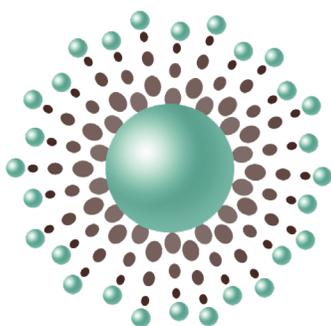


# COMPUTAEX

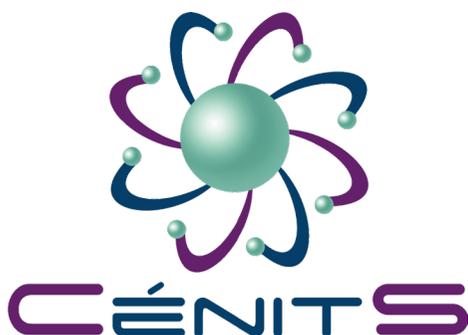
## MEMORIA ANUAL 2021





COMPUTAEX

MEMORIA  
2021



© Fundación COMPUTAEX

Edición: Fundación COMPUTAEX

Diseño: Fundación COMPUTAEX

Autores: Jesús Calle Cancho, Javier Corral García, Moisés Gaitán Fernández, José Luis González Sánchez, Felipe Lemus Prieto, Miguel Ángel Mahíllo, Julio Mañas Viniegra, Enrique Moreno Sánchez y Javier Sánchez Rivero.

Impreso en España

Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-09-41980-7

Depósito Legal: CC-000137-2022



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

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



<b>2021. “Because it’s there” .....</b>	<b>6</b>
<b>1. Fundación COMPUTAEX.....</b>	<b>8</b>
Objeto y fines.....	8
Patronato.....	9
Equipo CénitS 2020.....	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 CénitS.....</b>	<b>17</b>
EuroCC .....	18
CultivData.....	20
CONECTA PYME 4.0.....	22
MiPYME Digital .....	24
Quantum Spain .....	26
CultivDat2 .....	28
Prospéctic2.....	30
Anemoi .....	32
TaxoTIC 2021.....	34
Hiperespectral IntelliHSI.....	36
Implementación de plataforma de comunicación digital y e-learning en Moodle .....	37
Plan Complementario de Biotecnología aplicada a la Salud.....	38
Go2Edge .....	39
Grupo de investigación CénitS .....	39
Supercomputador LUSITANIA IV .....	40
CénitS CPD: Resilient datacenter.....	41
CénitS-CPD: Equipamiento científico tecnológico .....	42
CénitS-CPD: Consolidación de infraestructuras de supercomputación .....	42
Red de Excelencia RES (Red Española de Supercomputación).....	43
<b>3. Proyectos de investigación soportados .....</b>	<b>45</b>
Ciencias de la Tierra .....	46
Ciencias de la Vida .....	48
Ciencias Informáticas y de Comunicaciones.....	53

<b>4. Resultados de investigación.....</b>	<b>55</b>
Publicaciones en revistas.....	56
Publicaciones en congresos.....	62
Tesis doctorales.....	64
Publicaciones en libros.....	65
Trabajos Finales de Grado.....	66
<b>5. Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión.....</b>	<b>69</b>
Convenios de colaboración.....	70
Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC.....	72
Semana de la Ciencia.....	72
Noche Europea de los Investigadores.....	73
Becas de formación del convenio COMPUTAEX - UEx.....	74
Jornadas Nacionales de Investigación en Ciberseguridad (JNIC).....	76
Visita de Pedro Duque, Ministro de Ciencia e Innovación.....	76
Conferencia de usuarios de la Red Española de Supercomputación.....	77
Jornada de presentación del proyecto MiPYME Digital.....	77
Jornada de preselección de empresas del proyecto MiPYME Digital.....	78
Hacia la digitalización de las mipymes: casos de éxito.....	78
Presentación de resultados del proyecto MiPYME Digital.....	79
Portal web.....	80
Redes sociales.....	82
Difusión y divulgación.....	82
CénitS-COMPUTAEX en los medios.....	83
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos.....	84
<b>6. CénitS-CPD.....</b>	<b>87</b>
CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III.....	88
Consumo de recursos.....	95
Usuarios.....	97
Software.....	98
<b>7. Proyectos concluidos.....</b>	<b>101</b>



**2021**

***“Because it’s there”***

(Respuesta atribuida al escalador George Herbert Leigh Mallory en 1923 cuando un periodista le preguntó por qué intentaba hacer cima por tercera vez en el Everest)

2021 ha sido sin duda el más intenso de los trece años de la trayectoria del CénitS. Intensidad desde el punto de vista organizativo, técnico, investigador y administrativo. A la complejidad de la gestión de personal motivada por la COVID se unió la construcción del nuevo centro de proceso de datos CénitS-CPD y la confirmación de financiación de un buen número de proyectos. Recursos humanos, infraestructuras técnicas y proyectos son, precisamente, los tres aspectos fundamentales de la gestión de un centro tecnológico de investigación como CénitS.

En este ejercicio hemos podido concluir un proyecto en el que llevábamos trabajando desde los orígenes de la Fundación COMPUTAEX. Contar con un centro de proceso de datos con la adecuada dotación es un requerimiento imprescindible para alcanzar la excelencia en los servicios ofrecidos y en los resultados esperados. Dado el reconocimiento como ICTS (Infraestructura Científica y Técnica Singular) por el Ministerio de Ciencia e Innovación, lo ideal hubiera sido contar con un edificio propio de la Fundación COMPUTAEX, para gestionar adecuadamente el CénitS-CPD. No obstante, se ha logrado tener operativa la infraestructura y a pleno rendimiento desde mediados de 2021. Se trata ya del cuarto datacenter que diseñamos y explotamos desde que se creó el CénitS, y el actual se ha diseñado, construido y planificado con la previsión de poder escalar adecuadamente en torno a una década en espacio para equipos TI, en potencia eléctrica y en capacidad de enfriamiento.

Las principales características del nuevo CénitS-CPD son las siguientes:

- Sala IT de 60 m<sup>2</sup> útiles para:
  - 22 racks estándares.
  - 3 CRAHs.
  - 2 cuadros eléctricos redundantes.
- Salas técnicas:
  - 61 m<sup>2</sup> de sala de grupos electrógenos con un grupo de 400 kVA.
  - 27 m<sup>2</sup> de sala técnica con UPS de 200 kW; trafo de aislamiento galvánico de 400 kVA; CRAHs redundantes; cuadro BMS y baterías.
  - 101 m<sup>2</sup> de pasillo expositivo.
- Consumo actual de 200 kWit y 400 kVA totales. Preparado para consumo de 400 kWit y 800 kVA totales. Escalable a Tier III.
- Capacidad de enfriamiento: 300 kW frigoríficos totales N+1. Preparado para 500kW frigoríficos.
- PUE teórico medio/ponderado con simulación de carga al 100 %: 1,21.

Hemos diseñado un CPD para ser mostrado y que sirva para estudiar y explicar la complejidad de este tipo de instalaciones. También se ha reservado un espacio expositivo que sirva para mostrar la trayectoria del CénitS a las más de 500 visitas anuales recibidas en media los últimos años y que esperamos aumenten sustancialmente en el futuro.

El CPD acoge toda la infraestructura de cómputo y almacenamiento que puede resumirse en los siguientes datos para entender la potencialidad con que cuenta actualmente el CénitS:

- 3 supercomputadores activos.
- 3.696 cores HPC + 40.960 CUDA cores.
- 12,1 TB memoria RAM.
- 93 Tflops HPC + 120 Tflops gráficas.
- Red Infiniband EDR 100 Gbps.
- Almacenamiento 862 TB RAW.

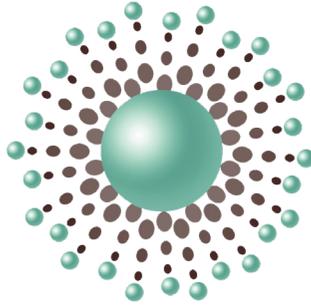
Los últimos años se han mantenido en desarrollo una media de quince proyectos anuales con diferentes fuentes de financiación (Plan regional, Plan nacional, H2020, Interreg, convenios, etc). En 2021 han destacado los siguientes proyectos por su importancia técnica y económica:

- Quantum ENIA (Estrategia Nacional de Inteligencia Artificial): creación de un ecosistema de computación cuántica para la inteligencia artificial (IA). Concesión directa Real Decreto 936/2021. Entidad financiadora: Ministerio de Asuntos Económicos y Transformación Digital (Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia). Financiación total proyecto: 22.000.000 €
- Supercomputador LUSITANIA IV. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (Unión Europea NextGenerationEU, Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia). Financiación total proyecto: 658.608,34 €
- Biotecnología aplicada a la salud. Concesión directa Real Decreto 991/2021. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (Planes Complementarios de I+D+I con Comunidades autónomas del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia). Financiación total Extremadura: 2.494.500 €.
- CénitS-CPD: Resilient datacenter. Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (Unión Europea NextGeneration EU). Financiación total proyecto: 200.000 €.
- National Competence Centres in the Framework of EuroHPC- EuroCC. Entidad financiadora: H2020, European High-Performance Computing Joint Undertakin. Referencia: Grant Agreement number: 951732 — EUROCC — H2020-JTI-EuroHPC-2019-2. Financiación total proyecto: 27.942.672 €.
- CONECTA\_PYME 4.0: La Transformación Digital Como Estrategia de Gestión del Cambio Hacia la PYME Conectada en la Euroregión EUROACE. Entidad financiadora: INTERREG V A España-Portugal (POCTEP). Financiación total proyecto: 966.435,69 €.

La cuenta de resultados del ejercicio económico refleja una economía saneada de la Fundación con un Activo total de 3.403.169 €, donde los Gastos de personal son la partida más importante (418.604 €). La Amortización del inmovilizado (231.182 €) tiene un destacable efecto sobre las cuentas anuales, dadas las valiosas inversiones que deben hacerse en un centro como CénitS, con periodos de amortización amoldados al rápido ritmo de obsolescencia de sus equipos informáticos.

Cerramos así un ejercicio intenso, dinámico y lleno de satisfacciones para el mejor equipo humano de la Fundación que tiene ante sí un esperanzador horizonte.

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

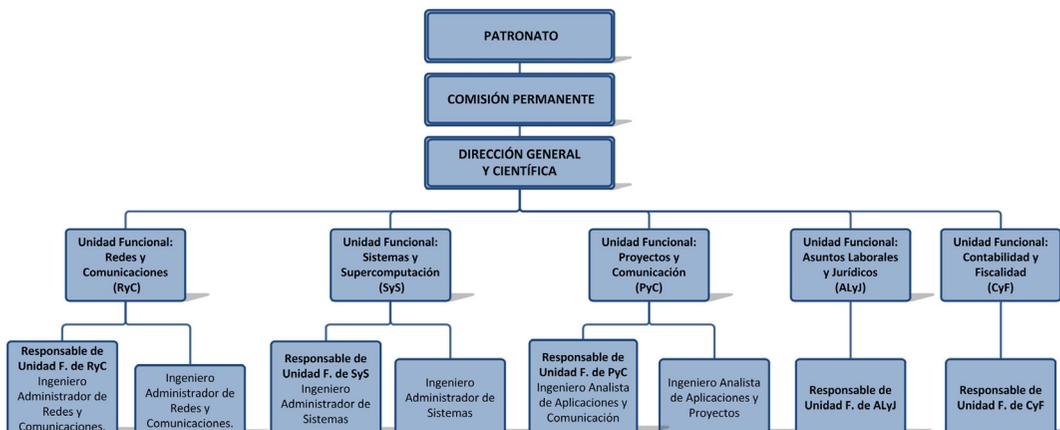
PATRONATO
<b>D. RAFAEL ESPAÑA SANTAMARÍA</b> <b>Presidente de la Fundación COMPUTAEX</b> Ilmo. Sr. Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital
<b>D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ</b> <b>Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX</b> Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología, Innovación 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

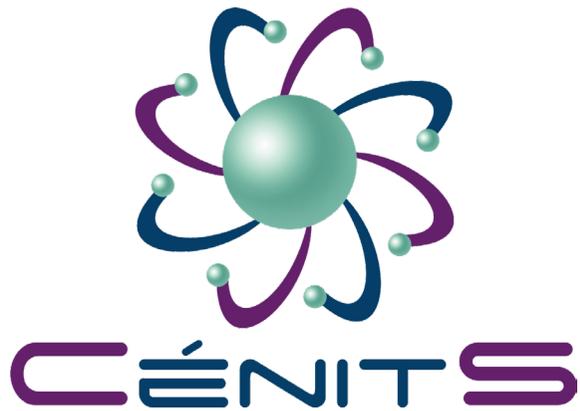
DIRECCIÓN GENERAL
<b>D. JOSÉ LUIS GONZÁLEZ SÁNCHEZ</b> Sr. Director General de la Fundación COMPUTAEX Secretario del Patronato

COMISIÓN PERMANENTE
<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

## Equipo CénitS 2021

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



**Felipe Lemus**  
Responsable de la U.F.  
de redes y comunicaciones



**Jesús Calle**  
Responsable de la U.F.  
de sistemas y supercomputación



**Javier Corral**  
Responsable de la U.F.  
de proyectos y comunicación



**Blanca Pérez**  
Responsable de contabilidad  
y fiscalidad



**Julio Mañas**  
Responsable de personal  
y asuntos jurídicos



**Miguel Mahillo**  
Administrador de Redes  
y Comunicaciones



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



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



**Julia Hernández**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Jara Marcos**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Enrique Moreno**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Antonio Parra**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Andrés Sánchez**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Javier Sánchez**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Laura Andrea Silva**  
Técnico de apoyo a la I+D+i



**Yolanda Velázquez**  
Auxiliar de administración



**Carlos Castañares**  
Becario de investigación



**Moisés Gaitán**  
Becario de investigación

## RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS) distribuida por toda la geografía española, consistente en la interconexión de 14 nodos 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

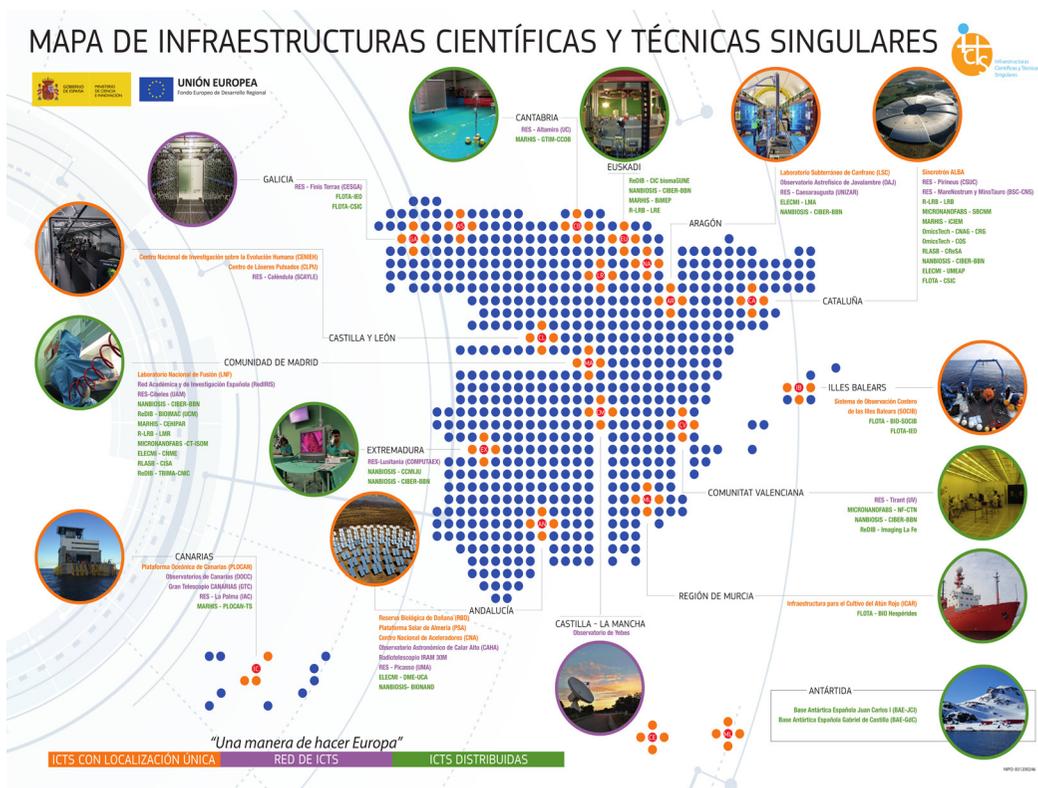


innovación en España. Para alcanzar este propósito, ofrece sus recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización 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 gestiona el mapa que recoge el estado del ecosistema de Inteligencia Artificial (IA) en España, mostrando información sobre 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 son reconocidos como nodos de este mapa, que supone una pieza clave para el diseño de la estrategia Nacional de Inteligencia Artificial. Esta estrategia persigue alinear las políticas nacionales destinadas a fomentar el desarrollo y el uso de la IA, aumentando la inversión, reforzando la excelencia en tecnologías y aplicaciones de IA y fortaleciendo la colaboración entre el sector público y privado. Este mapa es además un compromiso de los Estados Miembros con la UE con el objetivo de fortalecer la Inteligencia Artificial.

## Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)



El Ministerio de Ciencia e Innovación publicó en 2020 una nueva infografía que recoge de forma resumida y esquemática el Mapa de Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares de España, mostrando todas las infraestructuras punteras de I+D+i 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.

En noviembre de 2018, el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación aprobó este mapa, reconociendo a CénitS y 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). Cabe destacar asimismo que el actual Mapa está integrado por 29 ICTS que aglutinan un total de 62 instalaciones distribuidas por todo el territorio nacional.

El objetivo de las mismas 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, entendiendo 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.

El reconocimiento de CénitS-COMPUTAEX en este mapa refleja además el compromiso con la I+D+i que tanto la Junta de Extremadura como la Fundación y su Centro mantienen desde su creación en el año 2009.



## Agradecimientos

2021 ha sido un año muy intenso para el personal de CénitS. Los logros y satisfacciones que recoge esta memoria de actividades no hubieran sido posibles sin la coordinación de nuestro equipo con el personal 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.
- 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 PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR CénitS**

**Durante 2021, el equipo de CénitS ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, aportando soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.**

## EuroCC



La computación de alto rendimiento (HPC, High-Performance Computing), como herramienta clave para la ciencia y la industria, ha crecido hasta convertirse en una tecnología madura que da soporte a muchos de los sectores Europeos de mayor relevancia. En diversos sectores de la economía europea, como la ingeniería, la sanidad, el clima y la energía, el uso del diseño asistido por ordenador unido a la modelización y la simulación

sigue creciendo rápidamente. Las aplicaciones informáticas utilizadas en estos sectores impulsan la innovación. En muchos ámbitos del mundo académico, de la industria y de la administración pública, el uso de la modelización y la simulación iterativas -incluyendo la gestión, el análisis y la visualización de datos- es cada vez más importante. HPC, por sí sola o en combinación con HPDA e IA, proporciona los medios para abordar no sólo problemas grandes y complejos, sino también para ampliar el uso y la adopción de estas tecnologías en el mundo académico, la administración pública y la industria. Por tanto, es necesario establecer una cooperación simbiótica, en la que las partes interesadas en las infraestructuras, los servicios y los conocimientos técnicos de HPC puedan mejorar su cartera de servicios en función de las necesidades de los clientes y, de este modo, ayudar a los usuarios finales con la máxima eficiencia en sus respectivos ámbitos. Esta cooperación es llevada a cabo a través del proyecto EuroCC



y con la Acción de Coordinación y Soporte (CSA) CASTIEL. Con respecto al proyecto, los países participantes tienen la tarea de establecer un único Centro Nacional de Competencia (NCC) en el área de la computación de alto rendimiento en sus respectivos países. CASTIEL lleva a cabo actividades de creación de redes transeuropeas entre los NCC. Hace hincapié en la formación, la interacción y la cooperación industrial, el desarrollo empresarial y la concienciación sobre las tecnologías y los conocimientos relacionados con HPC. Como centro de intercambio de información y formación, CASTIEL promueve la creación de redes entre los NCC y refuerza el intercambio de ideas mediante el desarrollo de mejores prácticas. La identificación de sinergias, retos y posibles soluciones se lleva a cabo mediante la estrecha colaboración de los NCC a nivel europeo.

## ENTIDADES PARTICIPANTES



En EuroCC participan entidades de 33 países y estados asociados. El NCC español está compuesto por: BSC (Barcelona Supercomputing Center), BIFI-UNIZAR (Instituto de Biocomputación y Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza), CénitS-COMPUTAEX, CESGA (Centro de Supercomputación de Galicia), CSUC (Consorti de Serveis Universitaris de Catalunya), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), SCAYLE (Supercomputación de Castilla y León) y UNICAN (Universidad de Cantabria).

## OBJETIVOS

El objetivo principal del proyecto es implantar eficientemente una red de centros nacionales de competencia en Europa. Cada NCC será capaz de proporcionar un amplio abanico de servicios en materia de Supercomputación, Big Data e Inteligencia Artificial adaptados a las necesidades específicas de la industria (especialmente pymes), la administración pública y el mundo académico en su respectivo país. Mediante esta red de NCC interconectados, se aprovechan las ventajas, experiencia y los recursos disponibles en Europa en estas tres materias para la coordinación de iniciativas a nivel nacional para la promoción de estas tecnologías. Este objetivo se desglosa en los siguientes:

- La orquestación de organizaciones, servicios y actividades de formación ya existentes en la nación respectiva.
- El desarrollo de actividades de apoyo mejoradas y nuevas.
- Un modelo de negocio claramente definido para la interacción con los diferentes grupos de clientes potenciales.
- Promoción y sensibilización a nivel nacional e internacional.
- Maximización de las sinergias (intercambio de mejores prácticas y apoyo) con otras naciones europeas.

## **METODOLOGÍA**

---

La metodología de EuroCC se enfoca en que cada NCC realice un paquete de trabajo (WP, Work Package) independiente con las siguientes tareas:

- Gestión.
- Formación y desarrollo de competencias.
- Transmisión de tecnología y desarrollo empresarial.
- Colaboración con la industria.
- Asignación de competencias técnicas en materia de HPC/Big Data/IA (en el estado correspondiente).
- Facilitación del acceso a científicos, técnicos expertos y grupos de investigación.
- Sensibilización y colaboración.

## **OBJETIVOS ALCANZADOS**

---

Principalmente se están desarrollando las siguientes tareas:

- Establecer herramientas de gestión para coordinar el progreso del proyecto, en especial, el plan de gestión y la hoja de ruta del NCC.
- Obtener una visión general de las competencias existentes en HPC, Big Data e IA en España e implementar y mantener un mapa de competencias, apoyando a las entidades interesadas en aplicar estas tecnologías y apoyándose en los respectivos expertos e instituciones. Se utiliza una combinación de rastreo automático de publicaciones, proyectos y otras fuentes de Internet con la supervisión y refinamiento humano para identificar las entidades que trabajan en cada campo.
- Proporcionar acceso y asesoramiento experto en HPC/Big data/AI a los usuarios del sector público español, las universidades y la industria. Para ello se han identificado herramientas que puedan aportar beneficios significativos a las entidades destinatarias, se imparten conferencias y talleres prácticos sobre HPC/Big data/AI y servicios de consultoría.
- Además se ha trabajado en la definición de la hoja de ruta del proyecto.

## **FUENTES DE FINANCIACIÓN**

---

El proyecto EuroCC está financiado en un 50% por la Empresa Común Europea de Informática de Alto Rendimiento (European High-Performance Computing Joint Undertaking- EuroHPC-JU) en virtud del acuerdo de subvención No 951732. La EuroHPC-JU recibe apoyo del programa de investigación e innovación Horizonte 2020 (H2020).



**EuroHPC**  
Joint Undertaking

## CultivData



En los últimos años, Extremadura 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. No obstante, el desarrollo del sector agropecuario y la adopción de nuevas técnicas, comparado con otras áreas, se encuentra retrasado y avanza lentamente. Este hecho, unido al futuro reto de 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. Por tanto, 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

CénitS-COMPUTAEX.

### OBJETIVOS

El objetivo general está centrado en el análisis, diseño y pilotaje de un prototipo de plataforma informática para el “cultivo” de datos abiertos y públicos, aspirando a la excelencia en el sector agrario extremeño. La plataforma capta datos de iversas fuentes y formatos para aplicar técnicas de Big Data con el fin de crear modelos de datos que permitan obtener conocimiento que pueda resultar de utilidad para el 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. CultivData se ha orientado específicamente hacia el sector de la fruta de hueso, dada su importancia en el ámbito agropecuario en Extremadura. Las lecciones aprendidas podrán ser extrapoladas y aplicadas a otros sectores de la industria agropecuaria.

### METODOLOGÍA



La metodología 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 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 que los supercomputadores LUSITANIA 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.

