforma web desarrollada previamente y permitiendo la generación y elaboración de pedigríes, así como su carga y modificación.

Respecto a su colaboración con la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación de CénitS, participó en la organización y desarrollo de la Noche Europea de los Investigadores y en otras jornadas de difusión organizadas por el centro.

En el ámbito académico, desarrolló su Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software, titulado “*Sistema bioinformático de apoyo a la investigación en la unificación del patrimonio genealógico y genético*”, como parte del proyecto HeritaGen, desarrollado por CénitS.

Entre los objetivos marcados para esta beca, se encontraban los siguientes: unificación de información genealógica, genética y de variantes, así como su relación para facilitar su análisis; estudio del rendimiento del almacenamiento de grandes volúmenes de datos; desarrollo de técnicas que faciliten el acceso y análisis de información; automatización de extracción de información a partir de datos; aplicación de técnicas que garanticen la seguridad de los datos almacenados.

Entre los objetivos alcanzados destacan principalmente los siguientes:

- Participación en el desarrollo software de un proyecto de gran tamaño, frente a los proyectos aislados realizados durante la formación universitaria.
- Ampliación de conocimientos en el uso de bases de datos NoSQL y programación en Python, incluyendo el uso de librerías y frameworks.
- Ampliación de conocimientos en HPC y Big Data.
- Desarrollo de documentación técnica sobre software.

Portal web

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

**Funciones**

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



**Contenidos**

Canal de noticias relacionadas con la actualidad de CénitS y COMPUTAEX.

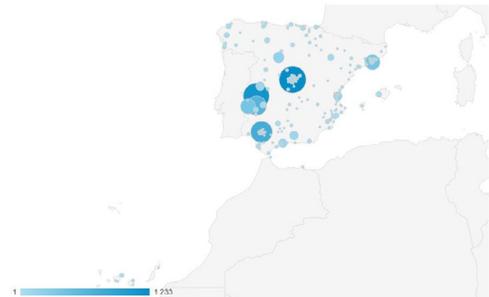
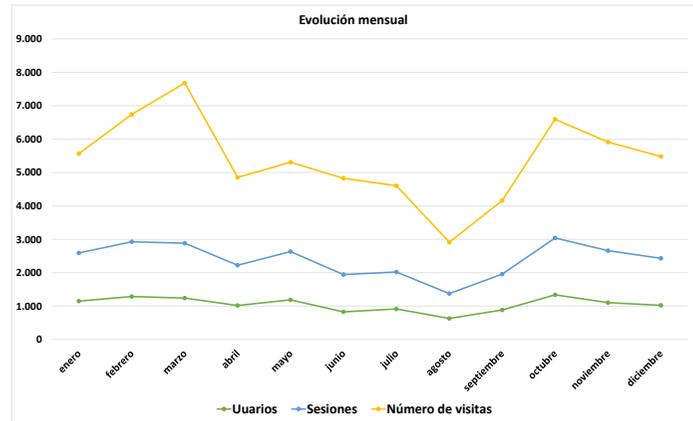
- La Fundación: información relativa a COMPUTAEX, el patronato de la Fundación, el perfil del contratante, las memorias anuales editadas por la Fundación desde su creación, los premios y reconocimiento recibidos, así como los casos de éxito publicados y la identidad corporativa. Cabe destacar especialmente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

## Datos estadísticos

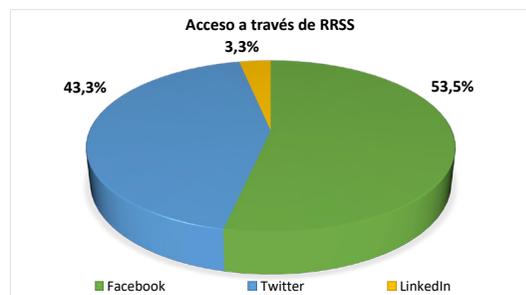
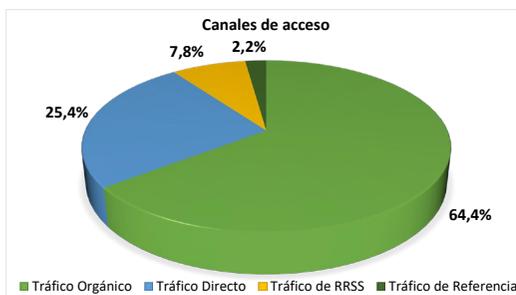
A continuación se muestran los datos estadísticos más relevantes del ecosistema web, relativos al año 2019, según Google Analytics.

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

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



Las siguientes gráficas detallan cómo acceden los usuarios a la plataforma web. El desarrollo en base a los estándares, las buenas prácticas en cuestiones de accesibilidad y las técnicas SEO, han mejorado el porcentaje de accesos a través de los distintos motores de búsqueda y tráfico directo. El esfuerzo de divulgación de noticias y actividades realizadas por la Fundación a través de las redes sociales, también ha contribuido notablemente, siendo Facebook y Twitter los dos motores principales que centralizan la visita a la web corporativa desde estas redes.



## Redes sociales

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



[facebook.com/computaex](https://facebook.com/computaex)

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



[twitter.com/cenits](https://twitter.com/cenits)

Posibilita notificar cualquier evento de interés relacionado con CénitS y COMPUTAEX, manteniendo una relación con los usuarios rápida y flexible.



[linkedin.com/company/cenits/](https://linkedin.com/company/cenits/)

Página orientada a publicitar los servicios ofrecidos por el Centro a una audiencia más especializada.



[CénitS COMPUTAEX](https://www.youtube.com/CénitS%20COMPUTAEX)

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

## Difusión y divulgación

Durante el año 2019, CénitS ha recibido la visita de más de 600 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, y especialmente universitarios y estudiantes de educación primaria y secundaria. Desde su creación en el año 2009, muchas de estas visitas se han ido traduciendo en colaboraciones en proyectos de investigación, en prestación de servicios o en la difusión de conocimiento a los agentes regionales, nacionales e internacionales.



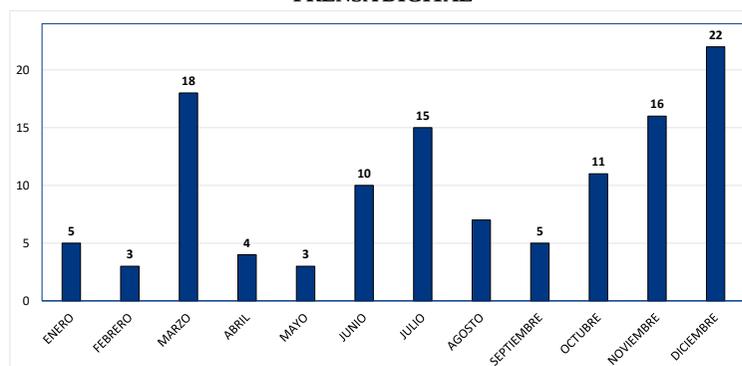
## CénitS-COMPUTAEX en los medios

El alcance mediático conseguido en televisión, radio, prensa escrita y prensa digital, proporciona evidencia del esfuerzo que se ha llevado a cabo a la hora de divulgar las labores acometidas por el Centro y la Fundación, y los logros de los investigadores e innovadores a lo largo de este año. El efecto difusor de estas actividades se añade al impacto en la investigación científica y tecnológica que ya se ha mostrado en el apartado de resultados de investigación.

