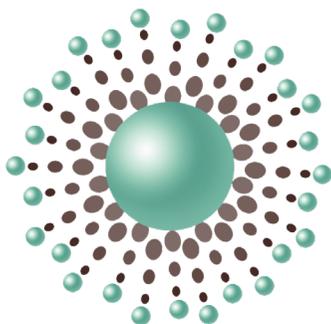


COMPUTAEX

MEMORIA ANUAL 2020





COMPUTAEX

MEMORIA
2020



© Fundación COMPUTAEX

Edición: Fundación COMPUTAEX

Diseño: Fundación COMPUTAEX

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

Impreso en España
Printed in Spain

ISBN - 13: 978-84-09-32360-9

Depósito Legal:



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

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

2020. “La memoria es el porvenir del pasado” 7

1. Fundación COMPUTAEX..... 8

Objeto y fines..... 8
 Patronato..... 9
 Equipo CénitS 2020..... 9
 RES (Red Española de Supercomputación) 12
 Mapa de capacidades de tecnologías de Inteligencia Artificial de España..... 12
 Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)..... 13
 Organizaciones colaboradoras..... 14
 Agradecimientos..... 15

**2. Proyectos de investigación e innovación tecnológica
 participados y dirigidos por CénitS..... 17**

EuroCC 18
 CultivData..... 20
 HeritaGen..... 22
 CONECTA PYME 4.0..... 24
 CultivDat2 26
 Prospéctic2..... 28
 Predictibilidad de enfermedades oncológicas mediante ultrasecuenciación 30
 Identificación de patrones de comportamiento en aerogeneradores 32
 Anemoi 34
 TaxoTIC 2020..... 36
 CénitS-CPD: equipamiento científico tecnológico..... 38
 CénitS-CPD: consolidación de infraestructuras de supercomputación 38
 Red de excelencia RES..... 39
 SmartNet5G 40
 5G-CLOPS..... 40
 Go2Edge 41
 Grupo de investigación CénitS 41
 Optimización de algoritmos y aplicaciones paralelas..... 42
 Implantación de nuevos sistemas de comunicación digital y e-learning..... 43

3. Proyectos de investigación soportados 45

Ciencias de la Tierra 46
 Ciencias de la Vida 47
 Ciencias Informáticas y de Comunicaciones..... 53

4. Resultados de investigación.....	55
Publicaciones en revistas.....	56
Publicaciones en congresos.....	61
Tesis doctorales.....	62
Publicaciones en libros.....	63
Trabajos Finales de Grado.....	64
5. Convenios de colaboración, acciones formativas y difusión.....	69
Convenios de colaboración.....	70
Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC.....	72
Semana de la Ciencia.....	72
Noche Europea de los Investigadores.....	73
Becas de formación del convenio COMPUTAEX - UEx.....	74
Prácticas curriculares de la Universidad de Extremadura.....	75
Inauguración del Supercomputador LUSITANIA III.....	76
Jornada TaxoTIC: Observatorio de un sector esencial en situación de pandemia.....	78
Jornada CultivData: El cultivo de datos agrarios a disposición de un sector esencial...	79
Jornada internacional de puertas abiertas de CénitS.....	80
Portal web.....	82
Redes sociales.....	84
Difusión y divulgación.....	84
CénitS-COMPUTAEX en los medios.....	85
Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos.....	86
6. Recursos tecnológicos.....	89
CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III.....	90
Consumo de recursos.....	93
Usuarios.....	95
Software.....	96
7. Proyectos concluidos.....	99



2020

“La memoria es el porvenir del pasado”

(Paul Valéry, poeta, escritor y filósofo)

Iniciamos 2020 con la puesta en marcha de LUSITANIA III, incorporando sus recursos a los ya existentes en CénitS y poniéndolos a disposición de sus usuarios. LUSITANIA III ha aportado: 160 cores puramente HPC para uso científico; 40.960 CUDA cores GPU para aceleración de cómputo; un cloud basado en hiperconvergencia con 250 máquinas virtuales para uso más específico y empresarial y casi un Petabyte de almacenamiento, todo ello interconectado con una red Infiniband de baja latencia de 100 Gbps.

El desafío para este año era cumplir nuestra misión como centro de investigación y de provisión de recursos, apoyo y acompañamiento a quienes lo necesiten. Sin embargo, como a todo el mundo, la realidad nos puso frente al desafío más importante de la humanidad en las últimas décadas. La interconexión que se ha promovido y facilitado desde nuestro sector nos ha permitido enfrentarnos a la nueva realidad que nos ha dejado un virus que se ha extendido con una rapidez inusitada aprovechando precisamente esa globalidad en la que vivimos.

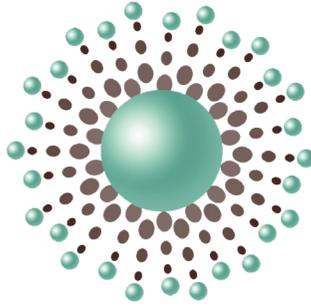
La crisis sanitaria ha puesto a prueba nuestras capacidades técnicas y científicas y, sobre todo, las organizativas, para lograr mantener operativo un centro que suele accederse de forma remota y que depende de la conectividad de su red de datos, de la tolerancia a fallos de sus equipos y de la entrega de su personal técnico para reaccionar a las incidencias de la mejor forma posible. Hemos tenido que amoldarnos a la nueva situación adaptando equipos humanos y técnicos para hacer realidad la palabra resiliencia que tan de moda se ha puesto y que en los centros de proceso de datos perseguimos desde siempre, para garantizar su alta disponibilidad como instalaciones críticas que son.

Este año ha sido para nosotros de consolidación, ya que nos ha permitido también acometer un proyecto anhelado desde hace años. CénitS-CPD supone la creación de un centro de proceso de datos diseñado con las garantías de resiliencia y perdurabilidad que hasta ahora no hemos podido disponer. La pandemia ha impedido que concluyera este proyecto en 2020 como estaba previsto, pero es ya una realidad palpable al servicio de toda la sociedad que lo necesite como se demostrará los próximos años.

El valioso apoyo recibido del Patronato de la Fundación, de los organismos de financiación de la investigación europeos, nacionales y regionales, y de los usuarios de CénitS, así como la potencia de los recursos que se nos han confiado, nos obligan a dar respuesta a las necesidades o desafíos que tenemos ante nosotros y los que puedan llegar después.

En 2020 se ha comprobado la importancia de la inversión realizada los últimos años en capacidades digitales, lo que no hace más que constatar la necesidad de esa continuidad digitalizadora de nuestra sociedad. Hemos vivido un año transformador donde las infraestructuras robustas y críticas han demostrado que la inversión realizada y por realizar en digitalización es absolutamente fundamental para toda la transición y la transformación que están por venir.

José Luis González Sánchez
D. G. Fundación COMPUTAEX



COMPUTAEX

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

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

Objeto y fines

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

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

Patronato

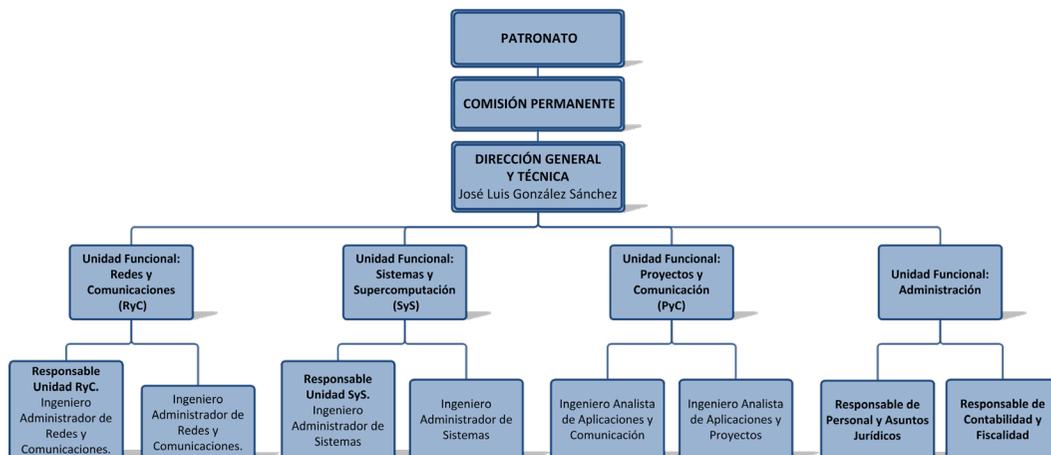
PATRONATO	
D. RAFAEL ESPAÑA SANTAMARÍA Presidente de la Fundación COMPUTAEX Ilmo. Sr. Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital	
D. JESÚS ALONSO SÁNCHEZ Vicepresidente del Patronato de la Fundación COMPUTAEX Ilmo. Sr. Secretario General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad	
DÑA. ANA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

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

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

Equipo CénitS 2020

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





José Luis González
Director General de la Fundación
COMPUTAEX



María Jesús Martínez
Responsable de personal
y asuntos jurídicos



Julio Mañas Viniegra
Responsable de personal
y asuntos jurídicos



David Cortés
Responsable de la Unidad Funcional
de redes y comunicaciones



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



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



Luis Ignacio Jiménez
Administrador de sistemas
y supercomputación



Javier Corral
Analista de aplicaciones
y comunicación



Juan Francisco Bermejo
Analista de aplicaciones
y proyectos



Blanca Pérez
Responsable de contabilidad
y fiscalidad



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



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



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



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



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



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



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



Álvaro Huertas
Becario de investigación



Álvaro Rodríguez
Becario de investigación



Fátima Dávila
Becaria de investigación



Enrique Moreno
Becario de investigación



Luis Portal
Alumno en formación del
Programa de Innovación y Talento
de la Junta de Extremadura



Jesús Tovar
Estudiante en prácticas del Grado en
Ingeniería Informática en
Ingeniería del Software de la UEx

RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS) distribuida por toda la geografía española, consistente en la interconexión de 16 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica. La RES gestiona estos recursos con el fin de impulsar el avance de la ciencia



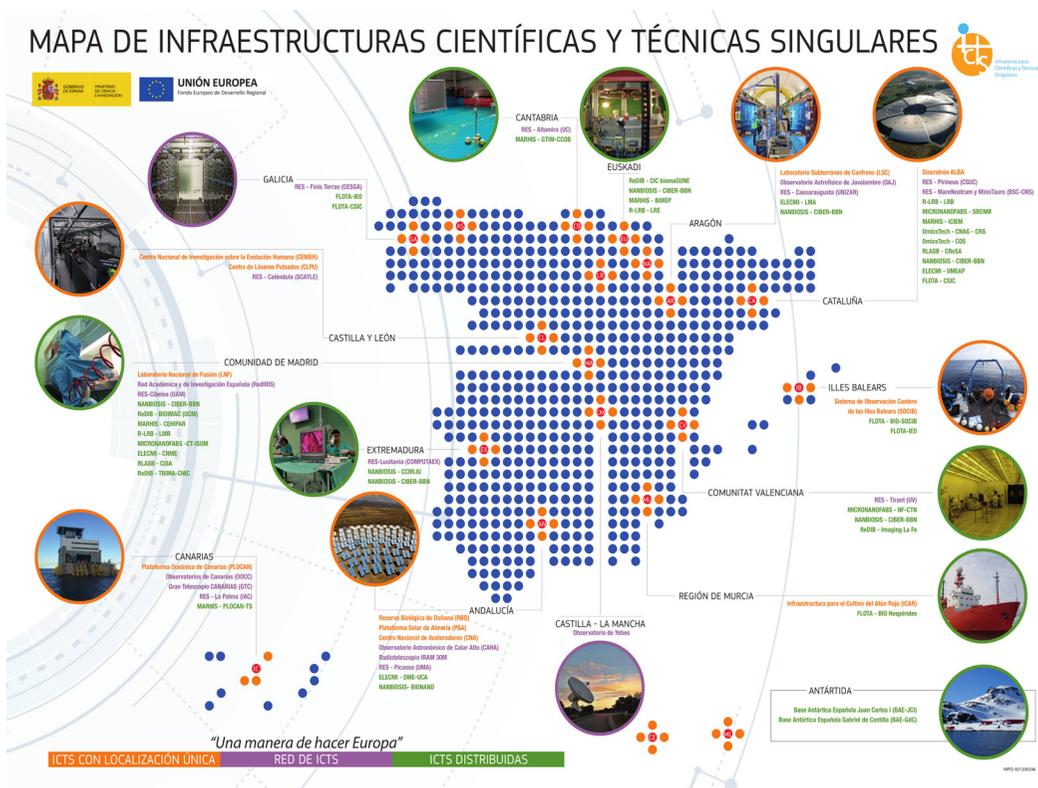
ya la innovación en España. Para alcanzar este propósito, ofrece sus recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización óptima de todos los recursos disponibles en la red. El tiempo de cómputo en las máquinas de la RES es concedido a través de convocatorias competitivas. Las propuestas recibidas son evaluadas cada cuatro meses por el Comité de Acceso, que es asesorado por un Panel de Expertos formado por reconocidos investigadores. Por otra parte, la RES también promueve acciones de interés común para sus nodos, como planes de inversión, actividades de formación y divulgación, o participación conjunta en proyectos nacionales e internacionales.

