

COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2022



FUNDACIÓN COMPUTAEX

FUNDACIÓN, COMPUTACIÓN Y TECNOLOGÍAS AVANZADAS DE EXTREMADURA

© Fundación COMPUTAEX

Edición:

Fundación COMPUTAEX

Diseño:

Estudio EXTREMEÑO

Autores:

Javier Corral García.

José Manuel Delgado López.

Moisés Gaitán Fernández.

Felipe Lemus Prieto.

Miguel Ángel Mahillo Paniagua.

Julio Mañas Viniestra.

Juan Manuel Murillo Rodríguez.

Gema Villa Galán.

Impreso en España Printed in Spain

ISBN: 978-84-09-53060-1.

Depósito legal: CC-000153-2023

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

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



INDICE

4 FUNDACIÓN COMPUTAEX

5 Patronato

6 - 7 Equipo CénitS 2022

8 RES (Red Española de Supercomputación)

9 Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)

10 - 20 PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR CénitS

21 - 27 PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS

28 - 33 RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

34 - 38 CONVENIOS DE COLABORACIÓN, ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN

39 - 46 Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC

46 Visitas guiadas

47 Patrocinios

48 CénitS - CPD

50 - 56 CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III





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.

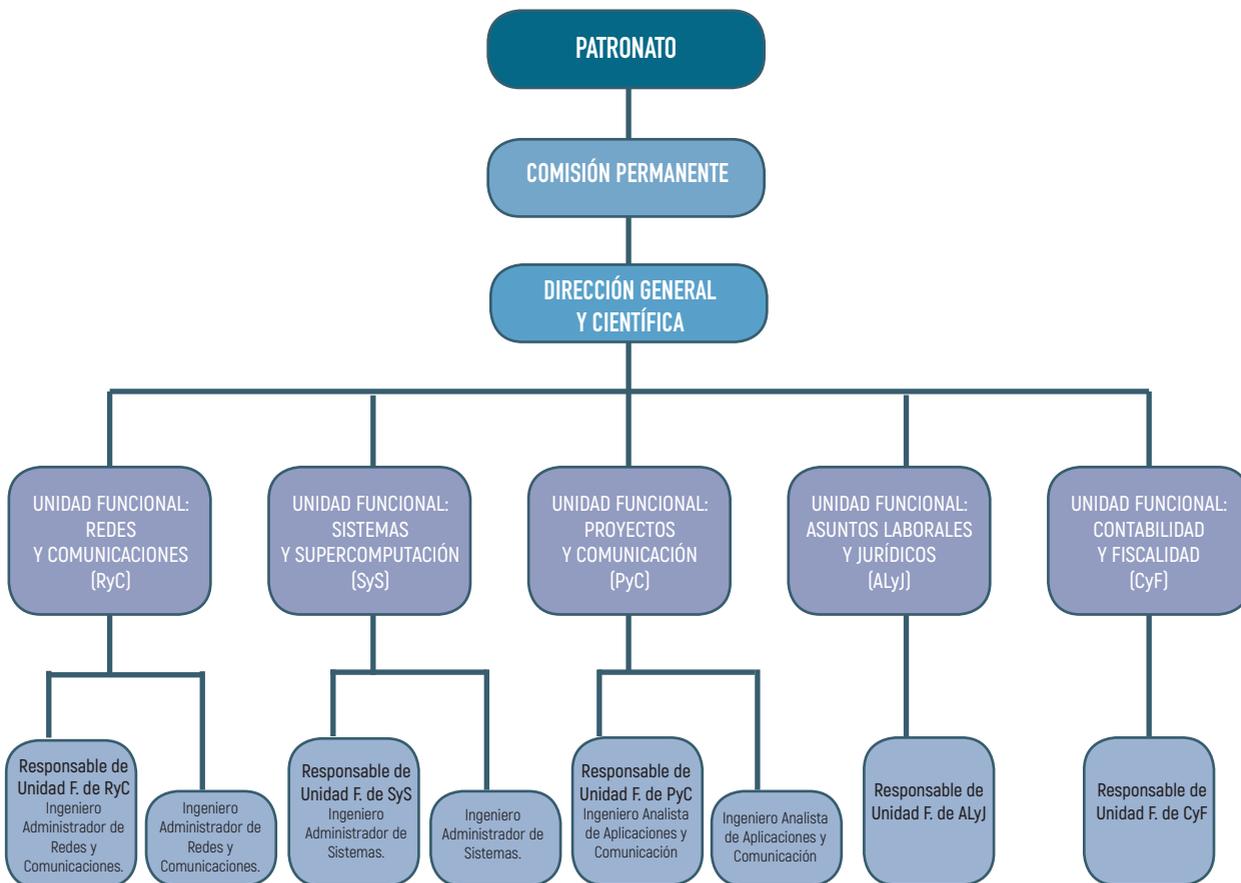
Objeto y fines

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

Equipo CénitS 2022

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.



Alumnos que realizaron sus prácticas curriculares en CénitS durante 2022:

Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software:

José Manuel Molero Arranz.
María Martín Rodríguez.
Emilio Delgado Muñoz.
Rubén Marín Lucas.

Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Computadores:

David Barroso Moro.

Módulo de FP de Grado Superior de Administración de Sistemas Informáticos en Red

Ángel García Moreno.

Módulo de FP de Grado Medio de Sistemas Microinformáticos y Redes

David Pérez Monroy.



JUAN MANUEL MURILLO RODRÍGUEZ
Director General de la Fundación COMPUTAEX



FELIPE LEMUS PRIETO
Responsable de la Unidad Funcional
de redes y comunicaciones



JAVIER CORRAL GARCÍA
Responsable de la Unidad Funcional
de proyectos y comunicación



JULIO MAÑAS VINIEGRA
Responsable de personal
y de asuntos jurídicos



JOSÉ MANUEL DELGADO LÓPEZ
Técnico en contabilidad y fiscalidad



MIGUEL MAHILLO PANIAGUA
Administrador de redes y comunicaciones



MOISÉS GAITÁN FERNÁNDEZ
Administrador de sistemas
y supercomputación



JAVIER SÁNCHEZ RIVERO
Técnico de apoyo a la I+D+i



DANIEL TALAVÁN VEGA
Técnico de apoyo a la I+D+i



ANDRÉS VENTURA VALIENTE
Técnico de apoyo a la I+D+i



ANDRÉS SÁNCHEZ
Técnico de apoyo a la I+D+i



ENRIQUE MORENO
Técnico de apoyo a la I+D+i



CARLOS CASTAÑARES
Becario de investigación



DAVID BARQUERO
Oficial 1º Mantenimiento



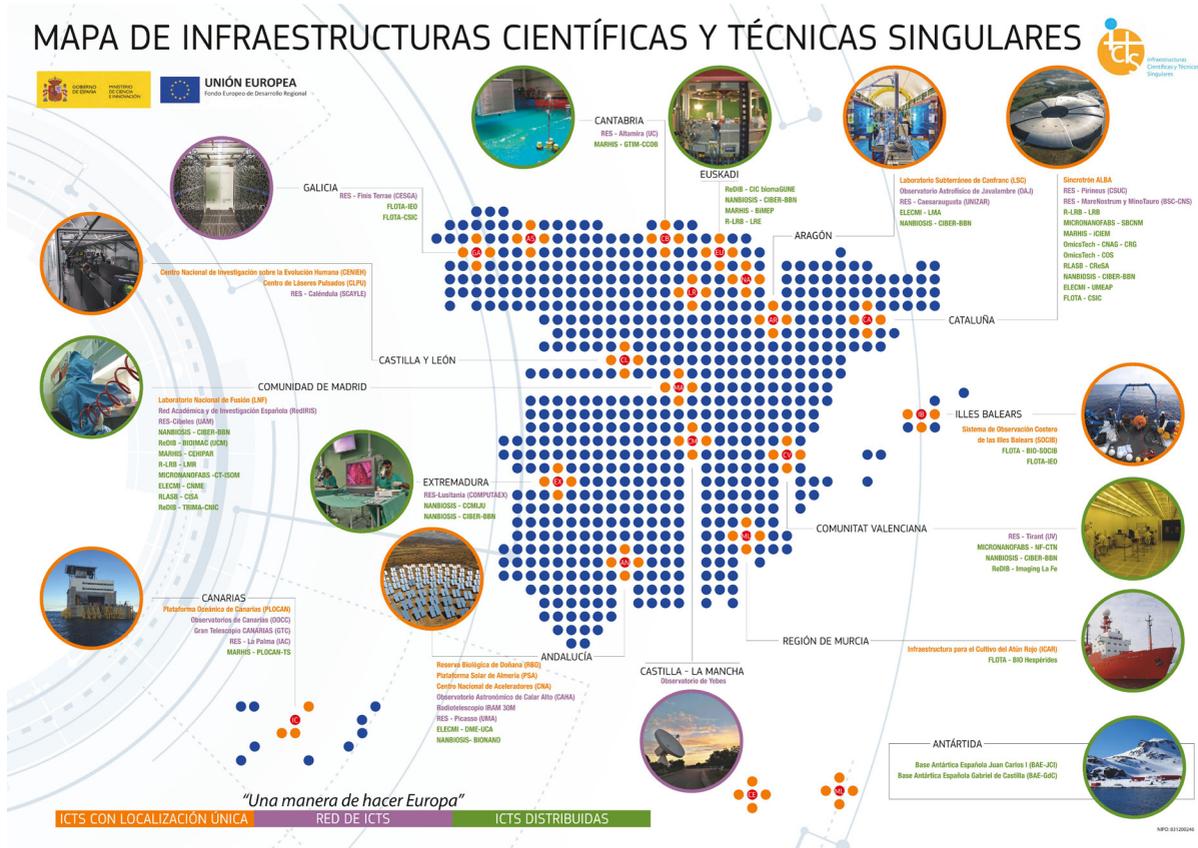
GEMA VILLA GALÁN
Auxiliar de administración

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.



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 aquéllas 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.

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR CénitS



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR CénitS

Euro CC



Durante 2022, el equipo de CénitS ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, aportando soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.

El proyecto EuroCC y la Acción de Coordinación y Soporte (CSA) CASTIEL tienen como objetivo fortalecer la infraestructura de la computación de alto rendimiento (HPC), big data e inteligencia artificial (IA) en Europa, a través de la creación de Centros Nacionales de Competencia (NCC). Cada NCC ofrece servicios de HPC, big data e IA a la industria, la administración pública y el mundo académico, adaptados a sus necesidades específicas. Los NCC se coordinan a nivel europeo, compartiendo mejores prácticas y recursos disponibles y están enfocados en la planificación de servicios y recursos formativos existentes, el desarrollo de actividades de apoyo, la definición de un modelo de negocio, la promoción de estas tecnologías y el impulso de nuevas sinergias. Las tareas incluyen, entre otros objetivos, el desarrollo de nuevas competencias, el impulso de la transferencia tecnológica y estimular la colaboración con la industria. El proyecto también incluye la creación de un mapa de competencias y asesoramiento experto.