Televisión	Radio	Prensa escrita	Prensa digital
6	7	8	119

Fecha	Titular	Fuente
<b>TELEVISIÓN</b>		
01/02/2019	Convocada plaza a tiempo completo en la Fundación COMPUTAEX	Canal Extremadura Televisión
22/03/2019	Jornada de celebración del X Aniversario de COMPUTAEX	RTVE Noticias de Extremadura
05/06/2019	V Jornadas de Investigación en Ciberseguridad (JNIC 2019)	RTVE Noticias de Extremadura
01/07/2019	Jornada de presentación del proyecto TaxonomTIC 2018	RTVE Noticias de Extremadura
09/11/2019	Entrevista sobre el Proyecto CultivData	Canal Extremadura Televisión
17/12/2019	Jornada de puertas abiertas de la Fundación COMPUTAEX	RTVE Noticias de Extremadura
<b>RADIO</b>		
01/07/2019	Jornada de presentación del proyecto TaxonomTIC 2018	Canal Extremadura Radio, Radio Nacional de España
02/07/2019	Observatorio regional del sector TIC en Extremadura	Canal Extremadura Radio
20/08/2019	Entrevista al Director General de la Fundación COMPUTAEX	Radio Nacional de España
16/11/2019	Técnicas de programación energéticamente eficientes.	Canal Extremadura Radio
17/12/2019	Jornada de puertas abiertas de la Fundación COMPUTAEX	Radio Nacional de España, Canal Extremadura Radio
<b>PRENSA ESCRITA</b>		
23/03/2019	La supercomputación cumple diez años	Diario Hoy
23/03/2019	10 años del primer superordenador	El Periódico Extremadura
06/05/2019	Entrevista al Director General de COMPUTAEX	Suplemento I+D+i. Diario ABC.
08/06/2019	Expertos avisan que los ciberataques también afectan a los ciudadanos	El Periódico Extremadura
02/07/2019	Empresas tecnológicas en Extremadura crecen un 48% en diez años	Diario Hoy
02/07/2019	859 empresas y 3.200 empleos en el sector de las TIC	El Periódico Extremadura
19/08/2019	300 residentes en el Jerte participan en un estudio sobre enfermedades hereditarias	Diario Hoy
01/12/2019	XVI Encuentro de las Telecomunicaciones de Extremadura	Revista Bit (COIT)

### PRENSA DIGITAL



## Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos

Fecha	Nombre	Lugar	Participación
14/01/2019	Evento "Transición ecológica: El reto de la financiación sostenible"	CaixaForum Madrid	Asistentes
29/01/2019	Reunión del Patronato de la F. COMPUTAEX	Mérida	Asistentes
01/02/2019	VIII Olimpiada Informática de Extremadura	Centro Universitario de Mérida	Patrocinadores
07/02/2019	Curso sobre contratación del sector público	Mérida	Asistentes
13-14/02/2019	Curso sobre contratación del sector público	Mérida	Asistentes
19/02/2019	VIII Jornada Universidad-Empresa 2019	Almadén (Ciudad Real)	Ponentes
20/03/2019	Foro Conecta Empresas	CCMIJU, Cáceres	Ponentes y Asistentes
22/03/2019	Jornada de Celebración del X Aniversario	CénitS-COMPUTAEX, Cáceres	Organizadores y Ponentes
27-29/03/2019	Congreso internacional ISUM 2019	Monterrey, México	Ponentes
28-29/03/2019	Congreso Autonómico sobre Contratación Pública	Palacio de congresos de Mérida	Asistentes
06/05/2019	Reunión Consejo de la RES	Madrid	Asistentes
10/05/2019	Jornada CDTI Proyectos I+D Transferencia Cervera	Fundecyt-PCTEX, Badajoz	Asistentes
28-30/05/2019	Jornadas Técnicas de Red Iris	Universidad de Sevilla	Asistentes
05/06/2019	10X Genomics Biology at High Resolution	Edificio Guadiana, Badajoz	Asistentes
05-07/06/2019	V Jornadas Nacionales de Investigación en Ciberseguridad (JNIC)	Complejo San Francisco de Cáceres	Org., Patroc. y Asistentes
13/06/2019	Participación Mesa redonda	Centro Universitario de Mérida	Asistentes y Participantes
19/06/2019	Reunión del Patronato de la F. COMPUTAEX	CénitS-COMPUTAEX, Cáceres	Asistentes
01/07/2019	Jornada de presentación del proyecto TaxonomTIC	Escuela Politécnica de Cáceres	Organizadores y Ponentes
03/07/2019	Foro Emprende	Mérida	Asistentes
04/07/2019	Presentación Reto	Diputación de Badajoz	Asistentes
17/07/2019	Master Big Data&Analytics	Madrid	Asistentes
11/09/2019	Asamblea General de la Asociación Extremeña de Fundaciones	F. Mercedes Calles y Carlos Ballesteros, Cáceres	Asistentes
17-19/09/2019	Curso Internacional "IoT, BigData, Machine Learning y Blockchain para el sector agroganadero"	Escuela Politécnica de Cáceres	Ponentes
18-19/09/2019	13ª Conferencia de Usuarios de la Red Española de Supercomputación	Zaragoza	Asistentes
18-20/09/2019	Jornadas SARTECO 2019	Complejo Cultural San Francisco, Cáceres	Ponentes y Asistentes

27/09/2019	Noche Europea de los Investigadores 2019	Escuela Politécnica de Cáceres	Organizadores y Ponentes
02/10/2019	Foro enerTIC sobre tendencias tecnológicas en grandes infraestructuras	Hotel Villa Magna, Madrid	Ponentes
05/10/2019	Extremadura Digital Day	CCMIJU, Cáceres	Patrocinadores y Asistentes
16/10/2019	TEEM 2019 Conference	León	Ponentes y Asistentes
16/10/2019	Sesión práctica “Bonificaciones y fiscalidad para actividades de I+D+i”	Fundecyt-PCTEX, Badajoz	Asistentes
17/10/2019	Foro Innova Extremadura 2019	Mérida	Asistentes
22/10/2019	NUTANIX Technical Workshop	Sevilla	Asistentes
23-25/10/2019	Jornadas de Ingeniería Telemática (JITEL) 2019	Zaragoza	Asistentes y Ponentes
25/10/2019	XVI Encuentro de las Telecomunicaciones en Extremadura	Hotel Velada, Mérida	Asistentes y Ponentes
29/10/2019	Jornada CDTIC sobre Agricultura de precisión.	FEVAL, Don Benito	Ponentes
04-15/11/2019	Semana de la Ciencia de Extremadura 2019	CénitS-COMPUTAEX, Cáceres	Ponentes
08/11/2019	Jornada sobre propiedad intelectual	CCMIJU, Cáceres	Asistentes
11/11/2019	IBM Think Summit 2019	Madrid	Asistentes
11/11/2019	IBM Cloud Packs	Madrid	Asistentes
11/11/2019	WorkshopGPSS	Madrid	Asistentes
12-13/11/2019	Spectrum Scale Workshop	Madrid	Asistentes
14/11/2019	Extremadura TechTalent	Sngular, Madrid	Asistentes
15/11/2019	Concurso Reto Ada Byron	Mérida	Patrocinadores
26/11/2019	Reunión ECHOAlliance	Badajoz	Asistentes y Ponentes
29/11/2019	50 Aniversario IES Augustóbriga	Navalmoral de la Mata	Ponentes
04-06/12/2019	IADIS WWW/Internet 2019	Lisboa	Ponentes
05/12/2019	III Jornadas de Divulgación de las Ciencias Biomédicas y Experimentales	CCMIJU, Cáceres	Ponentes y Asistentes
12/12/2019	Seminario de beneficiarios del Programa POCTEP	Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Sevilla	Asistentes
12/12/2019	EnerTIC Awards 2019	Secretaría de Estado para el Avance Digital, Madrid.	Asistentes
17/12/2019	Jornada de Puertas Abiertas de CénitS	CénitS-COMPUTAEX, Cáceres	Organizadores y Ponentes
18/12/2019	Reunión del Patronato de la F. COMPUTAEX	Cáceres	Asistentes