## RESULTADOS



Se han obtenido cuatro resultados principalmente. Por un lado, se han identificado un gran número de fuentes de datos abiertos que pueden ser relevantes para el sector agroalimentario (86) y, además, se ha realizado un análisis de tales fuentes que ha permitido explorar los datos contenidos e incluso valorar las posibilidades de su reutilización. Este análisis ha sido de gran valor para el proyecto ya que, aunque algunas de las fuentes no permiten fácilmente la reutilización de sus datos pueden resultar especialmente útiles en análisis más

específicos. Por otro lado, en el proyecto se ha diseñado, desarrollado y probado un prototipo de red de sensores agroclimáticos con un precio asequible y con un rendimiento aceptable. Los dispositivos pueden llegar a medir más de 10 variables agroclimáticas distintas y han presentado autonomías de varios meses. Además, permite nuevas actualizaciones y configuraciones en función de las necesidades específicas del usuario final. El resultado más importante es la propia plataforma CultivData, que permite a sus usuarios realizar consultas a organismos con fuentes de datos abiertos relevantes para el sector de una forma centralizada y, además, almacenar y visualizar datos de explotaciones sensorizadas para poder realizar un mejor seguimiento de las mismas desde un punto de vista agroclimático. Finalmente, se han realizado análisis exploratorios de las fuentes de datos abiertos que se consideraron más relevantes e interesantes para los fines del proyecto. Estos análisis han permitido entender con profundidad los datos contenidos en las fuentes y las posibilidades que representan para el propio sector agrario regional. Como consecuencia de estos análisis, se realizaron otros análisis preliminares destinados a comprobar la utilidad real de los datos abiertos disponibles, arrojando resultados sumamente interesantes.

Además, el proyecto CultivData ha tenido otros resultados complementarios que han repercutido en un beneficio para el centro CénitS: el incremento del *know-how* del equipo en tecnologías IoT que ha derivado en otros proyectos, presentaciones y varias publicaciones científicas de impacto; el conocimiento adquirido en materia de extracción y análisis de imágenes hiperespectrales de satélite o el desarrollo de cuatro trabajos fin de grado universitarios en el marco del proyecto.

Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional

“Una manera de hacer Europa”

**JUNTA DE EXTREMADURA**  
Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital  
Dirección General de Agenda Digital

Unión Europea

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



### CONECTA PYME

El avance de las TIC (tecnologías de la información y comunicación) es imparable. Cada vez tenemos más presentes términos como Big Data, Cloud Computing, Blockchain o Internet de las Cosas (IoT), tecnologías disruptivas que suponen importantes cambios en las estrategias de negocio de las organizaciones y cambios sustanciales en el desarrollo de sus actividades, ofreciendo la posibilidad de generar un valor añadido en los procesos productivos, y en los productos y servicios de las empresas que las incluyen en sus estrategias.

La adaptación de las empresas a este mundo digital e hiperconectado en el que nos encontramos en la actualidad, se hace necesaria para la mejora en la eficiencia y competitividad de éstas. Este proceso de adaptación a un nuevo escenario digital y a nuevos procedimientos de trabajo es lo que conocemos por transformación digital.

La transformación digital va más allá de la implementación de estas nuevas tecnologías en los procesos productivos de las empresas, implica cambios en todas las áreas de las organizaciones y en la cultura empresarial. El modelo de negocio, las personas, los procesos, las infraestructuras, los productos y servicios, son susceptibles de los cambios que pueda acometer la transformación digital para la adaptación de éstos a las nuevas necesidades y a la sociedad digital.

Para abordar esta transformación digital en el territorio EUROACE, que comprende los territorios de Extremadura, Centro y Alentejo, se crea Conecta Pyme 4.0, proyecto transfronterizo que tiene como finalidad la de mejorar la competitividad de las empresas de la eurorregión incorporando conocimiento y tecnologías para digitalizar procesos e incrementar el valor añadido de los productos y servicios de las pequeñas y medianas empresas de la eurorregión.

#### 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 del proyecto es el de mejorar la competitividad 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. Los objetivos se centran en:

- Mejorar las capacidades digitales de las personas dentro de las organizaciones, mejorando la asimilación de nuevas incorporaciones tecnológicas en un proceso de transformación digital.
- Mejorar los procesos de trabajo en la empresa, permitiendo una total conectividad de todas las fases de la misma, obtención de datos en tiempo real y eliminación del papel y las tareas manuales.

- Se contribuirá a la consecución del Objetivo específico 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

## METODOLOGÍA

Para el desarrollo de los objetivos, el proyecto se ha distribuido en 4 actividades principales:

- Actividad 1: La organización y las personas como prioridad en el proceso de transformación digital de las pymes en el territorio EUROACE.
- Actividad 2: Digitalización de los procesos productivos de las pymes.
- Actividad 3: Incorporación y mejora del diseño de producto para la pyme conectada.
- Actividad 4: Fomento de la cooperación empresarial a través de la creación de entornos colaborativos.

## OBJETIVOS ALCANZADOS

Actualmente estamos trabajando principalmente en el desarrollo y ejecución de la actividad 2: “Digitalización de los procesos productivos de las Pymes”, con la que se pretende ofrecer a las empresas un servicio con el que favorecer la transformación digital de éstas, aplicando nuevas tecnologías y generando el conocimiento necesario que permitan a las organizaciones generar valor añadido en sus productos y servicios además de permitir encontrar eficiencias en su cadena de valor y operativa diaria. En el transcurso de la actividad, desde CénitS-COMPUTAEX y como fase inicial de la actividad, se ha desarrollado una herramienta para la evaluación y el diagnóstico de la madurez digital de las empresas de la eurorregión que completan un cuestionario de evaluación a través de la aplicación desarrollada al uso. Una vez obtenidos los resultados de madurez a través de un informe de las empresas registradas, se ha realizado una selección de empresas beneficiarias de la actividad, a las que se les están realizando diagnósticos personalizados y planes de acción en materia de digitalización, con el fin de mejorar la eficiencia de las empresas participantes mediante la adquisición de nuevas competencias digitales y la implementación de las nuevas tecnologías emergentes.



## FUENTES DE FINANCIACIÓN

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”.

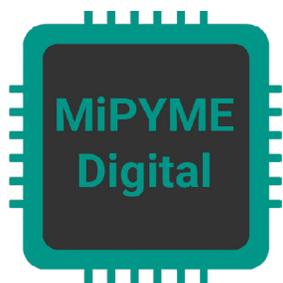


**Interreg**  
España - Portugal



Fondo Europeo de Desarrollo Regional  
Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional

## MiPYME (Micro, Pequeña y Mediana Empresa) Digital



Las tecnologías de la información y la comunicación han crecido exponencialmente en los últimos años, aumentando significativamente su presencia en la industria y en las organizaciones que desean avanzar y aumentar la productividad y la eficiencia de sus negocios. La implementación y el uso de estas tecnologías resultan de vital importancia para añadir valor a los procesos de las empresas, los cuáles deben seguir adaptándose al escenario digital e hiperconectado de la sociedad actual.

La transformación digital se extiende más allá de la implementación de estas tecnologías en las empresas y sus procesos productivos, implicando cambios en todas las áreas de las organizaciones y en su cultura empresarial. La transformación digital es fundamental en estos momentos para que las organizaciones puedan adaptarse al futuro. El modelo de negocio, las personas, los procesos, las infraestructuras, los productos y los servicios, son susceptibles de los cambios que pueda acometer la transformación digital para la adaptación de éstos, tanto a las nuevas necesidades, como a la sociedad digital.

El proyecto MiPYME (Micros, Pequeñas y Medianas Empresas) Digital ha propuesto el análisis, el diagnóstico tecnológico y la provisión de servicios de consultoría a las micros (1-9 trabajadores), pequeñas (10-49 trabajadores) y medianas empresas (50-249 trabajadores) extremeñas para enfrentarse a la digitalización de sus procesos de negocio. La transición ecológica y transformación digital es un reto al que hemos de enfrentarnos como sociedad y las empresas han de hacerlo con decisión. Sin embargo, se ha detectado que en muchos casos la madurez digital de las organizaciones más pequeñas no es la apropiada y precisan del adecuado apoyo tecnológico para adoptar nuevos métodos que las hagan más competitivas.

MiPYME Digital ha ofrecido así un servicio de consultoría en materia de digitalización y transformación digital a empresas extremeñas, principalmente englobadas en los sectores estratégicos definidos en la Estrategia de Investigación e Innovación para la Especialización Inteligente RIS3, aportando soluciones y desarrollando planes de acción que contribuyan a la mejora en la productividad y eficiencia de sus procesos, mediante el fomento de la aplicación de tecnologías disruptivas. Para obtener estos propósitos CénitS ha puesto a disposición de las empresas participantes las siguientes tecnologías, fundamentales para convertir en realidad la Industria 4.0 y alcanzar los adecuados grados de madurez digital: alojamiento web (hosting y housing), Big Data, Internet de las cosas (IoT, Internet of Things), computación en la nube (cloud computing), ciberseguridad, computación de alto rendimiento (HPC, High Performance Computing), inteligencia artificial, datos abiertos (open data) y análisis de datos de alto rendimiento (HPDA, High Performance Data Analytics).

### ENTIDADES PARTICIPANTES

CénitS-COMPUTAEX

### OBJETIVOS

Extremadura tiene gran potencial de avance en la transformación digital y en la mejora de las sinergias dentro de su tejido empresarial, siendo notable el esfuerzo que ha realizado la región en implantar medidas de este ámbito en distintos sectores, como por ejemplo el agroalimentario.

El objetivo general de MiPYME Digital ha perseguido que los actores involucrados en el tejido empresarial extremeño puedan tomar decisiones mejor informadas que den lugar a medidas que optimicen la calidad, productividad y comercialización de sus productos y negocios, en base a la mejora de sus actividades digitales y el uso de los servicios proporcionados por el sector TIC dentro de los objetivos específicos de la RIS3 de Extremadura 2021-2027.

Para ello se han realizado labores de consultoría especializada, que a su vez han tenido como objeto proporcionar una medida entendible de la actual situación de cada empresa en cuestión de madurez digital, identificando adecuadamente las posibles opciones de actualización y resolución de las debilidades y deficiencias detectadas, así como divulgando los conocimientos y prácticas que pueden resultar útiles para otros negocios.

## **METODOLOGÍA**

---

El trabajo desarrollado con cada una de las empresas que han participado en este proyecto ha seguido una metodología iterativa e incremental. Esto ha possibilitado que los objetivos hayan sido afinados en sucesivas iteraciones, permitiendo asimismo revisar y adaptar continuamente el desarrollo del proyecto hasta alcanzar el grado de satisfacción requerido. Estas entidades podrán decidir, de forma libre e individual, la implementación o no de las propuestas sugeridas en los planes de acción desarrollados por los ingenieros de CénitS. Las iteraciones han tenido distintas duraciones, considerando las siguientes fases principales:

- Fase de planificación: identificación de los objetivos concretos a perseguir y especificación detallada de cada tarea a realizar.
- Fase de diseño de estrategias para alcanzar cada objetivo en base a su especificación previa.
- Fase de revisión: análisis del grado de cumplimiento de los distintos objetivos.

## **OBJETIVOS ALCANZADOS**

---

El proyecto ha alcanzado los objetivos planteados en un principio, aportando estrategias, soluciones y medidas a nueve MiPYMEs para mejorar la calidad, productividad y comercialización de sus productos, así como su madurez digital y presencia en las redes. Estos objetivos se han logrado siguiendo las tres fases de la metodología para cada una de ellas, con diferentes iteraciones y duraciones para adaptarse a las distintas necesidades de las empresas.

## **FUENTES DE FINANCIACIÓN**

---

En el DOE n.º 137 de 19 de julio de 2021, se publicó el convenio por el que se formalizó la transferencia específica a favor de la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX) para la realización del proyecto “Desarrollo de Proyectos de Investigación en Supercomputación - Proyecto MiPYME Digital” en el ejercicio 2021.

MiPYME Digital ha sido aprobado por la Dirección General de Agenda Digital (Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital) de la Junta de Extremadura, en el marco del Programa 332A “Tecnologías de la Información y las Comunicaciones”, cofinanciado en un 80% por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

**Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional**

“Una manera de hacer Europa”



## Quantum Spain: creación de un ecosistema de computación cuántica para la Inteligencia Artificial



El proyecto Quantum Spain prevé la construcción e instalación del primer ordenador cuántico basado en tecnología europea. El objetivo estratégico del proyecto Quantum Spain, es crear un ecosistema sólido de computación cuántica en España. Involucra a 25 universidades y centros de infraestructuras y supercomputación, de 14 comunidades autónomas.

El ordenador cuántico se irá dotando progresivamente de chips de distintas generaciones y número de qubits. El qubit es la unidad básica de la computación cuántica y el proyecto Quantum España utilizará qubits basados en tecnología de circuitos superconductores. La construcción del hardware se realizará en colaboración con empresas especializadas en este sector emergente. La previsión es que el ordenador tenga un primer chip de dos qubits operativo a finales de 2022 e irá incorporando progresivamente nuevas versiones de chips, hasta llegar a los 20 qubits en 2025.

La prioridad de Quantum Spain, enmarcada en la Estrategia Nacional de Inteligencia Artificial (ENIA), es establecer un ecosistema de computación cuántica sólido en España, aprovechando y potenciando el talento de los investigadores locales expertos. Este objetivo se basa en cuatro pilares: la computadora cuántica, el desarrollo de algoritmos cuánticos útiles aplicables a problemas reales; la creación de un sistema de acceso remoto en la nube; y un programa de formación para aumentar las capacidades de los usuarios potenciales de la computación cuántica.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

Consortio Barcelona Supercomputing Center, Centro Nacional de Supercomputación (BSCCNS), Fundación Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), Universidad de Zaragoza, Universidad de Valencia, CénitS-COMPTUAEX, Consorcio Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC), Consorcio de Servicios Universitarios de Cataluña (CSUC), CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas), Navarra de Servicios y Tecnologías (NASERTIC), Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Málaga, Universidad de Cantabria.

### OBJETIVOS

La propuesta Quantum ENIA persigue tres objetivos:

- Crear un computador cuántico de altas prestaciones, a partir de una aproximación tecnológica de qubits basados en corrientes superconductoras.
- Crear un servicio de acceso remoto en la nube al procesador, para permitir a la industria y al sector público experimentar con los nuevos algoritmos cuánticos.
- Desarrollar librerías de algoritmos cuánticos útiles, aplicables a problemas reales, para usuarios finales tanto de empresas como de entidades públicas. Este software hará hincapié en el desarrollo de Quantum Machine Learning (QML).

La propuesta pretende crear un ecosistema cuántico competitivo, con implicaciones de medio y largo plazo en tecnologías de hardware deep tech.

El objetivo principal del proyecto es la puesta en marcha de la primera infraestructura de computación cuántica situada en el sur de Europa, que de acceso a las empresas y al sector público, con especial atención al desarrollo de QML

## **METODOLOGÍA**

---

En una fase inmediata, se desarrollarán los aspectos tecnológicos de esta infraestructura en colaboración con empresas de este sector, centros con competencias próximas y con los programas europeos de tecnología y computación cuántica como el EuroHPC Joint Undertaking.

En una segunda fase, debe ser incorporado el tejido industrial como usuario de computación cuántica. Desde este punto de vista, la infraestructura de computación cuántica debe preexistir a la invitación al uso por parte de los diferentes sectores productivos. Es importante notar que la computación cuántica tiene potenciales aplicaciones en IA, en química cuántica, en finanzas, en optimización de procesos de la cadena productiva, en criptografía y en cualquier problema de necesidades computacionales intensas. Sobre estos temas se desarrollarán los primeros casos de uso del proyecto. En particular, cabe destacar las aplicaciones que va a tener en el campo de la inteligencia artificial, donde se desarrollarán los primeros casos de uso.

Un segundo grupo de casos de uso se desarrollarán alrededor del campo de la criptografía y la ciberseguridad. El objetivo es desarrollar casos donde, algoritmos como el de Glover o el de Shor, permitan entender el impacto futuro sobre la seguridad de las comunicaciones, y de qué manera las empresas e instituciones tiene que proteger las mismas, entrando en lo que se conoce como la criptografía post-cuántica.

Finalmente, otro grupo de casos de uso se desarrollará alrededor del campo de la industria química y farmacéutica. El uso de los supercomputadores clásicos está muy extendido en estos sectores, porque permiten hacer simulaciones en temas como la modelización molecular, la creación y parametrización de nuevos materiales o el descubrimiento de nuevos catalizadores. La computación cuántica debería permitir acelerar algunos cálculos necesarios en estos procedimientos, lo que abre las puertas a grandes avances para las industrias de estos sectores.

A parte de estos primeros casos, se trabajará para desarrollar pilotos también en temas como las finanzas, donde la computación cuántica debería permitir acelerar metodologías como Monte Carlo, comúnmente aplicadas a problemas de optimización en finanzas o al análisis de riesgos, o la logística, donde el tradicional problema del viajante podrá ser resuelto a niveles nunca vistos a través de la computación cuántica, cuando exista un computador cuántico suficientemente potente.

## **FUENTES DE FINANCIACIÓN**

---

Proyecto cofinanciado mediante concesión directa de subvención, en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia, y regulada por el Real Decreto 936/2021, publicado en el BOE número 258 de 28 de octubre de 2021, por el que se regula la concesión directa de una subvención a varios centros de la Red Española de Supercomputación, para el desarrollo del proyecto Quantum ENIA, en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia.



**Financiado por  
la Unión Europea**  
NextGenerationEU



**Plan de Recuperación,  
Transformación y Resiliencia**

## CultivDat2: Desarrollo sostenible aplicando modelos predictivos al cultivo de datos agrarios

El presente proyecto propone una versión evolucionada y de mayor amplitud de CultivData, el cual es un proyecto que comenzó con anterioridad y cuyo objetivo principal está centrado en el análisis, diseño y pilotaje de un prototipo de plataforma para la recogida de datos provenientes de numerosas fuentes y formatos, con el fin de aplicar técnicas de Big Data para crear modelos de datos que permitiesen obtener conocimiento resultando útil en los grupos del sector de interés, el cual es el sector agroalimentario. Con este conocimiento, se permite tomar decisiones fundamentales para mejorar la calidad de los productos, ampliar la productividad de las explotaciones y aspirar a la eficiencia en la comercialización.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

---

Fundación COMPUTAEX-CénitS, y CASAT, sociedad agraria de transformación.

### OBJETIVOS

---

El objetivo principal de CultivDat2 propone mejorar y ampliar una solución tecnológica innovadora para la toma de decisiones en el sector agrario, aplicando técnicas de supercomputación (HPC, High Performance Computing), IoT, Big Data e Inteligencia artificial, persiguiendo la eficiencia, eficacia, seguridad, fiabilidad y alta disponibilidad de grandes volúmenes de información. Ampliará un repositorio de información agraria Extremeña que permitirá implementar agricultura de precisión, predictiva y preventiva teniendo en mente los objetivos de desarrollo sostenible y la creación de nuevos modelos de negocio.

El objetivo general del proyecto se desglosa en un conjunto de objetivos específicos, cada uno de ellos con actividades concretas para llevar a cabo el proyecto con una temporalidad y metodología. De forma general, se estudiará nuevas fuentes de datos provenientes de: imágenes satelitales, composición del suelo de las explotaciones y características del agua de riego.

Estas fuentes de datos aportan a la plataforma un enriquecimiento de la información almacenada, procesada y analizada. Esto permite incorporar mayor cantidad de información y datos históricos, lo cual es el factor más importante para la capacidad predictiva.

Entre los objetivos definidos destacan también: el uso de imágenes satelitales, aumentar los conocimientos sobre la composición del suelo y agua de riego cuya función es mejorar la productividad de las explotaciones y calidad de los productos, estudio de la influencia que posee el



entorno en la prevalencia de epidemias, utilización de algoritmos de predicción de productividad y calidad utilizando IoT, IA, Machine Learning, Deep Learning y Big Data.

Del mismo modo, se persigue la aplicación de modelos predictivos para facilitar alguna de las propuestas de desarrollo sostenible como la reducción de hambre, reducción del consumo de agua y energía, mejora de la productividad con la disminución de residuos, etc. Por último, como prestación de servicios, se ofrece la posibilidad de realizar la consulta de ciertos datos de forma abierta, sin restricciones de derechos de autor, patentes u otros mecanismos de control, mediante Open Data.

Así, el proyecto CultivDat2 en el que, como continuidad del proyecto CultivData, construye un conjunto de innovaciones, servicios y propuestas que benefician a los sectores productivo agrario e investigador y a los consumidores y ciudadanos en suma.

## **METODOLOGÍA**

---

Actualmente se está obteniendo en el proyecto CultivData una metodología y un prototipo en el que las técnicas analíticas de Big Data son un requisito muy importante, debido a los volúmenes de datos y las variantes de formatos. La velocidad de respuesta y las simulaciones casi en tiempo real requieren de la potencia de procesamiento HPC (High Performance Computing) que el supercomputador LUSITANIA III puede aportar a este tipo de proyectos.

El proyecto se enriquece de modelos predictivos basados en técnicas computacionales y de inteligencia artificial garantizando la seguridad de la información y generando modelos matemáticos que ejecutados en el supercomputador LUSITANIA den respuesta a sus usuarios en el menor tiempo posible.

CultivDat2 es una convergencia de tecnologías puestas al servicio del sector agrario para producir de forma inteligente y sostenible, basándonos en la experiencia del pasado, el conocimiento del presente y usando la predictibilidad del futuro.

Respecto al procedimiento del análisis de los datos recogidos por los sensores, se utilizó el lenguaje de programación interpretado denominado Python haciendo uso del entorno Jupyter. Además, se emplean distintas librerías para el análisis estadístico de los datos.

## **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 (Resolución de 6 de septiembre de 2019).

Proyecto de investigación encuadrado en la línea estratégica del sector Agroalimentario, 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).



**JUNTA DE EXTREMADURA**  
Consejería de Educación y Empleo



UNIÓN EUROPEA  
Fondo Social Europeo  
Iniciativa de Empleo Juvenil  
El FSE invierte en tu futuro

## **Prospéctic2: Aplicación de Inteligencia Artificial, Big Open Data y Supercomputación al Estudio de la Herencia Epigenética en Enfermedades Oncológicas**

Entendiendo que la prospectiva es el conjunto de análisis y estudios realizados con el fin de explorar o predecir el futuro en una determinada materia, el objetivo general del proyecto Prospéctic2 es aplicar las tecnologías informáticas con carácter prospectivo para enfrentarse a la influencia que las condiciones del entorno tienen en la aparición y prevalencia de ciertas enfermedades oncológicas, y el papel que desempeña el sistema inmunológico.

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

En todo caso es sabido que existen factores de entorno que juegan un papel fundamental para la aparición de algunas enfermedades oncológicas y es nuestra intención aplicar Big data, Machine Learning y Open data entre otras tecnologías informáticas, a la información existente para analizarla y estudiarla con la intención de explorar las posibilidades de predicción de ciertas enfermedades en función de los hábitos, costumbres, alimentación, zonas geográficas, nivel cultural, nivel económico, herencia genética, etc.

Desde el punto de vista del consejo genético en oncología no existe una metodología estándar cuando se trata de encontrar y analizar información (lo que depende de la especialidad de quien realiza la consulta de consejo genético y de la enfermedad estudiada) y esto representa un problema para analizar la información y llegar a resultados concluyentes. Ello supone una dificultad a la hora de compartir información por parte de los especialistas y, sobre todo, cuando se trata de comparar resultados. Al final, el hecho de que existan problemas en la accesibilidad de la información implica que el proceso de consejo genético no sea tan eficaz como debería ser.

Por ello los paradigmas Cloud computing, Big Data y Open Data abren un esperanzador horizonte para la medicina de precisión y también para nuevos modelos de negocio que es necesario explorar porque ello redundará en la salud de los ciudadanos y no sólo en la economía.

La incorporación de estos nuevos mecanismos permitiría llevar al servicio asistencial clínico de forma masiva terapias mucho más efectivas a la vez que se generarían los necesarios repositorios de información que podrían ser usados para aplicar técnicas de Big Data que, a través de servicios Cloud, acerquen el potencial que toda la información almacenada puede poner a disposición de los oncólogos, pacientes, laboratorios, investigadores y empresas de prestación de servicios que, a través de Open Data, pueden encontrar en este proyecto una clara aplicación de modelo de economía circular de forma que, la actual carencia de información valiosa deje de ser un inconveniente en poco tiempo

### **ENTIDADES PARTICIPANTES**

---

Fundación COMPUTAEX-CénitS, y FOTEX.



## OBJETIVOS

El objetivo general del proyecto se desglosará en un conjunto de objetivos específicos, cada uno de ellos con actividades concretas para llevar a cabo el proyecto con una temporalidad y metodología claramente determinadas.

Se proponen los siguientes objetivos específicos:

- Estudio previo sobre la recogida y análisis de información acerca de la influencia que tienen las condiciones del entorno en la aparición y prevalencia de ciertas enfermedades oncológicas y los distintos condicionantes: hábitos, costumbres, alimentación, zonas geográficas, nivel cultural, nivel económico y herencia genética, entre otros.
- Procesamiento de datos: estudio de la utilización de algoritmos de predicción pilotos para la predicción de ciertas enfermedades en función de los condicionantes citados anteriormente, mediante la utilización de Machine Learning, Big Data y HPC.
- Análítica inicial de datos y viabilidad de predicción sobre una enfermedad escogida tras el análisis previo de los datos obtenidos.
- Evaluación de prestación de servicios, así como de la posibilidad de ofrecer ciertos datos de forma abierta, sin restricciones de derechos de autor, patentes u otros mecanismos de control, mediante Open Data.

## 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 (Resolución de 6 de septiembre de 2019).

Proyecto de investigación 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).

## **Anemoi: Modelo Predictivo de Productividad y Operatividad de Parques Eólicos Aplicando Análisis de Datos y Aprendizaje Automático**

El objetivo general del proyecto es analizar los datos extraídos del parque eólico del Merengue que la empresa NATURGY tiene en explotación en Plasencia. La información se extraerá de los datos que genera el funcionamiento de los aerogeneradores para identificar y analizar todas las variables que pueden influir en su vida útil, así como en las causas de sus averías. Además, se correlacionarán las variables que influyen en la productividad de los aerogeneradores. De este modo, se persigue analizar, modelar e identificar patrones de comportamiento en el funcionamiento de los aerogeneradores que puedan usarse para la predictibilidad del óptimo funcionamiento y de la productividad que permita la reducción de incidencias de funcionamiento en el parque y que favorezca el aumento de vida útil de los equipos.