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 (Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), SCAYLE (Supercomputación de Castilla y León) y UNICAN (Universidad de Cantabria).

El proyecto 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

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

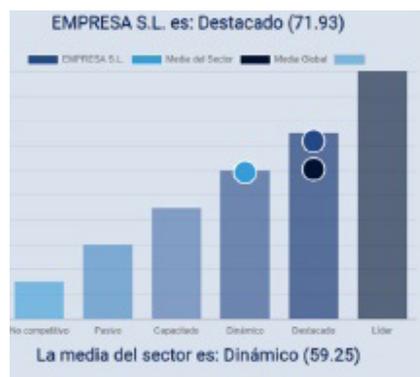


CONECTA PYME

El proyecto transfronterizo Conecta Pyme 4.0 se desarrolla en el territorio EUROACE (Extremadura, Centro y Alentejo) con el objetivo de impulsar la transformación digital y mejorar la competitividad de las pequeñas y medianas empresas. Además de la implementación de tecnologías como Big Data, Cloud Computing, Blockchain e Internet de las cosas, este proceso implica cambios profundos en el modelo de negocio, la cultura empresarial, las personas, los procesos y las infraestructuras. El objetivo es digitalizar procesos, incrementar el valor de productos y servicios, mejorar las capacidades digitales de los empleados y optimizar los procesos de trabajo. Para ello se han establecido cuatro actividades principales: priorizar la organización y las personas, digitalizar procesos productivos, mejorar el diseño de productos y fomentar la cooperación empresarial. El proyecto se ha centrado en la digitalización de procesos productivos, mediante una herramienta para evaluar la madurez digital de las empresas y proporcionar diagnósticos personalizados y planes de acción.

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.

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”.



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



Quantum Spain persigue construir el primer computador cuántico de alta prestación en el sur de Europa, basado en qubits y tecnología superconductor. El proyecto tiene tres objetivos: crear un computador cuántico, desarrollar un servicio de acceso remoto en la nube y desarrollar librerías de algoritmos cuánticos aplicables a problemas reales. Además, se colaborará con empresas del sector y programas europeos de tecnología y computación cuántica. La infraestructura permitirá, principalmente, a empresas y al sector público experimentar con Quantum Machine Learning (QML). Entre sus usos destacarán especialmente aquellos relacionados con aplicaciones en inteligencia artificial, criptografía y ciberseguridad, industria química y farmacéutica, o finanzas y logística. Asimismo, a largo plazo, el proyecto busca establecer un ecosistema cuántico competitivo, impulsando avances en tecnologías de hardware “deep tech”.

Entidades participantes: Consorcio 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, Fundación 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.

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

Anemoi: Modelo Predictivo de Productividad y Operatividad de Parques Eólicos

El proyecto Anemoi ha tenido como objetivo general analizar datos de aerogeneradores del parque eólico del Merengue de NATURGY en Plasencia, para optimizar su rendimiento y prolongar su vida útil. Para ello se han identificado y correlacionado aquellas variables que influyen en su productividad, con objeto de anticipar posibles fallos. Anemoi evolucionó a partir de un prototipo previo, utilizando técnicas analíticas de Big Data y la capacidad de procesamiento del supercomputador LUSITANIA III. Así, el proyecto ha propuesto emplear modelos predictivos y técnicas de inteligencia artificial para simular y optimizar la operatividad de parques eólicos. Los objetivos específicos han incluido la sensorización avanzada, el uso de datos climáticos para predecir la generación de energía, y el análisis de datos históricos de parques eólicos previos.

Entidades participantes: Fundación COMPUTAEX y NATURGY Iberia S.A.

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).

Anemoi2: Modelo Predictivo de Productividad y Operatividad de Parques Eólicos

El proyecto Anemoi2 presenta como objetivos analizar los datos operacionales de parques eólicos reales, en colaboración con NATURGY, para entender mejor el funcionamiento de los aerogeneradores. De este modo, se centra en identificar aquellas variables que influyen en la vida útil, así como las causas de las distintas averías. Los métodos incluyen técnicas avanzadas de supercomputación, Internet of Things, Big Data e inteligencia artificial para modelar el comportamiento de los aerogeneradores y predecir un funcionamiento óptimo y mejorar su productividad, reduciendo el número de incidencias. El trabajo desarrollado ha permitido ya alcanzar distintos objetivos, como el análisis de nuevas variables, la comparación de fuentes de datos abiertas, el análisis de datos históricos, el análisis estadístico inicial y la identificación de datos anómalos. También se ha modelado la curva de potencia y la temperatura del aceite de la multiplicadora utilizando técnicas de inteligencia artificial. Así, los resultados obtenidos permiten mejorar la productividad y la eficiencia de los parques eólicos.

Entidades participantes: Fundación COMPUTAEX-CénitS, y NATURGY Iberia S.A.

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, modificado por el Decreto 18/2018, de 6 de febrero, y de Resolución de 22 de julio de 2021, por la que se aprueba la convocatoria de las mismas correspondientes al ejercicio 2021-2022. (DOE número 149, de 4 de agosto de 2021).

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

El programa de Innovación y Talento (PIT), impulsado por la Junta de Extremadura, tiene como objetivo potenciar el empleo y la formación de jóvenes menores de 30 años en la región extremeña. Con una duración de 12 meses, combina la formación teórica (impartida en este caso por la Fundación COMPUTAEX), con prácticas profesionales en empresas privadas. Este proyecto se ha centrado en el desarrollo y la implementación de la plataforma e-learning “Campus Inteligencia Límite”, diseñada para proporcionar un sistema de aprendizaje personalizado y seguro a educadores, administradores y estudiantes con discapacidad intelectual. Su objetivo ha sido permitir la formación a distancia, adaptando la formación presencial a formato online, para mejorar las competencias y habilidades de más de 200 usuarios con inteligencia límite y discapacidad intelectual, facilitando así su acceso al empleo. De este modo, este programa ha promovido el desarrollo de talento y la inserción laboral en áreas estratégicas.

Entidades participantes: Fundación Magdalena Moriche (FMM) y CénitS-COMPUTAEX.

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

Los recientes avances en biotecnología y tecnologías digitales están facilitando la transición hacia la medicina personalizada, con un enfoque particular en enfermedades como el cáncer, enfermedades relacionadas con el envejecimiento, enfermedades minoritarias e infecciosas. El plan complementario de biotecnología aplicada a la salud tiene como objetivo desarrollar herramientas para el diagnóstico, pronóstico y terapias personalizadas. Su enfoque incluye el análisis de genomas, transcriptomas y proteomas de humanos y patógenos, además del desarrollo de terapias innovadoras como los nanofármacos. COMPUTAEX participa en la Línea de actuación 2, que se enfoca en la implementación y análisis de bases de datos en medicina de precisión. Esta línea busca construir bases de datos a partir de muestras de biofluidos y tejidos de cohortes no orientadas y/o orientadas a patologías específicas. También implica el desarrollo de análisis avanzados de modificaciones genómicas, epigenéticas, metabolómicas, proteómicas y transcriptómicas. Gracias a la inteligencia artificial y a las plataformas de análisis -ómicas, se permitirá la integración y contextualización de los datos, favoreciendo la identificación personalizada de biomarcadores.

Entidades beneficiarias por regiones: Cataluña (5), País Vasco (9), Castilla la Mancha (2), Galicia (7), Extremadura (4), Aragón (3) y Andalucía.

Entidades beneficiarias en Extremadura: Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón (CCMIJU); Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX); Fundación para la Formación e Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura (FundeSalud); Universidad de Extremadura (UEx).

Este Plan ha sido cofinanciado por el Ministerio de Ciencia e Innovación con fondos de la Unión Europea NextGenerationEU (PRTR-C17.11) y las Comunidades Autónomas.



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: computación cuántica, biotecnología aplicada a la salud, eficiencia energética, inteligencia artificial, computación y comunicaciones de altas prestaciones, seguridad de la información y las comunicaciones, y sostenibilidad, eficacia y eficiencia energética en computación de altas prestaciones.

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 GR21183.

Supercomputador LUSITANIA IV

Proyecto para la adquisición del supercomputador LUSITANIA IV gracias a los fondos de la Unión Europea: Next Generation EU. La nueva infraestructura, que se unirá a los actuales supercomputadores LUSITANIA II y III en el CPD de CénitS, cuenta con procesadores x86_64 de última generación, mayor cantidad de memoria RAM de alta velocidad y nuevos servidores de memoria compartida, superando la capacidad de LUSITANIA II y III en potencia de cálculo. Los equipos estarán interconectados con dispositivos InfiniBand y Ethernet para proporcionar alta velocidad y baja latencia. También se incluirá un sistema de almacenamiento mejorado para aumentar la capacidad y la fiabilidad de los datos de cómputo. Todo esto mejorará la capacidad de cómputo del centro, permitiendo una mayor contribución a la investigación científica y tecnológica, e impulsando el procesamiento de datos y el aprendizaje automático.

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.

CénitS CPD: Resilient datacenter

Proyecto para potenciar la infraestructura del Centro de Proceso de Datos (CPD) de la Fundación, con el objetivo de reforzar y ampliar la alta disponibilidad, seguridad, fiabilidad, velocidad de acceso y eficiencia energética de sus equipos de supercomputación, incluyendo los supercomputadores LUSITANIA II y III, mejorando su conectividad y su capacidad de almacenamiento. Esta ampliación permitirá un aumento considerable del almacenamiento, facilitando a los investigadores y usuarios de CénitS, el análisis de datos y la utilización de modelos más complejos de Inteligencia Artificial. Las mejoras también buscan garantizar la redundancia en todos los sistemas críticos. Asimismo, los objetivos del proyecto también incluyen mejorar los mecanismos de firewalling, actualizar la electrónica de red, mejorar la conectividad y aumentar la capacidad de almacenamiento con redundancia de datos.

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).



EDIH T4E - Extremadura Digital Innovation Hub: Tech for Efficiency

El Digital Innovation Hub de Extremadura persigue liderar la digitalización de las empresas extremeñas, a través de la oferta de servicios de formación, desarrollo de negocio e I+D+i. En línea con las estrategias RIS3 de Extremadura y Extremadura 2030 de Economía Verde y Circular, busca mejorar la calidad de vida, incrementar la competitividad empresarial y fomentar la sostenibilidad ambiental. Para cumplir sus objetivos, el DIH ofrecerá servicios especializados como análisis de necesidades, asesoramiento técnico, transferencia de conocimientos, pruebas de concepto, formación y tutoría, además de apoyo en la búsqueda de fuentes de financiación y en la creación de consorcios para proyectos. Además, se pretende trabajar en red con múltiples actores regionales, para catalogar todos los recursos disponibles que contribuyan a la digitalización de la economía extremeña.