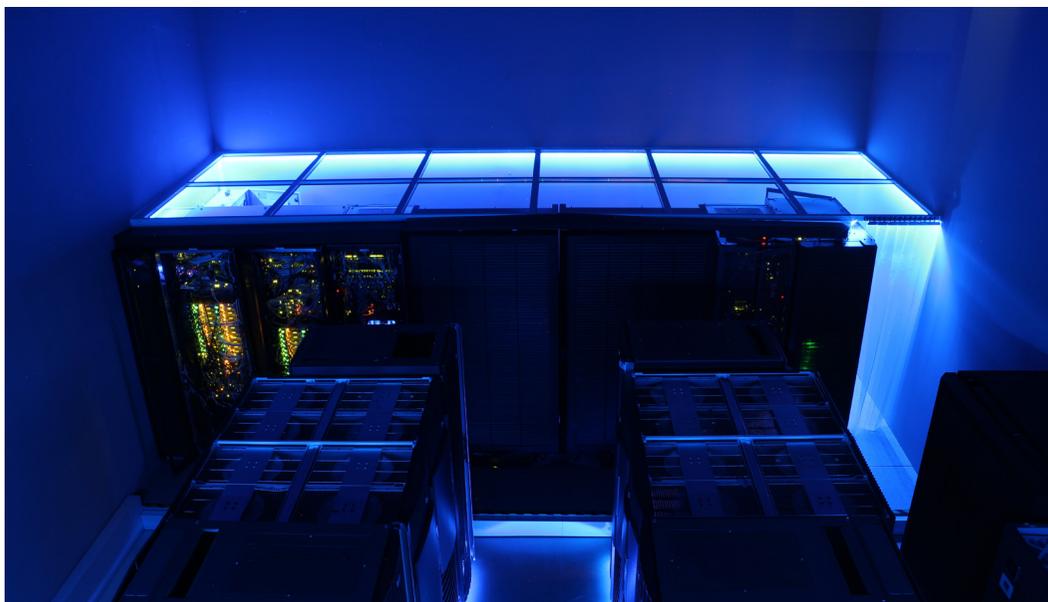
The background features a dark space filled with vibrant, multi-colored light trails in shades of green, yellow, orange, and blue. Several large, dark, reflective spheres are scattered throughout, each catching and reflecting the surrounding light, creating bright highlights and colorful halos. The overall effect is dynamic and futuristic, suggesting advanced technology and data processing.

# RECURSOS TECNOLÓGICOS

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

## CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III



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

Actualmente, la infraestructura y los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, alojados en su CénitS-CPD, alcanzan una capacidad de cálculo de supercomputación de 93 TFlops y 120 Tflops de computación gráfica.

A continuación se detallan sus características técnicas:

### **Nodo de cómputo**

- 2 IBM Power Systems Accelerated Compute Server (AC922) con 2 procesadores POWER9 con 20 cores cada uno, a 2,4GHz (40 cores por nodo), con 1TB de RAM y 2 Nvidia Tesla V100 GPU with NVLink SXM2.
- 2 IBM Power Systems Accelerated Compute Server (AC922) con 2 procesadores POWER9 con 20 cores cada uno, a 2,4GHz (40 cores por nodo), con 128GB de RAM y 2 Nvidia Tesla V100 GPU with NVLink SXM2.

### **Nodo de cómputo de memoria compartida**

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

### Clúster de memoria distribuida

---

- 10 chasis Fujitsu Primergy CX400 con capacidad para albergar hasta 4 servidores cada uno.
- 40 servidores Fujitsu Primergy CX2550 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2660v3, de 10 cores cada uno, a 2,6GHz (20 cores por nodo, 800 cores en total) y 25 MB de caché, con 80GB de RAM y 2 discos SSD 128GB.
- 168 IBM System x iDataPlex dx360 M4 con 2 procesadores Intel E5-2670 SandyBridge-EP, de 8 cores cada uno, a 2.6GHz (16 cores por nodo, 2688 cores en total) 20 MB de caché y 32GB de RAM.
- 2 racks IBM iDPx con RDHX (water cooling) con capacidad para 84 servidores cada uno.

### Clúster hiperconvergente de cloud computing

---

- 3 nodos HX-5522 cada uno con 2 procesadores Intel Xeon Gold 5220 (Cascade Lake) de 18 cores cada uno a 2,2GHz. Cada nodo cuenta con 512GB de RAM, 2 discos SSD M.2 de 128GB, 2 discos SSD de 1,92TB y 4 discos HDD de 8TB. En total, el clúster cuenta con 96TB HDD, 11,52TB SSD y 768 GB SSD M.2. Además, estos nodos cuentan con una interconexión de red de 25GbE.

### Nodos de servicio

---

- 1 IBM Power Systems Accelerated Compute Server (AC922) con 2 procesadores POWER9 con 16 cores cada uno, a 2,7GHz (32 cores por nodo) y 128GB de RAM.
- 3 Fujitsu Primergy RX2530 M1, cada uno con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 32GB de RAM DDR4, 2 discos SAS de 300GB.
- 1 servidor IBM System x x3550 M4 con 1 procesador Intel SandyBridge-EP (8 cores a 2.6GHz y 20MB de caché); 16 GB RAM, 2 discos SAS de 300GB.