Se ha obtenido del proyecto previo una metodología y un prototipo en el que las técnicas analíticas de Big Data son un importante requerimiento, dados los volúmenes de datos y variantes de formatos. La velocidad de respuesta y las simulaciones casi en tiempo real requieren de la potencia de procesamiento HPC (High Performance Computing) que el supercomputador LUSITANIA III puede aportar a este tipo de proyectos.

Anemoi se propone como nueva versión evolucionada y ampliada que se enriquecerá con la propuesta de modelos predictivos basados en técnicas computacionales y de inteligencia artificial cuidando la seguridad de la información y generando modelos matemáticos que ejecutados en el supercomputador LUSITANIA III den respuesta en el menor tiempo posible en simulaciones de parques eólicos. Anemoi incorporará nuevas fuentes de datos provenientes de artículos científicos, de previsiones climáticas, de otros parques, de fuentes públicas de datos, etc, que aporten un enriquecimiento de la información almacenada, procesada y analizada. Esto permitirá incorporar mayor cantidad de información y datos históricos, que es lo más importante para que la capacidad predictiva, a través de la ciencia de datos, pueda dar un paso más en la estadística y desarrollar modelos predictivos que faciliten la toma de decisiones y la aplicación de machine learning.

### **ENTIDADES PARTICIPANTES**

---

Fundación COMPUTAEX-CénitS, y NATURGY Iberia S.A.

### **OBJETIVOS**

---

Anemoi propone mejorar y ampliar una solución tecnológica innovadora para la toma de decisiones en el sector eólico, aplicando técnicas de supercomputación (HPC, High Performance Computing), IoT, Big Data e Inteligencia artificial, persiguiendo mediante la modelización, simulación y optimización mejorar la productividad y operatividad de los parques eólicos. El objetivo general del proyecto se desglosará en un conjunto de objetivos específicos, cada uno de ellos con actividades concretas para llevar a cabo el proyecto con una temporalidad y metodología expuestas más adelante.

Se proponen los siguientes objetivos específicos:

- Sensorización y captación de nuevas variables.
- Uso de datos climáticos para la predictibilidad de energía.
- Conocimiento de fuentes abiertas de datos.
- Análisis de datos históricos de parques eólicos previos.

- Estudio previo sobre la recogida y análisis de datos acerca de la influencia que tienen las condiciones del entorno en la producción de averías y en la productividad.
- Procesamiento de datos: estudio de la utilización de algoritmos de predicción de productividad y operatividad en función de los condicionantes citados anteriormente, mediante la utilización de IoT, inteligencia artificial, machine learning, deep learning y big data.
- Analítica inicial de datos y viabilidad de predicción tras el análisis previo de los datos obtenidos.
- Simulaciones HPC para modelar un parque eólico. Implementación de software para representar, simular y analizar el comportamiento del parque.
- Aplicación de los modelos predictivos para anticiparse a las averías y optimizar la productividad y alta disponibilidad de los aerogeneradores.
- Influencias de la temperatura en los componentes mecánicos de los aerogeneradores.
- Efecto del espacio de lubricación del eje del aerogenerador.
- Evaluación de prestación de servicios, así como de la posibilidad de ofrecer ciertos datos de forma abierta mediante Open Data.

## METODOLOGÍA

---

El desarrollo del proyecto está basado en una metodología iterativa e incremental, de forma que los objetivos del mismo son abordados y refinados en sucesivas iteraciones, que permiten retroalimentar constantemente el desarrollo del proyecto. Esto favorece los reajustes en la estrategia de planificación del mismo en base a los resultados parciales que se van obteniendo. La duración de las iteraciones ha sido fijada en un mes, contando cada una con las siguientes fases:

- Fase de planificación: al comienzo de cada iteración se determinan los objetivos a acometer, obteniendo como resultado de esta fase una especificación detallada de los mismos.
- Fase de diseño: definición de la estrategia a partir de la especificación previa de los objetivos.
- Fase de desarrollo: la estrategia diseñada es ejecutada durante esta fase.
- Fase de revisión: en la cual se realiza un análisis sobre el grado de cumplimiento de los distintos objetivos, determinando si estos han sido alcanzados de forma satisfactoria o por contra, deben volver a ser afrontados en futuras iteraciones. Además, se evalúa el estado del proyecto analizando los resultados parciales hasta el momento, dejando cerrada la iteración actual, para dar comienzo a la siguiente.

Además, la actividad de gestión del proyecto, cuyo objetivo es controlar el mismo, vigilando que los objetivos siguen siendo alcanzables, se mantiene activa durante toda la ejecución, de forma que se monitoriza y controla el desarrollo del mismo, se coordina la ejecución de las diferentes tareas y se proporciona un soporte de gestión necesario para su correcta ejecución.

## 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 (Resolución de 6 de septiembre de 2019). Proyecto de investigación 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 2021**



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

Número de empresas por sector en Extremadura



En 2017 se decidió ampliar la información relacionada con la formación TIC en la región incluyendo la formación profesional. La formación profesional está adquiriendo mayor protagonismo en los últimos años y la incorporación de la misma al estudio permite establecer una foto más precisa de los profesionales TIC que se forman cada año en la región.

COMPUTAEX considera que la información aportada por el proyecto es importante para Extremadura y, sobre todo, para el propio Sector TIC. Por ello, desde el año 2018 ha continuado la labor de recopilación y análisis de toda la información relevante para el Sector TIC regional. La novedad más significativa aportada durante el año 2019 fue la actualización de la documentación en castellano de la norma europea CEN Workshop Agreement CWA 16458-1:2018. Esta norma es de especial interés para el proyecto, ya que se trata de la segunda versión de la descripción de perfiles profesionales TIC europeos y en ella se presentan modificaciones a algunos de los 23 perfiles ya existentes (traducidos y analizados en el año 2016 en el seno de este proyecto) y se proponen siete nuevos perfiles relacionados, principalmente, con la proliferación de la analítica de datos y las metodologías ágiles de desarrollo. El trabajo realizado durante 2020 es de especial valor porque ha permitido establecer el impacto de la pandemia en el sector TIC.

#### ENTIDADES PARTICIPANTES

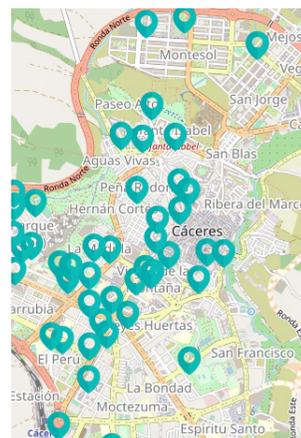
Equipo de CénitS-COMPUTAEX.

#### OBJETIVOS

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

#### METODOLOGÍA

En primer lugar, se procede a la actualización de la información del Sector TIC regional con información extraída de la propia plataforma del proyecto (OLISTIC) y del Instituto Nacional de Estadística (INE). De este modo se obtienen estadísticas económicas y de sociedades del sector en Extremadura. A continuación, se actualiza la información relativa a la formación TIC en la región y en España. Los datos son extraídos principalmente del Observatorio de Indicadores de la Universidad de Extremadura y de las Estadísticas de la Educación del Ministerio de Educación y Formación Profesional. Una vez recopilados los datos, se realiza un análisis de los datos económicos del Sector TIC en Extremadura mediante una comparativa económica con otros sectores productivos más tradicionales en la región. El análisis se completa con una comparativa del sector regional respecto al sector nacional y europeo.



#### RESULTADOS

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

## Hiperspectral IntelliHSI: Aprendizaje Automático para la Optimización de Plataformas de Supercomputación y soporte de Aplicaciones de Imagen Hiperspectral

Este proyecto persigue aplicar técnicas de aprendizaje automático para abordar los problemas clásicos de optimización HPC clúster/cloud planteados tanto en el software del sistema como en las aplicaciones. Este enfoque es altamente innovador y supone un cambio de perspectiva, desde el uso habitual de plataformas HPC para la ejecución de aplicaciones paralelas, incluido el entrenamiento de enormes estructuras de computación neuronal, hacia la consideración de técnicas de aprendizaje automático emergentes (redes profundas, aprendizaje por refuerzo, redes generativas antagónicas, autoencoders, etc) para abordar los problemas típicos de optimización en la computación HPC clúster/cloud.

Las técnicas clásicas para abordar los problemas de optimización del paralelismo aparecen en los campos de gestión de recursos, particionamiento de grafos, programación dinámica, heurísticas en problemas combinatorios, etc. A este respecto, nuevas técnicas del campo de la inteligencia artificial son prometedoras y justo ahora están produciendo sus primeros resultados en áreas como la planificación y despliegue de procesos y la creación de modelos analíticos de comunicaciones.

Hiperspectral IntelliHSI explora y desarrolla métodos, algoritmos y herramientas innovadores basados en el campo del aprendizaje automático como fundamento para la optimización de aplicaciones científicas en plataformas heterogéneas HPC clúster/cloud. Los resultados serán aplicados y evaluados en el campo del análisis e interpretación de imágenes hiperspectrales obtenidas por sensorización remota.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

Juan Antonio Rico Gallego, Antonio Plaza Miguel, Javier Plaza Miguel, Juan Carlos Díaz Martín, Juan Luis García Zapata y Carmen Jurado Calvo, de la Universidad de Extremadura; Javier Corral García, de CénitS-COMPUTAEX.

### OBJETIVOS

El objetivo general del proyecto es explorar y desarrollar métodos, algoritmos y herramientas basados en el aprendizaje automático como fundamento para la optimización de aplicaciones científicas en el campo del análisis e interpretación de imágenes hiperspectrales obtenidas por sensorización remota, desde el punto de vista de la eficiencia de procesamiento de datos y comunicaciones en plataformas heterogéneas HPC Cluster y Cloud.

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

Resolución de 9 de abril de 2020, (DOE núm. 87, de 7 de mayo) de la Secretaría General, por la que se aprueba la convocatoria de las ayudas destinadas a la realización de proyectos de investigación en los Centros Públicos de I+D+i de la Comunidad Autónoma de Extremadura, para la anualidad 2020. Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad. Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital.

Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional

“Una manera de hacer Europa”



## Mejora, implementación e implantación de plataforma de comunicación digital y e-learning en Moodle

El programa de Innovación y Talento (PIT), promovido por la Consejería de Educación y Empleo de la Junta de Extremadura, y destinado a la contratación de desempleados menores de 30 años, combina la formación de tecnólogos con las prácticas profesionales en empresas privadas. Su objetivo es facilitar la inserción laboral de jóvenes y potenciar las capacidades del talento de la región extremeña en distintas áreas estratégicas. La duración de este proyecto, de ámbito TIC, es de 12 meses, de los cuales, aproximadamente el 25% consiste en un proceso formativo impartido y tutorizado en CénitS, mientras que el 75% restante es destinado al desarrollo de trabajo efectivo. De este modo, la formación realizada en CénitS tiene por objeto la mejora y adquisición de competencias y capacidades, por parte del alumno, para el desempeño posterior de actividades como tecnólogo en la Fundación Magdalena Moriche, incluyendo además formación específica en competencias colaborativas.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación Magdalena Moriche (FMM) y CénitS-COMPUTAEX.

### OBJETIVOS

El proyecto considera los siguientes objetivos principales:

- Desarrollar e implementar de forma completa y exhaustiva la plataforma Campus Inteligencia Límite, diseñada en Moodle para proporcionar a educadores, administradores y estudiantes con discapacidad intelectual un sistema integrado, único, robusto y seguro para crear ambientes de aprendizaje personalizados.
- Implementar la plataforma de formación e-learning de Campus Inteligencia Límite para competencias profesionales destinada a trabajadores del sector.

El fin del proyecto es el de mejorar, implementar e implantar la plataforma de formación online “Campus Inteligencia Limite” destinada para la formación online de personas con discapacidad intelectual, cuya versión piloto previa fue desarrollada gracias a la aprobación por parte de la Consejería de Educación y Empleo de la correspondiente subvención destinada a la financiación del programa de Innovación y Talento en la convocatoria 2020. La implementación e implantación de la plataforma e-Learning se posibilitará la formación a distancia del colectivo de personas con inteligencia límite y discapacidad intelectual ligera, adaptando la formación presencial de habilidades personales y competencias profesionales al formato online. Esto va a permitir que más de 200 usuarios con inteligencia límite y discapacidad intelectual puedan mejorar sus competencias para acceder a un empleo.

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

Decreto 73/2021, de 23 de junio, por el que se aprueban las bases reguladoras de concesión de subvenciones destinadas a la financiación del programa de Innovación y Talento y su primera convocatoria (DOE n.º 126 de 2 de julio de 2021). Consejería de Educación y Empleo. Junta de Extremadura.

## Plan Complementario de Biotecnología aplicada a la Salud

El Plan Complementario de Biotecnología aplicada a la Salud es un programa orientado al desarrollo de herramientas para diagnóstico, pronóstico y terapias avanzadas o dirigidas en medicina personalizada. En la integración y adopción de tecnologías facilitadoras en la industria biotecnológica y de tecnologías médicas es donde radica el gran potencial de conseguir una medicina personalizada o de precisión (MP) que establezca herramientas para la prevención según su predisposición a determinadas enfermedades, sistemas para el diagnóstico precoz, y métodos para elegir la estrategia terapéutica que mejor se adapte a cada persona en cada circunstancia. Solamente así se conseguirá dar respuesta a los siguientes retos: el cáncer, las enfermedades asociadas al proceso de envejecimiento (neurodegenerativas, crónicas), las enfermedades minoritarias y las enfermedades infecciosas.

A pesar de los avances, es necesario incrementar el conocimiento de los efectos de todas las variantes posibles en los genomas, transcriptomas, proteomas humanos y de patógenos. Además, se debe profundizar en el estudio de la expresión génica a nivel celular individual. El desarrollo de nuevas terapias personalizadas y dirigidas como los nanofármacos, así como de técnicas avanzadas de cirugía requieren desarrollar modelos de enfermedad pre-clínicos que aprovechen el potencial de los sistemas biomiméticos y los biomodelos. La contribución del Basque Resource for Electron Microscopy (BREM), una plataforma de criomicroscopía electrónica (crioME), permitirá la visualización y determinación en un entorno casi fisiológico de las estructuras de proteínas, células y tejidos que subyacen a la patología de las enfermedades.

### ENTIDADES PARTICIPANTES

Comunidades Autónomas de Extremadura, País Vasco, Cataluña, Galicia y Castilla-La Mancha. Extremadura participará en la recolección y análisis de muestras de diferentes cohortes para el estudio de patologías cardíacas (accidentes cerebrovasculares y isquemia) y reproductivas y en la integración y minado de datos a través del centro de supercomputación.

### LÍNEAS DE ACTUACIÓN

- LA-1: Plataforma BREM de criomicroscopía electrónica aplicada a la medicina personalizada.
- LA-2: Implementación y análisis de bases de datos en medicina de precisión.
- LA-3: Plataforma de cribado de fármacos y análisis interacciones fármaco-diana.
- LA-4: Desarrollo de modelos biológicos para cribado y estudio de la actividad de moléculas terapéuticas.
- LA-5: Desarrollo de nanofármacos, biodistribución, toxicidad y acciones terapéuticas en modelos de patología.
- LA-6: Técnicas y procesos para terapias avanzadas y dirigidas, formación quirúrgica y robótica médica.

### FINANCIACIÓN

Ministerio de Ciencia e Innovación, con cargo a fondos del PRTR (Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia), y con aportaciones de las Comunidades Autónomas.



Financiado por  
la Unión Europea  
NextGenerationEU



Plan de Recuperación,  
Transformación y Resiliencia

## 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.

## Grupo de Investigación CénitS



El Grupo de investigación CénitS fue constituido en 2017 y realiza actividades de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, participando en proyectos competitivos de convocatorias europeas, nacionales y regionales. También colabora intensamente con organizaciones públicas y privadas estableciendo convenios y contratos para colaborar en proyectos de diversa índole. Asimismo, realiza una destacada actividad investigadora publicando sus trabajos en revistas de impacto y congresos de primer nivel. Varios miembros colaboran además impartiendo docencia y dirigiendo Trabajos Fin de Grado, Trabajos Fin de Master y Tesis doctorales en la Universidad de Extremadura.

Las líneas de investigación principales de CénitS son: agricultura y ganadería de precisión; *big and open data & science*; biotecnología y medicina de precisión; computación y comunicaciones de altas prestaciones; seguridad de la información y las comunicaciones; y sostenibilidad, eficacia y eficiencia energética en computación de altas prestaciones.

### FINANCIACIÓN

Cofinanciado por la Junta de Extremadura con Fondos FEDER (Decreto 14/2018). Objetivo temático OT1: Potenciar la investigación, el desarrollo tecnológico y la innovación. Expediente GR18195.

## Supercomputador LUSITANIA IV

Con el propósito de mejorar la capacidad de cómputo del centro CénitS y actualizar los equipos para obtener una mayor eficiencia en el supercomputador, se ha concedido financiación para la compra de LUSITANIA IV. Estos nuevos equipos de computación de elevadas prestaciones (HPC), será desplegado en el reciente CénitS-CPD, junto a los actuales LUSITANIA II y III gracias a los fondos de financiación de la Unión Europea: Next Generation EU.

Este nuevo supercomputador contará con procesadores x86\_64 de última generación y una mayor cantidad de memoria RAM de alta velocidad por nodo de cómputo, con lo que se espera poder conseguir mejorar la infraestructura de supercomputación de COMPUTAEX, sobrepasando la capacidad del actual supercomputador LUSITANIA II e incluso llegando a mejorar el reciente LUSITANIA III en cuanto a potencia de cálculo se refiere. Además, este nuevo supercomputador contará con servidores de memoria compartida, tal y como ocurría en el LUSITANIA III, con una configuración de dos nodos de alta potencia destinados a proporcionar capacidad de cómputo para aquellos cálculos y ejecuciones que demanden muchos recursos, en especial, una alta cantidad de memoria RAM.

Para interconectar todos los equipos mencionados anteriormente, se adquirirá también dispositivos de conectividad con las tecnologías InfiniBand y Ethernet. Con estos nuevos equipos de comunicaciones, se busca brindar de una conexión de alta velocidad a todos los nodos para que puedan trabajar concurrentemente con el máximo ancho de banda y la menor latencia posible. Los nodos contarán con una comunicación de cómputo de InfiniBand HDR100, lo que proporcionará anchos de banda de hasta 100 Gbps, y una conexión de 10 Gbps de Ethernet para la gestión del sistema y control de las ejecuciones.

Todos estos equipos estarían distribuidos en cuatro racks con puerta refrigerada por agua, de esta manera se obtiene una mayor eficiencia de refrigeración con un menor consumo energético que las soluciones convencionales basadas en aire.

Gracias a todos estos nuevos equipos que adquirirá el centro CénitS de la Fundación COMPUTAEX, será posible aumentar la capacidad de cómputo actual y ofrecer una nueva gama de servicios a investigadores y proyectos tanto nacionales como internacionales, colaborando de forma directa en el progreso de la investigación científico-tecnológica de todos los usuarios del CénitS-CPD y en el de toda la sociedad de forma indirecta. Además, la adquisición de un nuevo sistema de almacenamiento permitirá disponer también de una mayor capacidad, fiabilidad y alta disponibilidad de los datos de cómputo, ofreciendo a los usuarios la posibilidad participar en investigaciones de procesamiento de datos (Big Data) y Machine Learning.

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

Convocatoria del año 2021 del procedimiento para la concesión de ayudas para la adquisición de equipamiento científico-técnico, correspondientes al Subprograma Estatal de Infraestructuras de Investigación y Equipamiento Científico-Técnico del Programa Estatal de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico del Sistema de I+D+i, en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2020.



Financiado por  
la Unión Europea  
NextGenerationEU



Plan de Recuperación,  
Transformación y Resiliencia

## CénitS CPD: Resilient datacenter

Con el propósito de acometer el refuerzo, ampliación y potenciación del 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 II y LUSITANIA III, se ha obtenido una financiación por parte de los fondos de la Unión Europea Next Generation EU.

Se propone equipar el datacenter CénitS-CPD con las infraestructuras necesarias para reforzar con las esperadas garantías de alta disponibilidad, seguridad, fiabilidad, velocidad de acceso y eficiencia energética los equipos de supercomputación que ya gestiona CénitS, así como ampliar su conectividad y capacidad de almacenamiento. Un incremento considerable en el sistema de almacenamiento proporcionaría también la posibilidad de ofrecer a los investigadores una mayor cuota de almacenamiento de alta velocidad, que permita transferencias con gran ancho de banda y alojamientos de amplias cantidades de datos para proyectos de análisis de datos y Machine Learning.

Con la infraestructura solicitada que se instalaría en el nuevo CPD, se aspira mejorar la actual instalación para colaborar de forma directa en el progreso de la investigación científico-tecnológica de todos los usuarios de CénitS-CPD y en el de toda la sociedad de forma indirecta. Actualmente, CénitS-CPD cuenta ya con redundancia en varios de sus sistemas críticos, sin embargo, por limitaciones presupuestarias y estratégicas no se ha podido garantizar en todos los sistemas, por lo que se ha obtenido esta financiación para alcanzar los objetivos centrados en conectividad y almacenamiento. Contar con estas mejoras en la infraestructura garantiza la alta disponibilidad, seguridad, conectividad y privacidad ofreciendo, de esta manera, la fiabilidad que muchos proyectos científicos y tecnológicos requieren.

Además, contar con mejoras en el almacenamiento y conectividad, aportará a los usuarios herramientas, no solo de computación de altas prestaciones, sino también para aplicar a proyectos científicos y tecnológicos la inteligencia artificial, big data y analítica de datos de altas prestaciones (HPDA).

### OBJETIVOS

Los objetivos principales del proyecto son:

- Mejorar los mecanismos de firewalling y fortalecer las políticas de seguridad.
- Actualizar la electrónica de red y mejorar la conectividad.
- Aumentar la capacidad de almacenamiento y aportar redundancia de datos.

### FUENTES DE FINANCIACIÓN

Convocatoria ICTS 2021 (Orden CIN/538/2021, de 29 de mayo, por la que se aprueban las bases reguladoras para la concesión de ayudas públicas para las Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares y por la que se aprueba la convocatoria correspondiente al año 2021 en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia).



Financiado por  
la Unión Europea  
NextGenerationEU



Plan de Recuperación,  
Transformación y Resiliencia

### **CénitS-CPD: Equipamiento científico tecnológico**

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 es 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) para consolidar 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 es 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).



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

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una infraestructura distribuida consistente en la interconexión de 16 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.