Entidades: Fundación Fundecyt Parque Científico y Tecnológico de Extremadura (Fundecyt-PCTEx); Diputación de Badajoz; Diputación de Cáceres; Universidad de Extremadura (UEx); Fundación COMPUTAEX; Asociación Empresarial Extremeña de Tecnologías de la Información y la Comunicación, AEXTIC; Cluster de la Energía de Extremadura; CICYTEX; FEVAL; Cámara de comercio de Cáceres; Cámara de comercio de Badajoz.

Proyecto financiado por la Comisión Europea a través de la convocatoria Digital-2021-EDIH-01 (European Digital Innovation Hubs).

ExQNet (Extremadura Quantum Network)

El proyecto ExQNet (Extremadura Quantum Network) se centra en el diseño y la evaluación de una red de comunicaciones cuánticas para interconectar infraestructuras críticas, utilizando software cuántico para proporcionar conexiones seguras y fiables. El proyecto analiza la posibilidad de construir la base de ExQNet sobre la actual Red Científico Tecnológica, utilizando fibras ópticas para facilitar la transición de las redes de conmutación de paquetes actuales a las comunicaciones cuánticas. Se persigue así poder interconectar Centros de Proceso de Datos, supercomputadores, hospitales, centros tecnológicos, institutos de investigación, universidades y empresas. El proyecto también ha investigado la viabilidad de usar repetidores cuánticos para ampliar el alcance de las comunicaciones cuánticas, que actualmente están limitadas a distancias inferiores a 100 km. De este modo, ExQNet permitirá además investigar y experimentar sobre los avances producidos en el campo de las comunicaciones cuánticas.

Proyecto financiado por la Consejería de Educación y Empleo. Junta de Extremadura. PAI (Personal de Apoyo a la Investigación). Ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la Comunidad Autónoma de Extremadura, correspondiente al ejercicio 2021 (Resolución de 22 de julio de 2021).

Qserv-UEx. Desarrollo y Operación de Microservicios Cuánticos. PID2021-124054OB-C31

Proyecto de la convocatoria Nacional de Proyectos de Generación de Conocimiento en Coordinación con la Universidad de Castilla la Mancha y la Universidad de Deusto. Qserv-UEx se centra en el desarrollo de técnicas y metodologías para la creación de software cuántico, inspirándose en la ingeniería de software clásica. Se espera que el software cuántico coexista con los sistemas clásicos y que se dedique a solucionar problemas no resolubles por estos últimos. La colaboración entre sistemas clásicos y cuánticos se manejará mediante principios orientados a servicios, aunque actualmente no existen las tecnologías necesarias para crear dichos sistemas híbridos. El proyecto abordará tres limitaciones principales de los servicios cuánticos actuales: desarrollo y operación de microservicios cuánticos (Universidad de Extremadura), calidad y pruebas de microservicios cuánticos (Universidad de Castilla-La Mancha), y aspectos de seguridad (Universidad de Deusto). Se aspira a proveer técnicas y herramientas para el desarrollo de sistemas complejos bajo el paradigma disruptivo de la computación cuántica, siendo pionero en el joven campo de la ingeniería de software cuántico.

Simulador del Continuo Cloud-To-Thing para asegurar la calidad de servicio de Aplicaciones Distribuidas.

Proyecto correspondiente a la convocatoria nacional de proyectos de prueba de concepto 2022. Propone el desarrollo y comercialización del framework C2TSim, diseñado para facilitar la creación de aplicaciones para el Internet de las Cosas (IoT). Este entorno permite a los desarrolladores crear y probar aplicaciones en entornos virtualizados antes de su lanzamiento, mejorando la calidad del servicio (QoS). El software será compatible con las prácticas de integración y despliegue continuo, reduciendo el costo y el riesgo asociado al desarrollo de aplicaciones distribuidas. Esta herramienta tiene como objetivo ayudar a las empresas a enfrentar la creciente complejidad de estas aplicaciones, que involucran múltiples servicios y nodos, y a garantizar un nivel mínimo de calidad para evitar el rechazo de los usuarios y el daño a la reputación de la empresa.

Ruralserv: una arquitectura basada en UAVS para el despliegue de Servicios Digitales en zonas rurales sin conectividad.

Proyecto financiado convocatoria de proyectos de Transición Ecológica y Digital 2021. Ruralserv tiene como objetivo principal proporcionar una solución tecnológica que permita el desarrollo y gestión de nuevas aplicaciones de software capaces de ofrecer servicios digitales a las personas que viven en zonas rurales y que de otra manera no podrían acceder a ellos. Aprovechando las capacidades de los Vehículos Aéreos No Tripulados (UAVs), se propone una arquitectura de software sostenible para el despliegue óptimo de aplicaciones IoT que puedan mejorar la calidad de vida de la población rural. Para ofrecer servicios digitales a esta población, es necesario diseñar un modelo que permita: proporcionar cobertura a la zona rural; proporcionar métodos y herramientas que permitan a los desarrolladores crear aplicaciones altamente distribuidas capaces de adaptarse a diferentes entornos; y proporcionar métodos y herramientas para la distribución y despliegue de servicios más cerca de los usuarios para evitar posibles retrasos que, en algunos casos, impactan de forma significativa en el correcto funcionamiento de las aplicaciones que se están ejecutando.

CénitS-CPD: Equipamiento científico tecnológico

COMPUTAEX ha ampliado y renovado recientemente sus equipos de computación de alto rendimiento (HPC) para mejorar los servicios de supercomputación que ofrece. La creación de un nuevo Centro de Proceso de Datos (CPD) potenciará el desarrollo regional, proporcionando recursos avanzados para nuevos desafíos científicos y tecnológicos en Extremadura. El nuevo equipamiento no solo mejora la competitividad en investigación, sino que también beneficia al sector productivo, permitiendo a las empresas llevar a cabo proyectos de innovación tecnológica. Así, el objetivo principal de este proyecto ha consistido en la creación del Centro de Proceso de Datos de CénitS, donde se alojan todos los equipos de computación de alto rendimiento de la Fundación COMPUTAEX, fortaleciendo así los servicios ofrecidos.

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

JUNTA DE EXTREMADURA

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

CénitS-CPD: Consolidación de infraestructuras de supercomputación para el progreso de la investigación científico-técnica

Proyecto destinado a la construcción del Centro de Proceso de Datos (CPD) de CénitS con el objetivo de consolidar todas las herramientas de informática y comunicaciones del centro, incluyendo los supercomputadores LUSITANIA II y LUSITANIA III. El objetivo ha consistido en diseñar, construir y equipar el CPD para albergar y fortalecer los sistemas de supercomputación existentes, asegurando alta disponibilidad, seguridad, fiabilidad, velocidad de acceso y eficiencia energética. Para proporcionar un servicio de alta calidad, es esencial tener un suministro eléctrico estable, una red de datos de alta capacidad, un sistema de enfriamiento eficiente, medidas de seguridad adecuadas y espacio para el crecimiento futuro. Este CPD resulta, por tanto, fundamental para el correcto funcionamiento de los supercomputadores. El desarrollo del proyecto ha permitido mejorar la calidad del servicio y ampliar los recursos de computación de alto rendimiento, fortaleciendo las líneas de investigación existentes y facilitando nuevas investigaciones.

Este proyecto ha sido 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).



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.

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 (Consorci de Serveis Universitari de Catalunya), SCAYLE (Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León), UAM (Universidad Autónoma de Madrid), y CénitS-COMPUTAEX.



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS



PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS

CénitS ofrece su infraestructura, sus recursos y apoyo técnico para acometer proyectos (científicos, técnicos o empresariales). En esta sección se relacionan los proyectos de investigación a los que se ha dado soporte en CénitS durante el ejercicio 2022. 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.**

COMPUTATIONAL MODELLING OF THE LATTICE THERMAL CONDUCTIVITY OF ALLOYS WITH THERMOELECTRIC APPLICATIONS

José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla (US).

Ciencias de la Vida.

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

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, κ_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.

ESTUDIOS COMPUTACIONALES EN REACCIONES MULTICOMPONENTES

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

Ciencias de la Tierra.

El proyecto busca desarrollar nuevas reacciones multicomponente de isonitrilos (RMCI) para la síntesis de compuestos bioactivos, dada la creciente demanda en el campo biomédico. Este tipo de reacciones, que incluyen la combinación de 3 o más reactivos con alta eficiencia atómica, se aplican en la industria farmacéutica y pueden ser influenciadas por pequeñas variaciones en los reactivos o condiciones de reacción. Se utilizarán métodos computacionales para estudiar teóricamente nuevas RMCI, específicamente, reacciones tipo Ugi con enoles y procesos tándem de cicloadición de isonitrilos para la obtención de aminas aromáticas. El proyecto consta de tres fases: localización de los mínimos de energía de los reactivos y productos, elaboración de un perfil energético completo de la reacción, y racionalización de los datos obtenidos para entender los resultados experimentales y calcular, o diseñar nuevas estrategias de síntesis.

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 (UEX).

Ciencias de la Vida.

Este proyecto investiga sistemas poliatómicos en fase gaseosa, enfocándose en su estudio cinético y dinámico teórico a través de superficies de energía potencial (SEP). La creación de estas SEP se basa en cálculos ab initio de alto nivel y son fundamentales para describir completamente un sistema reactivo. A partir de las SEP, se obtiene información cinética mediante la Teoría Variacional del Estado de Transición (VTST) y datos dinámicos a través de cálculos de trayectorias cuasi-clásicas (QCT). El proyecto se aplica a campos como la química de combustión, la química atmosférica, la catálisis y la bioquímica. Se han logrado avances significativos, incluyendo cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos, estudios sobre el sistema $\text{Cl}+\text{NH}_3$ y la construcción inicial de la SEP para el sistema $\text{OH}+\text{NH}_3$, un proceso desafiante debido a la complejidad del camino de reacción.

GALEMYS: ALINEAMIENTO, ENSAMBLADO Y SECUENCIACIÓN DEL GENOMA DEL DESMÁN DE LOS PIRINEOS

Juan Luis García Zapata, Universidad de Extremadura (UEX).

Ciencias de la Vida.

Galemys busca secuenciar y construir una base de datos genómica del Desmán de los Pirineos (*Galemys pyrenaicus*), y compararla con genomas de otros micromamíferos utilizando técnicas de Deep Learning y Aprendizaje por Refuerzo. La creación de la base de datos y el procesamiento y comparación genómica requieren alta capacidad de almacenamiento y cómputo, haciendo necesaria la utilización de computación de alto rendimiento (HPC) y métodos de computación científica específicos para la bioinformática. El equipo de investigación posee experiencia en genómica y optimización de HPC, y en el uso de técnicas de inteligencia artificial para el análisis genómico. El objetivo no es solo estudiar el genoma del Desmán, sino también desarrollar nuevos métodos de análisis genómico y aplicar herramientas de Deep Learning para la comparación de genomas, un avance respecto a los métodos estadísticos tradicionales.