### Nodos de desarrollo

---

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

### Almacenamiento

---

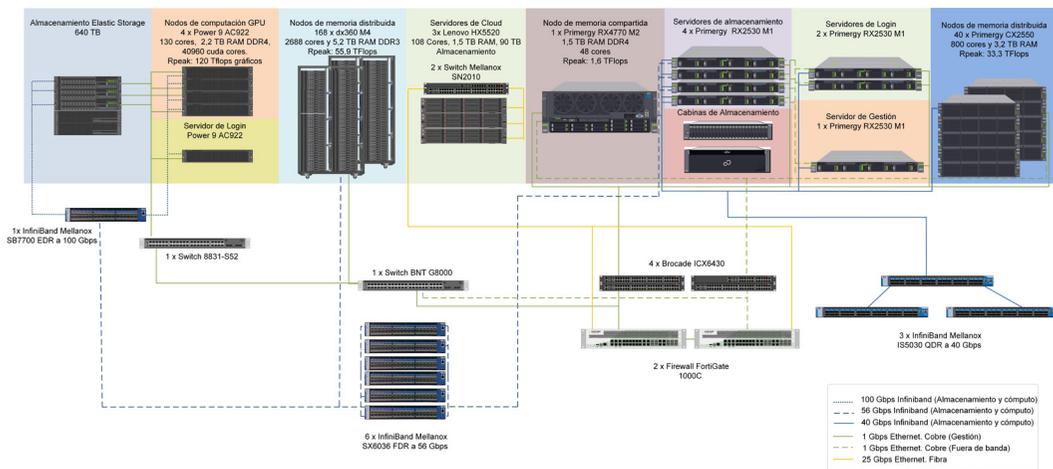
- Elastic Storage Server GL1S con una capacidad de almacenamiento de 656TB RAW:
  - 1 enclosure con 84 slots: 82 x 8TB Enterprise HDD y 2x 800GB SSD.
  - 2 Data Servers: 2 x 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 256GB RAM.
  - 1 ESS Management Server: 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 64GB RAM.
  - Licenciamiento de IBM Spectrum Scale.
- Cabina de metadatos (MDT) Eternus DX 200S3 (15 discos de 900GB SAS) = 12 TB.
- 2 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 64GB de RAM DDR4 y 2 discos SAS de 300GB para gestión de metadatos con Lustre.
- Cabina de datos (OST) Eternus DX200 (41 discos 2TB NL-SAS, 31 4TB NL-SAS) = 206TB.
- 2 servidores Fujitsu Primergy RX2530 M1 con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620v3 (6 cores a 2,4GHz y 15 MB de caché); 64GB de RAM DDR4, 2 discos SAS de 300GB para gestión de los objetos con Lustre.

## Topología de red

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

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

- 1 EDR Mellanox TOR 36-port IB2 FAF 100 Gb/s IB Switch 1:8828 Model G36.
- 1 Ethernet IBM Switch (48x1Gb+4x10Gb) 1:8831 Model S52.
- Dos firewall Fortinet Fortigate 1000C como sistema de seguridad perimetral, capacidad de firewall, VPN, antivirus, detección de intrusiones y gestión de ancho de banda por conexión, configurados como un clúster redundante activo-pasivo de alto rendimiento y gran capacidad de procesamiento.
- 14 switches Infiniband Mellanox SX6036 de 36 puertos FDR a 56Gbps para red de cómputo.
- 4 switches BNT G8052F de 48 puertos y 1 switch BNT G8000 de 48 puertos.
- Tres switches Brocade ICX6430 de 48 puertos y un switch Brocade ICX6430 de 24 para la red de comunicación y de gestión del supercomputador.
- Tres switches InfiniBand Mellanox IS5030 de 36 puertos QDR a 40Gbps para la red de cómputo.



LUSITANIA III fue financiado con Fondos FEDER gestionados desde la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura a través de la Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad.

Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional

“Una manera de hacer Europa”

**JUNTA DE EXTREMADURA**

Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital  
Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad

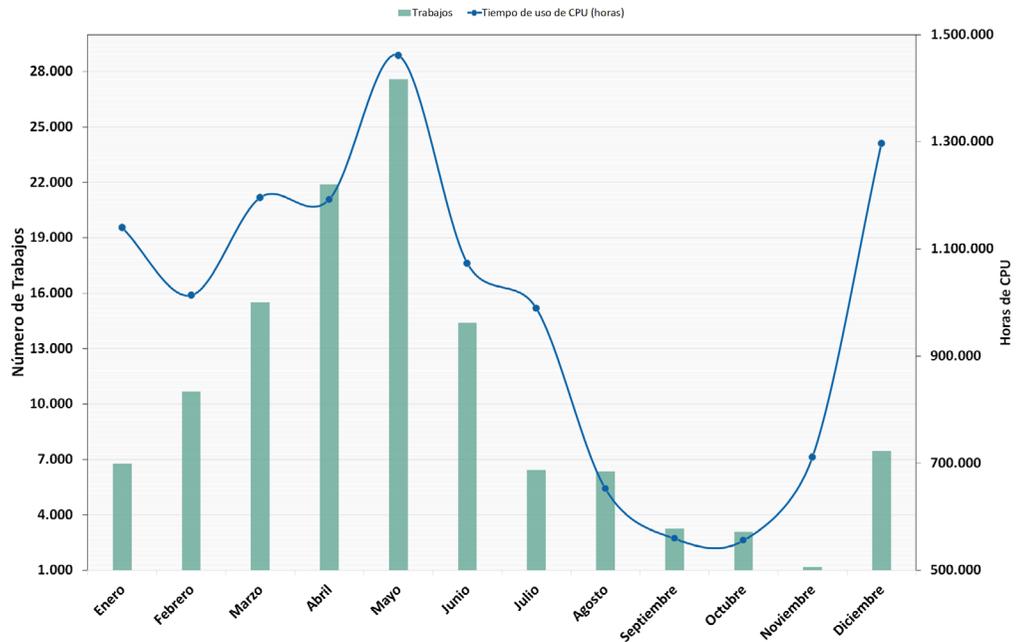


Unión Europea

## Consumo de recursos

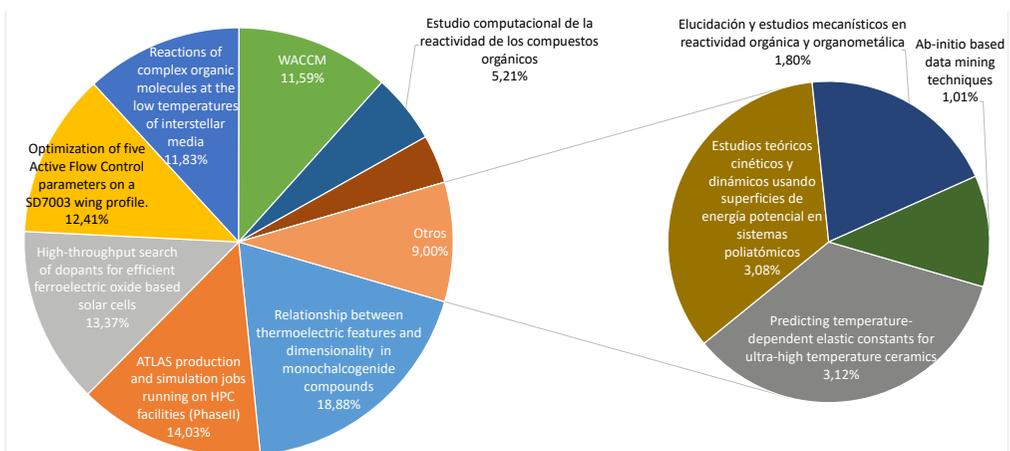
### Uso de recursos

Durante el año 2019, técnicos, investigadores e innovadores han hecho uso de la infraestructura de CénitS-CPD. En la gráfica que se representa a continuación se muestran los datos relacionados con el consumo de los recursos de los nodos de memoria distribuida y compartida. En ella se representa de manera detallada la relación mensual del número de horas de CPU computadas durante el ejercicio de 2019, obteniendo un total de 11.839.235 horas de cómputo.