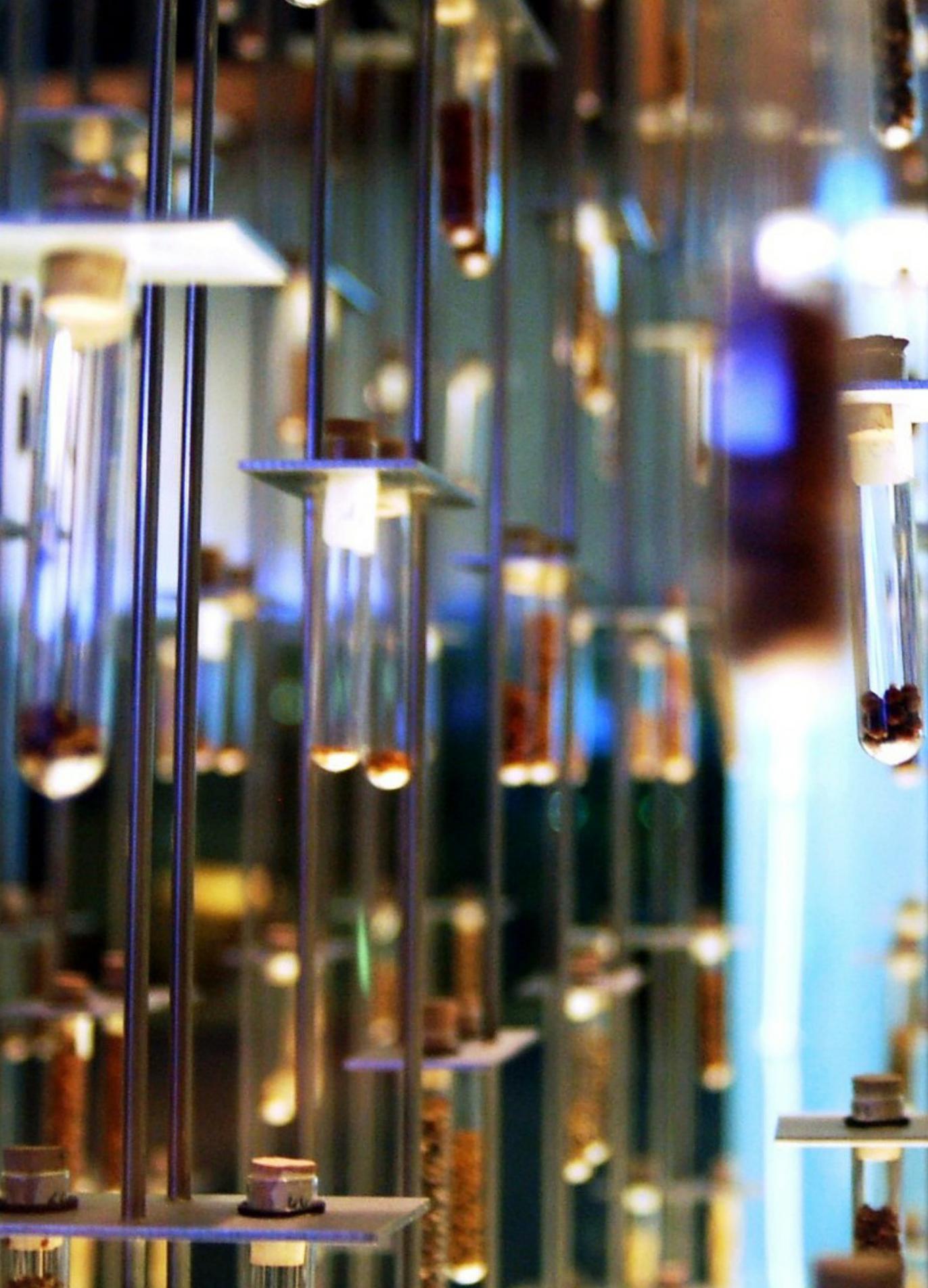
#### ENTIDADES PARTICIPANTES

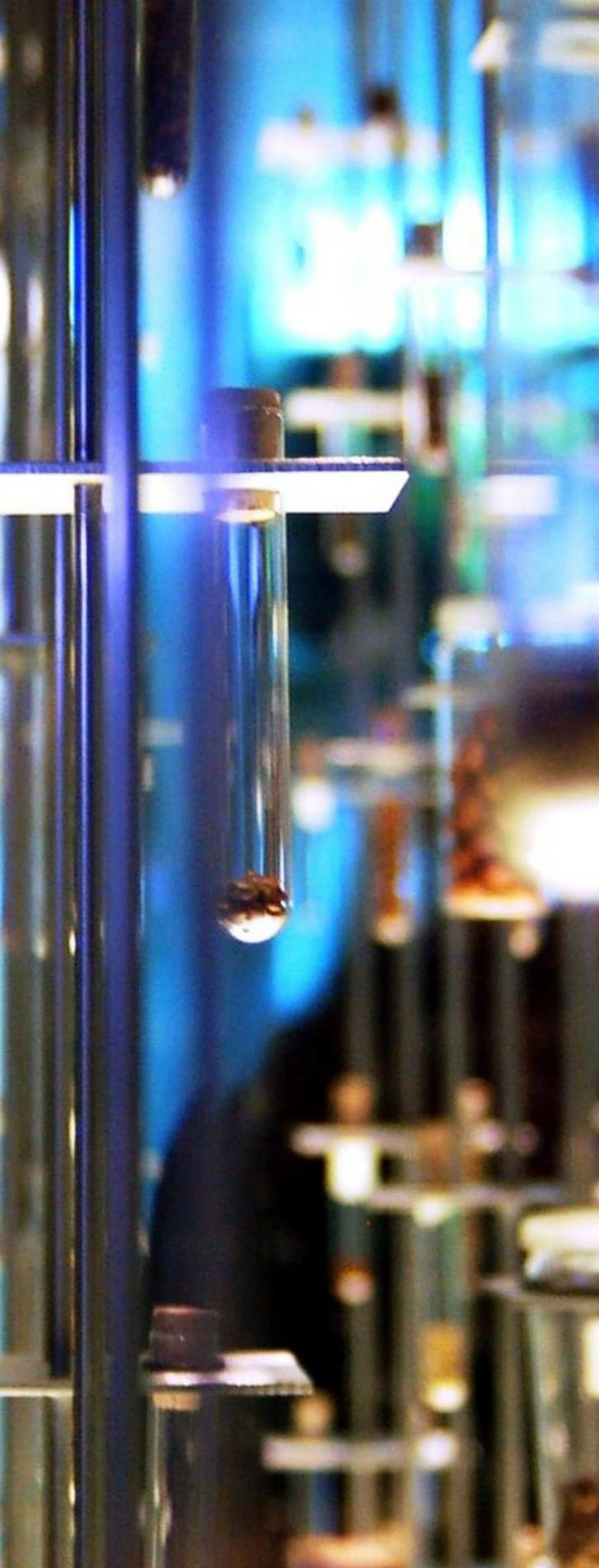
BSC (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación), CESGA (Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), IFCA (Instituto de Física de Cantabria), UMA (Universidad de Málaga), UV (Universitat de València), 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

Este proyecto es financiado por el MINECO (Ministerio de Economía y Competitividad), a través de las Acciones de Dinamización “Redes de Excelencia”, Convocatoria correspondiente a 2015, con Referencia TIN2015-69511-REDI.







# 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 2021. 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. 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



### ***Accelerated high-throughput prediction of the thermal conductivity of Skutterudites by machine learning***

### ***Accelerated high-throughput prediction of the figure of merit of Skutterudites***

### ***Computational modelling and design of thermoelectric materials based on metal chalcogenides and oxychalcogenides: the effects of the chemical composition***

*Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla (US).*

*[Proyectos soportados en CénitS procedentes de la Red Española de Supercomputación]*

In our society, more than 66% of generated energy is wasted, most of it as heat. Thermoelectric, TE, devices stand as the most promising technology to recover part of this wasted heat. Traditionally, TE material efficiency is measured by the figure of merit,  $zT$ . Reducing lattice thermal conductivity,  $\kappa_l$ , is probably the most straightforward approach to enhance  $zT$ . While most of these models are designed to predict directly one of the quantities that are related to  $zT$ , the biggest challenge is to establish connections between real space (atomic structure, chemical composition and microstructure) and reciprocal space properties (transport properties and  $zT$ ). Our goal is to connect the variables that can be controlled during the design, synthesis and processing of a TE material with their final transport properties and efficiency.

### ***Development of a Neural Network Potential to reproduce the potential energy landscape of gold AuN (N=10-120) anionic, cationic and neutral nanoclusters***

*Andrés Vega-Hierro. Universidad de Valladolid (UVa).*

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

First principles calculations are the standard approach to study nanostructures, which are based on the fundamental laws of quantum mechanics. There are several situations however in which these calculations are not feasible, for instance in large systems containing thousands of atoms, or when exploring the completeness of the energy potential landscape. Thus, other approaches emerge such as the interatomic potentials, or the novel Neural Network Potentials. Based on the Machine Learning technique, these combine the speed of empirical potentials while being substantially more accurate. We have developed a Neural Network Potential for nanostructures, and we aim to apply this scheme to gold nanoclusters, a system arduous to study by ab-initio calculations and challenging to depict through empirical potentials due to its complexity.

## ***Direct Numerical Simulations of spanwise flexible wings in tandem configuration***

*Oscar Flores. Universidad Carlos III de Madrid (UC3M).*

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

The objective of this activity is to evaluate the effects that spanwise flexibility has over the aerodynamic performance of a pair of flapping wings in tandem, in a configuration similar to that of a dragonfly. The kinematics of the wings are chosen to be the optimal ones in 2D simulations of two airfoils in tandem, and they are implemented here for rectangular wings of aspect ratio 2 and 4 for a pitching and heaving (vertical) motion imposed at the mid-span section of the wing. The results of the 3D simulations will allow the analysis of the impact that spanwise flexibility has over the global system in terms of total forces and power, and their relation with the interactions of the vortical structures over both wings, comparing their behaviour with those of wings that are rigid.

## ***Towards high-efficient and stable all-inorganic perovskites as sun-light absorber materials***

*Gregorio Garcia Moreno. Universidad Politécnica de Madrid.*

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

Hybrid organic-inorganic lead halide perovskites have earned much consideration for their use in photovoltaic devices, with efficiencies as high as 23%. But yet important challenges need to be overcome: poor stability and the toxicity of Pb. This project purpose the search for suitable perovskite semiconductor materials with enhanced stability, low toxicity as well as improved sunlight conversion efficiencies. Both, the intrinsic stability (replacing the organic cations by inorganic ones) and toxicity (by reducing Pb quantity) problems of perovskite materials can be fixed by adjusting the chemical composition. Thus, the effect of the chemical composition of all-inorganic perovskites with general formula  $Cs_{1-a}RbPb_{1-b}SnI_{2Br}$  on stability and sub-light absorption related-properties by using ab-initio methods.

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

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

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

## ***Theoretical simulations of novel Magnetic Carbides immersed in a graphene-based matrix***

*César González. Universidad Complutense de Madrid (UCM).*

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

Motivated by the recent synthesis of magnetic carbides nanoparticles (NP) developed at the Institute of Applied Magnetism, we propose the theoretical study, based on the Density Functional Theory (DFT), of the interface formed between the iron carbide, the so-called cementite (Fe<sub>3</sub>C) with a graphitic layer that covers the NP. The determination of the interaction established between both subsystems is of paramount importance for the understanding of the magnetic properties of the NPs and their further application as efficient lightweight microwave absorbing material. The theoretical calculations can help in the atomic and magnetic characterization of such complex interface as well as the most favorable Fe<sub>3</sub>C surface for the graphite adsorption. The large unit cells required by the simulations demands the use of supercomputer facilities.

### **Ciencias de la Vida**



## ***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:

- 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, aminopoliolés y aminoheterociclos). El estudio estructural, basado en experiencias de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear, se ha completado con estudios teóricos llevados a cabo a nivel DFT, en fase gaseosa y en disolución, que han permitido realizar un completo análisis de los equilibrios imina-enamina en disolución y en estado sólido.
- Se ha realizado el estudio de los equilibrios tautoméricos imina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioltris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G\* y M06-2X/6-311++G\*\* se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación ( $< 8 \text{ kcal.mol}^{-1}$ ). A través de un complejo 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 “matrices” 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 la construcción de la superficie.

## ***Functional dynamics of human DNA polymerase delta***

*Ramon Crehuet. Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).*

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

Although the basic process of DNA replication is well-known, there are still many questions about the roles of specific components and how is the high fidelity of the replication achieved. One of these components is p12, a protein that binds DNA polymerase delta and regulates its activity. In the present work we aim to understand how p12 modulates the activity of its partner polymerase delta by combining structures from Cryo-EM and enhanced sampling simulations. Our hypothesis is that this small protein is able to control the rate at which polymerase delta changes from active to inactive conformations by binding to a critical region of the polymerase.

## ***Genomic signatures of homologous recombination defects in prostate cancer***

*Joaquín Mateo. Vall d'Hebron Instituto of Oncology (VHIO).*

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

Precision medicine is an unmet need in metastatic prostate cancer (mPC). PARP inhibitors are now approved for the treatment of mPC associated with HRR mutations; however, significant inter-patient variability in outcome exist; better predictive biomarkers for patient stratification are needed. Genomic signatures of HRR defects have putative predictive value in other tumor types, but their clinical significance in prostate cancer is unknown. We will study the distribution of genomic events associated to HRR defects (LOH, LST, NTAI, CNA patterns) and derived signatures. We will test the hypothesis, based on data from our lab, that these signatures are enriched with resistance to hormonal treatments. We will study these features in WES and WGS datasets covering the disease spectrum, from treatment-naïve to late-stage drug resistant mPC.

### ***Investigating the effects of disease-causing mutations on the stability and dynamic properties of the human Hint1 protein***

Shoshana Wodak. VIB-VUB Center for Structural Biology.

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

Mutations of the dimeric Hint1 enzyme are well-known to cause neuropathy associated with neuromyotonia (NMAN). So far, 25 distinct NMAN causative variants have been identified worldwide. Structure-based bioinformatics predictors and in vivo assays revealed that certain variants compromise the protein stability more than the others. In this molecular dynamics (MD) simulation study, we scrutinize the structural dynamics of the wild-type and the single-residue mutant constructs, moreover, the extent of the destabilization effect of disease variants by MD simulations and thermodynamic integration in order to find disease variants that only compromise the stability to the extent that it is rescuable by small molecule stabilizers.

### ***Origin of the selectivity on the conversion of CO<sub>2</sub> on ceria supported Ni catalyst from multiscale simulations***

Francesc Illas. Faculty of Chemistry, University of Barcelona (UB).

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

Conversion of atmospheric CO<sub>2</sub> is a need to prevent further global warming and also constitutes an opportunity as it can be used as a C1 feedstock for the synthesis of fuels and other commodities. However, the high stability of this molecule requires high active catalysts, often transition metals, leading to a mixture of products. Here, the selectivity of Ni on a ceria support towards CO<sub>2</sub> conversion will be studied by multiscale modelling simulations and compared to that of previous studies for extended Ni surfaces and Ni nanoparticles supported on TiC. This will provide useful information for the development of more efficient and selective catalyst.

### ***Understanding a novel mode of non-canonical CaM activation***

Alvaro Villarroel. Instituto Biofísica (Basque Centre for Biophysics), CSIC, UPV/EHU.

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

Calmodulin (CaM) is the main eukaryotic mediator that confers the ability to respond to intracellular Ca<sup>2+</sup> oscillations. CaM binds a huge amount of targets and transmit the Ca<sup>2+</sup> signalization in a versatile way, making it a suitable pharmacological target. We are investigating and interaction between a peptide and CaM, which is able to modulate de calcium signal into the cellar excitability dampener Kv7 channel. The aim of this project is to translate the wet experiments to in silico systems to describe at an atomic level how different peptides interact with CaM and translate the calcium signalling to proteins. We believe that this non-canonical mechanism of calcium modulation will provide insights to develop new drug applicable to several diseases, such as, epileptogenic epilepsy and Amyotrophic Lateral Sclerosis (ALS).

## Ciencias Informáticas y de Comunicaciones



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

*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.

### ***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. FUNDECYT-PCTEX es una Fundación privada del sector público, sin ánimo de lucro, con un objetivo fundamental: la vertebración del Sistema Extremeño de Ciencia y Tecnología mediante la contribución al aprovechamiento socioeconómico de la ciencia y tecnología, apoyando y promocionando su desarrollo y gestión para lograr un mejor aprovechamiento de la investigación y la innovación, estimulando la participación de la sociedad civil y movilizando sus recursos.

### ***Proyecto de computación del CAB, CSIC-INTA***

*CAB, CSIC-INTA*

Prestación de recursos para el proyecto de computación del centro de AstroBiología CAB, creado como centro mixto entre el CSIC (Centro Superior de Investigaciones Científicas) y el INTA (Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial). Las investigaciones del CAB se centran en cuestiones específicas relacionadas con la sistematización de la cadena de acontecimientos que tuvo lugar entre el Big Bang y el origen, la evolución y la distribución de la vida, incluida la autoorganización del gas interestelar en moléculas complejas. Entre las líneas de investigación más relevantes del CAB se encuentran: estudio de los escenarios planetarios que pueden crear y evolucionar la vida tal y como la conocemos; la versatilidad y plasticidad de bioquímicas y metabolismos hipotéticos en diferentes entornos planetarios; y el núcleo de la astrobiología a través de la investigación de la posibilidad de vida en otros mundos.





# RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

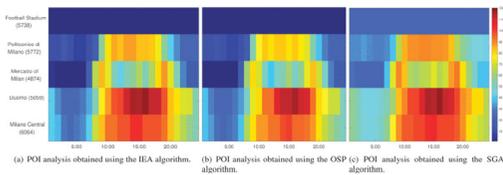
La obtención de resultados de investigación es esencial para un centro de investigación e innovación tecnológica como CénitS, que permite a un destacado número de investigadores e innovadores acometer sus actividades. Muchos de estos proyectos alcanzan una notable visibilidad con publicaciones de diverso 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 2021, además de la Tesis Doctoral y los Trabajos Finales de Grado desarrollados en el centro.

## Publicaciones en revistas

***A Quantitative and Comparative Evaluation of Key Points Selection Algorithms for Mobile Network Data Sets Analysis***

**D. Cortés-Polo, L. I. J. Gil, J. -L. González-Sánchez and J. Carmona-Murillo, “A Quantitative and Comparative Evaluation of Key Points Selection Algorithms for Mobile Network Data Sets Analysis,” in IEEE Access, vol. 9, pp. 92030-92042, 2021, doi: 10.1109/ACCESS.2021.3092596.**



In recent years, network operators are receiving an outside amount of data due to the increasing number of mobile network subscribers, network services and device signalling. This trend increases with the deployment of 5G that will provide advanced connectivity to wireless devices and develop new services. Network analytics must allow telecommunications operators to improve their services and the infrastructure extracting useful information from large amounts of data. A methodology based on orthogonal projections was developed in order to analyze the network information and facilitate the management and the operations to network providers. In the current study, different key points selection algorithms are investigated in order to make a quantitative and qualitative evaluation and analyze the performance of those algorithms which use different approaches to select these points, which will be utilized in the methodology. A novel synthetic data set has also been developed to statistically evaluate the effect of the key points selection algorithms in the clustering, as well as, measure the performance of the aforementioned methodology. Finally, these key points selection algorithms are used in a real scenario to evaluate the impact of the different approaches in the analysis..

***CultivData: Application of IoT to the Cultivation of Agricultural Data***

**Lemus-Prieto, F.; Bermejo Martín, J.F.; González-Sánchez, J.-L.; Moreno Sánchez, E. CultivData: Application of IoT to the Cultivation of Agricultural Data. IoT 2021, 2, 564-589. <https://doi.org/10.3390/iot2040029>**

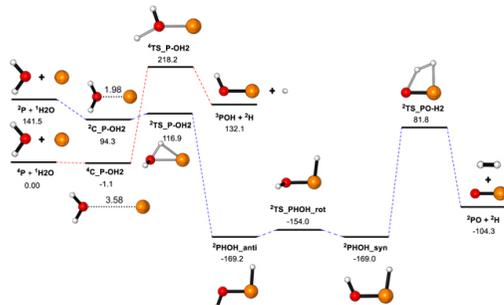
CultivData proposes the convergence of technologies, such as IoT, big data, HPC, open data and artificial intelligence, to apply HPDA (High Performance Data Analytics) to the cultivation of agricultural data and improve the efficiency and effectiveness of farms. An information system has been developed as an IT platform for the cultivation of open data to extract knowledge and to support the decision making of stakeholders in the agricultural sector, so that it is possible to improve product quality and farm productivity. The resulting system integrates access to data provided by IoT devices that sensorize farms and public and open data sources (Open Data). The platform was designed to make precision agriculture a reality and to be useful not only to farmers, but also to agricultural decision-makers who plan species and crops based on data such as available water; expected weather, prices and market demands, and so forth. In addition, the platform provides to agricultural producers access to historical climate data; climate forecasts to anticipate times of drought or disasters; pest situations or monitoring of their plantations with sensorization and orthophotographs.



### Formation of Phosphorus Monoxide (PO) in the Interstellar Medium: Insights from Quantum-chemical and Kinetic Calculations

de la Concepción, J. G., Puzzarini, C., Barone, V., Jiménez-Serra, I., & Roncero, O. (2021). Formation of phosphorus monoxide (PO) in the interstellar medium: Insights from quantum-chemical and kinetic calculations. *The Astrophysical Journal*, 922(2), 169A **Theoretical Rationalization. European Journal of Inorganic Chemistry**, 2020(3), 269-280.

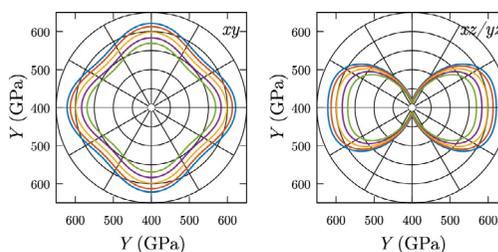
In recent years, phosphorus monoxide (PO), an important molecule for prebiotic chemistry, has been detected in star-forming regions and in the comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. These studies have revealed that, in the interstellar medium (ISM), PO is systematically the most abundant P-bearing species, with abundances that are about one to three times greater than those derived for phosphorus nitride (PN), the second-most abundant P-containing molecule. The reason why PO is more abundant than PN remains still unclear. Experimental studies with phosphorus in the gas phase are not available, probably because of the difficulties in dealing with its compounds. Therefore, the reactivity of atomic phosphorus needs to be investigated using reliable computational tools. To this end, state-of-the-art quantum-chemical computations have been employed to evaluate accurate reaction rates and branching ratios for the  $P + OH \rightarrow PO + H$  and  $P + H_2O \rightarrow PO + H_2$  reactions in the framework of a master equation approach based on ab initio transition state theory. The hypothesis that OH and H<sub>2</sub>O can be potential oxidizing agents of atomic phosphorus is based on the ubiquitous presence of H<sub>2</sub>O in the ISM. Its destruction



then produces OH, which is another very abundant species. While the reaction of atomic phosphorus in its ground state with water is not a relevant source of PO because of emerged energy barriers, the  $P + OH$  reaction represents an important formation route of PO in the ISM. Our kinetic results show that this reaction follows an Arrhenius–Kooij behavior, and thus its rate coefficients ( $\alpha = 2.28 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ,  $\beta = 0.16$  and  $\gamma = 0.37 \text{ K}$ ) increase by increasing the temperature.

### High-Throughput Screening of the Thermoelastic Properties of Ultrahigh-Temperature Ceramics

Nath, P., Plata, J. J., Santana-Andreo, J., Blancas, E. J., Márquez, A. M., & Fernandez Sanz, J. (2021). High-Throughput Screening of the Thermoelastic Properties of Ultrahigh-Temperature Ceramics. *ACS applied materials & interfaces*, 13(25), 29843-29857.

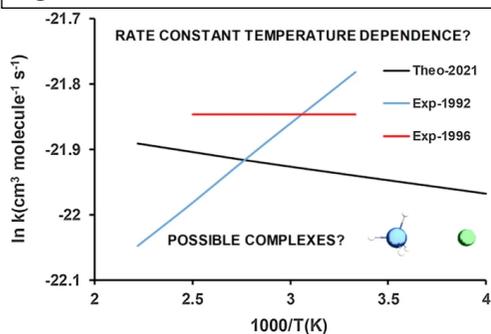


Ultrahigh-temperature ceramics (UHTCs) are a group of materials with high technological interest because of their applications in extreme environments. However, their characterization at high temperatures represents the main obstacle for their fast development. Obstacles are found from an experimental point of view, where only few laboratories around the world have the resources to test these materials under extreme conditions, and also from a theoretical point of view, where actual methods are expensive and difficult to apply to large sets of materials. Here, a new theoretical high-throughput framework for the prediction of the thermoelastic properties of materials is introduced. This approach can be systematically applied to any kind of crystalline material, drastically reducing the computational cost of previous methodologies

up to 80% approximately. This new approach combines Taylor expansion and density functional theory calculations to predict the vibrational free energy of any arbitrary strained configuration, which represents the bottleneck in other methods. Using this framework, elastic constants for UHTCs have been calculated in a wide range of temperatures with excellent agreement with experimental values, when available. Using the elastic constants as the starting point, other mechanical properties such as a bulk modulus, shear modulus, or Poisson ratio have been also explored, including upper and lower limits for polycrystalline materials. Finally, this work goes beyond the isotropic mechanical properties and represents one of the most comprehensive and exhaustive studies of some of the most important UHTCs, charting their anisotropy and thermal and thermodynamical properties.

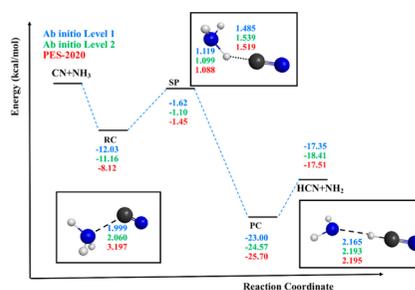
**Intermediate complexes and activation energy for the Cl(2P) + SiH<sub>4</sub> hydrogen abstraction reaction: a difficult case**

**Espinosa-Garcia, J., Garcia-Bernaldez, J.C. Intermediate complexes and activation energy for the Cl(2P) + SiH<sub>4</sub> hydrogen abstraction reaction: a difficult case. *Theor Chem Acc* 140, 93 (2021). <https://doi.org/10.1007/s00214-021-02793-2>**



The reaction path from reactants to products for the reaction between the chlorine atom and the silane molecule was analysed by means of different electronic structure calculations, Møller–Plesset, coupled cluster and density functional theory, using Pople’s and Dunning’s basis sets. In total, fourteen models were analysed. In addition, the effects of other factors, such as spin projection, zero-point

energy (0 K), thermal corrections (298 K) and spin–orbit coupling, on the energy changes were considered. The experimental enthalpy of reaction (298 K) was reproduced only when very high-level correlation energy and large basis sets were used. The existence or not of intermediate complexes in the entrance channel has been a debatable issue in the literature. In the present theoretical study, three intermediate van der Waals complexes, vertex, edge and face orientations, were located, which are slightly stabilized with respect to the reactants, in the range  $-0.31$  to  $-0.99$  kcal mol<sup>-1</sup>. However, it is observed that at room temperature they disappear. In the reaction path, the energy monotonically decreases from reactant to products. Therefore, the system evolves as a barrierless reaction. Of the fourteen models analysed, only two low-level models led to true saddle points with barrier heights of  $\sim 2.5$  kcal mol<sup>-1</sup>. However, when higher-level models were used, it was concluded that the barriers are due to artifacts of the low level used. Another debatable issue in this reaction is the controversy about the positive/negative activation energy and, consequently, about the temperature dependence of the rate constant. Using the very simple Gorin model (adequate as a first approximation for this kind of fast and barrierless reaction without tunnelling) in the temperature range 250–450 K, we found an activation energy of zero, as compared to  $E_a=0$  and  $-0.48$  kcal mol<sup>-1</sup>, experimentally obtained, i.e. differences of 0.5 kcal mol<sup>-1</sup>, which can be explained by theoretical limitations and/or experimental uncertainties. The possible existence of intermediate complexes to explain the negative activation energy has been discarded in the present study, and the final value will be a delicate balance between enthalpy contributions and temperature.