GCYDEX. SUPERFICIES DE ENERGÍA POTENCIAL EN SISTEMAS POLIATÓMICOS. ESTUDIOS CINÉTICOS Y DINÁMICOS TEÓRICOS

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

Ciencias de la Vida.

El Grupo de Cinética y Dinámica de la Universidad de Extremadura (GCYDEX) se enfoca en el estudio teórico cinético y dinámico de sistemas poliatómicos en fase gaseosa, utilizando Superficies de Energía Potencial (SEP) construidas a partir de cálculos ab initio de alto nivel. Los métodos de Teoría Variacional del Estado de Transición y trayectorias cuasi-clásicas son empleados para obtener información cinética y dinámica. El grupo está construyendo SEP analíticas para varios sistemas poliatómicos con aplicaciones en combustión, química atmosférica, catálisis y bioquímica. Han logrado cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos, investigaciones en el sistema $\text{Cl}+\text{NH}_3$, y han iniciado la construcción de la SEP para el sistema $\text{OH}+\text{NH}_3$. El proyecto, financiado parcialmente por la Junta de Extremadura, refleja la transición en la investigación desde sistemas átomo+diátomo a poliatómicos.

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 (UEx).

Ciencias de la Vida.

QUOREX es un grupo de docentes e investigadores enfocados en varias líneas de investigación en las que la supercomputación juega un papel relevante. Esto incluye el estudio de reactividad química en moléculas orgánicas, diseño de cápsulas moleculares, simulación de enzimas catalíticos y modelización de interacciones de glicolípidos. Han centrado sus estudios en la síntesis y estructura de bases de Schiff, la tautomería en derivados de anilinas y o-hidroxinaftaldehídos, y la reactividad química en cápsulas moleculares. También han investigado la hidrogenación de amidas con catalizadores basados en rutenio, y descubierto un nuevo organocatalizador para la síntesis de tetrazoles, importantes en la preparación de antibióticos y otros medicamentos. La supercomputación y los cálculos teóricos han sido fundamentales para sus logros, permitiendo un análisis detallado de los procesos químicos y facilitando el diseño y la optimización de nuevas reacciones y catalizadores.

IN SILICO DESIGN OF LIGHT PROPELLED MOLECULAR MACHINES FOR THE SCRUTINY AND CONTROL OF BIOLOGICAL PROCESSES

Inés Corral. Universidad Autónoma de Madrid.

Ciencias de la Vida.

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

Light-driven molecular machines afford the monitoring and manipulation of biological and biochemical processes within the same spatial and temporal scales of nature, contributing to their understanding and to the identification of potential dysfunctions. The aim of the present activity is to scrutinize the working mechanism of azo-based BODIPY photoswitches, as prototypes for turn-on hypoxia fluorescent probes, and only-photon unidirectional hemithioindigo molecular motors, employing full dimensional molecular dynamics simulations, and state of the art electronic structure approaches. These results are intended to establish structural-photophysical relationships that might serve as a basis for the rational design of novel biomarkers and molecular motors with improved absorbing properties, efficiency and sensitivity.

MODELLING THE NPC1-NPC2 PROTEIN-PROTEIN INTERACTION USING ALPHAFOLD MULTIMER AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

Llabrés Prat. Universitat de Barcelona

Ciencias de la Vida.

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

Niemann-Pick disease type C is a rare genetic disorder in which cholesterol transport across the body is compromised. Its cause are mutations on the lysosomal NPC1 and NPC2 proteins. The aim of this project is to validate a structural model of the protein-protein interaction of NPC1 and NPC2 proteins using AlphaFold Multimer and state-of-the-art molecular modelling methods.

QHS-2022-2-0027 AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF BIMOLECULAR PROCESSES IN ACID ZEOLITES

Mercedes Boronat. Instituto de Tecnología Química, Universitat Politècnica de Valencia - CSIC.

Ciencias de la Tierra.

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

Many industrially relevant hydrocarbon reactions catalyzed by acid zeolites include in their mechanism bimolecular steps, in which new C-C bonds form by reaction of cationic intermediates with neutral molecules. To design highly specific catalysts able to favor one particular process among some competitive ones, it is necessary to go beyond the static description provided by standard DFT calculations and take into account the mobility of the reactants within the zeolite channels. In this project we intend to investigate, using ab initio molecular dynamics (AIMD) metadynamics simulations, the formation of key dimeric intermediates involved in the diethylbenzene-benzene transalkylation and butene skeletal isomerization reactions, in order to find the zeolite microporous structures able to enhance the rate of such bimolecular steps.

SIMULACIÓN DEL CLIMA MEDIANTE EL MODELO WACCM

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

El proyecto busca entender el papel de la estratosfera en el cambio climático mediante el uso del modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model), que incorpora diversas especies químicas relevantes para la meteorología. Se llevan a cabo integraciones climáticas similares en los supercomputadores Lusitania del CémitS, MareNostrum del BSC y FINIS TERRAE del CESGA, por lo que la coordinación entre estos grupos de investigación es un objetivo principal. Se han realizado dos simulaciones del clima utilizando los modelos WACCM y CESM (Community Earth System Model), incluyendo una simulación del siglo XXI en España. El proyecto también examina la posibilidad de realizar estas simulaciones en el supercomputador LUSITANIA, comparando los resultados con los obtenidos en el NCAR (National Center for Atmospheric Research). Los análisis preliminares indican que los resultados son comparables a los obtenidos en el NCAR.

SIMULATIONS OF CARBON-BASED ELECTRODES FOR A NEW GENERATION OF MORE EFFICIENT BATERIES

César González. Universidad Complutense de Madrid [UCM].
Ciencias de la Tierra.

[Proyecto soportado en CémitS procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)]

Solid state batteries have recently acquired a great importance due to their advantages respect the other types. Normally, graphite has been chosen as the anode electrode due to the fantastic electronic properties and the low chemical reactivity. Doping the C-based structures with N, an improvement in the electrode performance is obtained. In this project, using precise mechano-quantum calculations based on the Density Functional Theory, we have planned to study graphite and nanotubes doped with different elements (N or B) in order to establish their potential improvement in the electronic interchange as well as the ionic mobility. We will study the inclusion of different types and number of alkaline ions (Li, Na, K) to find the best arrangements and the saturation number. All these parameters will suggest the best future electrode.

STUDYING THE STATISTICAL PROPERTIES OF CLUSTERS OF PHOTONIC PARTICLES BY COMMUNICATION-FREE PARALLEL MONTE CARLO SIMULATIONS

Juan Manuel Rius Casals. Universidad Politécnica de Cataluña [UPC].

Ciencias de la Tierra.

[Proyecto soportado en CéniT procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)]

Clusters of plasmonic nanoparticles enable a multitude of promising applications as surface-enhanced Raman spectroscopy or tailored properties in colloidal assemblies. Computer simulations play a fundamental role in understanding and predicting the electromagnetic properties of these clusters. We employ a novel communication-free parallel Monte Carlo method to efficiently calculate the optical response of clusters of nanoparticles with different configurations. Our objective is to study the properties of these systems from a statistical point of view, with special emphasis on the coupling effects that determine their collective behavior. From the results, we infer simple rules that allow to better understand them and to design particle arrays with the desired properties.

THEORETICAL PREDICTION OF THE ENVIRONMENTAL IMPACT OF PESTICIDES

Manuel Alcami. Universidad Autónoma de Madrid (UAM)

Ciencias de la Tierra.

[Proyecto soportado en CéniT procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)]

The project will develop a large database of quantum chemical calculation of pesticide that will be central part of an expert system to predict the environmental impact of pesticides based exclusively in Quantum Chemistry calculations.

The ultimate goal is to develop and validate new computational tools to predict the impact of pesticides and their degradation products, providing new predictive decision-making tools in environmental policy.

TRIPHENYLENE-BASED MOLECULES AS ORGANIC SPACERS FOR TUNING STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF 2D PEROVSKITES MATERIALS

Gregorio García Moreno. Universidad de Valladolid.

Ciencias de la Tierra.

[Proyecto soportado en CéniT procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)]

Two-dimensional (2D) hybrid organic-inorganic perovskites have shown great application potential in solar cells and other optoelectronic devices. Based on DFT simulations and AIMD, we study the structure, stability and electronic-structure related properties of a series of 2D Ruddlesden-Popper and Dion-Jacobson perovskites, which adopt the general formula Y_2BX_4 and YBX_4 , respectively, with $Y = \text{TriPh-based organic bication or cation}$, $B = \text{Pb, Sn}$; $X = \text{Cl, Br, I}$.

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 2022.

Publicaciones

A Guide for Quantum Web Services Deployment.

Alvarado-Valiente, J., Romero-Álvarez, J., García-Alonso, J., Murillo, J.M. (2022). In: Di Noia, T., Ko, I.Y., Schedl, M., Ardito, C. (eds) Web Engineering. ICWE 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13362. Springer, Cham.

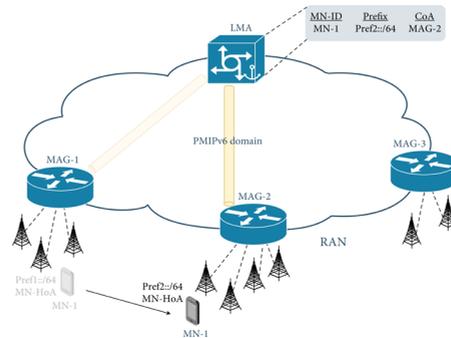
https://doi.org/10.1007/978-3-031-09917-5_42

A Guide for Quantum Web Services Deployment.

García-Alonso, J., & Murillo, J. M. (2022, June). In Web Engineering: 22nd International Conference, ICWE 2022, Bari, Italy, July 5–8, 2022, Proceedings (Vol. 13362, p. 493). Springer Nature.

A Novel Link-Network Assignment to Improve the Performance of Mobility Management Protocols in Future Mobile Networks.

Calle-Cancho, J., Carmona-Murillo, J., González-Sánchez, J. L., & Cortés-Polo, D. (2022). Wireless Communications and Mobile Computing, 2022.