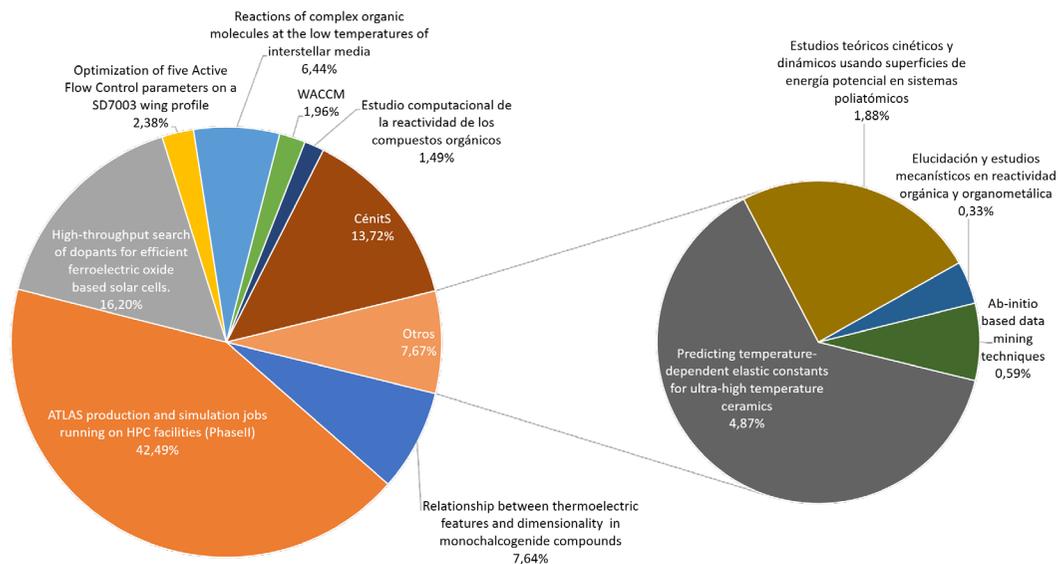
### Uso de CPU

A continuación se desglosa el consumo total anual de CPU en relación a los consumos de los distintos proyectos ejecutados, siendo representativa la distribución de recursos de cómputo uniforme entre una gran cantidad de proyectos heterogéneos. Esto es posible gracias a que CénitS-CPD dispone de una infraestructura singular, en lo que a recursos de cómputo se refiere.



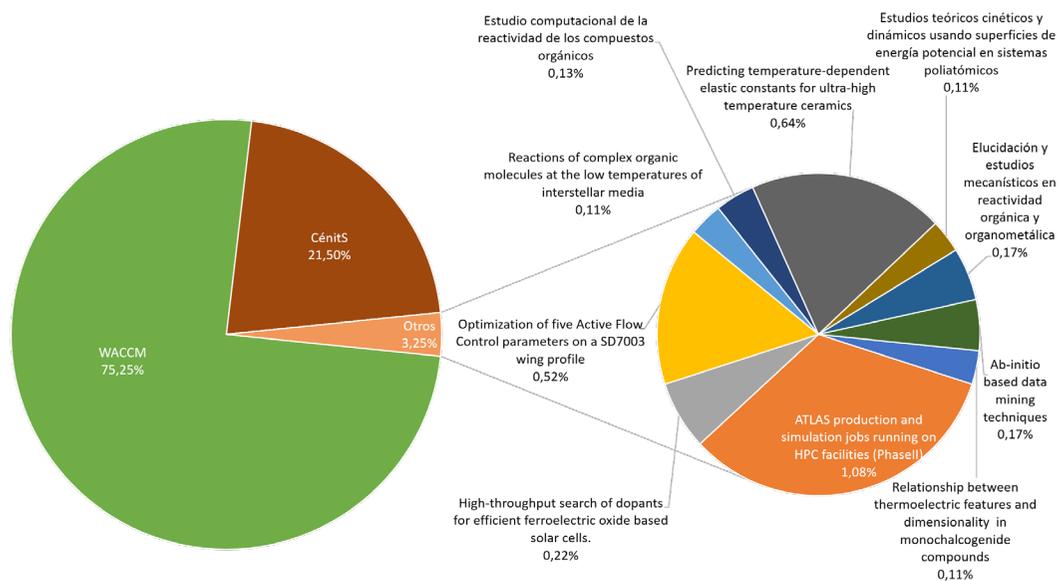
## Uso de memoria principal

De la misma manera, se representa el consumo anual de memoria RAM referente a los proyectos de investigación ejecutados, que ha estado parcialmente repartida entre todos los proyectos siendo el proyecto *ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities* el principal consumidor con un casi 43% del total.



## Uso de almacenamiento

La gráfica que se presenta a continuación muestra el volumen en disco de los proyectos de investigación que más recursos han utilizado, siendo representativo que la mayor parte de consumo de almacenamiento en discos ha sido realizado por dos proyectos principalmente, alcanzando un 97% aproximadamente del consumo total.



## Usuarios

Durante el año 2019, un importante número de técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en el supercomputador LUSITANIA II.

### Consultas de asesoramiento técnico

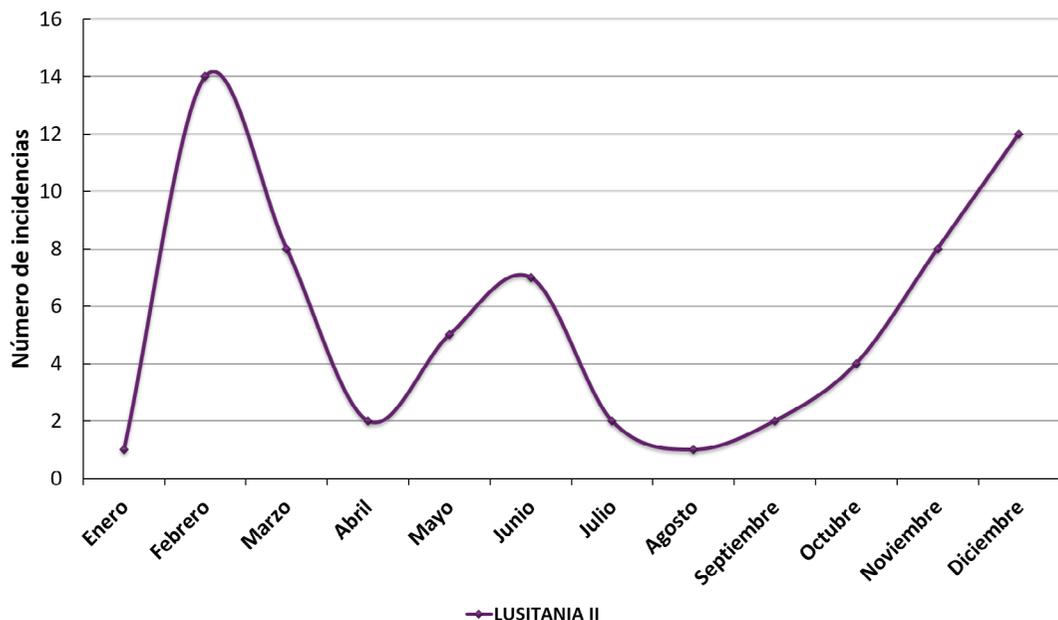
Las consultas y peticiones que realizan los usuarios se resuelven mediante un servicio de atención individualizado basado en la herramienta de gestión de tickets *osTicket*. Con esta herramienta se logra gestionar y controlar todas las peticiones de una manera ordenada. *osTicket* permite categorizarlas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

Toda solicitud es asignada a un técnico del equipo CénitS mediante un identificador único para poder realizar un seguimiento exhaustivo en todo momento. Además, se proporciona un archivo y un histórico de todos los tickets para que los propios usuarios conozcan el estado de sus peticiones.