***Quasi-Classical Trajectory Study of the CN+ NH<sub>3</sub> Reaction Based on a Global Potential Energy Surface***

**Espinosa-Garcia, J., Rangel, C., Garcia-Chamorro, M., & Corchado, J. C. (2021). Quasi-Classical Trajectory Study of the CN+ NH<sub>3</sub> Reaction Based on a Global Potential Energy Surface. *Molecules*, 26(4), 994.**

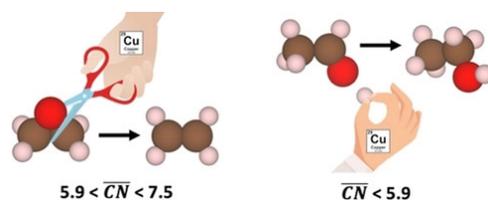
Based on a combination of valence-bond and molecular mechanics functions which were fitted to high-level ab initio calculations, we constructed an analytical full-dimensional potential energy surface, named PES-2020, for the hydrogen abstraction title reaction for the first time. This surface is symmetrical with respect to the permutation of the three hydrogens in ammonia, it presents numerical gradients and it improves the description presented by previous theoretical studies. In order to analyze its quality and accuracy, stringent tests were performed, exhaustive kinetics and dynamics studies were carried out using quasi-classical trajectory calculations, and the results were compared with the available experimental evidence. Firstly, the properties (geometry, vibrational frequency and energy) of all stationary points were found to reasonably reproduce the ab initio information used as input; due to the complicated topology with deep wells in the entrance and exit channels and a “submerged” transition state, the description of the intermediate complexes was poorer, although it was adequate to reasonably simulate the kinetics and dynamics of the title reaction. Secondly, in the kinetics study, the rate constants simulated the experimental data in the wide temperature range of 25–700 K, improving the description presented by previous theoretical studies. In addition, while previous studies failed in the description of the kinetic isotope effects, our results reproduced the experimental information. Finally, in the dynamics study, we analyzed the role of the vibrational and rotational excitation of the CN(v,j) reactant and product angular scattering distribution. We found that vibrational excitation by one quantum slightly increased reactivity, thus reproducing the only

experimental measurement, while rotational excitation strongly decreased reactivity. The scattering distribution presented a forward-backward shape, associated with the presence of deep wells along the reaction path. These last two findings await experimental confirmation.

***Selectivity Map for the Late Stages of CO and CO<sub>2</sub> Reduction to C<sub>2</sub> Species on Copper Electrodes***

**Piqué, O., Low, Q. H., Handoko, A. D., Yeo, B. S., & Calle Vallejo, F. (2021). Selectivity Map for the Late Stages of CO and CO<sub>2</sub> Reduction to C<sub>2</sub> Species on Copper Electrodes. *Angewandte Chemie International Edition*, 60(19), 10784-10790.**

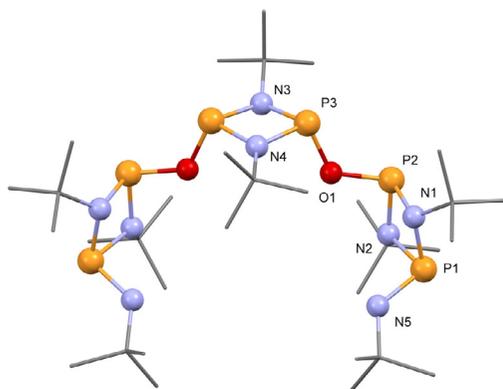
The electrochemical CO and CO<sub>2</sub> reduction reactions (CORR and CO<sub>2</sub>RR) using copper catalysts and renewable electricity hold promise as a carbon-neutral route to produce commodity chemicals and fuels. However, the exact mechanisms and structure sensitivity of Cu electrodes toward C<sub>2</sub> products are still under debate. Herein, we investigate ethylene oxide reduction (EOR) as a proxy to the late stages of CORR to ethylene, and the results are compared to those of acetaldehyde reduction to ethanol. Density functional theory (DFT) calculations show that ethylene oxide undergoes ring opening before exclusively reducing to ethylene via \*OH formation. Based on generalized coordination numbers (CN), a selectivity map for the late stages of CORR and CO<sub>2</sub>RR shows that sites with moderate coordination ( $5.9 < \overline{CN} < 7.5$ ) are efficient for ethylene production, with pristine Cu(100) being more active than defective surfaces such as Cu(311). In contrast, kinks and edges are more active for ethanol production, while (111) terraces are relatively inert.



**Size-control in the synthesis of oxo-bridged phosphazane macrocycles via a modular addition approach**

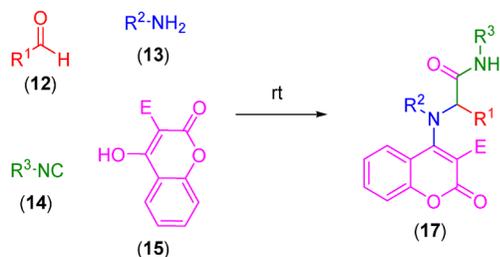
Shi, X., León, F., Ong, H. C., Ganguly, R., Díaz, J., & García, F. (2021). Size-control in the synthesis of oxo-bridged phosphazane macrocycles via a modular addition approach. *Communications Chemistry*, 4(1), 1-8.

Inorganic macrocycles remain largely underdeveloped compared with their organic counterparts due to the challenges involved in their synthesis. Among them, cyclodiphosphazane macrocycles have shown to be promising candidates for supramolecular chemistry applications due to their ability to encapsulate small molecules or ions within their cavities. However, further developments have been handicapped by the lack of synthetic routes to high-order cyclodiphosphazane macrocycles. Moreover, current approaches allow little control over the size of the macrocycles formed. Here we report the synthesis of high-order oxygen-bridged phosphazane macrocycles via a “3+n cyclisation” (n=1 and 3). Using this method, an all-PIII high-order hexameric cyclodiphosphazane macrocycle was isolated, displaying a larger macrocyclic cavity than comparable organic crown-ethers. Our approach demonstrates that increasing building block complexity enables precise control over macrocycle size, which will not only generate future developments in both the phosphazane and main group chemistry but also in the fields of supramolecular chemistry.



**Synthesis of Chromeno [3, 4-b] piperazines by an Enol-Ugi/Reduction/Cyclization Sequence**

Bornadiego, A., Neo, A. G., & Marcos, C. F. (2021). Synthesis of Chromeno [3, 4-b] piperazines by an Enol-Ugi/Reduction/Cyclization Sequence. *Molecules*, 26(5), 1287.



E= electron-withdrawing group

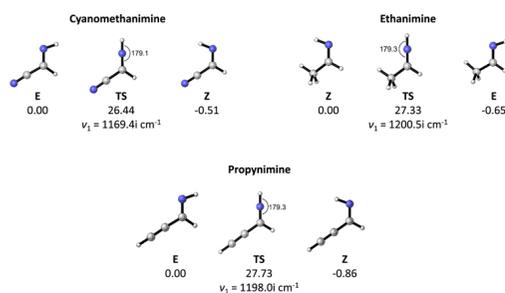
Keto piperazines and aminocoumarins are privileged building blocks for the construction of geometrically constrained peptides and therefore valuable structures in drug discovery. Combining these two heterocycles provides unique rigid polycyclic peptidomimetics with drug-like properties including many points of diversity that could be modulated to interact with different biological receptors. This work describes an efficient multicomponent approach to condensed chromenopiperazines based on the novel enol-Ugi reaction. Importantly, this strategy involves the first reported post-condensation transformation of an enol-Ugi adduct.

**The origin of the E/Z isomer ratio of imines in the interstellar medium**

de la Concepción, J. G., Jiménez-Serra, I., Corchado, J. C., Rivilla, V. M., & Martín-Pintado, J. (2021). The origin of the E/Z isomer ratio of imines in the interstellar medium. *The Astrophysical Journal Letters*, 912(1), L6.

Recent astronomical observations of both isomers E and Z of imines such as cyanomethanimine, ethanimine, and 2-propyn-1-imine have revealed that the abundances in the interstellar medium (ISM) of these isomers

differ by factors of  $\sim 3$ – $10$ . Several theories have been proposed to explain the observed behavior, but none of them successfully explains the [E]/[Z] ratios. In this work we present a detailed study of the kinetics of the one-step E-Z isomerization reactions of cyanomethanimine, ethanimine, and 2-propyn-1-imine under interstellar conditions (in the 10–400 K temperature range). This reaction was previously thought to be nonviable in the ISM due to its associated high-energy barrier (about 13,000 K). In this Letter, we show that considering the multidimensional small curvature tunneling approximation, the tunneling effect enables the isomerization even at low temperatures. This is due to the fact that the representative tunneling energy lies in the vibrational ground state of the least stable isomer up to approximately 150 K, making the reaction constants of the isomerization from the least stable to the most stable isomer basically constant. The predicted [E]/[Z] ratios are almost the same as those reported from the astronomical observations for all imines observed. This study demonstrates that the [E]/[Z] ratio of imines in the ISM strongly depends on their relative stability.



### *Thinking in Parallel: foreword*

**Matellán Olivera, V., González-Sánchez, J.L. Thinking in Parallel: foreword. Journal of Supercomputing, 2021. doi: 10.1007/s11227-021-03848-8.**

Under the title of Supercomputing Education: Thinking in Parallel, this special issue of the Journal of Supercomputing (SUPE) was promoted from the TEEM'19 International ConferenceFootnote1 held in León (Spain) in October 2019. A special session under the same

title was organized at the Conference, focused on the factors that have to be taken into account for improving training in Supercomputing, on identifying the limitations of Supercomputing training, and on how to provide solutions for these limitations.

The use of Supercomputers is wide spreading, constituting an essential component in many fields of science. The interest in the use of high-performance computing (HPC) facilities is also increasing in a growing percentage of undergraduates because the use of these infrastructures allows them to improve their skills and the results of their training. For this reason, the demand of training on supercomputing increases continuously. “Thinking in Parallel” intended to focus on the factors that have to be taking into account for improving training in Supercomputing for improving the performance of researchers and also to try to identify the limitations of current supercomputing training and to provide solutions for these limitations.

In particular, this special issue is focused on experiences and tools to facilitate the parallelization of existing code, training of researchers and professionals with non-IT backgrounds, recycling of IT professional for the HPC ecosystem, and learning methodologies, tools, and experiences for training of computer science students in parallel programming.

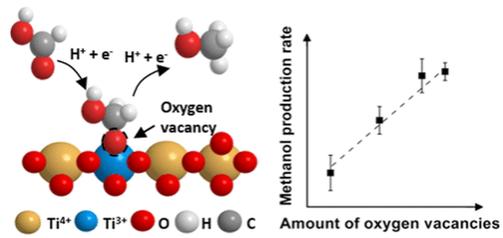
### *Toward Efficient Tandem Electroreduction of CO<sub>2</sub> to Methanol using Anodized Titanium*

**Teh, W. J., Pique, O., Low, Q. H., Zhu, W., Calle-Vallejo, F., & Yeo, B. S. (2021). Toward Efficient Tandem Electroreduction of CO<sub>2</sub> to Methanol using Anodized Titanium. ACS Catalysis, 11(14), 8467-8475.**

The electroreduction of CO<sub>2</sub> (CO<sub>2</sub>RR) using renewable electricity is an appealing route to synthesize methanol (CH<sub>3</sub>OH), a valuable C<sub>1</sub> feedstock and fuel. Unfortunately, there are still no workhorse electrocatalysts with suitable activity and selectivity for this reaction. Currently, formic acid (HCOOH), CO, and

methane are the most common C1 products. Since multielectron electrocatalytic reactions can be severely affected by adsorption-energy scaling relations, a tandem process likely offers a higher efficiency. Therefore, we strategized to reduce CO<sub>2</sub> to HCOOH and then reduce HCOOH to CH<sub>3</sub>OH. While the former step can be accomplished with ease using post-transition metals, the latter is extremely difficult due to the electrochemical inertness of HCOOH. Herein, we develop anodized titanium catalysts containing Ti<sup>3+</sup> sites and oxygen vacancies (termed as TOVs), which can reduce HCOOH to CH<sub>3</sub>OH with a remarkable Faradaic efficiency of 12.6% and a partial current density of -2 mA/cm<sup>2</sup> at -1.0 V versus reversible hydrogen electrode (RHE). Using electron paramagnetic resonance spectroscopy and cyclic voltammetry, we show that the population of TOVs on the catalyst is positively

correlated with the production of CH<sub>3</sub>OH. Density functional theory (DFT) calculations identify TOVs at defects as the active sites in a vacancy-filling pathway mediated by \*H<sub>2</sub>COOH. We further provide holistic screening guidelines based on the \*HCOOH and \*H<sub>2</sub>COOH binding energies alongside TOV formation energies. These can open the path for the high-throughput automated design of catalysts for CH<sub>3</sub>OH synthesis from tandem CO<sub>2</sub> electrolysis.



## Publicaciones en congresos

**Despliegue de técnicas SDNFV para la detección, gestión y mitigación de amenazas a la seguridad de centros de supercomputación (HPC)**

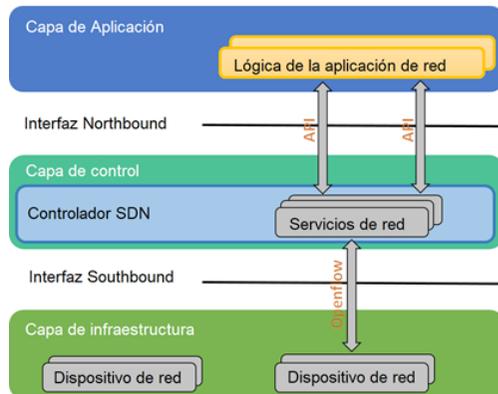
**Lemus Prieto, F., Cortés-Polo, D., González-Sánchez, J. L., Calle-Cancho, J., & Jiménez Gil, L. I. (2021). 05 Despliegue de técnicas SDNFV para la detección, gestión y mitigación de amenazas a la seguridad de centros de supercomputación (HPC).**

Los incidentes de seguridad son cada vez más frecuentes en todo tipo de organizaciones que experimentan el impacto negativo provocado por este tipo de amenazas. Los centros de supercomputación que prestan servicios de computación de alto rendimiento no son ajenos a este tipo de incidentes que afectan a la alta disponibilidad que estos centros críticos deben garantizar.

Por ello, la investigación y diseño de infraestructuras que permitan detectar, gestionar y mitigar las amenazas a la seguridad

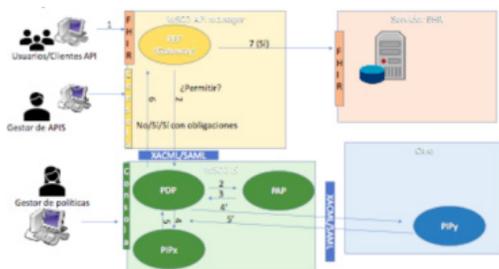
de este tipo de centros de datos es especialmente necesaria. Se presenta la investigación en la softwarización y virtualización de red para implementar una infraestructura de red basada en NFV y SDN.

Se ha desplegado esta infraestructura de red donde se aplican tecnologías de nueva generación para mitigar los incidentes de seguridad mediante funciones de red virtualizadas y desplegadas en contenedores.



### Aplicación de control de acceso y técnicas de Blockchain para el control de datos genéticos

Román, I., Madinabeitia, G., Estepa, R., Estepa, A., Díaz-Vedejo, J., González-Sánchez, J. L., & Lemuz Prieto, F. (2021). 67 Aplicación de control de acceso y técnicas de Blockchain para el control de datos genéticos.



Este trabajo presenta una solución al reto de mejorar la trazabilidad del acceso a información genética almacenada en una aplicación propietaria a través del uso de blockchain.

Para ello se realizan tres acciones: (a) se normaliza la estructura y acceso a los datos conforme al estándar sanitario FHIR; (b) se diseña una arquitectura normalizada de control de acceso a los datos en la que el paciente puede administrar las políticas de acceso a sus datos clínicos compatible con el RGDP; (c) se securiza mediante blockchain la trazabilidad del acceso a los datos.

Los resultados de las tres acciones anteriores se integran en un demostrador o una aplicación piloto que tiene las siguientes características: (a) arquitectura SOA con interfaces normalizados de acceso que siguen el estándar FHIR; (b) cuenta con sistema distribuido de control de acceso de grano fino que sigue el estándar XACML/SAML; (c) utiliza blockchain de forma que se garantice la trazabilidad y la integridad de los registros de acceso al sistema.

### Primary Vs. Secondary Alcohols Electrooxidation: Mechanistic Insights

Mangoufis-Giasin, I., Khanipour, P., Piqué, O., Mayrhofer, K. J., Calle-Vallejo, F., & Katsounaros, I. (2021, May). Primary Vs. Secondary Alcohols Electrooxidation: Mechanistic Insights. In ECS Meeting Abstracts (No. 46, p. 1870). IOP Publishing.

Direct Alcohol Fuel Cells (DAFCs), mostly based on methanol or ethanol, have been in the spotlight in the past, due to alcohols' high and easy availability, low cost, liquid form, low temperature operation and comparable theoretical mass energy densities in comparison with Hydrogen Fuel Cells.[1] However, 2-propanol fuel cells can be preferred for coupling with Liquid Organic Hydrogen Carriers (LOHCs), by creating a closed loop where 2-propanol is oxidized in a fuel cell to acetone and the latter is hydrogenated back to 2-propanol by the catalytic transfer hydrogenation reaction with a hydrogen-rich LOHC molecule.[2]

Here, we characterize the products of 2-propanol oxidation on Pt and PtRu and find that the reaction is selective to acetone on both surfaces. Interestingly, the addition of ruthenium gives rise to an early oxidation peak close to the reversible potential, which is not present in 1-propanol oxidation.[3] The early onset of the 2-propanol oxidation leads to significantly larger Open Circuit Voltages (OCVs) for fuel cells based on 2-propanol compared to 1-propanol, when PtRu is used as the anode. By studying the oxidation of larger (C4 and C5) alcohols, we find that this is a unique characteristic of secondary alcohols on platinum-ruthenium bimetallic catalysts. Using a combination of Rotating Disc Electrode (RDE) measurements, Density Functional Theory (DFT) calculations and real-time product analysis with Electrochemical Real-Time Mass Spectrometry (EC-RTMS) we conclude that the unique feature of secondary alcohols stems from the difficulty in breaking their C-C bond, which prevents their dissociative adsorption at low potential and enables the optimal adsorption on platinum-ruthenium ensemble sites.

## Tesis Doctorales

### *Paralelización Automática y Estrategias de Desarrollo de Código Eficiente para Aumentar el Rendimiento en Centros de Supercomputación*

**Javier Corral García.**

**Programa de Doctorado en Tecnologías Informáticas de la Universidad de Extremadura.**

**Directores: José Luis González Sánchez y Miguel Ángel Pérez Toledano.**

Expertos de múltiples ramas del conocimiento se enfrentan diariamente a multitud de desafíos en proyectos científicos, técnicos o industriales que requieren el uso de la computación de alto rendimiento (HPC, High-Performance Computing) para satisfacer adecuadamente sus necesidades. Sin embargo, el desarrollo de algoritmos y programas que empleen correctamente este tipo de infraestructuras implica un importante conocimiento previo que muchos de estos usuarios no poseen, lo cual dificulta notablemente su labor.

Este tipo de proyectos, ampliamente multidisciplinares y heterogéneos, demandan una obtención de resultados con tiempos de ejecución realmente críticos, necesitando para ello la imprescindible utilización de la computación paralela. De este modo, con objeto de alcanzar resultados confiables y emplear eficientemente los recursos de cómputo disponibles, muchos de estos profesionales necesitan una importante ayuda adicional que les permita llevar a cabo la paralelización y optimización de sus códigos. De hecho, es habitual que el primer obstáculo al que se enfrenten sea precisamente la adaptación de sus propios algoritmos secuenciales. En algunos casos, implementar estos códigos ya resulta una tarea complicada para expertos de diversas ramas de la ciencia muy alejadas de la programación informática, lo cual prolonga significativamente su curva de aprendizaje. La situación empeora especialmente cuando precisan además el uso de la computación paralela. De esta forma, para estos usuarios obtener una solución adecuada puede convertirse en un objetivo de notable complejidad.

Este problema está principalmente motivado por el hecho de que los algoritmos paralelos no son diseñados únicamente para realizar el trabajo computacional, sino que también

indican cómo será distribuido o dividido éste entre múltiples unidades de procesamiento. Así, es común que científicos e investigadores, que carecen de la formación específica requerida, empleen demasiado tiempo en desarrollar y ejecutar correctamente este tipo de algoritmos. Esto propicia además que sus códigos no sean tan eficientes como deberían, para lo cual se requiere mayor preparación y experiencia.

La completa paralelización automática de códigos de programación, considerando además su eficiencia y el correcto uso de los recursos de cómputo disponibles, sería de utilidad, no solo para estos investigadores, sino también para los propios administradores de los centros de computación de alto rendimiento. De esta forma, los usuarios podrían hacer un uso más eficiente tanto de su propio tiempo, como de las infraestructuras ofrecidas por estos centros, donde dicha eficiencia es clave en diversos aspectos, entre los que destacan: los tiempos de cómputo y de espera para acceder a las distintas infraestructuras, el número de núcleos o procesadores empleados y la disponibilidad de memoria y espacio en disco, sin olvidar el consumo energético, que actualmente supone un desafío clave para los centros HPC.

En consecuencia, uno de los objetivos principales de la presente tesis doctoral consiste en dar solución a los problemas identificados, proponiendo un transcompilador (compilador source-to-source) para la paralelización automática de códigos secuenciales, con el cual será posible obtener mejores rendimientos y eficiencias en las ejecuciones y escoger una correcta estrategia de planificación para cada código. De esta manera, el transcompilador determina las partes del código que pueden ser paralelizadas y genera automáticamente la correspondiente versión paralela. La realización de transformaciones source-to-source secuencial-paralelo permite además a

los usuarios comparar ambos códigos de forma más simple, facilitando el aprendizaje y la mejora de sus capacidades en programación paralela.

Adicionalmente, es habitual que los programadores centren sus esfuerzos en aquellas instrucciones que pueden ser paralelizadas, sin tener en cuenta la eficiencia del resto del código, a menudo ignorando el importante efecto que las partes secuenciales tienen sobre los tiempos de ejecución. El impacto asociado es especialmente significativo en trabajos HPC que tardan varios días en ejecutarse o que forman parte de proyectos que requieren miles de horas de CPU anuales, algo muy común en variedad de investigaciones científicas. Por ello, esta tesis evalúa y analiza diversas técnicas software con el objetivo de conseguir mejoras adicionales en el código y reducir los tiempos de ejecución. Las técnicas han sido seleccionadas entre la literatura existente y escogidas por ser las más representativas o que mejoran de modo más notable la eficiencia, entendiendo ésta como

el rendimiento computacional alcanzado por un programa en relación al alcanzable en una situación óptima. En primer lugar, se realiza un detallado análisis del impacto producido al aplicar las distintas estrategias en dispositivos IoT (Internet of Things, Internet de las cosas), debido a su mayor sencillez para realizar todas las mediciones necesarias. Tras comprobar su impacto en la reducción de los tiempos de ejecución y en el ahorro energético, las mismas estrategias son aplicadas sobre infraestructuras HPC. De este modo se demuestra que las técnicas propuestas permiten aumentar la eficiencia de forma fácil y sencilla en ambos entornos, posibilitando que los usuarios obtengan destacables mejoras de rendimiento con cambios menores en sus códigos.

Con todo lo anterior se consigue que incluso usuarios noveles puedan hacer un uso más apropiado y eficiente de los recursos computacionales, disminuyendo los problemas inherentes al aprendizaje de la programación paralela.

## Publicaciones en libros

### *Memoria Anual 2020 de COMPUTAEX.*

**Jesús Calle Cancho, Javier Corral García, David Cortés Polo, José Luis González Sánchez, Luis Ignacio Jiménez Gil, Felipe Lemus Prieto, Julio Mañas Viniegra y Blanca Pérez Mariño.**  
**ISBN-13: 978-84-09-3X360-9. Depósito Legal: BA-345-2021.**



La Fundación COMPUTAEX presentó en junio su memoria de actividades correspondiente al ejercicio 2020.

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 pone a disposición de investigadores, tecnólogos e innovadores.

La memoria está disponible para su descarga en formato pdf, siendo además posible visualizarla de forma online o acceder a ella a través del histórico de la Fundación, desde la sección de memorias anuales.

## Trabajos Finales de Grado

### ***CultivData: Integración, análisis y gestión de la recolección y tratamiento de datos de cultivo para la mejora de la eficiencia agraria***

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

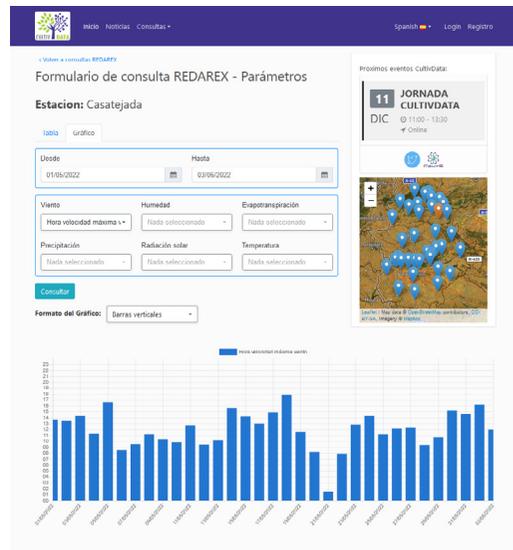
Las tecnologías progresan, pero hay un sector que avanza a un ritmo más lento: el sector agropecuario. Sin embargo, la población aumenta y, por lo tanto, también el consumo. Considerando que la agricultura es la principal fuente alimenticia a nivel mundial, para satisfacer esta gran demanda de alimentos hay que aumentar la productividad de los cultivos. Se debe pretender un cultivo o una gestión de los cultivos innovadora, eficaz, moderna.