Mapa de capacidades de tecnologías de Inteligencia Artificial de España

El Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades gestiona el mapa que recoge el estado del ecosistema de Inteligencia Artificial (IA) en España, mostrando información sobre entidades públicas y privadas que desarrollan, investigan, utilizan o prestan servicios relacionados con tecnologías de IA. Su objetivo es fomentar las sinergias entre las entidades españolas y abrir un camino de colaboración europeo e internacional, identificando y visualizando capacidades y fortalezas españolas en dicha área. CénitS y la Fundación COMPUTAEX son reconocidos como nodos de este mapa, que supone una pieza clave para el diseño de la estrategia Nacional de Inteligencia Artificial. Esta estrategia persigue alinear las políticas nacionales destinadas a fomentar el desarrollo y el uso de la IA, aumentando la inversión, reforzando la excelencia en tecnologías y aplicaciones de IA y fortaleciendo la colaboración entre el sector público y privado. Este mapa es además un compromiso de los Estados Miembros con la UE con el objetivo de fortalecer la Inteligencia Artificial.

Tipo de entidad	Razón social
Administración Pública	Fundación Andaluza para el Desarrollo Aeroespacial
	Fundación AZTI - AZTI Fundazioa
	Fundación CARTIF
	Fundación Centro de Tecnologías de Interacción Visual y Comunicaciones (VICOMTECH)
	Fundación Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia
	Fundación Circe
	Fundación Computaex (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)
	Fundación I+D+I Automoción y Mecatronica
	Fundación InD del Software Libre
	Fundación ICAMCyT
	Fundación Instituto de Investigación Marques de Valdecilla (IDIVAL)
	Fundación Institut d'Investigació Biomèdica de Bellvitge
	Fundación Instituto de Investigación Sanitaria Aragón
	Fundación Instituto de Investigación Sanitaria Fundación Jiménez Díaz
	Fundación Instituto Internacional de Investigación en Inteligencia Artificial y Ciencias de la
	Fundación para la Formación e Investigación Sanitarias de la Región de Murcia
	Fundación para la Investigación Biomédica de Córdoba-FIBICO
	Fundación Para la Investigación Biomédica del Hospital Clínico San Carlos

Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)



El Ministerio de Ciencia e Innovación publicó en 2020 una nueva infografía que recoge de forma resumida y esquemática el Mapa de Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares de España, mostrando todas las infraestructuras punteras de I+D+i que prestan servicios para desarrollar investigación de vanguardia y de máxima calidad, así como para la transmisión, intercambio y preservación del conocimiento, la transferencia de tecnología y el fomento de la innovación.

En noviembre de 2018, el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación aprobó este mapa, reconociendo a CénitS y al Supercomputador LUSITANIA como nuevo nodo. Aunque el Supercomputador extremeño ya era de facto una ICTS desde que en 2015 pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES). Cabe destacar asimismo que el actual Mapa está integrado por 29 ICTS que aglutinan un total de 62 instalaciones distribuidas por todo el territorio nacional.

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

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

Agradecimientos

2020 ha sido un año muy intenso para el personal de CénitS que ha tenido que responder a la complejidad organizativa que ha supuesto el teletrabajo en nuestro centro y en el resto de la sociedad.

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

- Los Patronos de la Fundación que colaboran en la toma de decisiones.
- La Red Española de Supercomputación (RES) y sus nodos, con los que compartimos importantes recursos de cómputo.
- Los propios usuarios de CénitS para los cuales buscamos la máxima calidad de servicio.
- Los compañeros del resto de Centros Tecnológicos y Fundaciones regionales y nacionales que han colaborado en proyectos comunes.
- Los investigadores, tecnólogos, empresas, socios, medios de comunicación y todos aquellos con los que hemos tenido la oportunidad de cooperar.





PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR CénitS

Durante 2020, el equipo de CénitS ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, aportando soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.

EuroCC



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

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



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

ENTIDADES PARTICIPANTES



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

OBJETIVOS

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

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

METODOLOGÍA

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

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

Principalmente se están desarrollando las siguientes tareas:

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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



EuroHPC
Joint Undertaking

CultivData



Extremadura es reconocida como una región que produce productos agrícolas y ganaderos de gran calidad. Además, en los últimos años, se ha caracterizado por el notable esfuerzo que ha realizado para no perder la revolución tecnológica y así, las TIC se han incorporado a todos los ámbitos de la sociedad. Aún así, el desarrollo del sector agropecuario y la adopción de nuevas técnicas, comparado con otras áreas, se encuentra retrasado y avanza lentamente. Este hecho, unido al reto que se le plantea para los próximos años, en los que necesitará abastecer a una población

mundial en crecimiento, al mismo tiempo que se disminuyen las hectáreas cultivables por persona, hace necesario un avance significativo en sus procedimientos. Partiendo de estas premisas, es evidente que se deben unir los esfuerzos del ámbito tecnológico y agrario para aumentar considerablemente la productividad, sin que ello suponga una merma en la calidad, reconocida internacionalmente a los productos de la región. CultivData pretende aportar esa eficiencia, así como eficacia, productividad, sostenibilidad y calidad al sector agropecuario extremeño. La propuesta presenta una investigación de carácter transversal de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones, y su aplicación en la sociedad, que conlleva la interacción con áreas del conocimiento como la agricultura, la eficiencia en la utilización de los recursos naturales y la optimización de la calidad de los productos derivados de las explotaciones agrícolas.

ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación COMPUTAEX - CénitS.

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

La metodología para cumplir los objetivos del proyecto aborda una realización cíclica de las tareas planteadas para cada actividad. Ello es consecuencia, por una parte, del carácter plurianual del proyecto, y por otra, de la necesidad de que los entregables reflejen al máximo la visión experta que las entidades del sector agropecuario tienen del problema al que se enfrenta el proyecto. Con el fin de obtener una herramienta lo más útil posible para los grupos de interés del sector agroalimentario extremeño, se propone un desarrollo ágil de la plataforma CultivData. Se trata de un desarrollo cíclico en el que en cada iteración se incluyen todas las fases de un desarrollo tradicional: planificación, análisis de requisitos, diseño, codificación, pruebas y documentación. Esta metodología apuesta por el desarrollo rápido de versiones del producto o servicio, las cuales se presentan a los usuarios finales,

de forma que, a partir del feedback proporcionado por éstos, se inicia una nueva iteración del desarrollo. La ventaja de este tipo de metodologías radica en un producto final mejor orientado al usuario y en una reducción de costes de desarrollo, debido a que los cambios en el software suelen ser menores que en las tradicionales metodologías en cascada. Así, se obtendrá un prototipo en el que las técnicas analíticas de Big Data serán un requerimiento muy importante, dados los grandes volúmenes de datos y variantes de formatos. La velocidad de respuesta y las simulaciones casi en tiempo real requerirán de la potencia de procesamiento HPC (High Performance Computing) que los supercomputadores LUSITANIA II y LUSITANIA III pueden aportar al proyecto. Además, se configurarán servicios de cómputo bajo demanda a los potenciales usuarios (agentes decisores, agricultores, distribuidores y consumidores) a través de Cloud, los cuales estarán a su disposición en el centro de proceso de datos de CénitS, para ahorrarles costes y ofrecer la alta disponibilidad y seguridad de un CPD diseñado para la computación de altas prestaciones.



RESULTADOS



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

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

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

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



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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

OBJETIVOS

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

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

METODOLOGÍA

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

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

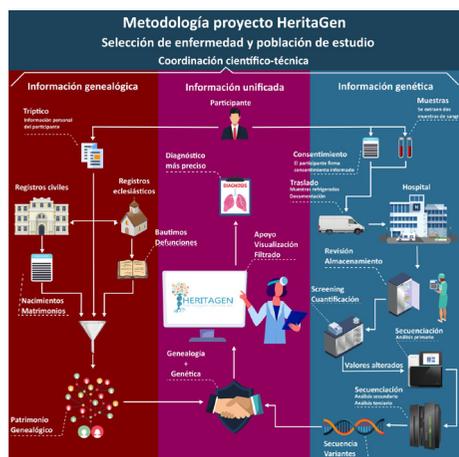
El proyecto HeritaGen ha seguido dos líneas de investigación paralelas. Por un lado, la obtención de la información genealógica de la población, con el fin de estudiar la relación de parentesco entre sus habitantes. Para ello, se ha recopilado información precedente de los Registros Civiles y los Archivos Parroquiales. Estos datos se encuentran digitalizados y almacenados en un nodo de LUSITANIA II con el fin de facilitar el acceso y la interpretación de dicha información mediante el uso de una base de datos NoSQL de tipo documental.

Para la segunda línea de investigación, se procedió a la obtención de los datos genéticos de las muestras más significativas. Tras la realización de un screening previo a todas las muestras de los participantes, se seleccionaron las más relevantes para el estudio, procediendo a su secuenciación genética y análisis de las variantes halladas. La creación de la base de datos y la aplicación web ha servido de base para la unificación de la información genética y genealógica.

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

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



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

Se ha presentado el proyecto y los resultados en varias ocasiones, como en el Congreso Internacional ISUM de México, marzo de 2019, y en las Jornadas de puertas abiertas de la Fundación COMPUTAEX que se celebraron en diciembre de 2019. También ha sido presentado un artículo en el Congreso Internacional Iwbbio, 2020.

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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

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



CONECTA PYME

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

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

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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

OBJETIVOS

El objetivo general del proyecto es el de mejorar la competitividad de las pymes del territorio EUROACE mediante la incorporación de conocimientos, tecnologías e innovaciones destinadas a la digitalización y remodelación de los procesos que redunden en la creación de productos y servicios de mayor valor añadido para las empresas. Los objetivos se centran en:

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

- Se contribuirá a la consecución del Objetivo específico de mejorar las condiciones necesarias y propicias para la aparición de nuevas iniciativas empresariales, en concreto aquellas que respondan a las necesidades de la economía digital de los territorios Extremadura, Centro y Alentejo

METODOLOGÍA

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

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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



FUENTES DE FINANCIACIÓN

Proyecto cofinanciado en un 75% por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través de la Segunda Convocatoria del Programa Interreg VA España-Portugal 2014-2020 (POCTEP). Que promueve los proyectos de cooperación en la línea transfronteriza entre España y Portugal. CONECTA PYME 4.0 se enmarca dentro del eje prioritario 2 “Crecimiento integrador a través de una cooperación transfronteriza a favor de la competitividad empresarial”, Objetivo temático 3 “Mejorar la competitividad de las pequeñas y medianas empresas”.



Interreg
España - Portugal



Fondo Europeo de Desarrollo Regional
Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional

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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

OBJETIVOS

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

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

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

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



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

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

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

METODOLOGÍA

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

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

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

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura, Consejería de Educación y Empleo-SEXPE y el Fondo Social Europeo, a través de la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura (Resolución de 6 de septiembre de 2019). Proyecto de investigación encuadrado en la línea estratégica del sector Agroalimentario, definida en el VI Plan Regional de Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación 2017-2020, aprobado mediante Decreto 91/2017, de 20 junio (DOE n.º 121, de 26 de junio).



JUNTA DE EXTREMADURA
Consejería de Educación y Empleo



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

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

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

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

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

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

Por ello los paradigmas Cloud computing, Big Data y Open Data abren un esperanzador horizonte para la medicina de precisión y también para nuevos modelos de negocio que es necesario explorar porque ello redundará en la salud de los ciudadanos y no sólo en la economía. La incorporación de estos nuevos mecanismos permitiría llevar al servicio asistencial clínico de forma masiva terapias mucho más efectivas a la vez que se generarían los necesarios repositorios de información que podrían ser usados para aplicar técnicas de Big Data que, a través de servicios Cloud, acerquen el potencial que toda la información almacenada puede poner a disposición de los oncólogos, pacientes, laboratorios, investigadores y empresas de prestación de servicios que, a través de Open Data, pueden encontrar en este proyecto una clara aplicación de modelo de economía circular de forma que, la actual carencia de información valiosa deje de ser un inconveniente en poco tiempo

ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación COMPUTAEX-CénitS, y FOTEX.

OBJETIVOS

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



Se proponen los siguientes objetivos específicos:

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura, Consejería de Educación y Empleo-SEXPE y el Fondo Social Europeo, a través de la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura (Resolución de 6 de septiembre de 2019).