Analyzing the Performance of Feature Selection on Regression Problems: A Case Study on Older Adults' Functional Profile

Rojo, J., de Pinho, L. G., Fonseca, C., Lopes, M. J., Helal, S., Hernández, J., ... & Murillo, J. M.. in IEEE Transactions on Emerging Topics in Computing, 2022,

<http://doi: 10.1109/TETC.2022.3181679>. (JCR Q1)

Blockchains' federation for enabling actor-centered data integration

Rojo, J., Hernandez, J., Foschini, L., Bellavista, P., Berrocal, J., Rodriguez, J. M. M., & García-Alonso, J.. ICC 2022 - IEEE International Conference on Communications, 2022, pp. 3430-3435

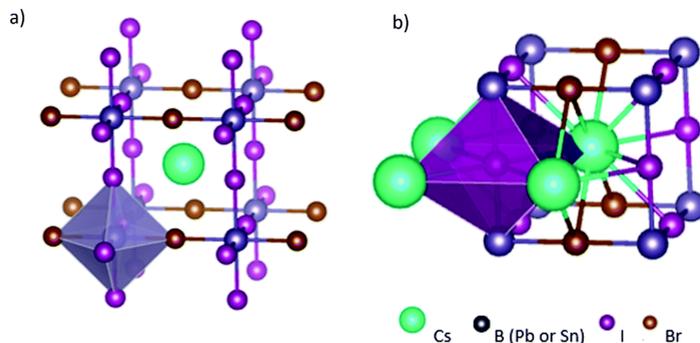
<https://doi.org/10.1109/ICC45855.2022.9838506>.

Catalytic activity of PtCu intermetallic compound for CO oxidation: A theoretical insight.

Suárez, J. A., Plata, J. J., Márquez, A. M., & Sanz, J. F. (2022). *Catalysis Today*, 383, 339-344.

Cation substitution effects on the structural, electronic and sun-light absorption features of all-inorganic halide perovskites.

Sánchez-Palencia, P., García, G., Wahnón, P., & Palacios, P. (2022). *Inorganic Chemistry Frontiers*, 9(7), 1337-1353.



Charting the Lattice Thermal Conductivities of I-III-VI₂ Chalcopyrite Semiconductors.

Plata, J. J., Posligua, V., Marquez, A. M., Fernandez Sanz, J., & Grau-Crespo, R. (2022). *Chemistry of Materials*, 34(6), 2833-2841.

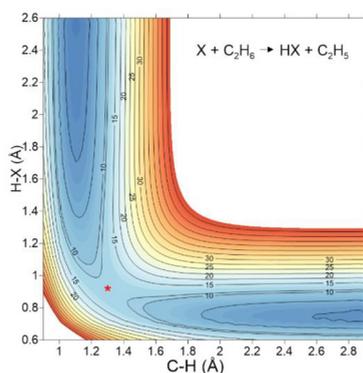
Context-aware privacy-preserving access control for mobile computing.

Herrera, J. L., Chen, H. Y., Berrocal, J., Murillo, J. M., & Julien, C. (2022). *Pervasive and Mobile Computing*, 101725.

<https://doi.org/10.1016/j.pmcj.2022.101725> (JCR Q2)

Current Status of the X + C₂H₆ [X = H, F(2P), Cl(2P), O(3P), OH] Hydrogen Abstraction Reactions: A Theoretical Review.

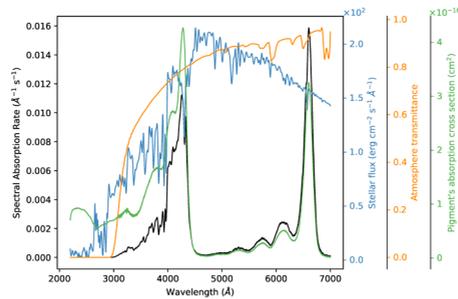
Espinosa-Garcia J, Rangel C, Corchado JC. *Molecules*. 2022; 27(12):3773.



ExoPhot: The Photon Absorption Rate as a New Metric for Quantifying the Exoplanetary Photosynthetic Activity Fitness.

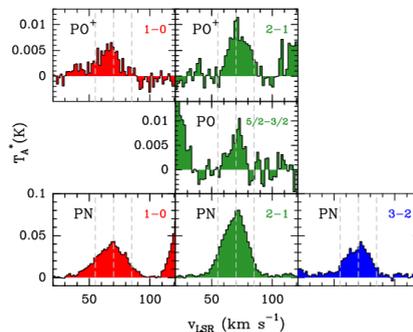
Marcos-Arenal, P., Cerdán, L., Burillo-Villalobos, M., Fonseca-Bonilla, N., de la Concepción, J. G., López-Cayuela, M. Á., Gómez, F., & Caballero, J.A. (2022). *Universe*, 8(12), 624.

<https://doi.org/10.3390/universe8120624>



Ionize Hard: Interstellar PO+ Detection.

Rivilla VM, García De La Concepción J, Jiménez-Serra I, Martín-Pintado J, Colzi L, Tercero B, Megías A, López-Gallifa Á, Martínez-Henares A, Massalkhi S, Martín S, Zeng S, De Vicente P, Rico-Villas F, Requena-Torres MA and Cosentino G (2022). *Front. Astron. Space Sci.* 9:829288



Mechanistic Insights into the Oxidative Degradation of Formic and Oxalic Acids with Ozone and OH Radical. A Computational Rationale.

Beltrán, F. J., Chávez, A. M., Cintas, P., & Martínez, R. F. (2023). *The Journal of Physical Chemistry A*, 127(6), 1491-1498.

On the Origin of Sugar Handedness: Facts, Hypotheses and Missing Links-A Review.

Martínez, R. F., Cuccia, L. A., Viedma, C., & Cintas, P. (2022). *Origins of Life and Evolution of Biospheres*, 52(1-3), 21-56.

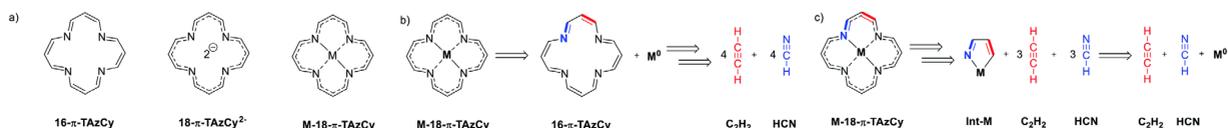
Perses: A framework for the continuous evaluation of the QoS of distributed mobile applications.

Laso, S., Berrocal, J., Fernández, P., Ruiz-Cortés, A., & Murillo, J. M. (2022). *Pervasive and Mobile Computing*, 84, 101627.

<https://doi.org/10.1016/j.pmcj.2022.101627>. (JCR Q2)

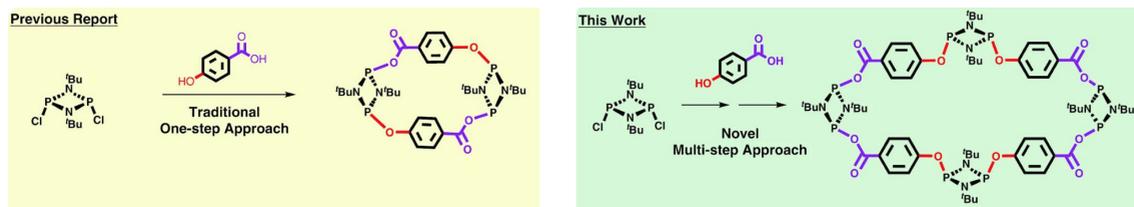
Phot0, a plausible primeval pigment on Earth and rocky exoplanets.

De la Concepción, J. G., Cerdán, L., Marcos-Arenal, P., Burillo-Villalobos, M., Fonseca-Bonilla, N., Lizcano-Vaquero, R., ... & Gómez, F. (2022). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 24(28), 16979-16987.



Pre-arranged building block approach for the orthogonal synthesis of an unfolded tetrameric organic-inorganic phosphazane macrocycle.

Sim, Y., Leon, F., Hum, G., Phang, S. J. I., Ong, H. C., Ganguly, R., ... & García, F. (2022). *Communications Chemistry*, 5(1), 1-9.



Quality of Service-Adaptive Industrial Internet of Things leveraging Edge Computing and Deep Reinforcement Learning: The Deep QoS-Adaptive Learning Environment (DeQALE) Architecture.

J. L. Herrera, J. Berrocal, J. Galán-Jiménez, J. García-Alonso and J. M. Murillo. 2022 17th Iberian Conference on Information Systems and Technologies (CISTI), 2022, pp. 1-4, <https://doi.org/10.23919/CISTI54924.2022.9820397>

Quantum Service-Oriented Architectures: From Hybrid Classical Approaches to Future Stand-Alone Solutions.

Valencia, D., Moguel, E., Rojo, J., Berrocal, J., Garcia-Alonso, J., Murillo, J.M. (2022). In: Serrano, M.A., Pérez-Castillo, R., Piattini, M. (eds) *Quantum Software Engineering*. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-05324-5_8

Quantum Software Engineering Landscape and Challenges.

Piattini, M., Murillo, J.M. (2022). In: Serrano, M.A., Pérez-Castillo, R., Piattini, M. (eds) *Quantum Software Engineering*. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-05324-5_2

Reliability of onshore wind turbines based on linking SCADA data to failure and maintenance records: a case study in central Spain.

Andres J. Sanchez-Fernandez, José Luis González-Sánchez, Íñigo Luna Rodríguez, Félix R. Rodríguez, Javier Sanchez-Rivero. *Wind Energy*, Wiley. <https://doi.org/10.1002/we.2793>

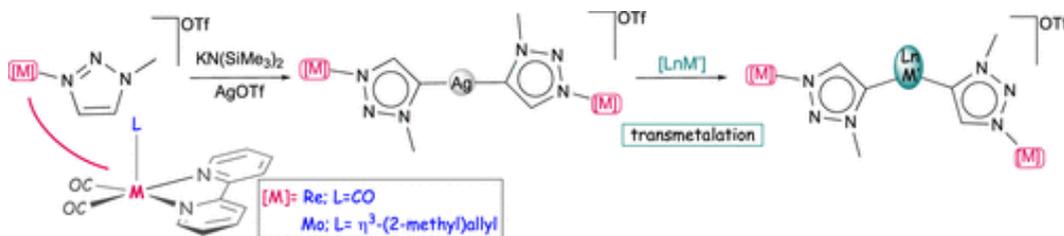
Social Events Analyzer (SEA): A Toolkit for Mining Social Workflows by Means of Federated Process Mining.

Rojo, J., García-Alonso, J., Berrocal, J., Hernández, J., Murillo, J.M., Canal, C.. In: Di Noia, T., Ko, IY., Schedl, M., Ardito, C. (eds) Web Engineering. ICWE 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13362. Springer, Cham.

https://doi.org/10.1007/978-3-031-09917-5_39

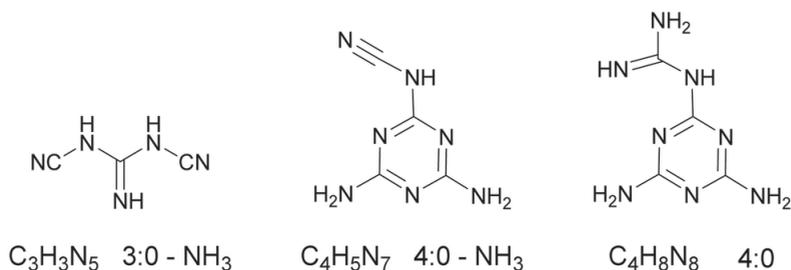
Strongly electron-donating triazolylidene ligands: cationic metal carbonyl complexes of 1-methyl-1, 2, 3-triazole as triazolium surrogates.