Este TFG pretende dar una solución tecnológica para mejorar la producción agrícola y ganadera mediante la aplicación de técnicas de agricultura de precisión, en términos generales, técnicas Big Data aplicadas al sector agropecuario. En concreto este proyecto se centrará en métodos de extracción de datos que serán la base de futuros análisis sobre estos mismos datos. Estos datos se captarán de fuentes de datos abiertas que permitan el uso de sus datos para tales propósitos.

El objetivo es desarrollar una plataforma que permita la extracción, gestión y visualización de los datos. La plataforma permite extraer los datos de las distintas fuentes de una forma sencilla, gestionarlos y visualizar los datos en distintos formatos desde un mismo lugar, sin necesidad de acceder a las plataformas específicas de cada fuente de datos.

Los objetivos específicos que persigue este TFG son:

- Extracción y almacenamiento de datos de distintas fuentes y actualizaciones de las mismas.
- Consulta de datos para agricultores, ganaderos, analistas y otros usuarios.
- Internacionalización del proyecto.
- Facilitación del despliegue y migración futura de la plataforma.
- Uso de un repositorio centralizado con datos web y agrarios.



El proyecto culmina diseñando una herramienta de extracción que permite gestionar todas las fuentes de datos de interés del proyecto. Esta herramienta se integra dentro del portal web del proyecto permitiendo su uso a cualquier administrador sin necesidad de ningún software adicional en su máquina. Además, se implementa una interfaz para la consulta de datos que permite personalizar las consultas y la visualización y descarga en distintos formatos, las consultas pueden realizarse en varios idiomas. El uso de Docker aporta rapidez a la hora de desplegar los cambios desarrollados en producción, además de esto resuelve muchos de los problemas que el equipo de desarrollo del proyecto CultivData se encuentra a la hora de desplegar el proyecto en una máquina distinta a la de desarrollo.

Los datos del portal web y los datos de interés del proyecto CultivData, obtenidos mediante técnicas de extracción de datos, se encuentran almacenados en un repositorio de datos formado por dos bases de datos MongoDB.

## **Análisis y diseño de prototipo experimental para el estudio y la validación de redes de alta velocidad**

**Moisés Gaitán Fernández. TFG en Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx. Codirigido por David Miguel Cortés Polo y José Luis González Sánchez.**

La realización de prácticas de laboratorio, generalmente requiere del uso de ordenadores potentes con sistemas operativos y softwares determinados instalados en ellos. Esto supone un reto para muchos alumnos puesto que no pueden desempeñar dicha labor con su portátil, obligados a utilizar las estaciones de trabajo presentes en el aula de laboratorio. Hacer esto es un problema tanto para los alumnos como para los docentes, puesto que las prácticas deben impartirse siempre en un laboratorio de informática y el estudiante debe permanecer en el puesto de ordenador presencialmente.

Esto suele originar problemas de concurrencia en aulas, falta de recursos para todos los estudiantes, imposibilidad de trabajo desde casa, lo cual hace que el alumno no pueda continuar con sus tareas fuera del aula.

Es por ello, que cada vez más se requiere de plataformas que permitan al usuario disponer de recursos de cómputo necesarios para acometer sus prácticas, con independencia del lugar en el que se encuentre y las características del dispositivo con el que haga sus estudios

Este TFG pretende responder a esta necesidad mediante el análisis, diseño e implementación de un prototipo experimental de plataforma de Cloud-Computing que permita el acceso a recursos remotos que el estudiante necesita para realizar sus estudios, especialmente destinado a la validación de redes de alta velocidad. El requisito principal de la plataforma es estar formado por software libre y que no requiera del pago de licencia alguna para su instalación y mantenimiento. De esta manera, cualquier centro podrá disponer de ella sin ningún coste.

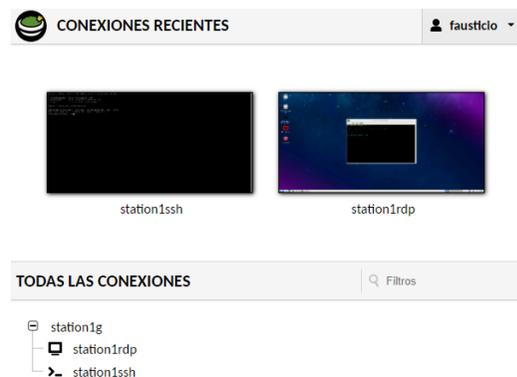
Se persiguen los siguientes objetivos

- Análisis de software necesario y estudio de las soluciones óptimas para el sistema.
- Diseño e implementación del prototipo experimental de la plataforma VDI.
- Evaluación de la viabilidad del sistema en un entorno de ejecución real.

El resultado del prototipo ha concluido con una Infraestructura de Dispositivos Virtuales (VDI) compuesta por dos componentes: un sistema de virtualización de máquinas y un portal web de acceso remoto para usuarios. Para la virtualización de máquinas, se empleó ProxMox VE, un hipervisor KVM el cual es escalable y distribuido. Los estudiantes, usuarios del sistema, accederían a las máquinas virtuales usando un portal web (Apache Guacamole), que permite el acceso por consola y por escritorio remoto.

Para el desarrollo de la plataforma, se hicieron uso de tecnologías de virtualización QEMU y KVM, y tecnologías de para-virtualización tales como contenedores LXC y Docker, donde se desplegaron los servicios fundamentales del sistema.

Tras las pruebas de rendimiento ejecutadas, esta plataforma completa, presentó una alta viabilidad para funcionar en infraestructuras empresariales, pudiendo albergar más de 60 máquinas virtuales ejecutándose al mismo tiempo en un solo servidor. Debido a que la plataforma desarrollada es fácilmente escalable, sería posible desplegar el sistema en un clúster de nodos ProxMox VE, multiplicando el máximo de máquinas virtuales que el sistema podría alojar.







# **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 2021 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación, destacando la colaboración en eventos, así como la organización de diversas jornadas.**

## 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, distintos proyectos, eventos y actividades.



**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.



**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.



**BIOS**, el Centro de Bioinformática y Biología Computacional de Colombia, la iniciativa de Ciencia, Tecnología e Innovación (CTeI) más importante del país, dependiente del Ministerio de Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (MinTIC) y Colciencias de Colombia, firmó un acuerdo de colaboración con COMPUTAEX para cooperar en proyectos de I+D+i.



**Canalytics Big Data Experts S.L.**, 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.



**CASAT**, sociedad agraria de transformación, firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto *“CultivDat2: Desarrollo sostenible aplicando modelos predictivos al cultivo de datos agrarios”*, 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.



**FOTEX**, especializada en consultoría e ingeniería, firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto *“Prospéctic2: Aplicación de la inteligencia artificial, big open data y supercomputación al estudio de la herencia epigenética en enfermedades oncológicas”*, en la convocatoria destinada al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en Extremadura.





**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.



La **Fundación Magdalena Moriche** firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto “Mejora, implementación e implantación de plataforma de comunicación digital y e-learning en Moodle, del Programa de Innovación y Talento”, del Programa de Innovación y Talento (PIT).



**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.



**NATURGY** Renovables, S.L.U. firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto “Anemoi: Modelo productivo de productividad y operatividad de parques eólicos aplicando analítica de datos y aprendizaje automático”, en la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura.



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.



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.



**SUKAN Sport Technology S.L.**, firmó un convenio con COMPUTAEX para participar en el proyecto ExQNet (Extremadura Quantum Network): Infraestructura de comunicaciones cuánticas fiable y segura para Extremadura, en la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura.



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 30 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.



## Semana de la Ciencia



Del 2 al 16 de noviembre tuvo lugar la V Semana de la Ciencia de Extremadura, coordinada por el Servicio de Difusión de la Cultura Científica de la Universidad de Extremadura y Fundecyt-PCTEX, y financiada por la O4i y la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura, a través del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

El objetivo de estos eventos es fomentar el interés de la sociedad extremeña por la ciencia y la tecnología, mediante la realización de más de 70 actividades, gracias a la colaboración de diversos centros de educación primaria y secundaria, centros tecnológicos, museos y asociaciones profesionales dedicadas a la cultura científica y varios departamentos y grupos de investigación de la Universidad de Extremadura.

Asimismo, también se persigue: promover las vocaciones científicas y tecnológicas en jóvenes no universitarios; fomentar la creatividad y la innovación en los más jóvenes; generar la cultura científica en los ciudadanos; facilitar el diálogo entre ciencia y sociedad; y desarrollar un marco común para la divulgación científica en Extremadura.

Mediante la actividad “Conoce CénitS, el Centro de Supercomputación de Extremadura”, COMPUTAEX volvió a participar, por quinto año consecutivo, ofreciendo la posibilidad de visitar sus instalaciones y acceder a su nuevo centro de procesamiento de datos (CénitS-CPD) que alberga los supercomputadores LUSITANIA.

En primer lugar, los ingenieros de CénitS exponían en una charla los beneficios que aporta la supercomputación de alto rendimiento a la sociedad, para afrontar las mayores oportunidades y desafíos del siglo XXI. Además, los participantes conocían los servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas ofrecidos por el Centro, así como sus proyectos de I+D+I más representativos. Posteriormente, se realizaban visitas guiadas en las que descubrían el centro de procesamiento de datos de CénitS y las infraestructuras de computación de alto rendimiento con las que cuenta, comprendiendo el funcionamiento y las principales características de sus supercomputadores.

## Noche Europea de los Investigadores



El viernes 24 de septiembre tuvo lugar la Noche Europea de los Investigadores, un evento que se celebra de forma simultánea en 29 países y que tiene como objetivo demostrar que la investigación y los avances científicos y tecnológicos están al alcance de todos los públicos.

Por décimo año consecutivo, la Universidad de Extremadura ofreció la oportunidad de conocer, de forma amena e interactiva, en qué consiste el trabajo de los investigadores y cuál es su aportación a la sociedad, a través de cerca de 70 actividades dirigidas a personas de todas las edades, interesadas en descubrir cuál es el impacto de los avances científicos en nuestra vida diaria. Los eventos se desarrollaron en los campus universitarios, con un amplio programa compuesto por

actividades entre juegos, retos, experimentos y charlas en numerosas áreas del conocimiento.

CénitS estuvo presente, también por décimo año, en la Escuela Politécnica de Cáceres, ofreciendo el taller “*Construye tu propio Supercomputador con piezas de LEGO*” en sesiones de 30 minutos para un máximo de 10 personas. En ellas los asistentes aprendieron a construir un supercomputador compuesto por pequeños ordenadores del tamaño de una tarjeta de crédito y ensamblado con piezas de LEGO. El principal objetivo era aprender a utilizar un clúster doméstico de ordenadores de bajo coste, sobre el que se ejecutaban distintos problemas que típicamente son resueltos gracias a la supercomputación.

La Noche Europea de los Investigadores es un proyecto de divulgación científica financiado por la Comisión Europea dentro de las acciones Marie Skłodowska-Curie.

## Becas de formación del convenio COMPUTAEX - UEx

### *Carlos Castañares Cañas*

Estudiante del Grado de Ingeniería en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software en la Escuela Politécnica de Cáceres. Durante la beca en la Fundación, ha colaborado en una investigación sobre sistemas de detección de intrusos en dispositivos IoT (del Internet de las cosas), formándose en el ámbito de generación y procesamiento de datasets en Python, uso de Machine Learning para la clasificación de los datos obtenidos y entrenamiento de una red neuronal para la detección de intrusos.

Ha apoyado en las tareas de análisis de artículos sobre sistemas de detección de intrusos en dispositivos IoT basándose en la variación del comportamiento y consumo que presentaban los dispositivos cuando están comprometidos. Posteriormente, ha realizado el montaje del clúster para la recopilación de datos, configurando e instalando los dispositivos para su puesta en marcha. Ha hecho uso de scripting en Python y librerías de procesamiento de Big Data para realizar la recolección de datos y el procesamiento de los mismos para crear modelos estadísticos que permitieran la identificación de intrusos en los sistemas. También ha adquirido conocimientos en la administración de sistemas linux y la generación de scripts que automatizan tareas de control y gestión de los dispositivos IoT.

Respecto a su colaboración con la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación de CénitS, ha participado en la organización de varios eventos, entre los que destacan la presentación de casos de éxito de digitalización de empresas en Extremadura y otras jornadas organizadas en el marco del proyecto MiPYME Digital, desarrollado por CénitS-COMPUTAEX

En el ámbito académico, se encuentra desarrollando su Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software.

El objetivo marcado en esta beca está centrado en la detección de intrusos en los sistemas software, almacenando el consumo y las tramas de red de cada dispositivo del clúster en un dataset, en estado normal, y posteriormente recibiendo un ataque cibernético, con la finalidad de entrenar una red neuronal, con el objetivo de detectar anomalías en el dispositivo, y notificar al usuario el evento producido. El sistema está conformado por cuatro placas Raspberry Pi, configuradas y preparadas para el montaje del clúster, una protoboard, una fuente de alimentación, un dispositivo INA para medir el consumo energético de cada placa, y un router configurado con OpenWRT para el almacenamiento de las tramas generadas en la red.

Entre los objetivos alcanzados destacan principalmente los siguientes:

- Participación en el desarrollo de proyecto de análisis y procesamiento de datos.
- Ampliación de conocimientos en la administración de sistemas y creación de redes para la realización de pruebas controladas en laboratorio.
- Ampliación de conocimientos en programación Python y BASH, en el tratamiento de datos y obtención de resultados.
- Despliegue de entornos de pruebas con herramientas de Hacking Ético y análisis de vulnerabilidades en los dispositivos de la red.
- Desarrollo de documentación técnica sobre la investigación efectuada.

**Moisés Gaitán Fernández**

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 traslado del supercomputador del CénitS, acondicionamiento y preparación de las nuevas instalaciones del CPD, formándose en el ámbito de la administración de redes de comunicaciones y administración sistemas y supercomputación.

Apoyo en las tareas de etiquetado de cables, clasificación y desconexión de los equipos en el antiguo CPD y traslado de los racks a las nuevas instalaciones. Posteriormente, participó en la labor de preparación del supercomputador en el nuevo CPD, donde se tuvieron que instalar equipos de electrónica de red y servidores en armarios con puerta refrigerada y crear un nuevo esquema de conexiones y cableados inter-rack.

También colaboró en el desarrollo del proyecto MiPYME Digital, integrándose en un equipo de trabajo y formándose en el análisis de digitalización de una empresa, analizando la productividad de sus procesos para posteriormente buscar soluciones digitales que pudieran mejorar el rendimiento de la empresa y crear un plan de actuación con las conclusiones y la implantación de las soluciones propuestas en la infraestructura de la empresa.

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 casos de éxito de la digitalización de empresas en Extremadura y otras jornadas del proyecto MiPYME Digital desarrollado por CénitS-COMPUTAEX.

En el ámbito académico, desarrolló su Trabajo de Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software, titulado “Análisis y diseño de prototipo experimental para el estudio y la validación de redes de alta velocidad” codirigido por David Miguel Cortés Polo y José Luis González Sánchez.

Durante el desarrollo del TFG, dispuso de un rack con 4 servidores, los cuales preparó y configuró, tanto los sistemas como la red de comunicación para disponer de un clúster sobre el que desplegar la plataforma resultante del Trabajo de Fin de Grado y poder realizar pruebas de viabilidad sobre un sistema de virtualización y una infraestructura empresariales.

Entre los objetivos marcados para esta beca, se encontraban los siguientes: análisis, diseño e implementación de un prototipo de plataforma experimental en la que usuarios pudieran conectarse remotamente a un escritorio a través de un portal seguro y de fácil uso; análisis del software necesario y estudio de las soluciones óptimas para el sistema; y realización de pruebas para la evaluación de la viabilidad del sistema en una infraestructura empresarial.

Entre los objetivos alcanzados destacan principalmente los siguientes:

- Participación en la organización, traslado y puesta a punto del nuevo CPD del CénitS.
- Ampliación de conocimientos en la administración de sistemas, gestión de clústeres de supercomputación y administración de redes de comunicaciones.
- Ampliación de conocimientos en despliegue y gestión de sistemas de virtualización y acceso a escritorios remotos.
- Desarrollo de documentación técnica diseño e implementación de un sistema software.

## Jornadas Nacionales de Investigación en Ciberseguridad (JNIC)



**JNIC  
2021  
LIVE**

Los días 9 y 10 de junio se celebraron de forma virtual las VI Jornadas Nacionales de Investigación en Ciberseguridad (JNIC), cuyo objetivo es promover el contacto, el intercambio y la discusión de ideas, conocimientos y experiencias entre la red académica e investigadora, y profesionales y empresas. CénitS formó parte del comité de transferencia tecnológica. En concreto, COMPUTAEX propuso un desafío en el marco del certamen de retos científicos consistente en analizar y diseñar un sistema basado en blockchain (público, privado o híbrido) para garantizar la confidencialidad e integridad de la información genética.

José Luis González, Director General de Cénits y Felipe Lemus, Responsable de la Unidad Funcional de redes y comunicaciones del Centro, colaboraron también en la publicación “*Aplicación de control de acceso y técnicas de Blockchain para el control de datos genéticos*”, realizada conjuntamente con Isabel Román, Germán Madinabeitia, Rafael Estepa, Jesús Díaz-Verdejo y Antonio Estepa, que fue presentada en la sesión dedicada a la transferencia tecnológica. Del mismo modo, Felipe Lemus presentó además el trabajo “*Despliegue de técnicas SDNFV para la detección, gestión y mitigación de amenazas a la seguridad de centros de supercomputación (HPC)*”, publicado junto a David Cortés, profesor de la Escuela Politécnica de Cáceres y José Luis González.

Las JNIC se centran en los últimos avances científicos en la materia, suponiendo un foro de debate en el que presentar perspectivas y enfoques innovadores en ciberseguridad, posibilitando además la conexión entre la acción investigadora e innovadora y el desarrollo de productos y servicios de valor para la sociedad. Como en anteriores ediciones, las jornadas se estructuraron en tres áreas fundamentales: Investigación en ciberseguridad, Docencia e innovación educativa en ciberseguridad, y Transferencia tecnológica (certamen de retos científicos). Las versiones extendidas de los mejores artículos recibidos, sobre investigación y formación en innovación educativa, fueron propuestas para special issues de revistas indexadas en el JCR (Journal Citation Reports).

## Visita de Pedro Duque, Ministro de Ciencia e Innovación



El Ministro de Ciencia e Innovación, Pedro Duque, visitó el jueves 1 de julio dos de las infraestructuras científicas y técnicas singulares (ICTS) existentes en Extremadura, entre las que se encuentra CénitS-COMPUTAEX. La visita contó también con la participación de Guillermo Fernández Vara, Presidente de la Junta de Extremadura, Yolanda García Seco, Delegada del Gobierno en Extremadura, Luis Salaya, Alcalde de Cáceres, Rafael España, Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura y Presidente de la

Fundación COMPUTAEX; y Jesús Alonso, Secretario General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad, entre otras autoridades. Además, durante la visita tuvo la oportunidad de conocer el nuevo Centro de Procesamiento de Datos de Cénits, que será inaugurado próximamente.

## Conferencia de Usuarios de la Red Española de Supercomputación



La Red Española de Supercomputación (RES), de la que forma parte COMPUTAEX, celebró su 15ª Conferencia de Usuarios los días 16 y 17 de septiembre con el objetivo de compartir conocimientos y experiencias en el uso de la computación de alto rendimiento (HPC, High-Performance Computing).

Esta edición iba a ser celebrada presencialmente en Cáceres, con la colaboración de CénitS, pero debido a la situación causada por la COVID-19 el evento fue celebrado de forma virtual. No obstante, la jornada contó con una visita virtual guiada por la parte antigua medieval de la ciudad, que será emitida en directo a través de Zoom.

La RES organiza anualmente la reunión de usuarios para informar sobre las novedades de la RES y aportar información de interés sobre el acceso a sus recursos y el ecosistema europeo en HPC. Este evento es, por tanto, un espacio de encuentro para usuarios, técnicos de apoyo, y los propios comités de acceso y de usuarios.

## Jornada de presentación del proyecto MiPYME Digital: hacia la transformación digital de las micro, pequeñas y medianas empresas



El miércoles 21 de julio, CénitS presentó de forma virtual y presencial en la sede social de la Fundación COMPUTAEX el proyecto MiPYME Digital, financiado por la Dirección General de Agenda Digital de la Junta de Extremadura.

MiPYME Digital ha tenido como objetivo principal lograr que los actores involucrados en el tejido empresarial extremeño puedan tomar decisiones mejor informadas que permitan optimizar la calidad, productividad y comercialización de sus productos y negocios. En base a ello, puede lograrse la mejora de sus actividades digitales y el uso de los servicios proporcionados por el sector TIC. Para ello se realizaron labores de consultoría especializada para evaluar la situación de cada empresa en función de su madurez digital, las posibles opciones de actualización y resolución de debilidades y deficiencias, así como la divulgación de conocimientos y prácticas que puedan resultar útiles a los negocios.

El objetivo de la jornada era la difusión del proyecto y el desarrollo de sus actividades entre el sector empresarial extremeño, explicando los objetivos del mismo y permitiendo conocer el grado de interés que la digitalización y las nuevas tecnologías suscitan en las empresas extremeñas. La jornada estuvo orientada en torno a cuatro campos fundamentales para la digitalización: Ciberseguridad, Big Data, Inteligencia Artificial y Computación de Altas Prestaciones.

## Jornada de preselección de empresas del proyecto MiPYME Digital: programa de consultoría y servicios gratuitos para PYMES extremeñas



CénitS-COMPUTAEX abrió el plazo del Programa MiPYME Digital para que micro, pequeñas y medianas empresas se beneficiasen de los servicios gratuitos de consultoría, análisis y diagnóstico tecnológico ofrecidos en el proyecto.

Las entidades interesadas pudieron conocer todos los detalles a través de una jornada informativa que tuvo lugar el jueves 30 de septiembre. El evento se desarrolló de forma virtual (a través de Zoom) y presencialmente en la sede social de la Fundación COMPUTAEX. Durante el mismo los participantes tuvieron la posibilidad de conocer todas las características de los servicios ofrecidos, pudiendo formalizar en ese momento sus solicitudes de participación. También conocieron otros casos de éxito de empresas extremeñas que ya se han beneficiado de los servicios de CénitS-COMPUTAEX en programas similares. Del mismo modo, durante el evento, aquellas empresas que lo desearon pudieron participar en reuniones bilaterales con los ingenieros de CénitS, que resolvieron todas

sus dudas y cuestiones de forma personalizada. Además, aquellos que acudieron presencialmente tuvieron la posibilidad de visitar el nuevo Centro de Procesamiento de Datos de CénitS.

## Hacia la digitalización de las mipymes: casos de éxito



El viernes 17 de diciembre, CénitS celebró de forma virtual y presencial en la sede social de la Fundación COMPUTAEX la jornada “Hacia la digitalización de las mipymes: casos de éxito”, enmarcada en el proyecto MiPYME Digital.

El objetivo del evento fue dar a conocer las posibilidades de la digitalización y las nuevas tecnologías, con el objetivo de acercar y fomentar su aplicación en las mipymes de la región. En concreto, el proyecto MiPYME Digital se centra en cuatro campos fundamentales para la digitalización: Ciberseguridad, Big Data, Inteligencia Artificial y Computación de Altas Prestaciones.

De este modo, la jornada contó con la participación de cuatro empresas, Arranzerámica SL, Arroba puntos, Sukan Sport Technology S.L. e ITAE Business School, que expusieron sus casos de éxito sobre la aplicación de estas tecnologías y la evolución de sus procesos de digitalización. Posteriormente,

tras un debate sobre la diversas posibilidades existentes actualmente para las empresas extremeñas, se presentaron los distintos recursos y servicios ofrecidos en CénitS para acometer la digitalización, actualización y resolución de debilidades y deficiencias de las mipymes, logrando así la mejora de sus actividades.



## Presentación de resultados del proyecto MiPYME Digital



COMPUTAEX presentó el miércoles 29 de diciembre los resultados de MiPYME Digital, con objeto de trasladar al sector empresarial extremeño los logros y la potencialidad del proyecto.

En primer lugar, se ofreció una breve introducción a los objetivos generales y específicos del proyecto, destacando la importancia de la transformación digital de las empresas, para que éstas mejoren sus servicios, productos y procesos, y logren asimismo competir en las mejores condiciones posibles en un mercado cambiante y global. A continuación, se presentaron los principales objetivos específicos alcanzados gracias al trabajo desarrollado. Seguidamente, los asistentes al evento pudieron conocer las principales actividades desarrolladas. Además, se subrayó que estos planes de acción han incluido la utilización de recursos técnicos de CénitS, con objeto de permitir a las empresas participantes familiarizarse con las tecnologías que más pueden ayudarles en su modelo de negocio.

También fueron presentadas las áreas consideradas para analizar la situación de las empresas participantes y se detallaron los planes de acción personalizados para cada una de las empresas participantes en el proyecto. De este modo, se explicaron detalladamente las diversas líneas de actuación planificadas, clasificadas a su vez en los cuatro ejes principales considerados: digitalización de procesos; infraestructuras y soluciones digitales; servicios; y marketing y clientes.