Aunque este sistema proporciona la flexibilidad y control suficientes para solventar cualquier petición, muchos usuarios han seguido utilizando el correo electrónico y el teléfono para ponerse en contacto con el equipo CénitS y así agilizar aquellas que exigen una respuesta más rápida.

En estos casos, el técnico recoge y categoriza la información transmitida por estas vías alternativas en el sistema de gestión de tickets para poder remitir al usuario el estado y la evolución de su solicitud a continuación.

El número de consultas de los usuarios se ha reducido con respecto al año anterior en aproximadamente un 33%, debido a las continuas mejoras técnicas llevadas a cabo por el equipo de CénitS. Se han resuelto un total de 66 incidencias distribuidas entre los distintos meses de 2019, tal y como se muestra a continuación



**COMPUTACIÓN TÉCNICA**

Biopython

Bowtie

BWA

COMSOL

CPMD

Cufflinks

Fastp

FastQC

GATK

Gaussian 16

GaussView 6

Hisat2

IDL

Jellyfish

Matlab

MIRA

netCDF

NWChem

Octave

Picard

Python

R

Ray

Salmon

SAMtools

Schrödinger

Singularity

SnEff

Trinity

VASP

WIEN2k

---

---

**COMPILADORES**

---

GNU GCC

---

Intel C/C++ Compiler

---

Intel Fortran Compiler

---

Java JDK

---

PGI Compilers & Tools

---

---

---

---

**SISTEMAS OPERATIVOS**

---

CentOS

---

Debian

---

Red Hat Enterprise

---

Suse Linux Enterprise Server

---

Ubuntu

---

---

18. Vir-Volt

11. H-I

12. J



19. Wart-Wart

6. M-M

7. Mo-M



1. Po

2. Pri-Proc





# PROYECTOS CONCLUIDOS

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

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



## Ciencias de la Tierra

### 1. ABAQUS

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

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

Eduardo Sabio Rey. Dpto. de Física Aplicada de la Universidad de Extremadura.

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

CénitS-COMPUTAEX.

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

Sara Basart. Barcelona Supercomputing Center. Astronomy, Space and Earth Sciences. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación]

### 5. Cálculos ab-initio

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

### 6. Distribución de niveles electromagnéticos en determinados entornos geográficos

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

### 7. Estudios computacionales en reacciones multicomponentes

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

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

Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.

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

Antonio David Pozo Vázquez y Vicente Lara Fanego. Dpto. de Física de la Universidad de Jaén.

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

Antonio Muñoz Mateo. Universidad de Barcelona. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]

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

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

12. **Magnetic connectivity through the Solar Partially Ionized Atmosphere**  
Ángel de Vicente. Dpto. de Física Solar del Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC).
13. **Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre**  
Antonio Plaza Miguel. Dpto. de las Tecnología de Computadores y de Comunicaciones de la de la Universidad de Extremadura.
14. **SIATDECO: Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones en Energías Ecológicas**  
Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal (ICMC), CETIEX, Fundecyt y CénitS-COMPUTAEX.
15. **The impact of the 11 year cycle in WACCM simulations**  
Gabriel Chiodo del Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica 2 de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid. Natalia Calvo de la Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García de la Universidad de Extremadura, Katja Matthes de Helmholtz-Zentrum Ozeanforschung Kiel GEOMAR (Kiel, Alemania) y Daniel R. Marsh del National Center for Atmospheric Research, Boulder (CO, EEUU).
16. **Supercomputing and e-science.**  
Gabriel Chiodo. Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica, Universidad Complutense de Madrid.



## Ciencias de la Vida

1. **Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces.**  
Sergio Diaz Tendero. Universidad Autónoma de Madrid.
2. **Ab-initio simulation of the electronic and magnetic properties in iridate-based oxide heterostructures.**  
Juan Ignacio Beltrán (I.P.). Universidad Complutense de Madrid. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]
3. **Activación molecular mediante complejos organometálicos con enlaces múltiples heterometálicos**  
Miguel Angel Ruiz Alvarez (IP), Daniel García-Vivó, M<sup>a</sup> Esther García Díaz, M<sup>a</sup> Angeles Alvarez Fidalgo. Área de Química Inorgánica, Universidad de Oviedo.
4. **Análisis clínico, inmunológico y genético del déficit selectivo de IGA. Estudio longitudinal de los pacientes acumulados en un centro de referencia durante los últimos 18 años**  
FundeSalud, Hospital San Pedro de Alcántara, Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.

- 5. Atomistic Simulations to Investigate Phosphocholine Micelle Self-assembly and Degradation**  
Christian Lorenz (I.P.). King's College London. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación].
- 6. Cálculo de la corriente de bootstrap en el Stellarator TJ-II**  
José Luis Velasco Garasa. Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 7. Consolidar TECNO\_FUS**  
José M<sup>a</sup> Gómez Ros. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 8. Construcción de superficies de energía potencial**  
Eloísa González Lavado, Dpto. de Ingeniería Química y Química Física (GCYDEX), de la UEx.
- 9. Desarrollo de nuevas reacciones multicomponentes de isonitrilos**  
Carlos Fernández Marcos. Dpto. de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad de Extremadura.
- 10. Dinámica fuera del equilibrio del modelo de Heisenberg tridimensional en presencia de un campo magnético**  
Juan Jesús Ruiz Lorenzo, Dpto. de Física de la Universidad de Extremadura. Antonio Gordillo Guerrero, Dpto. de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Automática de la Universidad de Extremadura.
- 11. Effect of oxygen vacancies in bismut oxide Energy-Loss Near-Edge Structure spectra by ab initio simulations**  
Francesca Peiró (I.P.), Javier Blanco Portals, Sonia Estrade Albiol and Catalina Coll Benejam. Universitat de Barcelona.
- 12. Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico**  
Francisco Javier Olivares del Valle (coordinador), Manuel Ángel Aguilar Espinosa, José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, María Elena Martín Navarro, Ignacio Fernández Galván, Aurora Muñoz Losa y Francisco Fernández García-Prieto. Grupo de investigación QCAMM (Quantum Chemistry And Molecular Modelling), Dpto. de Ingeniería Química y Física, Universidad de Extremadura.
- 13. Electronic and Thermoelectric Properties of doped-Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> based compounds from First Principles.**  
Pablo Palacios Clemente. Dpto. de Física Aplicada a las Tecnologías Aeronáutica y Naval, Universidad Politécnica de Madrid.
- 14. Estirpex**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 15. Estirpex-2**  
CénitS-COMPUTAEX.

**16. Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas.**

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

**17. Estudio de efectos estereoelectrónicos en heterociclos saturados hidroxilados**

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

**18. Estudio cinético de reacciones poliatómicas mediante el método RPMD**

Joaquín Espinosa García. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.

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

Manuel Ángel Aguilar Espinosa. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.

**20. Expedición SheliOS 2009**

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

**21. Flow-induced anisotropy in metallic glasses**

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

**22. Grupo Operativo APMEF: Agricultura de precisión aplicada para la mejora de explotaciones frutales.**

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

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

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

**24. IFMIF-EVEDA España**

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

**25. Mechanisms of Molecular Motion in Polymers with Nonuniform Stiffness**

Jorge Ramírez García. Universidad Politécnica de Madrid. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].