Cañadas, P., Díaz, J., Pérez, J., & Riera, L. (2022). *Inorganic Chemistry*, 61(3), 1254-1258.



Synthesis of C_xN_y-rich polycyclic oligomers from primeval monomers in aqueous media.

Lavado, N., de la Concepción, J. G., Cintas, P., & Reyes, B. (2022). *Physical Chemistry Chemical Physics*.



Synthesis of imidazolocoumarins by the amide-directed oxidative cyclisation of enol-Ugi derivatives.

Ramiro, J. L., Neo, A. G., & Marcos, C. F. (2022). *Organic & Biomolecular Chemistry*, 20(26), 5293-5307.

The trans/cis ratio of formic, HCOOH, and thioformic, HC(O)SH, acids in the Interstellar Medium.

García de la Concepción, J., Colzi, L., Jiménez-Serra, I., Molpeceres, G., Corchado, J. C., Rivilla, V. M., ... & Mininni, C. (2021).

Towards dynamic and heterogeneous social IoT environments.

Flores-Martin, D., Berrocal, J., García-Alonso, J. et al. *Computing* (2022).

<https://doi.org/10.1007/s00607-022-01113-1> (ICR Q2)

Unraveling the role of chemical composition in the lattice thermal conductivity of oxychalcogenides as thermoelectric materials.

Blancas, E. J., Plata, J. J., Santana, J., Lemus-Prieto, F., Márquez, A. M., & Sanz, J. F. (2022). *Journal of Materials Chemistry A*.

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 2022 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 (CTel) más importante del país, dependiente del Ministerio de Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (MinTIC) y Colciencias de Colombia, firmo un acuerdo de colaboración con COMPUTAEX para cooperar en proyectos de I+D+i.

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.



Acuerdo marco de colaboración para la creación del Nodo de Innovación “Tecnologías para Extremadura (**DIH TECH4E/ EXTREMADURA DIH**)”, entre la Fundación COMPUTAEX y la Fundación FUNDECYT-Parque Científico y Tecnológico de Extremadura, la Excm. Diputación Provincial de Badajoz, la Excm. Diputación de Cáceres, la Universidad de Extremadura, la Asociación Empresarial Extremeña de Tecnologías de la Información y Comunicación AEXTIC, el Cluster de la Energía de Extremadura, Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura (CICYTEX), FEVAL Institución Ferial de Extremadura, la Cámara de Comercio, Industria y Servicios de Cáceres y la Cámara Oficial de Comercio, Industria y Servicios de Badajoz.



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 los proyectos “Mejora, implementación e implantación de plataforma de comunicación digital y e-learning en Moodle, del Programa de Innovación y Talento”, e “Implantación de nuevos sistemas de comunicación digital y e-learning” 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 CémitS 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.



RED NACIONAL DE E-CIENCIA, persigue coordinar e impulsar el desarrollo de la actividad científica en España mediante el uso colaborativo de recursos geográficamente distribuidos e interconectados mediante Internet. Participan usuarios y expertos en aplicaciones de diversas disciplinas científicas, investigadores y centros proveedores de recursos.

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



SCAYLE, la Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León, es una entidad pública que tiene por objeto la mejora de las tareas de investigación de la universidad, los centros de investigación y las empresas. Este convenio permite la colaboración con el objeto de compartir experiencias y elaborar proyectos conjuntos en el ámbito de la I+D+i, la formación y la divulgación científica.



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.

COMPUTAEX y CénitS colaboran además en los Másteres TIC de la UEX impartiendo docencia en la asignatura “Computación de Altas Prestaciones” del Máster en Ingeniería Informática.

Además, desde el año 2009, se han concedido más de 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.

Transfiere, el Foro Europeo para la Ciencia, Tecnología e Innovación

Los días 16 y 17 de febrero se celebró en el Palacio de Ferias y Congresos de Málaga, la undécima edición de Transfiere, el Foro Europeo para la Ciencia, Tecnología e Innovación, que reunió a los principales agentes públicos y privados relevantes en el ámbito de la investigación y la transferencia de conocimiento científico y tecnológico. Entre sus objetivos destacó además el de promover la innovación y conectar ciencia y empresa. Se trató, por tanto, de un foro profesional y multisectorial clave para la mejora de la competitividad en el sector empresarial y la generación de oportunidades de negocio y networking.

CénitS participó en este foro, junto al resto de beneficiarios españoles del Proyecto EuroCC: National Competence Centres in the framework of EuroHPC, financiado por Empresa Común Europea de Informática de Alto Rendimiento (European High-Performance Computing Joint Undertaking – EuroHPC-JU) a través de la convocatoria EuroHPC-04-2019 de Horizonte 2020, en virtud del acuerdo de subvención No 951732.

Además se ofreció en la zona Science Room la ponencia “EUROCC Spain: promoviendo el uso de HPC en el ámbito de la innovación empresarial”. Los asistentes tendrán la oportunidad de conocer los distintos nodos que conforman el Centro Nacional de Competencias Español, así como las fortalezas nacionales en competencias de computación de alto rendimiento (HPC, High-Performance Computing), Análisis de Datos de Alto Rendimiento (HPDA, High Performance Data Analytics) e Inteligencia Artificial (AI, Artificial Intelligence). Se persiguió así aumentar la visibilidad del proyecto entre las empresas españolas, a las cuales el proyecto ofrece un amplia cartera de servicios de supercomputación adaptada a las necesidades nacionales respectivas de la industria (especialmente en relación a las PYME).

Ponencia en el Centro de Referencia de la Red Circular Fab en Cáceres

El 25 de febrero, José Luis González, Director General de la Fundación COMPUTAEX, ofreció la ponencia “CénitS como centro de competencias en computación y tecnologías avanzadas al servicio de la sociedad” en El Círculo de Cáceres. González abordó en ella los beneficios que la supercomputación ofrece a la sociedad para afrontar los desafíos más importantes del siglo XXI. Además, los asistentes conocieron los servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas ofrecidos por CénitS, así como sus proyectos de I+D+I más representativos.

El Círculo, ubicado junto al Paseo de Cánovas, en la calle Doctor Marañón, es el Centro de Referencia para el Emprendimiento y Transformación Tecnológica, perteneciente a la Red Circular Fab. Sus objetivos están centrados en la innovación y transformación digital de la sociedad y las empresas, y vinculados a la economía circular. De este modo, junto a otros cinco centros Circular Fab de la provincia, persigue ayudar a los ciudadanos a crear su propio empleo. Además, cuenta con un espacio de demostración destinado a la divulgación de las tendencias de innovación y tecnologías disruptivas gestionado por Telefónica.

La Diputación de Cáceres ha puesto en marcha la dinamización de los espacios que integran el centro, realizando labores de fomento de proyectos innovadores, impulsando el emprendimiento colaborativo, y poniendo a disposición de sus usuarios toda clase de serie de actividades, tecnologías y recursos.

Jornada “Ecosistema cuántico: computación y comunicaciones”.

Jornada de difusión del proyecto Quantum Spain.

El 01 de marzo, tuvo lugar en la Biblioteca Universitaria “San Isidoro” de la Universidad de León, la Jornada “Ecosistema cuántico: computación y comunicaciones”. El propósito del evento fue dar a conocer, principalmente a investigadores y empresas, el proyecto Quantum Spain.

El objetivo de este proyecto es desarrollar un computador cuántico de altas prestaciones que será puesto a disposición de la comunidad investigadora; también se creará un servicio de acceso remoto en la nube al procesador; y se desarrollarán librerías de algoritmos cuánticos útiles (Quantum Machine Learning), aplicables a problemas reales (englobados en diversos ámbitos como la química cuántica, las finanzas, la optimización de procesos de las cadenas productivas, o la criptografía, entre muchos otros), para usuarios finales tanto de empresas como de entidades públicas.

José Luis González, Director General de la Fundación COMPUTAEX ofreció la ponencia “ExQNet: Extremadura Quantum Network”, en la que expuso la participación de CénitS en Quantum Spain y la potencialidad de disponer de infraestructuras regionales de comunicaciones cuánticas.

Quantum Spain se enmarca en el Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia y en la medida 15 de la Estrategia Nacional de Inteligencia Artificial (ENIA), avanzando así también en la implementación de la agenda España Digital 2025. Además, el proyecto se alinea completamente con la apuesta de la Comisión Europea, a través de EuroHPC, de reforzar el ecosistema europeo situando a las máquinas cuánticas en los mismos centros de supercomputación que acogerán las grandes máquinas de HPC convencionales. También es complementario con otras iniciativas lideradas también por el Gobierno (planes de I+D en comunicaciones cuánticas) y por la propia Comisión (Quantum Flagship).

La primera fase del proyecto cuenta con una inversión inicial de 22 millones de euros, previendo una inversión total de hasta 60 millones a través de la complementariedad con otras iniciativas europeas.

Seminario de investigación sobre Computación Cuántica organizado por la Unidad de excelencia SCORE.

Asistencia del Director General de la Fundación COMPUTAEX, como Keynote, al 2nd Score Workshop on Quantum Computing, desarrollado los días 14 y 15 de junio y organizado por la Unidad de Excelencia SCORE (Smart Computer systems Research and Engineering) de la Universidad de Sevilla. En concreto ofreció las ponencias “Introduction to Quantum Computing/software: the current state to fix a common floor”, “Opportunities in Quantum Services Engineering” y “Quantum Programming Languages for Quantum Services: an introduction to kick in Mathematicians and Combinatory Researchers”.

El workshop introdujo la computación cuántica desde el punto de vista del software, destacando las limitaciones de las puertas lógicas y los lenguajes de programación actuales. Estas limitaciones abren la puerta a la innovación, por lo que el evento se centró en dos retos en este campo: los servicios sobre infraestructuras cuánticas y la definición de lenguajes de programación cuánticos que permitan elevar la abstracción. Además, se mostraron varios casos de aplicación para entender el verdadero alcance de esta revolución.

Jornada de puertas abiertas en la Semana de la Administración Abierta

Entre el 27 de junio y el 1 de julio, se celebró en toda España la Semana de la Administración Abierta, una iniciativa que ofrece jornadas de puertas abiertas y otro tipo de eventos en torno a los principios del Gobierno Abierto: transparencia, participación, rendición de cuentas y colaboración.