## 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).

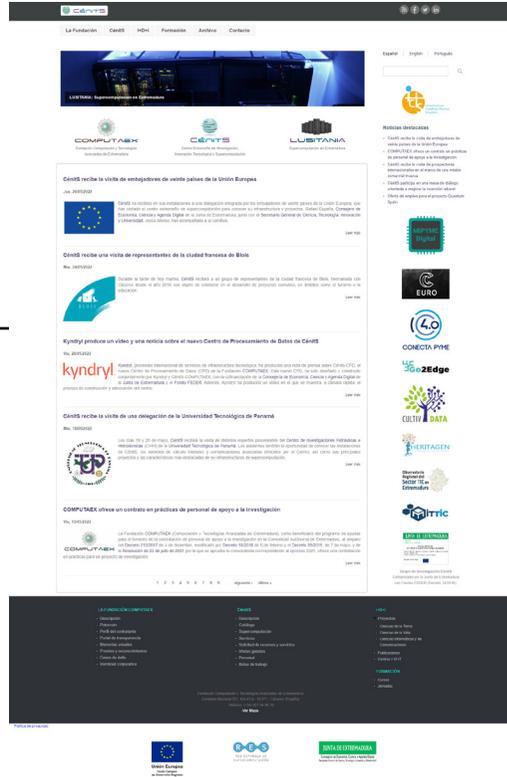
## Funciones

- 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 III, 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.

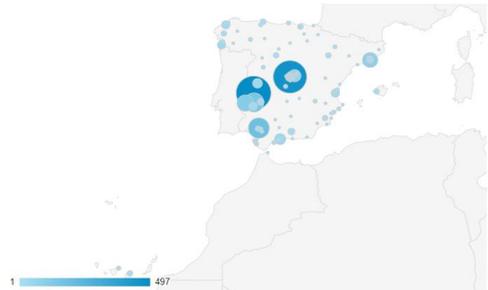
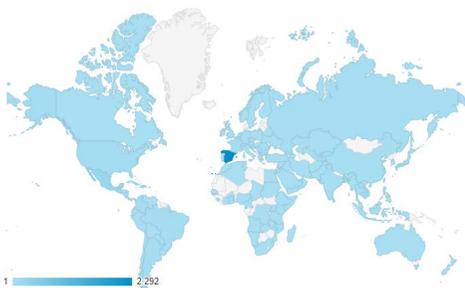
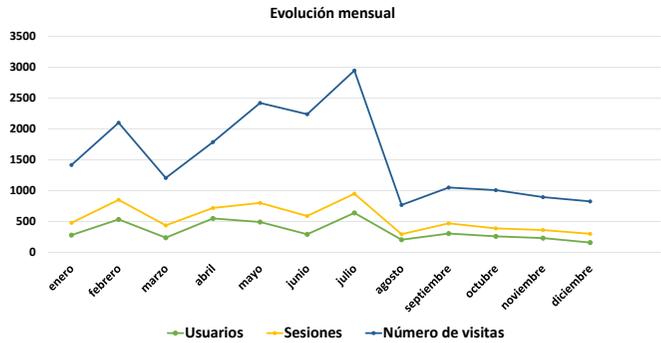


## Datos estadísticos

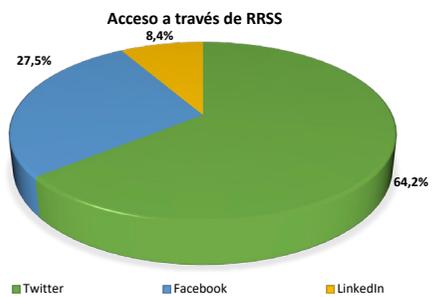
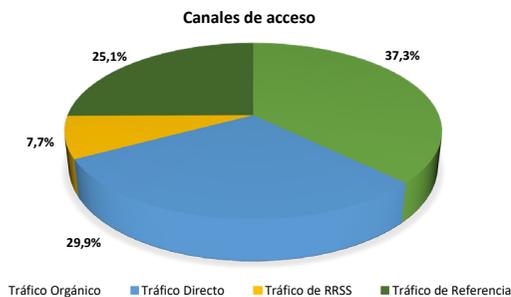
A continuación se muestran los datos estadísticos más relevantes del ecosistema web, relativos al año 2021, según Google Analytics.

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](#)

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

## Difusión y divulgación



Durante los últimos meses de 2021 (las visitas fueron restringidas anteriormente debido a la pandemia de COVID-19), CénitS recibió la visita de más de 250 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.

Adicionalmente, las distintas jornadas organizadas tuvieron un total de 80 asistentes presenciales, 110 asistentes online, mediante la herramienta Zoom, y 85 visualizaciones a través de Youtube.

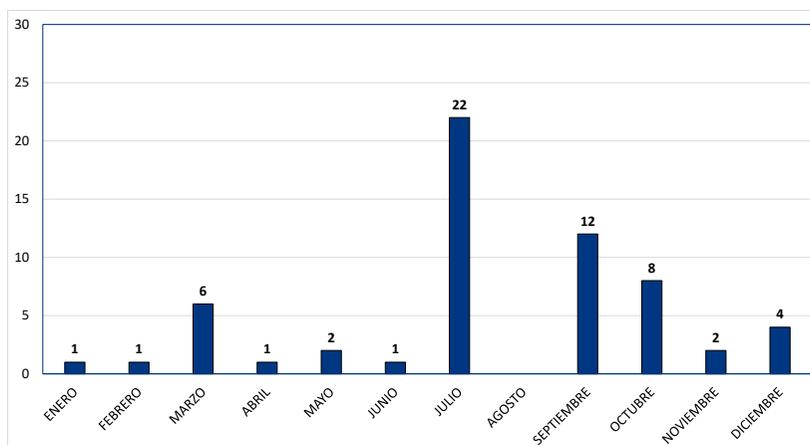
## CénitS-COMPUTAEX en los medios

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
1	4	2	60

Fecha	Titular	Fuente
<b>TELEVISIÓN</b>		
24/10/2021	CénitS-COMPUTAEX	"Programa Innovamos. Canal Extremadura"
<b>RADIO</b>		
17/05/2021	Entrevista al Director General de COMPUTAEX con motivo del Día mundial de Internet	"Crónica Extremadura. Radio Nacional de España"
01/07/2021	El Ministro de Ciencia e Innovación visita Cáceres	Cadena COPE
01/07/2021	El Centro Nacional de Investigación en Almacenamiento Energético tendrá que estar en 2023	Cadena SER
21/07/2021	Entrevista sobre el proyecto MiPyme Digital	"La Ventana. Cadena SER"
<b>PRENSA ESCRITA</b>		
29/10/2021	HeritaGen, una nueva forma de acceder a la información genética	Diario HOY
29/10/2021	CénitS y sus proyectos diversos	Diario HOY

### PRENSA DIGITAL



## Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos

Fecha	Nombre	Lugar	Participación
22/01/2021	EU4Health Programme 2021-2027, a vision for a healthier European Union.	Comisión Europea (virtual)	Asistente
26-27/01/2021.	The 1st annual EDIH conference. Gearing up towards European Digital Innovation Hubs (EDIH).	Comisión Europea (virtual)	Asistente
10/02/2021	Presentation event of HPC4SME Assessment Tool.	Comisión Europea (virtual)	Asistente
11/02/2021	Webinar Ayudas para Proyectos de I+D para Empresas Extremeñas.	Extremadura Avante (virtual)	Asistente
17/02/2021	Taller Introducción a la extracción de conocimiento a partir de Big Data.	Cátedra Telefónica (virtual)	Asistente
02/03/2021	Acto de adhesión al Pacto por la Ciencia y la Tecnología en Extremadura.	Centro Universitario de Mérida	Asistente
11/03/2021	Webinar Ayudas para Proyectos de I+D para Empresas Extremeñas.	Extremadura Avante (virtual)	Asistente
18/03/2021	PRACE-ETP4HPC Workshop on HPC Education and Training for Industry Users.	Comisión Europea (virtual)	Asistente
22-26/03/2021.	Workshop Collaboration between European Digital Innovation Hubs in the network, including trans-national cross-border hubs and corridors.	Comisión Europea (virtual)	Asistente
16/04/2021	EuroHPC Summit Week 2021. Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE).	Comisión Europea (virtual)	Asistente
27/04/2021	Presentación del hub de innovación digital de Extremadura (Tech4E).	Fundecyt-PCTEX (virtual)	Ponente
13/05/2021	Seminario online: Big Data y Data Science (Internet).	Escuela de Administración pública, Mérida (virtual)	Ponente
09-10/06/2021	Jornadas Nacionales de Investigación en Ciberseguridad (JNIC).	JNIC (virtual)	Organizador y Ponente
22/06/2021	Reunión del patronato de la Fundación COMPUTAEX.	CénitS (virtual)	Asistente
29/06/2021	Presentación del Ecosistema de Salud de Extremadura de la ECHAlliance.	FundeSalud (virtual)	Ponente
30/06/2021	Jornada de presentación del proyecto "Cáceres, destino digital. Relocalizando puestos de trabajo".	Institución Cultural "El Brocense", Cáceres	Ponente
21/07/2021	Jornada de presentación del proyecto MiPYME Digital: hacia la transformación digital de las micro, pequeñas y medianas empresas.	CénitS (presencial y virtual)	Organizador y Ponente

03/09/2021	Solemne acto de inauguración del curso académico de la Universidad de Extremadura. Acto de investidura de nuevos doctores.	Facultad de Empresa, Finanzas y Turismo, Cáceres	Asistente
06-10/09/2021	Startup Ole 2021	Auditorio Fonseca, Salamanca	Asistente
16/09/2021	Jornada "Centro Nacional de Competencias en Supercomputación. Promoviendo el uso del HPC en la innovación empresarial".	Spain EuroCC (virtual)	Ponente
16-17/09/2021	15ª Conferencia de Usuarios de la Red Española de Supercomputación.	Red Española de Supercomputación (evento virtual)	Organizador y Ponente
24/09/2021	Noche de los investigadores.	Escuela Politécnica de Cáceres	Organizador y Ponente
30/09/2021	Jornada de preselección de empresas del proyecto MiPYME Digital: programa de consultoría y servicios gratuitos para PYMES extremeñas.	Cénits (presencial y virtual)	Organizador y Ponente
2-16/11/2021	Semana de la Ciencia	CénitS	Organizador y Ponente
12/11/2021	Jornada Talento Femenino. Observatorio Extremeño de Igualdad. Confederación Regional Empresarial Extremeña (CREEX).	Sede COEBA/CREEX, Badajoz (presencial y virtual)	Asistente
16/11/2021	Jornada CDTI. Herramientas de teletrabajo, ciberseguridad y emprendimiento digital.	CDTIC Centro Demostrador TIC (virtual)	Asistente
16/11/2021	Feria Internacional de Energía y Medio Ambiente, Genera 2021.	IFEMA, Madrid	Asistente
25/11/2021	Cena solidaria XII Premios Grada.	Palacio de Cristal del Hotel Río, Badajoz	Asistente
26/11/20221	Reunión del patronato de la Fundación COMPUTAEX.	Cénits (virtual)	Asistente
17/12/2021	Hacia la digitalización de las mipymes: casos de éxito.	Cénits (presencial y virtual)	Organizador y Ponente
30/11/2021	II Foro Conecta Empresas. Proyecto Conecta PYME 4.0.	FEVAL Institución Ferial de Extremadura, Don Benito	Asistente
02/12/2021	Webinar de sesión introductoria al Plan de recuperación, transformación y resiliencia y al componente 17.	Ministerio de Ciencia e Innovación (virtual)	Asistente
09/12/2021	Formación Sistrol BMS CénitS-CPD	CénitS	Asistente
17/12/2021	Hacia la digitalización de las mipymes: casos de éxito	Cénits (presencial y virtual)	Organizador y Ponente
30/12/2021	Presentación de resultados del proyecto MiPYME Digital.	Cénits (virtual)	Organizador y Ponente





# CénitS - CPD

**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, almacenamiento 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.**

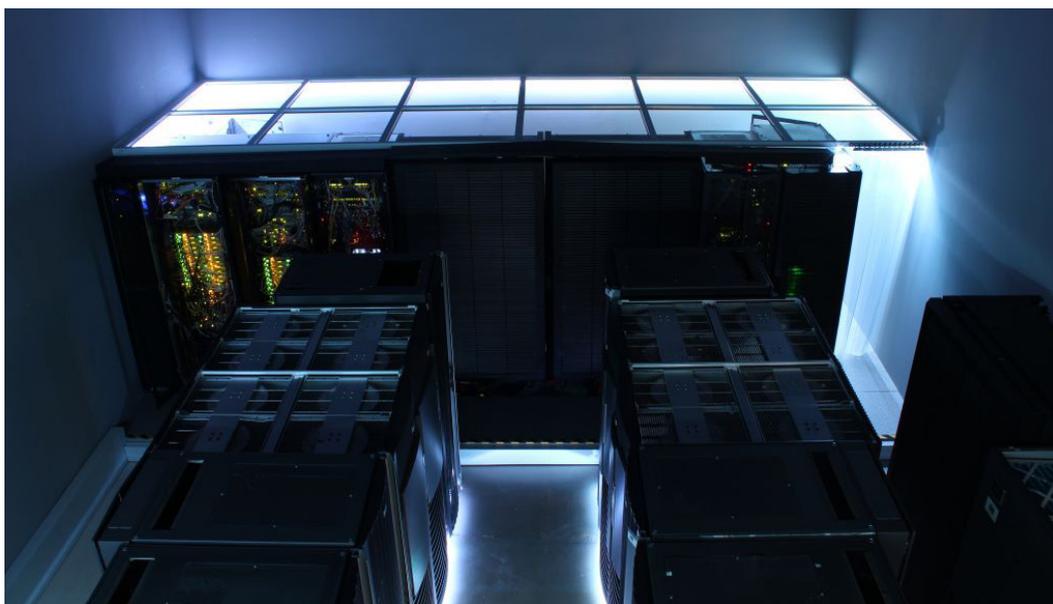


A finales del año 2008 la junta de Extremadura adquirió el supercomputador LUSITANIA con el fin de abordar nuevos proyectos científicos y tecnológicos situándose, de este modo, en el mapa de la supercomputación en España y Europa.

El destino inicial del supercomputador LUSITANIA era un edificio de la, en aquel momento, futurible Ciudad de la Salud de Cáceres. Sin embargo, cuando el supercomputador fue entregado, el edificio que supuestamente iba a alojarlo aún no había sido construido. Un supercomputador de las características de LUSITANIA requería unas infraestructuras especiales: sistemas de climatización adaptados, sistema de alimentación redundante, sistemas de detección y extinción de incendios, etc. En aquel momento, la mejor opción para alojar el supercomputador era el CETA-CIEMAT en la ciudad de Trujillo. Se trata de un centro dependiente del CSIC y que ya contaba con un Centro de Proceso de Datos (CPD) capaz de satisfacer las necesidades del supercomputador. Por lo que finalmente se instaló allí LUSITANIA con carácter temporal.



En el año 2015 la Fundación COMPUTAEX adquirió el supercomputador LUSITANIA II y, durante el periodo de un año, este estuvo desplegado en un contenedor marítimo en el exterior del edificio del Centro de Cirugía de Mínima Invasión (CCMI). La problemática era la misma que en el caso del primer supercomputador seis años antes, la falta de un espacio acondicionado, pero se contaba con la experiencia adquirida durante el desarrollo del proyecto Smart Green Data Center (SGDC) donde, entre otros resultados, se demostró la viabilidad de este tipo de despliegues.



En el año 2017 se habilitó un espacio en el CCMI para alojar los supercomputadores de la Fundación y nodos del supercomputador Mare Nostrum que, gracias a un convenio de colaboración con el CNS-BSC (Centro Nacional de Supercomputación-Barcelona Supercomputing Center), pueden ser utilizados por usuarios del CénitS y de la Red Española de Supercomputación (RES). Se acondicionó un estudio de televisión para transformarlo en un CPD.

En el año 2019 se adquirió LUSITANIA III y se integró con la infraestructura ya existente, ampliando los recursos disponibles, potenciando la infraestructura en la nube del centro y añadiendo nuevas capacidades al conjunto como la computación con GPUs (Graphical computing Units; Unidades de Procesamiento Gráfico).

En el año 2021 se construyó un Centro de Proceso de Datos en el edificio de la Bioincubadora de la Ciudad de la Salud de Cáceres para alojar las infraestructuras de cómputo de la Fundación COMPUTAEX. 12 años después de la llegada del supercomputador LUSITANIA se materializaba la construcción del Centro de Proceso de Datos que necesitaba el centro CénitS.

La construcción del Centro de Proceso de Datos se realizó entre los meses de febrero y julio. A finales de junio se comenzó el traslado del equipamiento a la nueva ubicación. Para ello, se detuvieron los servicios de cómputo y se procedió al desmontaje de los equipos que constituyen LUSITANIA II, ya que debían instalarse en los nuevos racks equipados con puerta trasera para su refrigeración. Se realizó la instalación de todo el equipamiento en la nueva sala, el despliegue del cableado de datos y la configuración de los equipos, poniéndose en producción los sistemas apenas dos semanas después de la parada programada.

La infraestructura del nuevo CPD está compuesta por varias áreas que se describen a continuación:



## Sala IT

---

La nueva infraestructura cuenta con una sala de tecnologías de la información de 60 m<sup>2</sup> con capacidad para albergar 23 racks convencionales equipados con una puerta trasera para su refrigeración.

La sala está equipada con un suelo técnico elevado para canalizar por debajo el cableado de datos y eléctrico y las tuberías del sistema de refrigeración. De esta forma se facilita el acceso y la operación sobre el cableado distribuido mediante bandejas y sobre las propias tuberías, resultando en una sala más funcional y limpia.



En la sala se encuentran 3 unidades CRAH (Computer Room Air Handler) que son equipos compuestos de filtros, ventiladores y bobinas conectados al sistema de tuberías de agua fría. Estos equipos posibilitan la gestión y el control de la temperatura y la humedad de la sala de forma precisa, permitiendo establecer unas condiciones óptimas para la sala.

En la sala existen dos cuadros eléctricos que otorgan redundancia eléctrica a la infraestructura de cómputo. Todos los racks de la sala se encuentran conectados a los dos cuadros, de tal modo que en el caso de que se produzca un fallo en una de las líneas, la infraestructura no se vea afectada.

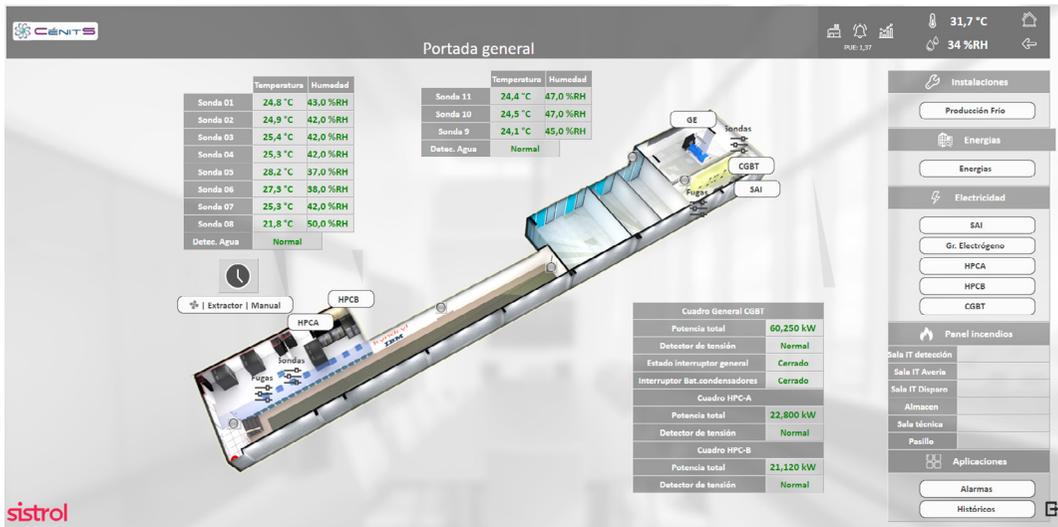
## Sala técnica

---

Se dispone de una sala técnica de 26,6 m<sup>2</sup> que alberga el cuadro general de baja tensión (CGBT), el sistema de alimentación ininterrumpida (SAI), un armario de baterías, un trafo de aislamiento galvánico de 400 kVA, 2 equipos CRAH y el cuadro del Building Management System (BMS).

El cuadro general de baja tensión alimenta al sistema de refrigeración y a los dos cuadros eléctricos de la sala IT (estos últimos protegidos por el SAI). A la entrada del cuadro están el trafo de aislamiento galvánico y el grupo electrógeno. El sistema está diseñado de modo que si se produce un fallo en el suministro eléctrico exterior el SAI alimenta a la infraestructura de cómputo hasta la puesta en marcha del grupo electrógeno.

El sistema de alimentación ininterrumpida es un equipo DELTA HPH 200Kw de doble conversión. Otorga a la infraestructura de cómputo una autonomía a máxima potencia (200 kW) de 5 minutos. La labor del SAI es asegurar el suministro eléctrico hasta el arranque y puesta en marcha del grupo electrógeno.



Existen dos equipos CRAH en esta sala que permiten gestionar las condiciones de temperatura y humedad de la sala.

Finalmente, la sala alberga el cuadro del BMS. El BMS o sistema de gestión de edificios es un sistema informático instalado para supervisar y controlar los equipos de climatización, los equipos de energía y los dispositivos de seguridad. Permite la realización de mediciones y la supervisión de parámetros como la temperatura o la humedad en las diferentes salas de la infraestructura con el fin de poder actuar en consecuencia.

### Sala de grupos

Se dispone de una sala de 61 m<sup>2</sup> para albergar los grupos electrógenos de la infraestructura. Actualmente se dispone de un único grupo capaz cubrir las necesidades actuales y las que surjan a medio plazo, aunque la sala puede llegar a albergar otros dos grupos electrógenos más para alcanzar una configuración N+1 (con el doble de potencia y un grupo de respaldo).

Las características del grupo electrógeno son las siguientes:

- 450 kVA (360 kW) en servicio de emergencia (rating emergency)
- 400 kVA (320 kW) en servicio continuo (rating continuous)
- Depósito de combustible de 888 litros (más de 10 horas en funcionamiento emergencia y más de 11 horas en continuo a máxima potencia)

### Recinto de Chillers

En el exterior del edificio se ha habilitado un recinto donde están las enfriadoras. El sistema actual cuenta con 300 kW frigoríficos totales, con una configuración N+1 (200 kW + 100 kW). Se dispone de dos enfriadoras adquiridas durante la construcción del nuevo CPD y otra enfriadora que formaba parte del anterior sistema de refrigeración del centro y que sirve ahora de respaldo. Los equipos nuevos son dos Liebert HPC-S con batería doble de free-cooling y bomba con variador de frecuencia. La tecnología free-cooling es un sistema que se vale de la temperatura del aire exterior para enfriar o refrigerar una infraestructura. Su uso resulta muy útil en climatización ya que permite reducir el gasto de los equipos y disminuir su uso mejorando ostensiblemente la eficiencia energética.

## CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III



12 años después de su creación, la Fundación COMPUTAEX y su centro CénitS cuentan con una infraestructura propia acorde a sus necesidades y que le permitirá proporcionar nuevos y mejores servicios. Por un lado, la disponibilidad de tecnologías como el free-cooling favorece la eficiencia energética de la solución, que es uno de los grandes desafíos a los que se enfrentan los centros de procesos de datos, reduciendo el coste ambiental y económico de los servicios prestados. Por otro lado, la nueva infraestructura cuenta con una mayor capacidad de resiliencia y de escalabilidad, lo que otorga al conjunto la robustez y flexibilidad necesarias para satisfacer necesidades presentes y futuras de la sociedad.