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



JUNTA DE EXTREMADURA
Consejería de Educación y Empleo



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

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

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

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

El presente proyecto pretende aprovechar las Tecnologías de la Información y la Comunicación para ofrecer, a los especialistas en oncología, nuevas herramientas para aplicar a sus pacientes medicina de precisión que garantice la seguridad y eficacia en sus tratamientos, potenciando a su vez la utilización de las nuevas tecnologías para el uso clínico y el servicio asistencial. Los paradigmas Cloud computing, Big Data y Open Data, abren un esperanzador futuro, tanto para la medicina de precisión, como para nuevos modelos de negocio, los cuales deben ser explorados puesto que ello redundará positivamente en la salud de los ciudadanos.

Así, la aplicación de estos paradigmas, permitirá acercar al servicio asistencial clínico de forma masiva terapias mucho más efectivas, al tiempo que se generarán los necesarios repositorios de información que podrían ser utilizados para aplicar técnicas de Big Data que, a través de servicios Cloud, acerquen el potencial que toda la información registrada puede poner a disposición de los oncólogos, pacientes, laboratorios, investigadores y empresas de prestación de servicios que, a través de Open Data, encontrarán en este proyecto una clara aplicación de modelo de economía circular.

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación COMPUTAEX - CénitS y ClouDEX, S.L.

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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

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

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

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

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

Los datos serán accesibles a través de una herramienta informática que se está desarrollando.

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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

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



JUNTA DE EXTREMADURA
Consejería de Educación y Empleo



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

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

Durante los últimos años se ha ido produciendo una generación de datos sin precedentes en todos los sectores. En consecuencia se han generado grandes volúmenes de información que las aplicaciones y equipos informáticos tradicionales son incapaces de procesar adecuadamente, siendo inviable extraer patrones repetitivos, que permitan tomar decisiones a partir de esos datos, sin utilizar para ello el paradigma Big Data sobre infraestructuras especializadas. Uno de los sectores donde más datos se han generado es el de la energía, y en particular el de las energías limpias, como termo-solares o parques eólicos. Existe además un valor potencial en los datos diarios generados en el mercado de la electricidad. Sin embargo, esta información no está siendo aprovechada adecuadamente, debido a los grandes desafíos en el procesamiento y análisis eficientes de estos grandes volúmenes de información

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

Así, el proyecto tiene como primera fase, la identificación y análisis de todas las variables que pueden afectar de manera real, tanto a la vida útil de los aerogeneradores, como a las causas de sus averías. Este primer análisis está permitiendo identificar el conjunto de variables que afectan a su funcionamiento ordinario, con el objetivo de enfocar adecuadamente el estudio. Tras esto, y una vez superado el análisis de riesgos, el proyecto persigue la identificación de patrones de comportamiento que inducen al fallo en dichos equipos. La identificación de estos patrones engloba, tanto la validación de variables, como la ponderación de las mismas, en base a su importancia en los fallos producidos en los equipos. De este modo, la utilización de técnicas basadas en Analítica Avanzada y Big Data, permitirá tratar de manera eficiente y en el tiempo apropiado, el gran volumen de datos que se pretende analizar, considerando lecturas diezminutales en temporalidades de varios meses. Así, el empleo de estas técnicas permitirá desarrollar análisis de variables que, de otro modo, sería complejo realizar.

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

OBJETIVOS

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

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

METODOLOGÍA

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

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

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

OBJETIVOS ALCANZADOS

Durante el periodo de duración del proyecto se han realizado distintas aproximaciones analíticas a los datos de un conjunto de aerogeneradores. Cada variable del conjunto ha sido analizada de forma independiente para reconocer patrones y posibles datos puntuales erróneos que deben ser filtrados de cara a análisis más profundos en el futuro. Se ha realizado un estudio de correlación de las variables disponibles para conocer la importancia relativa de las características de las turbinas manejadas identificando casos atípicos surgidos de errores de procedimiento, casos puntuales extraordinarios, registros fuera de los rangos habituales de funcionamiento de la maquinaria.

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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

Anemoi: Modelo Predictivo de Productividad y Operatividad de Parques Eólicos Aplicando Análítica de Datos y Aprendizaje Automático

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

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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

OBJETIVOS

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

Se proponen los siguientes objetivos específicos:

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

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

METODOLOGÍA

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

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

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura, Consejería de Educación y Empleo-SEXPE y el Fondo Social Europeo, a través de la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura (Resolución de 6 de septiembre de 2019). Proyecto de investigación encuadrado en la línea estratégica de Energías Limpias, definida en el VI Plan Regional de Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación 2017-2020, aprobado mediante Decreto 91/2017, de 20 junio (DOE n.o 121, de 26 de junio).

TaxoTIC 2020



Las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (TIC) se han convertido en el principal motor de la emergente economía digital y, como tal, merecían ser analizadas en profundidad. El proyecto TaxonomTIC se inició en el año 2013 con el objetivo de visibilizar las TIC y a aquellas empresas y profesionales de Extremadura que prestan servicios relacionados con las mismas. El trabajo realizado ha permitido el desarrollo de un observatorio del Sector TIC en la región, en el que se incluye información de las empresas y profesionales del sector, así como de la formación TIC profesional y universitaria.

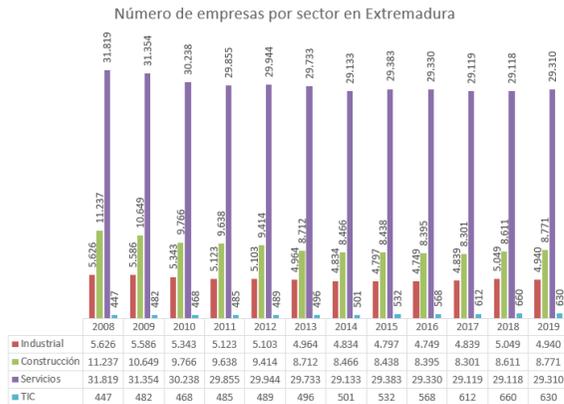
Durante el año 2013 se identificaron y clasificaron aquellas actividades que, desde el punto de vista del equipo de CénitS, podrían ser consideradas TIC. Partiendo de dicha clasificación, se identificó y caracterizó el sector, analizando todas las posibles empresas cuyas actividades principales estuvieran entre las establecidas como TIC para, finalmente, analizar el sector en Extremadura desde un punto de vista interno y externo (comparándolo con otros sectores más tradicionales de la región).

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

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

En 2016 se añadió a la plataforma OLISTIC información sobre los perfiles profesionales TIC y sus competencias asociadas. Para su elaboración se utilizó como referencia el e-CF (European e-Competence Framework) que en 2016 se transformó en un estándar europeo y que fue publicado oficialmente como la norma EN 16234-1. El marco e-CF define 23 perfiles profesionales y 40 competencias. En el momento de la elaboración del proyecto no se contaba con ninguna traducción

oficial del mismo al castellano y ésta fue realizada, en el marco del proyecto, por los propios técnicos de CénitS.



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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

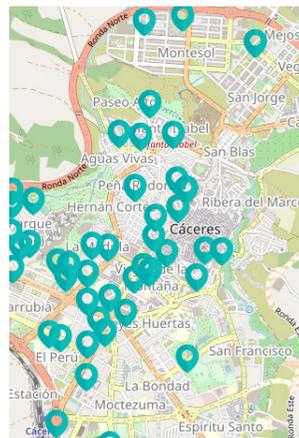
Equipo de CénitS-COMPUTAEX.

OBJETIVOS

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

METODOLOGÍA

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



RESULTADOS

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

CénitS-CPD: Equipamiento científico tecnológico

COMPUTAEX ha realizado en los últimos años una notable ampliación y renovación de los equipos de computación de elevadas prestaciones (HPC) para fortalecer los servicios de supercomputación ofrecidos.

Gracias a la construcción de un nuevo CPD será posible cubrir las expectativas más inmediatas de CénitS, de cara a seguir contribuyendo decididamente al desarrollo regional, permitiendo que la ciencia y tecnología cuenten con un recursos avanzado para poder acometer nuevos retos que hasta ahora no han podido ser emprendidos dentro de nuestra región.

No sólo el entorno investigador será más competitivo, sino que también el sector productivo se beneficiará de esta instalación de forma directa, permitiendo que muchas empresas puedan acometer proyectos de innovación tecnológica en CénitS y convertirse en socios tecnológicos del mismo, siendo proveedores y clientes de un centro avanzado, único en Extremadura y muy singular en el ámbito nacional y europeo.

En definitiva, el principal objetivo que se pretende conseguir con este proyecto es la creación del Centro de Proceso de Datos de Supercomputación de Extremadura, CénitS-CPD, donde alojar, proteger y gestionar todos los equipos HPC de los que dispone la Fundación COMPUTAEX, para fortalecer los servicios de supercomputación gestionados por su centro CénitS.

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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



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

Se solicitó financiación para acometer la construcción de un Centro de Proceso de Datos (CPD) para consolidar todas las herramientas informáticas y de comunicaciones con que cuenta el centro, entre las que destacan los supercomputadores LUSITANIA, LUSITANIA II y LUSITANIA III.

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

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

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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



Red de Excelencia RES (Red Española de Supercomputación)

CénitS forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una infraestructura distribuida consistente en la interconexión de 16 supercomputadores con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica. La RES gestiona recursos de computación de alto rendimiento con el objetivo de impulsar el avance de la ciencia y la innovación en España.

Para alcanzar este propósito, ofrece dichos recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización óptima de todos los recursos disponibles en la red.

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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



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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

FINANCIACIÓN

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

5G-CLOPS: Cross-Layer Optimization in 5G Networks

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

Universidad de Granada, Universidad de Extremadura y Fundación COMPUTAEX-CénitS.

FINANCIACIÓN

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

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

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

FINANCIACIÓN

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

Grupo de Investigación CénitS



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

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

FINANCIACIÓN

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

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

En los sistemas actuales de supercomputación, el criterio de equilibrado basado en la carga de trabajo es necesario pero insuficiente, siendo ésta la cuestión que acomete el proyecto. La distribución no uniforme de la carga no solo produce diferencias en el volumen de datos que cada proceso transmite, sino que también determina la utilización de los diferentes canales de comunicación del sistema.

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

ENTIDADES PARTICIPANTES

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

METODOLOGÍA

La propuesta parte del trabajo anteriormente realizado por el investigador principal. Cuenta con un equipo multidisciplinar que incluye expertos de diferentes campos, y trabaja habitualmente con investigadores nacionales e internacionales para afrontar un proyecto con dos hitos principales, el desarrollo de un modelo formal mixto de asignación de carga, y su posterior aplicación en forma de una herramienta software usable por el usuario final de un centro de supercomputación.

El modelo se denomina τ -Lop. Evaluado en clusters multi-core con redes de altas prestaciones, τ -Lop ha sido publicado en dos revistas de reconocido prestigio (primer cuartil y primer decil), y ha sido objeto de una tesis doctoral con mención europea en la UEX. La propuesta busca financiación para extenderlo a plataformas heterogéneas.

Se considera que la aproximación basada en τ -Lop posibilitará automatizar el proceso de asignación óptima de carga en arquitecturas heterogéneas, evitando el consumo intensivo de recursos que requieren los tests, y obteniendo una mejora significativa del rendimiento durante la ejecución de la aplicación. Ello redundará en el ahorro apreciable de costes tanto computacionales como energéticos en las instalaciones de supercomputación.

FUENTES DE FINANCIACIÓN

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

Implantación de nuevos sistemas de comunicación digital y e-learning

El programa de Innovación y Talento (PIT), promovido por la Consejería de Educación y Empleo de la Junta de Extremadura, y destinado a la contratación de desempleados menores de 30 años, combina la formación de tecnólogos con las prácticas profesionales en empresas privadas. Así, su objetivo es facilitar la inserción laboral de jóvenes y potenciar las capacidades del talento de la región extremeña en las siguientes áreas estratégicas: agroalimentaria, tecnologías de la información y la comunicación (TIC), turismo, salud, energías limpias, investigación básica, humanidades y ciencias sociales, economía verde, economía circular y bioeconomía.

La duración del proyecto “Implantación de nuevos sistemas de comunicación digital y e-learning”, de ámbito TIC, fue de 9 meses, de los cuales, el 25% consistió en un proceso formativo impartido y tutorizado en CénitS, mientras que el 75% restante fue destinado al desarrollo de trabajo efectivo.

De este modo, la formación realizada en CénitS tuvo por objeto la mejora y adquisición de competencias y capacidades, por parte del alumno, para el desempeño posterior de actividades como tecnólogo en la Fundación Magdalena Moriche, incluyendo además formación específica en competencias colaborativas.

ENTIDADES PARTICIPANTES

Fundación Magdalena Moriche (FMM) y Fundación COMPUTAEX-CénitS.