- 26. Medidas de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia**  
Juan Ignacio Lagares, Unidad de Aplicaciones Médicas del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas). Francisco Sánchez Doblado y María Teresa Romero Expósito, Dpto. de Fisiología Médica y Biofísica/Servicio de Radio-física de la Facultad de Medicina, Universidad de Sevilla.
- 27. Novel genomic regions associated to specific complex chromatin marks**  
Ángel Carlos Román. Instituto Cajal - CSIC. Dpto. Systems Circuits Group.
- 28. Nuevas sustancias gelificantes derivadas de monosacáridos e hidrazidas derivadas de diácidos**  
Pedro Cintas Moreno y Ana María Sánchez León. Grupo de investigación Química Orgánica (QUOREX), Universidad de Extremadura.
- 29. Pedigreex: gestión automatizada de pedigrís humanos en consejo genético**  
Noelia Alonso Sánchez. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática.
- 30. PIT (Programa de Innovación y Talento): Análisis y consultoría del proyecto OncoGenTIC: Tecnologías Informáticas y de las Comunicaciones al servicio asistencial de especialistas y pacientes de enfermedades oncológicas**  
CLOUDEX, S.L. y CénitS.
- 31. PIT (Programa de Innovación y Talento): IoTAgro 4.0**  
SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L, y CénitS.
- 32. Plataforma de integración y gestión de datos geolocalizados destinados a mejorar la eficiencia agraria de los cultivos.**  
Álvaro Huertas Martín. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software, Universidad de Extremadura
- 33. Propuesta y análisis de viabilidad de un servicio asistencial para la disposición de ultrasecuenciación genética en un centro de supercomputación**  
Manuel Alfonso López Rourich. Trabajo Final de Máster en dirección TIC.
- 34. Propuesta y análisis de viabilidad de un sistema automatizado de diagnóstico e investigación aplicado a la tecnología de ultra-secuenciación genética en un centro de supercomputación**  
Manuel Alfonso López Rourich. Trabajo Final de Máster universitario en investigación, UEx.
- 35. Quantum Chemistry and Molecular Modeling**  
Francisco J. Olivares del Valle. Grupo de investigación Quantum Chemistry And Molecular Modelling, Universidad de Extremadura.
- 36. Química computacional**  
José Carlos Corchado Martín-Romo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.
- 37. Quorex**  
Pedro Cintas Moreno, Martín Ávalos González, Reyes Babiano Caballero, José Luis Jiménez Requejo, Rafael Fernando Martínez Vázquez, Juan Carlos Palacios Albarrán, Abraham Rodríguez Cano. Grupo de investigación Química Orgánica (QUOREX), Universidad de Extremadura.

- 38. RUMIMETA: Disminución de la huella de metano por inclusión de polifenoles vitivinícolas en la alimentación de rumiantes. Monitorización de su efecto en el bienestar de los animales durante el cebo de terneros**  
Copreca (coordinador), Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L., Heral Enología S.L., CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.
- 39. SCINAP: Sistema Ciberfísico basado en la Inmótica, para su aplicación en Agricultura de Precisión**  
Domotys (Asociación española para el impulso y la innovación en la domótica, la inmótica y las ciudades inteligentes), SET Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., Sinapse Energía S.L., Amaysys Technologies S.L., Albufera Energy Storage S.L. y CénitS.
- 40. SCioT**  
SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería y CénitS-COMPUTAEX.
- 41. Simulación de procesos químicos**  
Santiago Tolosa Arroyo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, UEx.
- 42. Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con Euterpe**  
Edilberto Sánchez González, Francisco Castejón Magaña, Iván Calvo Rubio. Unidad de Teoría del Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 43. Simulaciones moleculares de docking (acoplamiento molecular) para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus**  
Vicente Galiano, José Villalaín, Emmanuel Fajardo. Departamento de Física y Arquitectura de Computadores, Universidad Miguel Hernández de Elche.
- 44. Sistema bioinformático de apoyo a la investigación en la unificación del patrimonio genealógico y genético**  
Álvaro Rodríguez San Pedro. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software. Universidad de Extremadura.
- 45. Sistema Ciberfísico para la Optimización de una Explotación Agropecuaria**  
Juan Francisco Bermejo y José Luis González (CénitS-COMPUTAEX) y Félix R. Rodríguez (Escuela Politécnica de Cáceres, Universidad de Extremadura). Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software.
- 46. Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional**  
Santiago Aparicio. Dpto. de Química de la Universidad de Burgos.
- 47. The mechanism of the two-step spin-transition of a thiazyl-diradical-based material presenting geometrical frustration.**  
Juan José Novoa Vide. Facultat de Química. Universitat de Barcelona. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].
- 48. Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación**  
Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres y CénitS-COMPUTAEX.



## Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

- 1. Accesibilidad web**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 2. Adecuación de la red de comunicaciones para CénitS**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 3. Adecuación del CPD de LUSITANIA II**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 4. Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 5. Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal**  
David Valencia Corrales. Dpto. Tecnologías de los computadores y de las comunicaciones de la Universidad de Extremadura.
- 6. Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (Aldealab c3)**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 7. Análisis de imágenes en profundidad en terapias de rehabilitación supervisadas por robots autónomos.**  
Eva María Mógica Cisneros. Trabajo Final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.
- 8. Análisis de un sistema de gobierno para federaciones de centros de procesamiento de datos con computación de alto rendimiento.**  
Javier Rubio Bravo. Trabajo Final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.
- 9. Cálculos de eficiencia condicionada con datos internacionales**  
José Manuel Cordero Ferrera. Departamento de Economía, Universidad de Extremadura.
- 10. CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial)**  
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)
- 11. COM.INFO.COM: Predictibilidad de infoestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPv6 y FTTH**  
Alfonso Gazo Cervero, José Luis González Sánchez, Francisco Javier Rodríguez Pérez y Javier Carmona Murillo. Grupo de investigación GÍTACA (Grupo de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas), Universidad de Extremadura, en convenio con la empresa Aplicaciones Integrales e Industriales Grupo G5.
- 12. Colaboración con el observatorio tecnológico UEX-HP**  
Universidad de Extremadura, Hewlett Packar y CénitS-COMPUTAEX.

- 13. ConSumar**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 14. Consumo energético de operaciones colectivas MPI en plataformas multicore**  
Álvaro Cortés Fácila y Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Dpto. de Arquitectura de Computadores y Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 15. Contribución al desarrollo de discretizaciones y optimización eficientes para el análisis y diseño de filtros, antenas y agrupaciones de antenas.**  
Jesús Rubio Ruiz, Rafael Gómez Alcalá, Juan F. Izquierdo León y Yolanda Campos Roca. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 16. Creación de un ecosistema de negocio en cloud computing. Gestión automatizada de la infraestructura**  
Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.
- 17. Eco-traffic**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 18. Deployment of next generation services in the Scientific and Technological Network of Extremadura**  
Jesús Calle Cancho. Trabajo Final de Máster Universitario en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.
- 19. Despliegue de un testbed de redes definidas por software para la gestión de recursos de red en un CPD.**  
Laura Amarilla Cardoso. Trabajo final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.
- 20. Diseño de un sistema de gestión por procesos de negocio en CénitS/COMPUTAEX**  
Felipe Lemus Prieto. Trabajo Final de Máster.
- 21. EISTER - e-Infranet Sustainability Training and Educational Resource**  
University College of West Flanders (Howest, Bélgica), University College Dublin (Dublin, Irlanda), Leeds Metropolitan University (Leeds, Reino Unido) y Technical University of Lisbon (Lisboa, Portugal), Riga Technical University (Riga, Letonia) y Open Universiteit (Países Bajos), Kajaani University of Applied Sciences (Kajaani, Finlandia) y CénitS-COMPUTAEX.
- 22. Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects**  
Levent Gürel. Director, Computational Electromagnetics Research Center (BiLCEM)
- 23. Electromagnetismo y supercomputación para nanoestructuras plasmónicas. Aplicación a nanoantenas ópticas y metamateriales**  
Luis Landesa Porras, José Manuel Taboada Varela, Francisco Javier Rivero Campos, Luis Bote Curiel y Mario Fernández Manzano. Dpto. de Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 24. Estudio y análisis de nuevos mecanismos para redes inalámbricas de próxima generación haciendo uso de técnicas de computación de altas prestaciones.**  
José Javier Rico Palomo. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.