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**

---

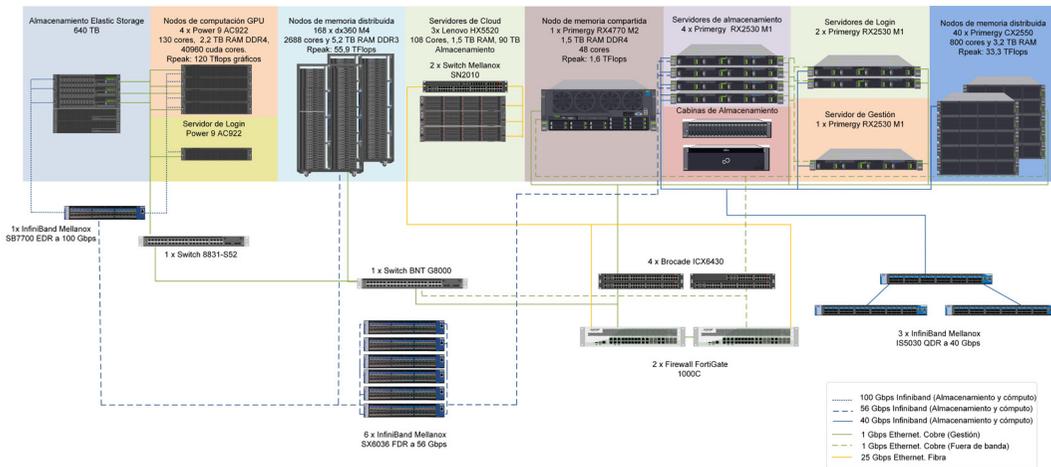
- Elastic Storage Server GL1S con una capacidad de almacenamiento de 656TB RAW:
  - 1 enclosure con 84 slots: 82 x 8TB Enterprise HDD y 2x 800GB SSD.
  - 2 Data Servers: 2 x 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 256GB RAM.
  - 1 ESS Management Server: 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 64GB RAM.
  - 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

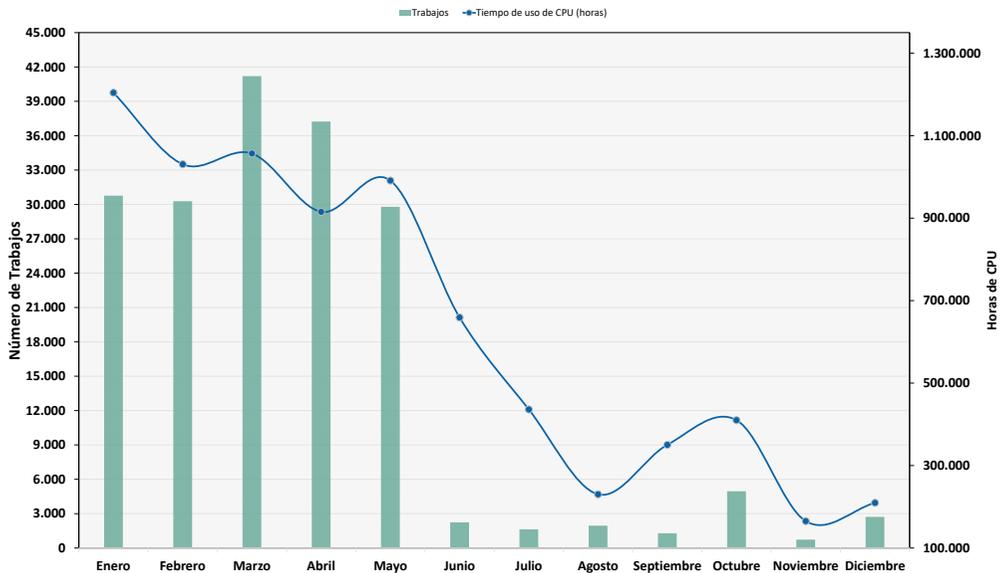


Unión Europea

## Consumo de recursos

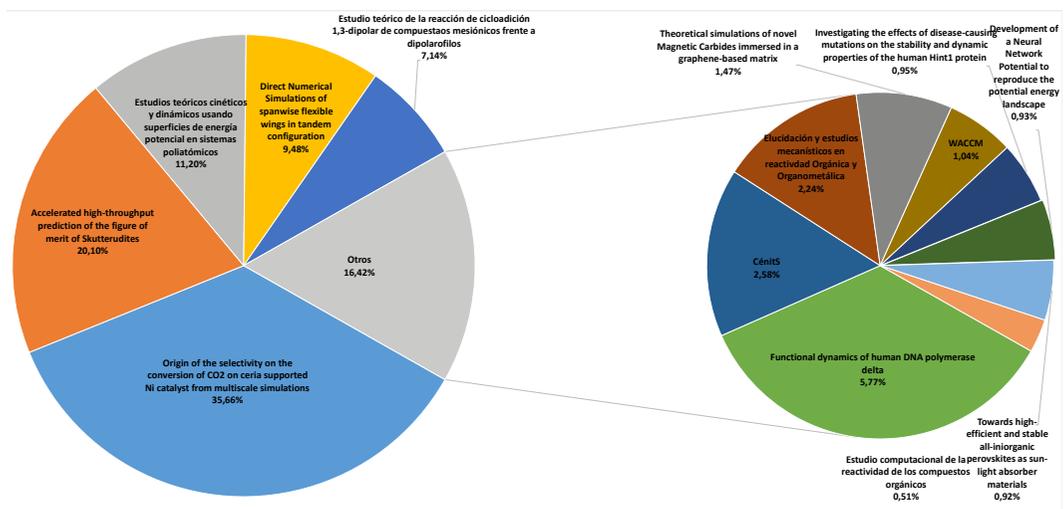
### Uso de recursos

Durante el año 2021, 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 2021, obteniendo un total de 7.658.612 horas de cómputo.



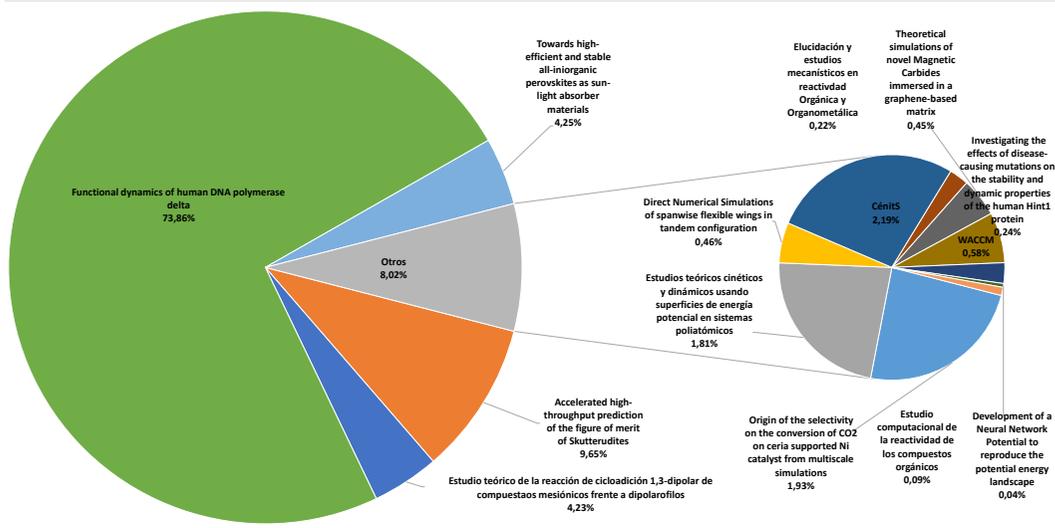
### Uso de CPU

A continuación, se separa 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.



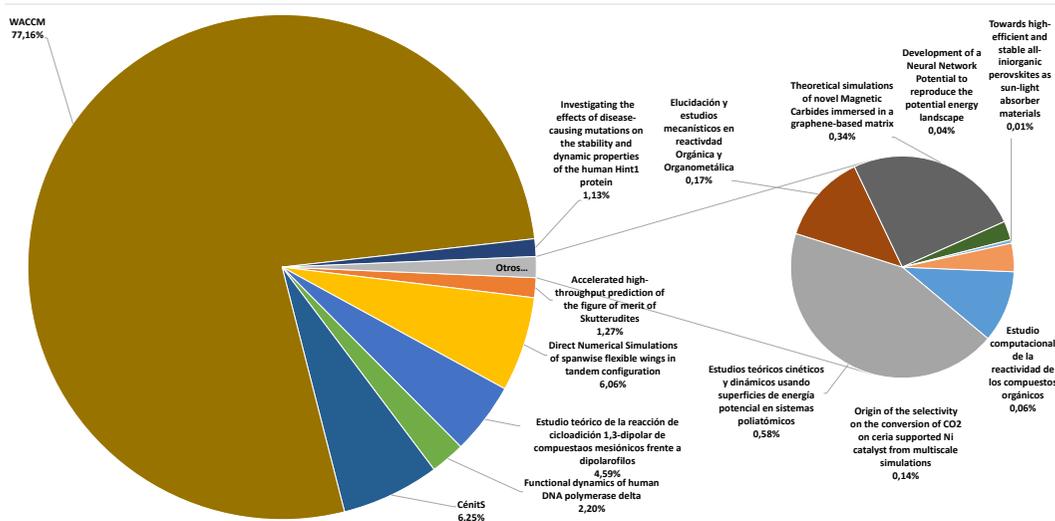
### Uso de memoria principal

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 *Functional Dynamics of Human DNA Polymerase Delta* el principal consumidor con casi el 74% 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 realizada por dos proyectos principalmente, alcanzando un 83% aproximadamente del consumo total.



## Usuarios

Durante el año 2021, un importante número de técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en los supercomputadores LUSITANIA II y LUSITANIA III, alojados en CénitS-CPD.

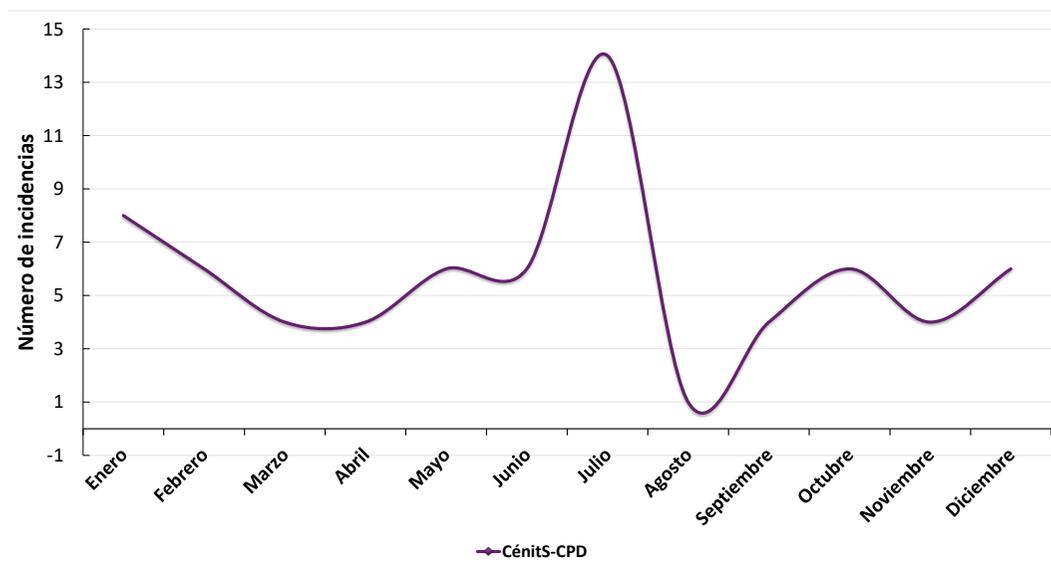
### Consultas de asesoramiento técnico

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

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

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

El número de incidencias de usuario se ha incrementado ligeramente con respecto al año anterior, debido a las continuas tareas de mantenimiento llevadas a cabo por el equipo de CénitS. Se han resuelto un total de 69 incidencias distribuidas entre los distintos meses de 2021, tal y como se muestra a continuación.



**COMPUTACIÓN TÉCNICA**

Biopython

Bowtie

BWA

COMSOL

CPMD

Fastp

FastQC

GATK

Gaussian 16

GaussView 6

Hisat2

IDL

Jellyfish

Matlab

MIRA

netCDF

NWChem

Octave

Orca

Picard

Python

R

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

---

Windows Server

---

---





# 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. Ab-initio based data mining techniques for studying the emergent phenomena in La1-xSrxMnO3/BaTiO3 heterojunctions

Juan Ignacio Beltrán Fínez. Universidad Complutense de Madrid. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]

### 3. 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.

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

CénitS-COMPUTAEX.

### 5. 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]

### 6. 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]

### 7. Cálculos ab-initio

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

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

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

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

Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.

### 10. Estudio del efecto de las nubes en la radiación solar.

Antonio Serrano Pérez. Grupo de investigación AIRE de la Universidad de Extremadura.

- 11. Estudios computacionales en reacciones multicomponentes**  
Carlos Fernández Marcos. Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la Universidad de Extremadura.
- 12. Evaluación de los recursos eólicos y solares en Andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoescala (RE NUEVA)**  
Antonio David Pozo Vázquez y Vicente Lara Fanego. Dpto. de Física de la Universidad de Jaén.
- 13. First principles simulations of amorphous GeSe compounds for memory selectors**  
Pablo Ordejon. ICN2 (Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology).  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].
- 14. 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]
- 15. Implementación paralela de modelo matemático de Tsunamis en el Mediterráneo y Atlántico**  
David Valencia, Laboratorio de Radiactividad Ambiental de la Universidad de Extremadura.
- 16. Magnetic connectivity through the Solar Partially Ionized Atmosphere**  
Ángel de Vicente. Dpto. de Física Solar del Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC).
- 17. 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.
- 18. 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]
- 19. 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]
- 20. SIATDECO: Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones en Energías Ecológicas**  
Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal, CETIEX, Fundecyt y CénitS-COMPUTAEX.
- 21. Supercomputing and e-science.**  
Gabriel Chiodo. Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica, Universidad Complutense de Madrid.
- 22. The impact of the 11 year cycle in WACCM simulations**  
Gabriel Chiodo, Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica 2, Universidad Complutense de Madrid. Natalia Calvo, Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García, 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).

**23. WRF-Chem simulations for aerosol cloud interaction research (REINFORCE).**

Lucas Alados Arboledas. Universidad de Granada.

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



## 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. 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**

CénitS-COMPUTAEX y Cloudex S.L.

**6. 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].

**7. 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).

**8. Consolider TECNO\_FUS**

José M<sup>a</sup> Gómez Ros. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

- 9. Construcción de superficies de energía potencial**  
Eloísa González Lavado, Dpto. de Ingeniería Química y Química Física (GCYDEX), de la UEx.
- 10. CultivData – Integración, análisis y gestión de la recolección y tratamiento de datos de cultivo para la mejora de la eficiencia agraria**  
Enrique Moreno Sánchez. TFG en Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx.
- 11. Desarrollo de nuevas reacciones multicomponentes de isonitrilos**  
Carlos Fernández Marcos. Dpto. de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad de Extremadura.
- 12. Designing Active Materials toward Formic Acid Reduction**  
Federico Calle Vallejo. Universidad de Barcelona.  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].
- 13. Development of a Neural Network Potential to reproduce the potential energy landscape of gold AuN (N=10-120) anionic, cationic and neutral nanoclusters**  
Andrés Vega-Hierro. Universidad de Valladolid (UVa).  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]
- 14. DFT simulations on the study of the dielectric function of novel nanostructured materials**  
Francesca Peiró. Universitat de Barcelona.  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]
- 15. 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.
- 16. Discovery of new peptides to rescue the mutated p53 tetramer**  
Ernest Giralt Lledó. Institute for Research in Biomedicine (IRB).
- 17. 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].
- 18. Efect of oxygen vacancies in bismut oxide Energy-Loss Near-Edge Structure spectra by ab initio simulations**  
Francesca Peiró (I.P.), Javier Blanco Portals, Sonia Estrade Albiol and Catalina Coll Benejam. Universitat de Barcelona.
- 19. 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.

- 20. Elucidación y estudios mecanísticos en reactividad orgánica y organometálica.**  
Jesús Díaz Álvarez. Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas. Universidad de Extremadura.
- 21. 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.
- 22. Estirpex**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 23. Estirpex-2**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 24. Estudio sobre la HemoDiálisis Progresiva en Pacientes Incidentes (DiPPI)**  
Javier Deira Lorenzo y Miguel Ángel Suarez, del Servicio de Nefrología del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres, Fundación para la Formación e Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura (FundeSalud) y CénitS-COMPUTAEX.
- 25. 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.
- 26. Estudio de efectos estereoelectrónicos en heterociclos saturados hidroxilados**  
Juan Manuel Garrido Zoido. Grupo de investigación QUOREX (Química Orgánica), Universidad de Extremadura.
- 27. Estudio cinético de reacciones poliatómicas mediante el método RPMD**  
Joaquín Espinosa García. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.
- 28. 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.
- 29. 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.
- 30. Exploring the role of K as a promoter in the water-gas shift reaction and methanol synthesis**  
José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]
- 31. 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.

- 32. Glicoconjugados basados en el esqueleto de aminopoliol. Estructura agregación y modificación superficial**  
Pedro Cintas Moreno, Martín Ávalos González, Reyes Babiano Caballero, David Cantillo Nieves, José Luis Jiménez Requejo, Rafael Fernando Martínez Vázquez, Juan Carlos Palacios Albarrán y Esther Matamoros Castellano. Grupo de investigación QUOREX, Universidad de Extremadura.
- 33. 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.
- 34. 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.
- 35. HeritaGen: Ultrasecuenciación y supercomputación para la unificación del patrimonio genealógico y genético extremeño. Aplicación al estudio de enfermedades hereditarias.**  
CénitS-COMPUTAEX, Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara y FundeSalud.
- 36. High-throughput search of dopants for efficient ferroelectric oxide based solar cells**  
José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]
- 37. IFMIF-EVEDA España**  
Fernando Mota García y Ángela García Sanz. Laboratorio Nacional de Fusión. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 38. 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].
- 39. 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.
- 40. Modelización de reacciones multicomponente**  
Carlos Fernández Marcos. Grupo de investigación Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas de la Universidad de Extremadura.
- 41. Novel genomic regions associated to specific complex chromatin marks**  
Ángel Carlos Román. Instituto Cajal - CSIC. Dpto. Systems Circuits Group.

42. **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.
43. **Pedigreeex: gestión automatizada de pedigrís humanos en consejo genético**  
Noelia Alonso Sánchez. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática.
44. **Photo-sensitization of doped ferroelectric oxides using a high-throughput framework.**  
Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
45. **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.
46. **PIT (Programa de Innovación y Talento): IoTAgro 4.0**  
SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L, y CénitS.
47. **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
48. **Predicting temperature-dependent elastic constants for ultra-high temperature ceramics**  
José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación]
49. **Predicting thermoelastic properties of 2D materials**  
Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
50. **Predicting thermoelastic properties of materials with advanced exchange correlation functionals**  
Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
51. **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.
52. **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.
53. **Prospéctica: Big Open Data para el análisis y estudio de la influencia del entorno en enfermedades oncológicas**  
CLOUDEX, S.L. y CénitS-COMPUTAEX.
54. **Quantum Chemistry and Molecular Modeling**  
Francisco J. Olivares del Valle. Grupo de investigación Quantum Chemistry And Molecular Modelling, Universidad de Extremadura.

**55. Química computacional**

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

**56. 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.

**57. 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.

**58. 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., Amaisys Technologies S.L., Albufera Energy Storage S.L. y CénitS.

**59. SCioT**

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

**60. Simulación de procesos químicos**

Santiago Tolosa Arroyo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, UEx.

**61. 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).

**62. 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.

**63. 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.

**64. 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.

- 65. 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.
- 66. Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos**  
Joaquín Espinosa García. Universidad de Extremadura.
- 67. 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].
- 68. Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación**  
Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres y CénitS-COMPUTAEX.
- 69. Understanding a novel mode of non-canonical CaM activation**  
Alvaro Villarroel. Instituto Biofísica (Basque Centre for Biophysics), CSIC, UPV/EHU.
- 70. Zr-based metal-organic frameworks for biomass valorization**  
Manuel Ortuño. ICIQ (Instituto Catalán de Investigación Química).  
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].



## Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

- 1. 5G-CLOPS: Cross-Layer Optimization in 5G Networks**  
Universidad de Granada, Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.
- 2. Accesibilidad web**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 3. Adecuación de la red de comunicaciones para CénitS**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 4. Adecuación del CPD de LUSITANIA II**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 5. Adquisición de equipamiento científico-tecnológico de la Fundación COMPUTAEX**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 6. Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS**  
CénitS-COMPUTAEX.

- 7. 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.
- 8. Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (Aldealab c3)**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 9. 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.
- 10. 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.
- 11. Análisis y diseño de prototipo experimental para el estudio y la validación de redes de alta velocidad**  
Moisés Gaitán Fernández. TFG en Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx.
- 12. Big Geodata - Implantación de un entorno Big Data para la integración y análisis de datos geoespaciales en el centro de supercomputación extremeño CénitS-COMPUTAEX**  
Fátima Dávila Benítez. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software de la UEx.
- 13. Cálculos de eficiencia condicionada con datos internacionales**  
José Manuel Cordero Ferrera. Departamento de Economía, Universidad de Extremadura.
- 14. CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial)**  
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)
- 15. COM.INFO.COM: Predictibilidad de infoestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPv6 y FTTX**  
Alfonso Gazo Cervero, José Luis González Sánchez, Francisco Javier Rodríguez Pérez y Javier Carmona Murillo. Grupo de investigación GÍTACA de la Universidad de Extremadura.
- 16. Colaboración con el observatorio tecnológico UEX-HP**  
Universidad de Extremadura, Hewlett Packar y CénitS-COMPUTAEX.
- 17. ConSumar**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 18. 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.
- 19. 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.

- 20. Creación de un ecosistema de negocio en cloud computing. Gestión automatizada de la infraestructura**  
Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.
- 21. Diseño y Simulación de Dispositivos y Sistemas de Comunicaciones Ópticas**  
Rafael Gómez Alcalá. Universidad de Extremadura.
- 22. Eco-traffic**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 23. ENGAGE: Banda ancha de alta velocidad en zonas rurales**  
Diputación Provincial de Badajoz, la Diputación Provincial de Cáceres y la Asociación de Universidades Populares de Extremadura (AUPEX), CénitS-COMPUTAEX.
- 24. 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.
- 25. 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.
- 26. Diseño de un sistema de gestión por procesos de negocio en CénitS/COMPUTAEX**  
Felipe Lemus Prieto. Trabajo Final de Máster.
- 27. 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.
- 28. Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects**  
Levent Gürel. Director, Computational Electromagnetics Research Center (BILCEM)
- 29. 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.
- 30. 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.
- 31. 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.

- 32. Evaluación de AzequiaMPI**  
Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Universidad de Extremadura.
- 33. 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.
- 34. 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).
- 35. Future Internet: eficiencia en las redes de altas prestaciones**  
Red Temática Fierro (incluyendo CénitS-COMPUTAEX).
- 36. 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.
- 37. Green code**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 38. Identificación de patrones de comportamiento en el funcionamiento ordinario de aerogeneradores de un parque eólico mediante técnicas de Advanced Analytics basadas en Big Data**  
CénitS-COMPUTAEX y Canalytics Big data Experts, S.L.
- 39. 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.
- 40. Implementación del modelo Cloud Computing en un centro de supercomputación.**  
Jaime Rivero Ramos. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC.
- 41. 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.
- 42. 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.
- 43. 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.

- 44. Mecanismos para la Gestión Eficiente del Plano de Control y del Plano de Datos en Redes Móviles 5G**  
Jesús Calle Cancho. Tesis Doctoral, Universidad de Extremadura.
- 45. Medianell Virtual Press**  
Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L.
- 46. Metodología y framework para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos HPC.**  
Javier Corral García. Diploma de Estudios Avanzados.
- 47. 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).
- 48. 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.
- 49. Optimización de Algoritmos y Aplicaciones Paralelas en Sistemas Heterogéneos Mediante el Uso Combinado de Modelos Formales de Cómputo y Comunicaciones**  
Juan Antonio Rico Gallego, Juan Carlos Díaz Martín, Juan Luis García Zapata, Carmen Calvo Jurado y Jesús Álvarez Llorente (Universidad de Extremadura) y Javier Corral García y Jesús Calle Cancho (CénitS-COMPUTAEX).
- 50. 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.
- 51. 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].
- 52. 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.
- 53. PIT (Programa de Innovación y Talento): Publicidad, marketing digital y diseño web**  
Synopsis 103 y CénitS.
- 54. Proyecto SEDE**  
SET Informática, Comunicación e Ingeniería, y CénitS-COMPUTAEX.

- 55. Proyecto SysGobEx**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 56. Red-Integra**  
Ayuntamiento de Cáceres, Câmara Municipal de Portalegre, Município de Castelo Branco, Fundación COMPUTAEX-CénitS, Ayuntamiento de Plasencia, Triángulo Urbano Ibérico Rayano Triurbir AEIE y Universidad de Extremadura.
- 57. Red NOVA sostenible**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 58. Redes inalámbricas MIMO de última generación en zonas rurales**  
Francisco Luna Valero. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.
- 59. 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.
- 60. Servicio Central de Apoyo a la Investigación (SCAI)**  
Universidad de Córdoba (UCO).
- 61. SIBE**  
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).
- 62. Simulación de dispositivos ópticos integrados**  
Rafael Gómez Alcalá. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 63. Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio**  
Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.
- 64. Sistema Blockchain para la trazabilidad de historiales clínicos en entornos HPC**  
Jesus Tovar Trujillo. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEX.
- 65. Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD**  
CénitS-COMPUTAEX.
- 66. Sistema de vigilancia tecnológica para un centro de supercomputación.**  
Javier Lázaro Jareño. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.
- 67. Smart Green Data Center**  
Cobra Instalaciones y Servicios, S.A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS-COMPUTAEX, CETIEX e INTROMAC.
- 68. SmartNet5G: Desarrollo de nuevos mecanismos de gestión en redes programables de próxima generación**  
GÍTACA (Grupo de Investigación de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas) de la Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.

**69. 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.

**70. 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).

**71. Supercomputación y Desarrollo GRID**

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

**72. Supercomputing electromagnetics for plasmonic nanostructures. Application to optical nanoantennas and metamaterials**

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

**73. TaxonomTIC 2013**

CénitS-COMPUTAEX.

**74. TaxonomTIC 2014**

CénitS-COMPUTAEX

**75. TaxonomTIC 2015**

CénitS-COMPUTAEX

**76. TaxonomTIC 2016**

CénitS-COMPUTAEX

**77. TaxonomTIC 2017**

CénitS-COMPUTAEX

**78. TaxonomTIC 2018**

CénitS-COMPUTAEX

**79. TaxoTIC 2019**

CénitS-COMPUTAEX

**80. TaxoTIC 2020**

CénitS-COMPUTAEX

**81. Unidad Interactiva 3D**

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

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

CénitS-COMPUTAEX

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

CénitS-COMPUTAEX

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

CénitS-COMPUTAEX

**85. Vale tecnológico Bobimex S.L.**

CénitS-COMPUTAEX

**86. Vale tecnológico Isatex, CEE.**

CénitS-COMPUTAEX

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

CénitS-COMPUTAEX

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

CénitS-COMPUTAEX

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

CénitS-COMPUTAEX

**90. 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