OBJETIVOS

El proyecto consideró los siguientes objetivos principales:

- Desarrollar y poner en marcha una plataforma de formación e-Learning destinada a personas con discapacidad intelectual.
- Crear una plataforma de formación e-learning para la formación de competencias profesionales destinada a trabajadores del sector.

El fin del proyecto fue crear un entorno web destinado a la formación online de personas con discapacidad intelectual. La Fundación Magdalena Moriche presta servicios a personas con inteligencia límite y discapacidad intelectual ligera de toda Extremadura, y muchos de sus usuarios no pueden acudir al Centro, situado en Badajoz, por motivos de transportes y/o económicos. De este modo, con la creación de una plataforma e-learning se posibilitaría la formación a distancia de este colectivo. Del mismo modo y dado que la Fundación Magdalena Moriche es referente a nivel nacional en el trabajo con personas con inteligencia límite, y recibe muchas demandas de formación especializada, con la creación de esta nueva plataforma e-learning se posibilitará la opción de generar formación en competencias específicas destinadas a profesionales del sector.

FUENTES DE FINANCIACIÓN

DECRETO 129/2017, de 1 de agosto, por el que se regula el Programa de formación en alternancia con el empleo de innovación y talento y se establecen las bases reguladoras de la concesión de subvenciones destinadas a dicho programa, en el ámbito de la Comunidad Autónoma de Extremadura. Consejería de Educación y Empleo. Junta de Extremadura.



A close-up, low-angle shot of a microscope lens, showing its metallic and glass components. The lens is positioned on the left side of the frame, with a blurred background of other microscope parts. The lighting is soft, highlighting the textures of the metal and glass.

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 2020. Estos proyectos son llevados a cabo por universidades, centros de investigación, centros tecnológicos y todo tipo de organizaciones, que requieren una gran cantidad de recursos informáticos. En este sentido, se valen de la infraestructura de los Supercomputadores LUSITANIA para realizar simulaciones, extrapolar resultados, demostrar hipótesis y diseñar innovaciones.

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

Ciencias de la Tierra



Direct Numerical Simulations of spanwise flexible wings in tandem configuration

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

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

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

First principles simulations of amorphous GeSe compounds for memory selectors

Pablo Ordejon. ICN2 (Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology).

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

The project will develop structural models of amorphous GeSe, a glassy semiconductor which is being used in the development of switching memories to be used in the context of neuromorphic computing. We will use First-Principles, Density Functional Theory methods to obtain models of the structure of these amorphous materials, of which little is known experimentally. These structural models are an imperative requisite for further studies of the electronic properties of these materials, which will allow us to gain understanding on how to tune their composition (via doping) and structure (via preparation conditions) to optimize their performance in memory devices. The work is part of the EU H2020 project INTERSECT.

Simulación del clima mediante el modelo WACCM

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

Integraciones climáticas con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model). Este modelo tiene la particularidad de incorporar multitud de especies químicas de interés meteorológico dentro del proceso de integración, muy interesantes desde el punto de vista de la estratosfera. Se trata de analizar el papel que juega la estratosfera en el estudio del cambio climático.

Se han realizado simulaciones climática, con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y con el modelo CESM (Community Earth System Model). La primera se ha realizado para complementar una anterior pero con un forzamiento externo de 8.5 W/m^2 en 2100. La segunda, para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional. También se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Asimismo, se realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Community Earth System Model). De igual modo, se pretende analizar la posible realización de simulaciones climáticas mediante supercomputación. Modelos anteriores fueron desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Colorado, USA) especialmente adaptados para sus ordenadores. Resulta del máximo interés conocer si estos programas, convenientemente compilados, se pueden ejecutar en otro tipo de máquinas.

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

Lucas Alados Arboledas. Universidad de Granada.

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

To be able to take decisions on how best to adapt to Climate Change, it is essential to have access to reliable data and climate change projections. To improve the climate change projections, the Fifth Assessment Report of the IPCC points to the aerosol-cloud interactions (ACI) as one of the main sources of uncertainty due to the poor knowledge of the detailed aerosol impact on clouds. Therefore, Aerosol-Cloud Interaction (ACI) is presently in the focus of atmospheric research, particularly on cloud models since incorporating ACI accurately in cloud parameterization schemes is rather challenging. With REINFORCE, we will investigate the ACI and Ice Nucleation formation to evaluate cloud model parameterizations by means of WRF-Chem model.

Ciencias de la Vida



Designing Active Materials toward Formic Acid Reduction

Federico Calle Vallejo. Universidad de Barcelona.

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

The electrochemical reduction of formic acid (FAR) is still an unsolved challenge in CO_2 transformation into commodities and fuels with high energy densities. Indeed, previous experimental results have shown that several materials reduce CO_2 only to formic acid. In this work, using DFT calculations, we will model all the different mechanistic possibilities on several metals and oxides to unravel the special characteristics that efficient FAR catalysts should have. Based on those, we will design and test new materials for FAR to methanol.

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

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

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

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

Elucidación y estudios mecanísticos en reactividad orgánica y organometálica

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

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

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

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

Estudio computacional de la reactividad de los compuestos orgánicos

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

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

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

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

Metodología

- Optimización de las estructuras de moléculas mediante cálculos teóricos.

Objetivos alcanzados

- Una de las líneas de investigación se ha centrado en la síntesis y estudio estructural de bases de Schiff generadas por condensación de aldehídos aromáticos con aminas de diferente naturaleza (aromáticas, alifáticas, aminopoliolés y aminoheterociclos). El estudio estructural, basado en experiencias de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear, se ha completado con estudios teóricos llevados a cabo a nivel DFT, en fase gaseosa y en disolución, que han permitido realizar un completo análisis de los equilibrios imina-enamina en disolución y en estado sólido.
- Se ha realizado el estudio de los equilibrios tautoméricos imina-enamina en varias bases de Schiff derivadas del aminopolioltris (hidroximetil) aminometano. A través de cálculos teóricos realizados utilizando los métodos B3LYP/6-31G* y M06-2X/6-311++G** se ha determinado la estabilidad relativa de cada uno de los tautómeros, así como la del estado de transición correspondiente a su interconversión. Los resultados obtenidos están de acuerdo con la existencia de estructuras enamínicas preferentemente en estado sólido, si bien la transformación imina-enamina debe tener lugar con gran facilidad dada la baja barrera de activación encontrada para dicha transformación ($< 8 \text{ kcal.mol}^{-1}$). A través de un complejo y costoso protocolo computacional se ha modelado la estructura cristalina, lo que ha puesto de manifiesto la mayor estabilidad de la forma enamínica en el retículo cristalino, hecho que concuerda totalmente con los datos obtenidos a través de difracción de rayos X de monocristal.
- Se ha estudiado también la tautomería imina-enamina en derivados de anilinas y o-hidroxinaftaldehídos, tanto en estado sólido como en disolución. Se han realizado cálculos DFT (a nivel B3LYP/6-31G** y M06-2X/6-311++G**) que han permitido obtener las energías relativas de las formas imínicas, enamínicas y de los estados de transición implicados en su transformación. En este caso se ha encontrado que las diferencias de energía entre iminas y enaminas es mucho menor, tanto en estado sólido como en disolución. También se ha cuantificado la proporción de imina presente en todos los equilibrios, mostrando una buena concordancia con las proporciones obtenidas experimentalmente mediante resonancia magnética nuclear. La simulación de la estructura cristalina de un derivado del naftaldehído ha puesto de manifiesto que la estructura imínica es ligeramente más estable que la enamínica, lo cual vuelve a estar de acuerdo con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.

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

Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas

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

Estudio, desde un punto de vista teórico, de reacciones químicas, para optimizar las condiciones de reacción y los tiempos y rendimientos experimentales y llegar a comprender y explicar los mecanismos por los que transcurren determinados procesos. Utilización del paquete de programas Gaussian para abordar el estudio.

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

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

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

Objetivos

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

Metodología

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

Objetivos alcanzados

- Cálculos mecanocuánticos de sistemas poliatómicos para el desarrollo de una Tesis Doctoral.
- Investigaciones sobre el sistema Cl+NH₃, con una complicada topología en la superficie de energía potencial.
- Comienzo de la construcción de la superficie de potencial para el sistema OH+NH₃, el cual presenta valles en el camino de reacción, que complica la construcción de la superficie.

Exploring the role of K as a promoter in the water-gas shift reaction and methanol synthesis

José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla. [Proyecto soportado en CéniTS procedente de la Red Española de Supercomputación]

The activity and selectivity of a heterogeneous catalyst can be substantially affected by the addition of a promoter. In this project, we aim to study the influence of K as a promoter for the WGS reaction and methanol synthesis in different Cu based catalyst. Our previous studies demonstrated that K plays an important role in water dissociation but it is unclear its influence in the whole catalytic cycle from a thermodynamic and kinetic points of view.

Functional dynamics of human DNA polymerase delta

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

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

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

Origin of the selectivity on the conversion of CO₂ on ceria supported Ni catalyst from multiscale simulations

Francesc Illas Riera. Universidad de Barcelona (UB).

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

Conversion of atmospheric CO₂ is a need to prevent further global warming and also constitutes an opportunity as it can be used as a C1 feedstock for the synthesis of fuels and other commodities. However, the high stability of this molecule requires high active catalysts, often transition metals, leading to a mixture of products. Here, the selectivity of Ni on a ceria support towards CO₂ conversion will be studied by multiscale modelling simulations and compared to that of previous studies for extended Ni surfaces and Ni nanoparticles supported on TiC. This will provide useful information for the development of more efficient and selective catalyst.

Zr-based metal–organic frameworks for biomass valorization

Manuel Ortuño. ICIQ (Instituto Catalán de Investigación Química).

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

While fossil fuels deplete, the use of biomass as renewable resources of carbon atoms becomes a promising solution to develop a sustainable industry. Bridging the gap between homogeneous and heterogeneous catalysis, this project will study metal–organic frameworks based on zirconia nodes to catalyze the valorization of biomass-derived feedstocks into high-value chemicals and fuels. Understanding the reaction mechanisms at atomic level of detail will help to guide future experiments.



Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

Aldealab / Factoría de Innovación

Excmo. Ayuntamiento de Cáceres.

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

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

Josep M Bergada Granyo. Universitat Politecnica de Catalunya.

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

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

Prestación de servicios de almacenamiento de datos

Fundecyt-PCTEX

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

Proyecto de computación del CAB, CSIC-INTA

CAB, CSIC-INTA

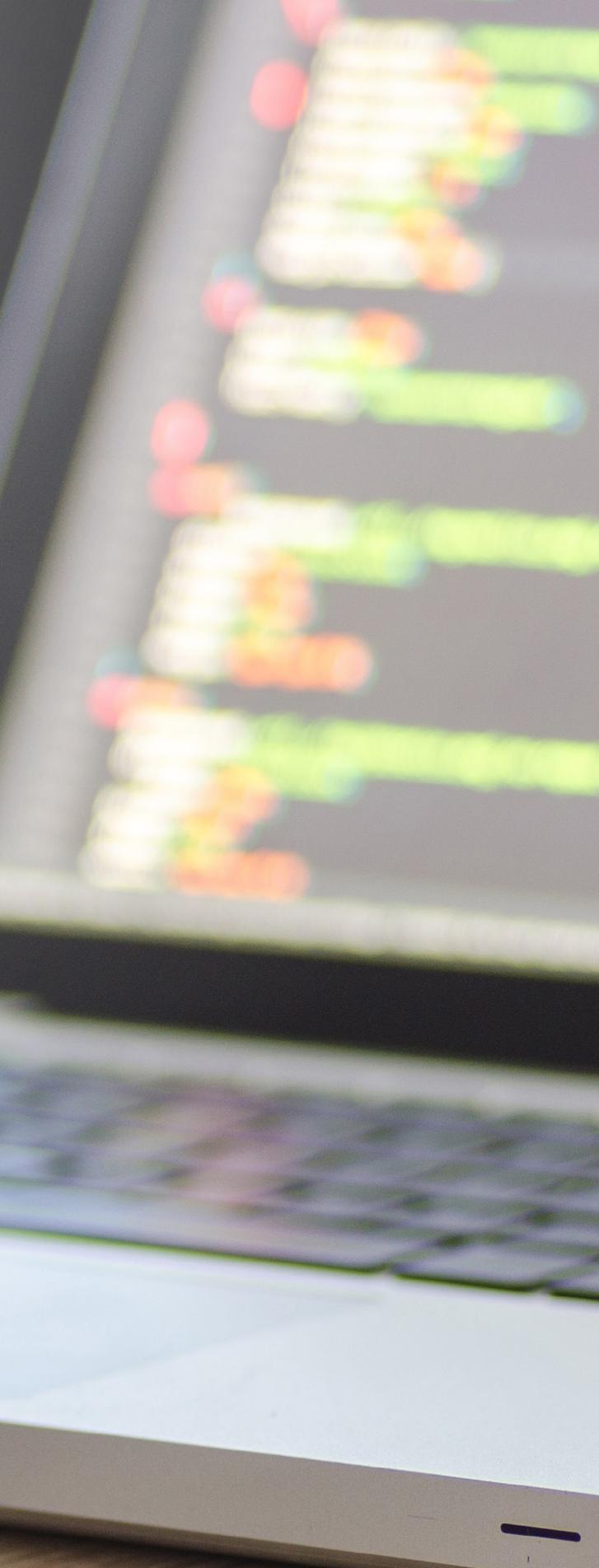
Prestación de recursos para el proyecto de computación del centro de AstroBiología CAB, creado como centro mixto entre el CSIC (Centro Superior de Investigaciones Científicas) y el INTA (Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial).