- 25. Estudio y evaluación de los mecanismos de gestión de la movilidad en redes de próxima generación**  
Jesús Calle Cancho. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática, Universidad de Extremadura.
- 26. Evaluación de AzequiaMPI**  
Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Universidad de Extremadura.
- 27. Evaluación de la movilidad IP y posibilidades de integración en redes programables 5G**  
José Manuel Mendoza Rubio. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.
- 28. FI4VDI - Desarrollo de una Red de Infraestructuras Federadas para la Generación de Servicios de Virtualización de Puestos de Trabajo**  
FCSCCL (Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León), CénitS-COMPUTAEX, UDL (Universitat de Lleida), Université Montpellier 2, Inovaria y Consorcio PCiTAL (Parc Científic i Tecnològic Agroalimentari de Lleida).
- 29. Future Internet: eficiencia en las redes de altas prestaciones**  
Red Temática Fierro (incluyendo CénitS-COMPUTAEX).
- 30. Gestión de la movilidad en redes de transporte de paquetes para la mejora de la calidad de servicio en la convergencia entre las redes fijas y móviles**  
David Cortés Polo. Tesis Doctoral, Universidad de Extremadura.
- 31. Green code**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 32. Implementación de un Sistema para el Control de Consumos Energéticos en Entornos HPC.**  
Manuel José Casillas, José Luis González (CénitS-COMPUTAEX) y Miguel Ángel Vega (Universidad de Extremadura). Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Computadores de la Universidad de Extremadura.
- 33. Implementación del modelo Cloud Computing en un centro de supercomputación.**  
Jaime Rivero Ramos. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC.
- 34. INRETEL - Investigación para la obtención de una nueva metodología y un prototipo TIC para el tratamiento y procesamiento de reclamaciones de servicios de telecomunicaciones.**  
Trecone, Grupo Área de Derecho S.L.P., Solucionex Consultoría y Desarrollo S.L., CETA-Ciemat, Feval, CénitS, y la Unión de Consumidores de Extremadura.
- 35. Mecanismos de Monitorización y Análisis de Tráfico en Redes de Próxima Generación**  
Daniel González Sánchez. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería en Telemática, Universidad de Extremadura.
- 36. Mecanismos para la distribución de contenidos a través de redes móviles**  
Javier Carmona Murillo. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.

- 37. Medianell Virtual Press**  
Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L.
- 38. Metodología y framework para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos HPC.**  
Javier Corral García. Diploma de Estudios Avanzados.
- 39. MITTIC - Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales**  
Gobierno de Extremadura, ICMC (Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal), INTROMAC (Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción), CCMIJU (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón), FEVAL (Institución Ferial de Extremadura), CénitS-COMPUTAEX, Fundecyt-PCTEX, CTAEX (Centro Tecnológico Agroalimentario Extremadura), Universidade de Évora, IPP (Instituto Politécnico de Portalegre), CEBAL (Centro de Biotecnología Agrícola e Agro-Alimentar do Alentejo), CEVALOR (Centro Tecnológico da Pedra Natural de Portugal), ADR-IPP y CATAA (Associação Centro de Apoio Tecnológico Agro-Alimentar de Castelo Branco).
- 40. NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología**  
Luis Landesa y José Manuel Taboada. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 41. Optimización de la red de acceso conmutada para provisión de QoS a dispositivos móviles mediante programación lineal**  
David Miguel Cortés Polo. Trabajo Final de Máster universitario en investigación.
- 42. Optimization of the diffused matrix format for heterogeneous parallel computing**  
David Valencia Corrales y Alejandro Cristo García. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 43. PIT (Programa de Innovación y Talento): Publicidad, marketing digital y diseño web**  
Synopsis 103 y CénitS.
- 44. Proyecto SEDE**  
SET Informática, Comunicación e Ingeniería, y CénitS-COMPUTAEX.
- 45. Proyecto SysGobEx**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 46. Red NOVA sostenible**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 47. Redes inalámbricas MIMO de última generación en zonas rurales**  
Francisco Luna Valero. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.
- 48. S4I - Software Sensor for Smart Infrastructures**  
Set Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., Grupo OHL: Obrascon Huarte Lain S.A., Auditoriza Diagnóstico de Sistemas S.L.P., Grupo Hypercomp (UEX) y CénitS-COMPUTAEX.

**49. SIBE**

CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).

**50. Simulación de dispositivos ópticos integrados**

Rafael Gómez Alcalá. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

**51. Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio**

Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.

**52. Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD**

CénitS-COMPUTAEX.

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

Javier Lázaro Jareño. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.

**54. Smart Green Data Center**

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

**55. Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones**

Luis Landesa y José Manuel Taboada. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.

**56. Soporte en porting a usuarios del CIEMAT en la plataforma de LUSITANIA**

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

**57. Supercomputación y Desarrollo GRID**

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

**58. TaxonomTIC 2013**

CénitS-COMPUTAEX.

**59. TaxonomTIC 2014**

CénitS-COMPUTAEX

**60. TaxonomTIC 2015**

CénitS-COMPUTAEX

**61. TaxonomTIC 2016**

CénitS-COMPUTAEX

**62. TaxonomTIC 2017**

CénitS-COMPUTAEX

**63. TaxonomTIC 2018**

CénitS-COMPUTAEX

**64. Unidad Interactiva 3D**

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

**65. Vale tecnológico Degusta San Juan S.L.**

CénitS-COMPUTAEX

**66. Vale tecnológico Instituto Stetica S.L.**

CénitS-COMPUTAEX

**67. Vale tecnológico Afimec Centro de Formación Profesional**

CénitS-COMPUTAEX

**68. Vale tecnológico Bobimex S.L.**

CénitS-COMPUTAEX

**69. Vale tecnológico Isatex, CEE.**

CénitS-COMPUTAEX

**70. Vale tecnológico Network Languages Formación S.C.**

CénitS-COMPUTAEX

**71. Vale tecnológico Proigam Instalaciones S.L.**

CénitS-COMPUTAEX

**72. Vale tecnológico Omicrón Elevadores S.A.**

CénitS-COMPUTAEX

**73. Vale tecnológico Méntor e-Learning**

CénitS-COMPUTAEX

# Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación

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

☎ +34 927 049 070

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



Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional

“Una manera de hacer Europa”

**JUNTA DE EXTREMADURA**

Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital  
Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad



Unión Europea