La semana se enmarca en las acciones de formación, sensibilización y educación del Tercer Plan de Acción de Gobierno Abierto, respondiendo a la Alianza por el Gobierno Abierto que está siendo impulsada a nivel mundial.

CénitS se sumó a esta iniciativa organizando el lunes 27 de junio el evento “Jornada de puertas abiertas de CénitS-CPD”, mediante el cual fue posible visitar las instalaciones del Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación. En la jornada se celebró una ponencia en la que se presentaron el centro y los proyectos desarrollados, centrados especialmente en Big Data, inteligencia artificial, HPC, transformación digital, etc. Además, fue posible visitar el nuevo Centro de Procesamiento de Datos (CPD) de la Fundación COMPUTAEX.

.....

Curso de computación cuántica en la Universidad de Málaga

Del 11 al 14 de julio, el Director General de COMPUTAEX participó como ponente en el curso de extensión universitaria Introducción al Desarrollo Software para Computación Cuántica, organizado por la Universidad de Málaga. La finalidad del curso fue ofrecer una primera aproximación al desarrollo de software cuántico para que los asistentes pudieran conocer los principios fundamentales del mismo.

.....

Jornadas Sistedes 2022

COMPUTAEX participó en las Jornadas SISTEDES (Sociedad de Ingeniería de Software y Tecnologías de Desarrollo de Software) 2022, celebradas del 5 al 7 de septiembre en Santiago de Compostela. El Director General de la Fundación presentó la ponencia “Arquitectura orientada a servicios basada en computación cuántica para farmacogenética”. La farmacogenética es una disciplina que tiene y tendrá mucha relevancia en el campo de la medicina y la medicación personalizada. Esta disciplina permite el estudio de los efectos de la variabilidad genética de un individuo en su respuesta a determinados fármacos. Sin embargo, generar una terapia farmacológica segura y eficaz ayudándose de las herramientas computacionales que tenemos en la actualidad es un problema complejo. La computación cuántica promete resolver este tipo de problemas que son inabarcables en tiempo y forma para la computación clásica. Por todo ello, la comunicación presentada a las jornadas propuso un sistema software híbrido clásico-cuántico, que permita la simulación de posibles efectos de un tratamiento farmacológico en una persona mayor con ciertos factores genéticos.

La Red Española de Supercomputación (RES), celebra en Cáceres su 16ª Conferencia de Usuarios



Los días 14 y 15 de septiembre, la RES celebró en Cáceres, en la sede de COMPUTAEX, su 16ª Conferencia de Usuarios. Con el objetivo principal de compartir conocimientos y experiencias en el uso de la computación de alto rendimiento, además de comunicar sus novedades y ofrecer información de interés sobre sus recursos y el ecosistema europeo en HPC.

Fue organizada de forma conjunta por COMPUTAEX y el Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas CETA-CIEMAT, como miembros de la RES. La inauguración contó con la presencia del Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital, D. Rafael España Santamaría y el Subdirector General de Grandes Instalaciones Científico –Técnicas del Ministerio de Ciencia e Innovación, D. José Ignacio Doncel Moreno

Noche Europea de los Investigadores



El viernes 30 de septiembre tuvo lugar la Noche Europea de los Investigadores, un evento que se celebró con el objetivo de demostrar que la investigación y los avances científicos y tecnológicos están al alcance de todos los públicos. La Fundación COMPUTAEX estuvo presente, por undécimo año consecutivo, ofreciendo el taller “Construye tu propio

Supercomputador con piezas de LEGO” en sesiones de 25 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 ejecutaron distintos problemas que típicamente son resueltos gracias a la supercomputación.

13th World Conference of Gerontechnology 2022

El Director General de la Fundación COMPUTAEX asistió virtualmente al 13th World Conference of Gerontechnology 2022, organizado por la ISC (International Society of Gerontechnology) y celebrado del 24 al 26 de octubre en Daegu, Korea del Sur. Además, se presentaron dos comunicaciones: “Quantum-classical software for drug prescription simulation in aging people” e “Improving the Assessment of Older Adults using Feature Selection and Machine Learning Models”; que contaron con la colaboración de Abdelsalam (Sumi) Helal, Profesor de Universidad de Florida.

Charla en Curso de Doctorado sobre computación cuántica para la Universidad Complutense de Madrid

El Director General de la Fundación COMPUTAEX, D. Juan Manuel Murillo, ofreció una ponencia a los alumnos de la Facultad de Informática de la Universidad Complutense de Madrid (UCM), en el marco de las actividades formativas de su Programa de Doctorado en Informática.

En su ponencia, ofrecida de forma online y titulada “Introduction to Quantum Computing and Quantum Service Oriented Computing”, se abordaron los conceptos básicos para emplear las propiedades de la mecánica cuántica en la computación. Tras comprender los conceptos de superposición, colapso y entrelazamiento, los asistentes pudieron conocer las características de los bits cuánticos o cúbits (qubits en inglés), mediante el uso de la esfera de Bloch, que permite representar gráficamente los estados de un cúbit. Además, descubrieron las funcionalidades básicas de la herramienta IBM Quantum Composer, para construir, visualizar y ejecutar circuitos cuánticos en ordenadores y simuladores cuánticos.

El evento fue organizado por D. Juan Pavón Mestras, Catedrático de Universidad del Departamento de Ingeniería del Software e Inteligencia Artificial de la UCM y Director del Instituto de Tecnología del Conocimiento de esta Universidad.

.....

Participación en el podcast Mentas Singulares de la Universidad de Santiago de Compostela

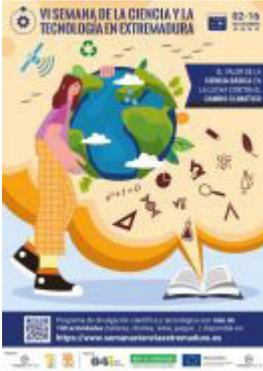
El Director General de la Fundación COMPUTAEX, D. Juan Manuel Murillo, participó como invitado en el programa Mentas Singulares, producido por el Centro Singular de Investigación en Tecnologías Intelixentes (CITUS) de la Universidad de Santiago de Compostela (USC).

El episodio, de una hora de duración, fue publicado el 31 de octubre y fue conducido por D. José Ramón Ríos, investigador en Ingeniería de Datos del CITUS, contando además con la presencia de D. Toni de la Prieta, Responsable del Centro Avanzado de Tecnología de Accenture España.

Los invitados centraron principalmente su diálogo en el ámbito de la transformación digital, conversando sobre cómo puede la sociedad actual afrontar la digitalización y el uso de las nuevas tecnologías, como blockchain o el metaverso, e identificando a su vez sus desafíos y retos más inmediatos.

El programa completo se encuentra disponible en la web del programa y en las principales plataformas de podcasts y difusión de contenidos audiovisuales.

Semana de la Ciencia



Del 2 al 16 de noviembre se celebró la VI 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 Oficina para la Innovación de Extremadura (O4i) y la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación y Universidad de la Junta de Extremadura, a través del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER). Durante esas dos semanas, la Fundación COMPUTAEX recibió en sus instalaciones visitas procedentes de 7 colegios e institutos de educación secundaria de la región, atendiendo a un total de 221 docentes, alumnos y alumnas de ESO, Bachillerato y Ciclos Formativos de grado medio y grado superior.

IWOG 2022 Fifth International Workshop on Gerontechnology



Los días 17 y 18 de noviembre se celebraron las dos jornadas principales de IWOG 2022, el workshop internacional sobre gerontotecnología. La quinta edición fue organizada conjuntamente por la Escuela de Enfermería de la Universidad de Évora (Portugal), la Fundación COMPUTAEX y el laboratorio SPILab de la Universidad de Extremadura. Las jornadas tuvieron lugar en Évora (Portugal) y en el Centro de Cirugía de Mínima

Invasión Jesús Usón (CCMIJU) de Cáceres, sede social de COMPUTAEX. IWOG se enmarca en el Proyecto Interreg 4IE+, Instituto Internacional de Investigación e Innovación del Envejecimiento, cuyo objetivo principal es analizar los aspectos biomédicos, funcionales y psicológicos del envejecimiento en el contexto de las zonas rurales de las regiones de Extremadura y Alentejo en Portugal, con líneas de trabajo focalizadas en la innovación para la salud de los ancianos, las problemáticas y desafíos sociales contemporáneos del envejecimiento, las políticas públicas para el envejecimiento y las soluciones tecnológicas para una sociedad envejecida.



Symposium Internacional de Investigación Biosanitaria

El 28 de noviembre, COMPUTAEX participó en el Symposium Internacional de Investigación Biosanitaria, en la presentación de la propuesta del proyecto “Gerontotecnología y fragilidad: nuevas perspectivas en la era de la Inteligencia Artificial”, organizado en el Hospital Universitario de Badajoz por el Instituto Universitario de Investigación Biosanitaria en Extremadura (INUBE). El objetivo general fue evaluar y promover las posibilidades de colaboración transfronteriza y transatlánticas para la captación de fondos de investigación internacionales, y particularmente europeos, que impulsen y refuercen la investigación biosanitaria en Extremadura, presentando las iniciativas en marcha en el INUBE y en Portugal y Latinoamérica.

Keynote inaugural de ICSOC 2022 en el paraninfo de la Universidad de Sevilla



Entre el 29 de noviembre y el 2 de diciembre se celebró la 20ª edición de la International Conference on Service Oriented Computing (ICSOC 2022), en la Universidad de Sevilla (US). Reunió a académicos, investigadores del sector industrial, desarrolladores y profesionales de todo el mundo, para presentar resultados innovadores y discutir ideas centradas en la computación orientada a servicios. Es una conferencia Clase A según el ranking CORE.

D. Juan Manuel Murillo, Director de la Fundación COMPUTAEX, impartió en el paraninfo de la Universidad la conferencia inaugural y keynote del congreso, titulada “Quantum Service-Oriented Computing: Challenges and Research Directions for Quantum and Hybrid Software System”. En ella, además de introducir los conceptos básicos para emplear las propiedades de la mecánica cuántica en la computación, abordó también las posibilidades, desafíos y diversas líneas de investigación que plantea un sistema de software híbrido orientado a servicios cuánticos.

.....

VISITAS GUIADAS



Durante el año 2022, CénitS recibió la visita de más de 400 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, y especialmente universitarios y estudiantes de educación primaria, secundaria y Formación Profesional. 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.



PATROCINIOS

La Fundación ha patrocinado:

Extremadura Digital Day.

El sábado 1 de octubre se celebró una nueva edición del Extremadura Digital Day, patrocinado, entre otras entidades, por la Fundación COMPUTAEX. El objetivo del evento era unir a la comunidad tecnológica extremeña, considerando todo tipo de empresas y profesionales del sector.