Servicio Central de Apoyo a la Investigación (SCAI)

Universidad de Córdoba (UCO)

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





RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

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

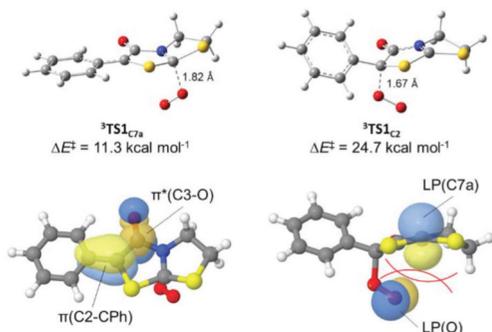
Esta sección presenta los resultados más destacables que han sido publicados en congresos y revistas durante el año 2020, además de la Tesis Doctoral y los Trabajos Finales de Grado desarrollados en el centro.

Publicaciones en revistas

A fully diastereoselective oxidation of a mesoionic dipole with triplet molecular oxygen

de la Concepción, J. G., Ávalos, M., Jiménez, J. L., Cintas, P., & Light, M. E. (2020). A fully diastereoselective oxidation of a mesoionic dipole with triplet molecular oxygen. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 18(32), 6328-6339.

Oxidations with molecular oxygen are ubiquitous processes in biological systems where cofactor-dependent enzymes activate either oxygen or hydrogen peroxide to induce multichannel pathways. In stark contrast, such slow atmospheric oxidations are seldom harnessed in chemical synthesis and analysis. The present study unveils an unusual aerobic oxidation of a mesoionic dipole leading easily to a more functionalized skeleton. Although the synthetic scope has not been explored, two key considerations emerge from this transformation, as it proceeds with complete diastereoselection and could be successfully extrapolated to structurally related mesoionic chirons without racemization. How this oxidation actually occurs proved to be puzzling from the onset and only high-level computation reveals a cascade transformation, whose results reconcile theory and experiment. Hopefully, the mechanistic insights should help us to understand better the autoxidative reactions of organic molecules.

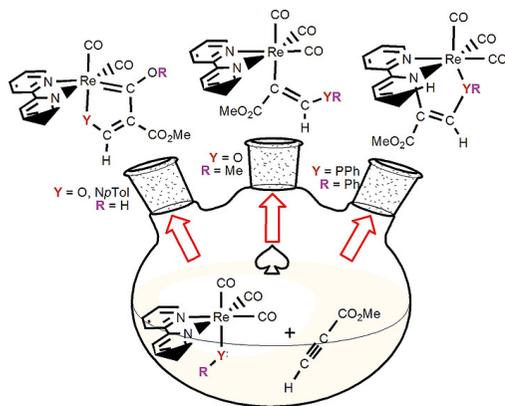
***A Methodology for Network Analysis to Improve the Cyber-Physicals Communications in Next-Generation Networks***

Cortés-Polo, D., Jimenez Gil, L. I., González-Sánchez, J. L., & Calle-Cancho, J. (2020). A Methodology for Network Analysis to Improve the Cyber-Physicals Communications in Next-Generation Networks. *Sensors*, 20(8), 2247.

Cyber-physical systems allow creating new applications and services which will bring people, data, processes, and things together. The network is the backbone that interconnects this new paradigm, especially 5G networks that will expand the coverage, reduce the latency, and enhance the data rate. In this sense, network analytics will increase the knowledge about the network and its interconnected devices, being a key feature especially with the increment in the number of physical things (sensors, actuators, smartphones, tablets, and so on). With this increment, the usage of online networking services and applications will grow, and network operators require to detect and analyze all issues related to the network. In this article, a methodology to analyze real network information provided by a network operator and acquire knowledge of the communications is presented. Various real data sets, provided by Telecom Italia, are analyzed to compare two different zones: one located in the urban area of Milan, Italy, and its surroundings, and the second in the province of Trento, Italy. These data sets describe different areas and shapes that cover a metropolitan area in the first case and a mainly rural area in the second case, which implies that these areas will have different compartments. To compare these compartments and group them in a single cluster set, a new technique is presented in this paper to establish a relationship between them and reduce those that could be similar.

Addition of Re-Bonded Nucleophilic Ligands to Activated Alkynes: A Theoretical Rationalization

Álvarez, D., Díaz, J., Menéndez, M. I., & López, R. (2020). Addition of Re-Bonded Nucleophilic Ligands to Activated Alkynes: A Theoretical Rationalization. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2020(3), 269-280.

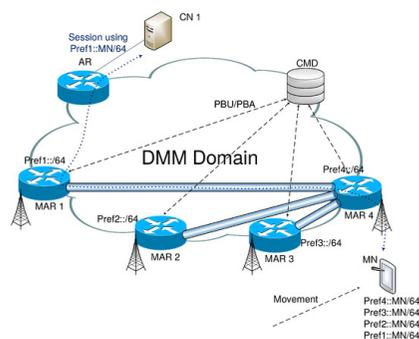


Reactions between $[\text{Re}(\text{X})(\text{CO})_3(\text{bipy})]$ ($\text{X} = \text{OH}, \text{OMe}, \text{NHpTol}, \text{PPh}_2$; $\text{bipy} = 2,2'$ -bipyridine) complexes and methyl propiolate (HMAD) are studied to rationalize the different products experimentally obtained. Three reaction patterns were found with a common and limiting initial attack of X to HMAD. Thus, the experimental selectivity depends on the kinetics and/or thermodynamics of the last reaction stages. For $\text{X} = \text{OH}$ and NHpTol an easy intramolecular attack of the X -linked HMAD to a highly electrophilic CO ligand is followed by a hydrogen transposition to this CO , yielding very stable species (C-CCOH products). When $\text{X} = \text{OMe}$, the insertion of the X -attached HMAD into the Re-O-Me bond (*ins* product) takes place due to the smallest barrier and the largest stability of the *ins* route. Finally, when $\text{X} = \text{PPh}_2$ the *ins* route becomes restricted and the route for the coupling of the X -attached HMAD with bipy (C-Cbipy product) wins over the one for the coupling with CO (C-CCO product) only due to the larger stability of the C-Cbipy product.

Analytical and Experimental Evaluation of a Novel Mechanism to Improve the Control Plane in Next-Generation Mobile Networks

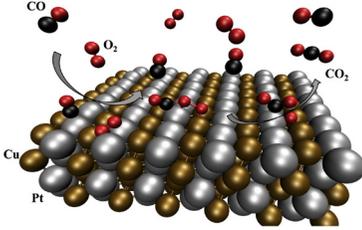
Calle-Cancho, J., Cortés-Polo, D., González-Sánchez, J. L., Jiménez, L. I., & Carmona-Murillo, J. (2020). Analytical and Experimental Evaluation of a Novel Mechanism to Improve the Control Plane in Next-Generation Mobile Networks. *Electronics*, 9(3), 417.

With the continuous development of mobile communications and the Internet of Things technology, the enhanced network performance can be seen as one of the major challenges in the fourth industrial revolution context, where new services and applications with strict performance requirements have emerged, such as driverless vehicles, smart cities, factories, and manufacturing, among others. These new services and applications also drive growth of the data traffic, which is increasing exponentially. Thus, in mobile network environments, industry and academia are proposing new mechanisms to overcome the traffic bottlenecks and reduce the signaling overhead that affects current networks. Centralized Mobility Management solutions are prone to several problems such as the aforementioned signaling overhead or scalability issues. To overcome these limitations, Distributed Mobility Management approaches are being considered. In this paper, an analytical cost model and experimental evaluation will be developed for evaluating the performance of the Distributed Mobility Management implementations. Furthermore, a new approach will be proposed to improve network performance.



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

Suárez, J. A., Plata, J. J., Márquez, A. M., & Sanz, J. F. (2021). Catalytic activity of PtCu intermetallic compound for CO oxidation: A theoretical insight. *Catalysis Today*.

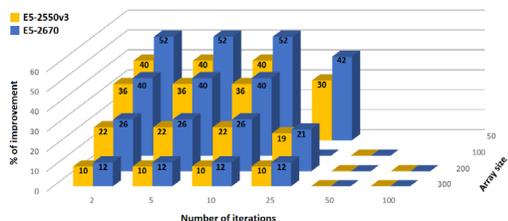


To understand the microscopic mechanism of the CO oxidation reaction at PtCu nanoparticles, which have unique geometric and electronic structures compared to their component metals, we present here a theoretical study, based on density functional theory calculations, of the main reaction steps of this reaction. We examine the O₂ dissociation, the CO adsorption and the CO + O₂ reaction at an atomic level and use the computed geometries, Bader charges, and vibrational frequencies to rationalize the role of the intermetallic nanoparticles surface structure on the experimentally observed much higher activity of these nanoparticles as catalysts of the preferential oxidation of CO. By comparing with clean Pt (111) surface and with different Cu-doped models of this same surface, our results show that, at the surface, the presence of Cu induces the segregation of CO molecules at Pt sites and of O₂ molecules at Cu sites. Contrarily to Pt surfaces, the unassisted O₂ dissociation has a high barrier at the intermetallic nanoparticle surface and proceeds through a CO-assisted mechanism in which the new CO bond is formed while the O_{single bond}O bond is broken with a kinetic barrier much lower than on either Pt (111) or in Pt-doped surfaces. The particular structure of the intermetallic surface is shown to have a significant role in the low kinetic barrier for the reaction, allowing for an easy approach of the CO to the adsorbed O₂ molecule that permits an early transition state with a low energetic barrier.

Efficient code development for improving execution performance in high performance computing centers

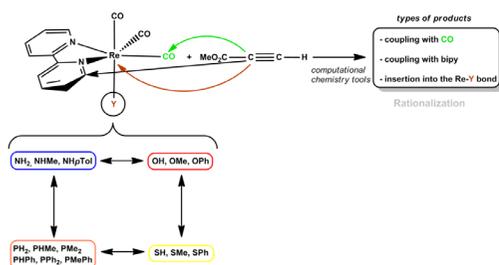
Corral-Garcia, J., Lemus-Prieto, F., & Perez-Toledano, M. A. (2021). Efficient code development for improving execution performance in high-performance computing centers. *The Journal of Supercomputing*, 77(4), 3261-3288.

Thanks to high-performance computing (HPC), it is possible to solve all kinds of highly complex projects from multiple scientific disciplines that require computationally intensive tasks to be undertaken and which otherwise could not be addressed. Unfortunately, since the development of parallel codes requires highly specific knowledge, it can become a challenge for beginners and non-expert programmers, especially when it comes to making adequate and efficient use of the available computing resources. To this end, we developed a transcompiler for helping researchers and inexperienced users who do not have the necessary skills in the use of parallel programming, and aimed at improving the performance of their HPC routines and tasks. Current efforts are focused on an additional module for optimizing code fragments in order to reduce their running times. In order to achieve this, twenty-six software techniques were selected from the literature to be integrated into this new module, all of them aimed at improving execution times of HPC programs by directly writing efficient code. Their effectiveness is analyzed and discussed in the current manuscript through a complete set of tests designed and conducted to measure and evaluate benefits achieved when applying these techniques.



Influence of the Nucleophilic Ligand on the Reactivity of Carbonyl Rhenium(I) Complexes towards Methyl Propiolate: A Computational Chemistry Perspective

Álvarez, D., López-Castro, E., Guerrero, A., Riera, L., Pérez, J., Díaz, J., ... & López, R. (2020). Influence of the Nucleophilic Ligand on the Reactivity of Carbonyl Rhenium (I) Complexes towards Methyl Propiolate: A Computational Chemistry Perspective. *Molecules*, 25(18), 4134.

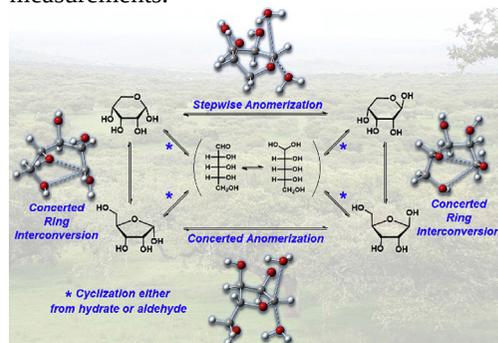


A comparative theoretical study on the reactivity of the complexes $[\text{ReY}(\text{CO})_3(\text{bipy})]$ ($\text{Y} = \text{NH}_2, \text{NHMe}, \text{NHpTol}, \text{OH}, \text{OMe}, \text{OPh}, \text{PH}_2, \text{PHMe}, \text{PMe}_2, \text{PPh}, \text{PPh}_2, \text{PMePh}, \text{SH}, \text{SMe}, \text{SPh}$; $\text{bipy} = 2,2'$ -bipyridine) towards methyl propiolate was carried out to analyze the influence of both the heteroatom (N, O, P, S) and the alkyl and/or aryl substituents of the Y ligand on the nature of the product obtained. The methyl substituent tends to accelerate the reactions. However, an aromatic ring bonded to N and O makes the reaction more difficult, whereas its linkage to P and S favour it. On the whole, ligands with O and S heteroatoms seem to disfavour these processes more than ligands with N and P heteroatoms, respectively. Phosphido and thiolato ligands tend to yield a coupling product with the bipy ligand, which is not the general case for hydroxo, alcoxo or amido ligands. When the Y ligand has an O/N and an H atom the most likely product is the one containing a coupling with the carbonyl ligand, which is not always obtained when Y contains P/S. Only for OMe and OPh, the product resulting from formal insertion into the Re-Y bond is the preferred.

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

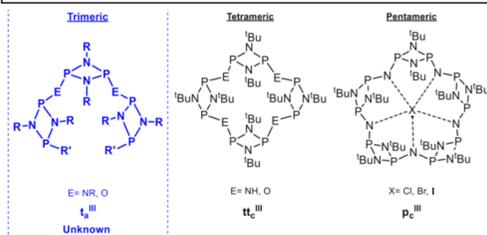
de la Concepción, J. G., Martínez, R. F., Cintas, P., & Babiano, R. (2020). Mutarotation of aldoses: Getting a deeper knowledge of a classic equilibrium enabled by computational analyses. *Carbohydrate research*, 490, 107964.

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

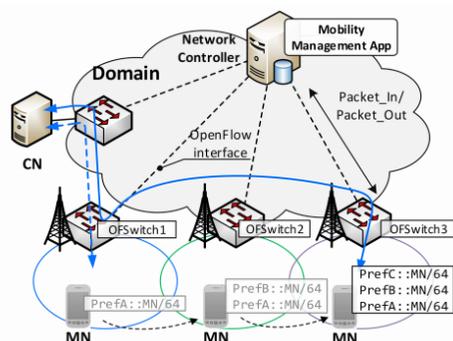


N-Bridged Acyclic Trimeric Poly-Cyclodiphosphazanes: Highly Tuneable Cyclodiphosphazane Building Blocks

Shi, X., Leon, F., Sim, Y., Quek, S., Hum, G., Khoo, Y. X. J., & Garcia, F. (2020). *N*-Bridged Acyclic Trimeric Poly-Cyclodiphosphazanes: Highly Tuneable Cyclodiphosphazane Building Blocks. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(49), 22100-22108.



We have synthesized a completely new family of acyclic trimeric cyclodiphosphazane compounds comprising NH, NiPr, NtBu and NPh bridging groups. In addition, the first NH-bridged acyclic dimeric cyclophosphazane has been produced. The trimeric species display highly tuneable characteristics so that the distance between the terminal N(H)R moieties can be readily modulated by the steric bulk present in the bridging groups (ranging from ≈ 6 to ≈ 10 Å). Moreover, these species exhibit pronounced topological changes when a weak non-bonding $\text{NH}\pi$ aryl interaction is introduced. Finally, the NH-bridged chloride binding affinities have been calculated and benchmarked along with the existing experimental data available for monomeric cyclodiphosphazanes. Our results underscore these species as promising hydrogen bond donors for supramolecular host-guest applications.



Towards a software-based mobility management for 5G: An experimental approach for flattened network architectures

Calle-Cancho, J., Mendoza-Rubio, J. M., González-Sánchez, J. L., Cortés-Polo, D., & Carmona-Murillo, J. (2020). *Towards a software-based mobility management for 5G: An experimental approach for flattened network architectures*. *Computer Science and Information Systems*, 17(1), 51-70.

The number of mobile subscribers, as well as the data traffic generated by them, is increasing exponentially with the growth of wireless smart devices and the number of network services that they can support. This significant growth is pushing mobile network operators towards new solutions to improve their network performance and efficiency.

Thus, the appearance of Software Defined Networking (SDN) can overcome the limitations of current deployments through decoupling the network control plane from the data plane, allowing higher flexibility and programmability to the network. In this context, the process of handling user mobility becomes an essential part of future mobile networks. Taking advantage of the benefits that SDN brings, in this article we present a novel mobility management solution.

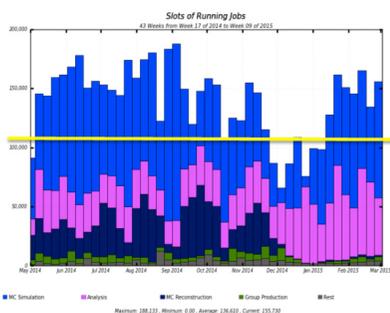
This proposal avoids the use of IP-IP tunnels and it adds the dynamic flow management capability provided by SDN. In order to analyse performance, an analytical model is developed to compare it with NB-DMM (Network-based DMM), one of the main DMM (Distributed Mobility Management) solutions. Additionally,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

Publicaciones en congresos

HeritaGen: Genetic and Genealogical Heritage Unification for Clinical Decision Making Support in Inherited Diseases

José-Luis González-Sánchez, Bernabé Diéguez-Roda, José Antonio García Trujillo, Jonathan Gómez-Raja, Felipe Lemus-Prieto, Ana María Núñez-Cansado, María Peguero-Ramos, Álvaro Rodríguez-San Pedro and Silvia Romero-Chala. HeritaGen: Genetic and Genealogical Heritage Unification for Clinical Decision Making Support in Inherited Diseases. IWBBIO 2020, Congreso Internacional de Trabajo sobre Bioinformática e Ingeniería Biomédica. Octubre, 2020

Databases with genealogical relationships linked to genetic information are very useful for epidemiological studies of genetic disorders. Integral analysis of this data helps clinicians in medical decision making, give genetic advice to families, identify individuals at risk of disease or discover new potential genetic causes for Mendelian diseases. A strategy was designed and implemented to collect the genealogical and genetic heritage of a delimited region to gain knowledge about primary immunodeficiencies (PIDDs) in the area. Next Generation Sequencing (NGS) technologies were used for whole exome sequencing (WES) of potentially immunodeficient participants. High Performance Computing (HPC) technologies were useful to manage the data. We have also developed the HeritaGen web platform to make it easier for clinicians to access and interpret information and help them in decision making.



Computing activities at the Spanish Tier-1 and Tier-2s for the ATLAS experiment towards the LHC Run3 and High-Luminosity periods

de la Hoz, S. G., Acosta-Silva, C., Pozo, J. A., del Peso, J., Casani, Á. F., Molina, J. F., ... & Vedaee, A. (2020). Computing activities at the Spanish Tier-1 and Tier-2s for the ATLAS experiment towards the LHC Run3 and High-Luminosity periods. In EPJ Web of Conferences (Vol. 245, p. 07027). EDP Sciences.

The ATLAS Spanish Tier-1 and Tier-2s have more than 15 years of experience in the deployment and development of LHC computing components and their successful operations. The sites are already actively participating in, and even coordinating, emerging R&D computing activities and developing new computing models needed for the Run3 and HighLuminosity LHC periods. In this contribution, we present details on the integration of new components, such as High Performance Computing resources to execute ATLAS simulation workflows.

The development of new techniques to improve efficiency in a cost-effective way, such as storage and CPU federations is shown in this document. Improvements in data organization, management and access through storage consolidations (“data-lakes”), the use of data caches, and improving experiment data catalogs, like Event Index, are explained in this proceeding. The design and deployment of new analysis facilities using GPUs together with CPUs and techniques like Machine Learning will also be presented. Tier-1 and Tier-2 sites, are, and will be, contributing to significant R&D in computing, evaluating different models for improving performance of computing and data storage capacity in the High-Luminosity LHC era.

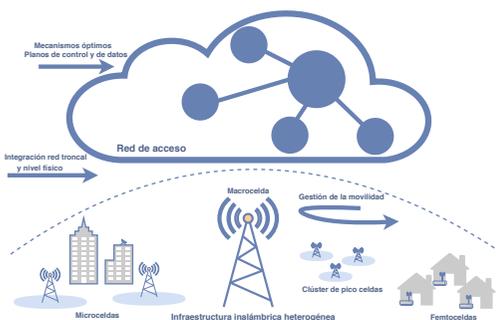
Tesis Doctorales

Mecanismos para la Gestión Eficiente del Plano de Control y del Plano de Datos en Redes Móviles 5G

Jesús Manuel Calle Cancho. Programa de Doctorado en Tecnologías Informáticas de la Universidad de Extremadura. Directores: José Luis González Sánchez y Javier Carmona Murillo.

En los últimos años, el incremento exponencial del tráfico de datos móviles, unido al despliegue de nuevos servicios sobre las redes actuales, han propiciado que los operadores de telecomunicaciones busquen nuevos mecanismos que permitan una gestión eficiente de la red de acuerdo a las demandas específicas de los usuarios. Estos mecanismos deben ser capaces de gestionar los recursos de red dinámicamente, proporcionando flexibilidad en el nuevo entorno 5G, a través de tecnologías emergentes. En este contexto, uno de los procesos involucrados en la gestión de la red es el soporte a la movilidad, cuyo principal objetivo es mantener las comunicaciones activas mientras los usuarios se mueven entre redes de acceso diferentes de manera transparente, minimizando el tiempo de desconexión o pérdida de servicio.

A tal efecto, se han estandarizado protocolos para la gestión de la movilidad centralizada (CMM) que basan su funcionamiento en una entidad central que gestiona el tráfico de datos y la señalización de los nodos móviles. Sin embargo, estos protocolos presentan algunas limitaciones y necesitan ser adaptados a las nuevas tendencias y a la creciente demanda de tráfico de datos móviles.



Por ello, se han desarrollado nuevas soluciones de gestión de la movilidad distribuida (DMM), cuyo objetivo es distribuir los nodos que actúan como ancla de movilidad por el borde de la red más cerca de los usuarios finales.

Por lo tanto, DMM reduce algunos de los problemas que afectan a las redes móviles, pero debido a la densificación de celdas producida por el incipiente desarrollo de 5G, se está produciendo un incremento de tráfico de señalización usado para gestionar la movilidad, que debe ser tenido en cuenta por los operadores de red en la fase de diseño. Además, a pesar de que muchos protocolos se están desarrollando de forma distribuida, existen situaciones en las que DMM provoca mayores costes de la red y, por tanto, su rendimiento puede verse afectado.

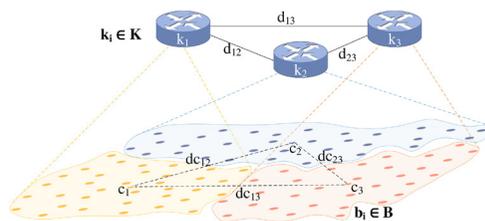
Partiendo de esta situación, en esta tesis se proponen tres nuevos mecanismos para mejorar el rendimiento de las redes móviles de próxima generación desde tres perspectivas diferentes. Nuestra primera propuesta, TE-DMM, permite llevar a cabo una gestión eficiente del plano de control, reduciendo en gran medida el tráfico de señalización. La segunda propuesta, SR-DMM, combina SDN con DMM para mejorar el proceso de gestión de la movilidad desde el punto de vista del plano de datos. Nuestro tercer mecanismo propone una estrategia de asociación entre estaciones base y la red de acceso para mejorar el rendimiento de los protocolos de gestión de la movilidad, tanto del plano de control como del plano de datos.

Adicionalmente, se ha llevado a cabo una evaluación de costes relacionados con el despliegue de tecnologías de red emergentes, analizando su viabilidad económica.

Además, se propone un modelo analítico basado en costes de infraestructura y operación, que permite obtener una evaluación comparativa y fiable entre los despliegues de red tradicionales y los de arquitecturas de red virtualizadas. El análisis desarrollado ha tomado como base la Red Científico Tecnológica de Extremadura (RCT), de manera que se puedan cubrir sobre ella las necesidades de las redes de próxima generación, reduciendo costes y proporcionando agilidad en el despliegue de sus servicios.