La jornada, que se desarrolló en las instalaciones del Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón (CCMIJU) de Cáceres, estuvo dividida en tres áreas principales que contaron con ponencias y talleres dedicados, respectivamente, a negocio, desarrollo y makers.

XVII Encuentro de las Telecomunicaciones de Extremadura.

La Fundación COMPUTAEX fue patrocinador bronce del XVII Encuentro de las Telecomunicaciones de Extremadura, organizado por el Colegio de Ingenieros en Telecomunicación de Extremadura, y celebrada el viernes 11 de noviembre en el Hotel Don Manuel de Cáceres. El evento contó con las ponencias del Decano-Delegado del Colegio Oficial de Ingenieros de Telecomunicación en Extremadura, así como de representantes regionales de Telefónica y Orange. Además, D. Pablo García, Director General de Agenda Digital de la Junta de Extremadura presentó el protocolo regional de despliegues de fibra óptica en entornos patrimoniales protegidos. Tras la entrega de premios al Mejor Expediente del Máster en Ingeniería de Telecomunicación, y el premio AEXIT 2022 a la Iniciativa Empresarial en el Sector Tecnológico, tuvo lugar la correspondiente cena de gala.

20º Edición del ICSOC 2022.

La Fundación COMPUTAEX patrocinó la vigésima edición de la International Conference on Service Oriented Computing (ICSOC 2022), celebrada en la Universidad de Sevilla (US) entre el 29 de noviembre y el 2 de diciembre. Se trata del congreso de investigación más importante en su ámbito, que reúne a académicos, investigadores del sector industrial, desarrolladores y profesionales de todo el mundo, para presentar resultados innovadores y discutir ideas centradas en la computación orientada a servicios. Es una conferencia Clase A según el ranking CORE.

ICSOC fomenta la excelencia científica entre comunidades reuniendo a expertos de varias disciplinas, como ciencias de servicios, datos y gestión, gestión de procesos comerciales, sistemas distribuidos, computación inalámbrica y móvil, computación en la nube y perimetral, sistemas ciberfísicos, flujos de trabajo científicos e ingeniería software y de servicios, entre otras. Especialmente, este congreso persigue aumentar el conocimiento y la comprensión de diversos aspectos relacionados con la informática de servicios, con un enfoque particular en inteligencia artificial, aprendizaje automático, big data, Internet de las cosas y otras tecnologías emergentes, incluyendo la computación cuántica.

Olimpiada Informática de Extremadura 2023.

El 3 de febrero de 2023 se celebrará en la Escuela Politécnica de Cáceres y el Centro Universitario de Mérida, la XI Olimpiada Informática de Extremadura, que tiene como principal objetivo promocionar y difundir la programación informática entre los estudiantes extremeños de educación secundaria y bachillerato, a través de varias competiciones dirigidas a potenciar el uso de los ordenadores como herramientas para resolver problemas y fomentar el interés de los alumnos por los estudios relacionados con las tecnologías informáticas.

La Fundación COMPUTAEX patrocina nuevamente esta Olimpiada que, en su XI edición, vuelve a contar con dos modalidades de participación: pruebas de ingenio y concurso de programación. Mientras que las primeras, de ingenio y lógica, no requerirán conocimientos previos de informática, en las segundas los problemas deberán ser resueltos mediante programas escritos en los lenguajes de programación C++ y Java.

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.

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

Sala IT

La infraestructura cuenta con una sala de tecnologías de la información de 60 m² 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.

Sala técnica

Se dispone de una sala técnica de 26,6 m² 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.

En esta sala se encuentra instalado 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.



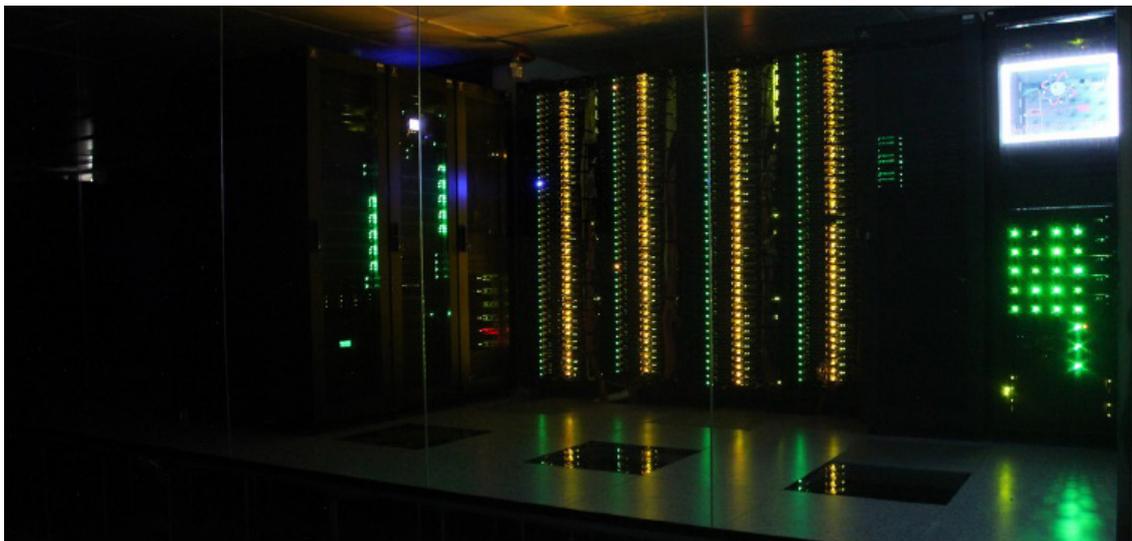
Sala de grupos

Se dispone de una sala de 61 m² para albergar los grupos electrógenos de la infraestructura. Actualmente se dispone de un único grupo capaz cubrir las necesidades actuales (otorgando a la infraestructura una autonomía de aproximadamente 24 horas con la carga actual) 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).

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 cuentan con tecnología free-cooling que es un sistema que emplea la temperatura del aire exterior para enfriar o refrigerar, mejorando la eficiencia energética de la infraestructura.

CÉNITS-CPD Y SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA III



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:

Clúster de cómputo para inteligencia artificial

- 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 Fat

- 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.
- 2 racks IBM iDPx con RDHX (water cooling) con capacidad para 84 servidores cada uno.
- 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.

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

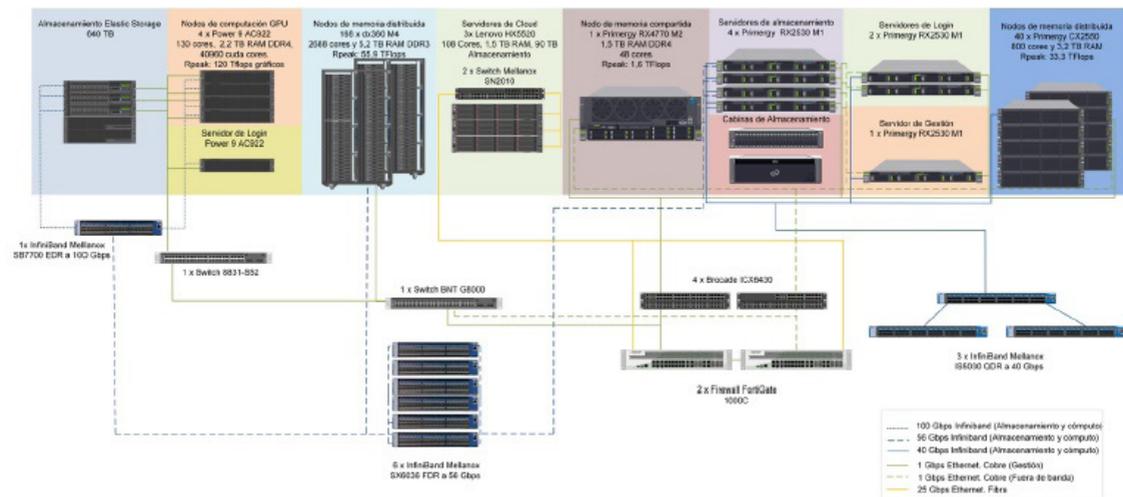
- Elastic Storage Server GLIS con una capacidad de almacenamiento de 656TB RAW:
- 1 enclosure con 84 slots: 82 x 8TB Enterprise HDD y 2x 800GB SSD.
- 2 Data Servers: 2 x 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 256GB RAM.
- 1 ESS Management Server: 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 64GB RAM.
- Licenciamiento 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 I:8828 Model G36.
- 1 Ethernet IBM Switch (48x1Gb+4x10Gb) I:8831 Model S52.
- 2 firewalls Fortinet Fortigate 600E 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.
- 3 switches Brocade ICX6430 de 48 puertos y un switch Brocade ICX6430 de 24 para la red de comunicación y de gestión del supercomputador.
- 3 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

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

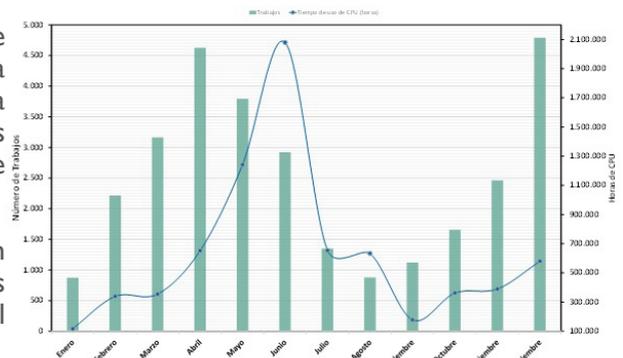


Consumo de recursos

Uso de recursos

Durante el año 2022, 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 2022, obteniendo un total de 7.583.894 horas de cómputo.



Usuarios

Durante el año 2022, 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.

Incidencias

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

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

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

Se han resuelto un total de 55 incidencias distribuidas entre los distintos meses de 2022, tal y como se muestra a continuación:



Software

Sistemas Operativos

Suse Linux Enterprise Server
 Red Hat Linux Enterprise
 Debian
 Ubuntu
 Windows Server

Computación Técnica

Octave	Trinity	BWA
.....
Matlab	Bowtie	SAMtools
.....
Gaussian 16	MIRA	Picard
.....
GaussView 6	Singularity	GATK
.....
IDL	Orca	SnEff
.....
netCDF	VASP	Hisat2
.....
NWChem	CPMD	Cufflinks
.....
R	Schrödinger	Anaconda
.....
COMSOL	Salmon	ADFR
.....
Python	Jellyfish	ParaView
.....
Biopython	FastQC	XTB
.....
WIEN2k	Fastp	IGV

Compiladores

Intel C/C++ Compiler
 Intel Fortran Compiler
 GNU GCC
 PGI Compilers & Tools
 Java JDK

Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación

 CARRETERA N-521,
KM 41,8 - 10.071
CÁCERES

 + 34 927 049 070

 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