Finalmente, se ha diseñado e implementado un simulador de gestión de la movilidad para redes de nueva generación (PyMMSim), que ha sido utilizado para obtener los resultados de simulación presentados en esta Tesis. PyMMSim ha sido integrado en un entorno

real de HPC, permitiendo realizar simulaciones con topologías de red a gran escala, obteniendo resultados más fiables gracias al despliegue masivo del simulador sobre un clúster de supercomputación distribuido, empleando como infraestructura el supercomputador LUSITANIA II. Además, se han realizado evaluaciones analíticas y experimentales con el objetivo de medir el rendimiento de los mecanismos propuestos en términos de costes de movilidad.



Publicaciones en libros

Memoria Anual 2019 de COMPUTAEX.

Juan Francisco Bermejo Martín, Jesús Calle Cancho, Javier Corral García, David Cortés Polo, José Luis González Sánchez, Luis Ignacio Jiménez Gil, Felipe Lemus Prieto, María Jesús Martínez Polo y Blanca Pérez Mariño. ISBN-13: 978-84-09-21652-9. Depósito Legal: BA-345-2020.



La Fundación COMPUTAEX presentó en junio su memoria de actividades correspondiente al ejercicio 2019, año en el que celebró su X Aniversario.

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

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

Trabajos Finales de Grado

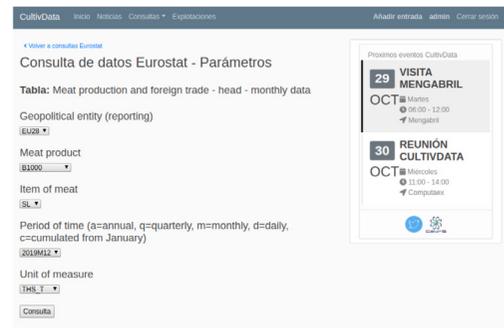
Plataforma de integración y gestión de datos geolocalizados destinados a mejorar la eficiencia agraria de los cultivos**Álvaro Huertas Martín. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx. Codirigido por Félix Rodríguez Rodríguez y José Luis González Sánchez.**

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

inteligencia artificial.

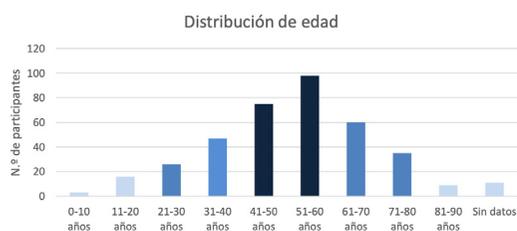
El objetivo se materializa en la implantación de una infraestructura de apoyo a la investigación genética con las siguientes funcionalidades:

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

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

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

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



Big Geodata - Implantación de un entorno Big Data para la integración y análisis de datos geospaciales en el centro de supercomputación extremeño CénitS-COMPUTAEX

Fátima Dávila Benítez. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software de la UEx. Codirigido por Félix Rodríguez Rodríguez y José Luis González Sánchez.

Big Data en los últimos años se ha convertido en un concepto de gran relevancia, hasta tal punto de estar presente en casi cualquier momento de nuestras vidas. En gran parte, esto se debe al nivel de cohesión tecnológica existente en la vida de cualquier persona que provoca que al cabo del día se generen millones de datos. La importancia de las tecnologías Big Data es que nos permiten tratar y analizar esta gran cantidad de datos para poder extraer información útil.

En concreto este TFG se centra en la extracción de conocimiento en determinadas zonas de interés aplicando técnicas Big Data a datos meteorológicos. Estos datos se obtienen de bases de datos de la NASA, concretamente de los satélites que se centren en obtener información sobre los vientos de la superficie de mares y océanos.

El objetivo principal del proyecto es la construcción de una interfaz que permita la consulta de estos datos y su procesamiento y análisis. Los objetivos específicos perseguidos son:

- Identificar la necesidad del análisis de datos meteorológicos y estudiar las soluciones existentes, obtener el conocimiento general sobre los datos y el proceso de transformación a fin de trabajar con ellos en un formato más cómodo.
- Implementación de un proceso MapReduce para poder seleccionar las regiones de interés del análisis.
- Estudiar la base de datos MongoDB (NoSQL) para el almacenamiento y gestión de los datos.
- Estudiar y comprender el uso de índices 2d y 2dSphere para las consultas geospaciales.
- Diseño e implementación de los procesos MapReduce adecuados al entorno del CPD del centro.

- Ajustar los parámetros algorítmicos proporcionados en WEKA para analizar los resultados.
- Implementar una interfaz de usuario para lanzar todo el proceso desde las consultas a la base de datos hasta el análisis WEKA.
- Estudiar los resultados obtenidos y plantear posibles mejoras y trabajos futuros.

Los objetivos del proyecto se han cumplido satisfactoriamente. Los datos descargados directamente de los repositorios NASA son procesados y transformados mediante técnicas MapReduce que filtran los datos y obtienen aquellos pertenecientes a las zonas de interés. También se obtienen datos estructurados que no requieren ser procesados y que se almacenan directamente en una base de datos MongoDB. Finalmente, para estos dos tipos de datos, se permite la invocación de algoritmos alojados en el entorno WEKA (Waikato Environment for Knowledge Analysis). Estos algoritmos analizarán cada una de las regiones de interés. Todo este proceso puede ser ejecutado mediante una aplicación de escritorio ejecutada en una máquina virtual de Spatial Hadoop. Por último, se ha realizado un estudio de escalabilidad del proyecto: si mejoran las condiciones de la máquina virtual la ejecución del proyecto es más rápida y eficiente.

Sistema Blockchain para la trazabilidad de historiales clínicos en entornos HPC

Jesus Tovar Trujillo. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software de la UEx. Codirigido por Lorenzo Martínez Bravo y José Luis González Sánchez.

Este proyecto, al estar relacionado con el sector sanitario, ha partido del estudio de los estándares existentes en materia de historiales clínicos de forma que se comparan diferentes sistemas normalizados de historias clínicas EHR (Electronic Health Record). Gracias a esto se ha obtenido una estructura de base de datos de historiales clínicos de forma que los datos hospitalarios se almacenen en un sistema de información normalizado, especificando los registros de los pacientes, toda la información clínica como preinscripciones, observaciones, pruebas, etc. y los roles dentro del sistema.

Una vez definidas las bases del proyecto, se ha introducido la intención de incorporar al sistema de información la información genética. Para ello, se verán diferentes estándares para representar dicha información en una base de datos. Para ello, habrá que tener en cuenta el volumen de información que supone incluir la información genética.

Los estándares citados anteriormente no aportan medidas de seguridad ni de control de acceso, por lo que parece razonable plantearse la sensibilidad de la información almacenada en estos sistemas de información y buscar la relación con el Reglamento General de Protección de Datos y todo lo que aporta.

Combinando lo anterior con Blockchain, se podrían obtener mecanismos de seguridad sobre los datos sensibles como integridad, confidencialidad, control de acceso, etc. Blockchain se comporta como un sistema de control de logs que no puede ser alterado, aunque está compartido entre diversas entidades. El uso

de Blockchain permite impedir la modificación de datos que constituyen la cadena y que sean protegidos frente a posibles manipulaciones, permitiendo la trazabilidad y la designación de responsabilidades. Además, se ha analizado la viabilidad y ventajas que supone introducir equipos HPC (Computación de alto rendimiento) para el procesamiento de este tipo de sistemas.

Por todo lo anterior, este proyecto ha sido desarrollado en las siguientes fases:

- Una de las primeras tareas realizadas consistió en la búsqueda de información sobre el sector sanitario en la actualidad. Gracias a esto se pudo comprobar la precariedad de los sistemas utilizados que, muchas veces no aportan los medios necesarios a la hora de tratar un paciente.
- A partir de la notificación de los principales problemas, se estudió el uso de estándares EHR para información clínica, ya que esto aportarían una base de datos, como bien se ha especificado, estandarizada, que permitiría el intercambio de historiales entre distintos hospitales.
- Para proteger dichos datos clínicos, se ha usado la tecnología Blockchain, muy ligada con las criptomonedas actualmente, pero no es su único objetivo. Están saliendo a la luz una gran cantidad de proyectos que usan esta tecnología, cuyo objetivo es totalmente distinto a las criptomonedas.
- Gracias al estudio de dicha tecnología se han podido conocer diferentes tipos de Blockchains, al igual que una amplia gama de herramientas utilizadas para el desarrollo de aplicaciones basadas en Blockchain.



hospitalId	name	especialistas	numEspecialistas	pacientes	numPacientes	Actions
H1	Quirosalud Coceres	resource.org.example.myNetwork.Espe...	2	0		[Edit] [Delete]
H2	Quirosalud Badajoz	resource.org.example.myNetwork.Espe...	1	0		[Edit] [Delete]



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 2020 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación, destacando los eventos relacionados con la Inauguración del Supercomputador LUSITANIA III, así como la organización de diversas jornadas.

Convenios de colaboración

AEXIT, la Asociación Extremeña de Ingenieros de Telecomunicación, tiene como objetivo potenciar y fomentar el desarrollo de las TIC en la sociedad extremeña y servir de punto de referencia a los ingenieros que desarrollan su trabajo en la región. COMPUTAEX firmó un convenio para impulsar, distintos proyectos, eventos y actividades.



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



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



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



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



CASAT, sociedad agraria de transformación, firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto *“CultivDat2: Desarrollo sostenible aplicando modelos predictivos al cultivo de datos agrarios”*, en la convocatoria destinada al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en Extremadura.



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



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





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



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



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



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



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



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



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



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

Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC



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

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

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

Además, desde el año 2009, se han concedido 29 becas de formación a estudiantes de distintas titulaciones de la Universidad de Extremadura, directamente relacionadas con las Tecnologías de la Información y la Comunicación. Estas becas tienen como objetivo la colaboración en proyectos de investigación desarrollados en CénitS.

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



Semana de la Ciencia



Del 26 de octubre al 9 de noviembre tuvo lugar la IV Semana de la Ciencia de Extremadura, coordinada por el Servicio de Difusión de la Cultura Científica de la Universidad de Extremadura y Fundecyt-PCTEX, y financiada por la O4i y la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura, a través del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

El objetivo de estos eventos es fomentar el interés de la sociedad extremeña por la ciencia y la tecnología, mediante la realización de cerca de 80 actividades en 22 localidades de la región, gracias a la colaboración de diversos centros de educación primaria y secundaria, centros tecnológicos, museos y asociaciones profesionales dedicadas a la cultura científica y varios departamentos y grupos de investigación de la Universidad de Extremadura.

Becas de formación del convenio COMPUTAEX - UEx

Fátima Dávila Benítez

Estudiante del Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software en la Escuela Politécnica de Cáceres. Durante el periodo de beca colaboró en el desarrollo del proyecto Big GeoData, formándose en el ámbito del Big Data, los datos abiertos (Open Data), la construcción de interfaces gráficas de usuario, la computación paralela, bases de datos y la inteligencia artificial. Su trabajo consistió en la implementación de un proceso completo Big Data utilizando datos meteorológicos con el objetivo de conseguir información útil de determinadas zonas de interés.

Respecto a su participación en la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación de CénitS, colaboró en la inauguración del supercomputador LUSITANIA III y en la recepción de varias visitas al centro. En el ámbito académico desarrolló su Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software, titulado “*Big Geodata - Implantación de un entorno Big Data para la integración y análisis de datos geoespaciales en el centro de supercomputación extremeño CénitS-COMPUTAEX*”. Con el comienzo de la beca se marcaron una serie de objetivos entre los que destacan: identificar la necesidad de análisis de datos meteorológicos y estudiar las soluciones existentes, ajustar los parámetros algorítmicos proporcionados por WEKA para analizar los resultados y apoyo a las actividades realizadas en el centro. Se alcanzaron los siguientes objetivos:

- Puesta en marcha de una máquina virtual Spatial Hadoop en el CPD de CénitS-COMPUTAEX. También se estudia su escalabilidad para distintas configuraciones en un entorno HPC.
- Aplicación de conocimientos de bases de datos NoSQL (MongoDB) para el almacenamiento de los datos.
- Estudiar y comprender el uso de índices 2d y 2dsphere proporcionados por MongoDB para las consultas geoespaciales.
- Implementación de una interfaz de usuario para lanzar todo el proceso (desde las consultas a la BD hasta el análisis).
- Diseño e implementación de los procesos MapReduce adecuados al entorno CénitS-COMPUTAEX.
- Ajustar los parámetros algorítmicos proporcionados por WEKA para analizar los resultados y mejorar la precisión de los resultados.
- Estudio de los resultados obtenidos y sugerencia de posibles mejoras y trabajos futuros.

Enrique Moreno Sánchez

Estudiante del Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software en la Escuela Politécnica de Cáceres. Durante el periodo de beca colaboró en el desarrollo del proyecto CultivData, instruyéndose en el marco del Big Data, los datos abiertos (Open Data), el desarrollo web, los contenedores software y la virtualización.

Contribuyó en la labor de recolección de datos de cada una de las fuentes de datos abiertas de interés del proyecto CultivData, estudiando cada una de las fuentes de datos y la forma de extraer, procesar y almacenar los datos. Para esta tarea, continuó el desarrollo de la plataforma web ya existente para el proyecto, implementando: una herramienta de extracción que permite la gestión y captación de datos de todas las fuentes de una forma gráfica y además el almacenamiento de los datos de interés en la base de datos del proyecto; un sistema que permite consultar los datos extraídos de forma

gráfica y tabular. Para implementarlos se han usado distintas tecnologías, entre las principales: Django, como framework web implementado con Python; MongoDB para el almacenamiento de los datos; Flask como API de consultas a la base de datos; una cola de Redis para ejecutar los procesos de extracción de datos de larga duración. Además la plataforma se encuentra internacionalizada (tanto su contenido estático como dinámico) y se han utilizado contenedores software (Docker) que mejoran sustancialmente el proceso de despliegue del proyecto en cualquier máquina.

Respecto a su participación en la Unidad Funcional de Proyectos y Comunicación de CénitS, colaboró en la inauguración del supercomputador LUSITANIA III y en la recepción de varias visitas al centro.

En el ámbito académico desarrolló su Trabajo Fin de Grado para la finalización de sus estudios en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software, titulado “*CultivData – Integración, análisis y gestión de la recolección y tratamiento de datos de cultivo para la mejora de la eficiencia agraria extremeño CénitS-COMPUTAEX*”. Antes de la realización de la beca se marcaron una serie de objetivos entre los que destacan: desarrollo de dos sistemas de extracción y consulta de datos públicos integrados en la plataforma web del proyecto CultivData; mejora gráfica de la plataforma del proyecto (diseño responsive); e implementar un sólo sistema gestor de bases de datos para todo el proyecto favoreciendo la integración de los distintos módulos. Entre los objetivos alcanzados tras la finalización de la beca se encuentran:

- Participación en un proyecto de gran envergadura y colaboración con el resto del equipo del centro para el desarrollo del mismo.
- Aplicación de conocimientos de programación: Python, JavaScript, etc. y aprendizaje del uso de algunas librerías.
- Aplicación de conocimientos de bases de datos: Redis y MongoDB.
- Relacionado con el objetivo anterior, uso de técnicas BigData (extracción de datos y bases de datos NoSQL).
- Aplicación de conocimientos de desarrollo web (Django), para el backend y también de lenguajes para el frontend (HTML, CSS, JavaScript).
- Uso de mecanismos de seguridad para proteger la información del proyecto (usuarios y sensores).
- Uso de contenedores software (Docker) con el objetivo de mejorar futuros despliegues y migraciones del proyecto.
- Uso del cloud alojado en el CPD del centro para ejecutar y desplegar el proyecto.

Prácticas curriculares de la Universidad de Extremadura

Durante el año 2020, los siguientes estudiantes de la Universidad de Extremadura desarrollaron sus prácticas curriculares en CénitS:

- **Fátima Dávila Benítez.** Estudiante del Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software en la Escuela Politécnica de Cáceres.
- **Enrique Moreno Sánchez.** Estudiante del Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software en la Escuela Politécnica de Cáceres.
- **Jesús Tovar Trujillo.** Estudiante del Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software en la Escuela Politécnica de Cáceres.

Inauguración del Supercomputador LUSITANIA III

INAUGURACIÓN DEL SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA III

21 FEBRERO CÁCERES

09:30 h. Acreditación y recepción de asistentes.

10:00 h. Presidencia del acto.

- D. Rafael España Santamilla. Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital. Presidente de la Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnología Avanzadas de Extremadura).
- D. José Ignacio Doncel Morales. Subdirector General de Grandes Instalaciones Científico-Técnicas. Ministerio de Ciencia e Innovación.
- Dña. María José Pulido Pérez. 1ª Teniente Alcalde y Concejala de Empleo y Educación del Ayuntamiento de Cáceres.
- D. Juan Castillo Amo. Director de Sistemas de IBM para España, Portugal, Grecia e Israel.
- D. Roberto Sebastián López. CEO de IaaS365.
- D. José Luis González Sánchez. Director General de la Fundación COMPUTAEX.

10:30 h. Puesta en marcha del Supercomputador LUSITANIA III.

11:00 h. *Del Big Data a la Computación Cuántica pasando por la Inteligencia Artificial.*

- Dña. Elisa Martín García. Directora de Tecnología e Innovación de IBM.

11:30 h. *¿La tiranía de los datos? Los claroscuros del uso de decisiones algorítmicas. (Videoconferencia)*

- Dña. Nuria Oliver Ramírez. Doctora en Inteligencia Artificial por MIT, Académica de la Real Academia de Ingeniería y Miembro del Board de ELLIS.

12:00 h. *Soluciones PaaS como complemento al HPC.*

- D. David Palau Ruano. Director de Cloud y Data Center de IaaS365.

12:30 h. *La ciencia tras los datos: extracción de conocimiento de la información de la red móvil.*

- D. David Cortés Polo. Responsable de la Unidad Funcional de redes y comunicaciones de CénitS.

13:00 h. Clausura.

Carretera Nacional 521, km 41,8 - 10.071 - Cáceres - Extremadura

Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación

Organización: CénitS, COMPUTAEX, Junta de Extremadura

Colaboración: Junta de Extremadura, IBM, IaaS365, CénitS

Información: Computación y Tecnología Avanzadas de Extremadura

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

JUNTA DE EXTREMADURA

El viernes 21 de febrero fue inaugurado LUSITANIA III, el nuevo supercomputador de Extremadura, en un evento que tuvo lugar en la sede social de la Fundación COMPUTAEX en Cáceres.

El evento estuvo presidido por: D. Rafael España, Consejero de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura y Presidente de la Fundación; D. José Ignacio Doncel, Subdirector General de Grandes Instalaciones Científico-Técnicas del Ministerio de Ciencia e Innovación; Dña. María José Pulido Pérez, 1ª Teniente Alcalde y Concejala de Empleo y Educación del Ayuntamiento de Cáceres; D. Juan Castillo, Director de Sistemas de IBM para España, Portugal, Grecia e Israel; D. Roberto Sebastián, CEO de IaaS365 y D. José Luis González, Director General de CénitS-COMPUTAEX.

La puesta en marcha del supercomputador se realizó tras la acreditación y recepción de los asistentes y la celebración del acto de apertura.

Dña. Elisa Martín, Directora de Tecnología e Innovación de IBM, ofreció la conferencia “*Del Big Data a la Computación Cuántica pasando por la Inteligencia Artificial*”. Posteriormente tuvo lugar la ponencia de Dña. Nuria Oliver, “*¿La tiranía de los datos? Los claroscuros del uso de decisiones algorítmicas*” (ofrecida a través de videoconferencia). Seguidamente, D. David Palau, Director de Cloud y Data Center de IaaS365, presentó la conferencia “*Soluciones PaaS como complemento al HPC*”. Finalmente, D. David Cortés, Responsable de la Unidad Funcional de redes y comunicaciones de CénitS, ofreció la ponencia “*La ciencia tras los datos: extracción de conocimiento de la información de la red móvil*”.





La inauguración de LUSITANIA III supone una destacable ampliación de los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, que en los últimos años ha visto aumentada considerablemente la potencia de cálculo ofrecida por los Supercomputadores LUSITANIA y LUSITANIA II en el Centro de Procesamiento de Datos de CénitS.

En concreto, LUSITANIA III incrementa de forma destacable los recursos de cómputo ofrecidos por la Fundación COMPUTAEX, alcanzando una capacidad de cálculo total de supercomputación de 93 TFlops más 120 TFlops de computación gráfica, sobre una red Infiniband de hasta 100 Gbps, y proporcionando un total de 3.696 cores y 40.960 cuda cores, que estarán a disposición de investigadores, innovadores, tecnólogos y todo tipo de usuarios que necesiten sus recursos.

LUSITANIA III cuenta con una arquitectura IBM Power Systems ACP que destaca por sus altas capacidades de almacenamiento (IBM Elastic Storage) y de cálculo, así como por el software necesario para facilitar su uso y sacar el máximo provecho a los recursos disponibles. Incluye además la plataforma de Inteligencia Artificial Watson Machine Learning Community Edition de IBM, que permite a los científicos simular el comportamiento de procesos físicos y químicos tal como lo harían en la vida real.

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, este nuevo Supercomputador se encuentra ya a disposición de investigadores, innovadores, tecnólogos y todo tipo de usuarios que necesiten sus recursos.



Jornada TaxoTIC: Observatorio de un sector esencial en situación de pandemia

JORNADA DE PRESENTACIÓN DEL PROYECTO
TaxoTIC
Observatorio de un sector esencial
en situación de pandemia
<https://olistic.cenits.es>

Martes 1 de diciembre de 2020, de 10:00 a 12:00 horas
Jornada virtual a través de videoconferencia

Acceso libre. Información en www.cenits.es

Organización: CénitS, COMPUTAEX
Colaboración: Junta Europea de Investigación Regional, AEXIT, AEXTIC, CPTIEV, MB3
Información: www.cenits.es

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

El martes 1 de diciembre, COMPUTAEX ofreció de forma virtual a través de Zoom y Youtube la jornada “*TaxoTIC: Observatorio de un sector esencial en situación de pandemia*”, en la que expuso el informe anual del proyecto, desarrollado en CénitS y centrado en el análisis de la evolución del sector de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones (TIC) en Extremadura, que además abarca la formación TIC profesional y universitaria.

El acto de apertura contó con la participación de Pablo García Rodríguez, Director General de Agenda Digital de la Junta de Extremadura y José Luis González Sánchez, Director General de COMPUTAEX. A continuación, Felipe Lemus Prieto, Responsable de la Unidad Funcional de Redes y Comunicaciones de CénitS, ofreció la ponencia “*TaxoTIC-2019: Siete años de observación del Sector TIC en Extremadura*”.

TIC como un sector verdaderamente esencial, que contó con la participación de Markus Hernández Droth, Presidente del CPIIEx, Mario Fernández Manzano, Presidente de AEXIT, Juan Miguel Trejo Fernández, Presidente de AEXTIC, y Francisco Morcillo Balboa, CEO de MB3 Gestión, siendo moderada por José Luis González, Director General de COMPUTAEX. Tras la finalización del correspondiente debate, Luis Ignacio Jiménez Gil, Administrador de sistemas y supercomputación de CénitS, presentó la actualización de la plataforma OLISTIC, realizada por los ingenieros del Centro y que, bajo la filosofía Open Data, permite localizar las empresas extremeñas relacionadas con el sector TIC e identificar los servicios que ofrecen.



JORNADA DE PRESENTACIÓN DEL PROYECTO TaxoTIC

Mesa redonda

¿Es el sector TIC verdaderamente esencial?



Markus Hernández Droth
Presidente del CPIIEx



Francisco Morcillo Balboa
Consultor, Project Manager y Blogger.
CEO de MB3 Gestión.



Carlos Rodríguez Ponce
Vicepresidente de AEXTIC



MODERADOR:
José Luis González Sánchez
Director General de
CénitS-COMPUTAEX



Mario Fernández Manzano
Presidente de AEXIT

Jornada CultivData: El cultivo de datos agrarios a disposición de un sector esencial

COMPUTAEX ofreció el 11 de diciembre la jornada “*El cultivo de datos agrarios a disposición de un sector esencial*” en la que se mostraron los resultados obtenidos en el proyecto CultivData, desarrollado en CénitS y centrado en el cultivo de datos para la eficiencia y la eficacia en la agricultura.

En el acto de apertura participaron Pablo García Rodríguez, Director General de Agenda Digital de la Junta de Extremadura y José Luis González Sánchez, Director General de COMPUTAEX. A continuación, Felipe Lemus Prieto, ofreció la ponencia “*Siembra, cultivo y recolección de datos para mejorar la eficiencia agraria*”, en la que dio a conocer en qué consiste el proyecto, explicando el trabajo realizado, así como los resultados obtenidos y el trabajo futuro. Posteriormente tuvo lugar la conferencia “*Plataforma Cultiv-Data: captación y visualización de datos agrarios*”, a cargo de Juan F. Bermejo Martín, que detalló los sensores empleados en el proyecto, los despliegues ejecutados y el funcionamiento de la plataforma desarrollada.



El acto contó también con un panel de expertos de ámbito profesional y académico que respondieron a la cuestión *¿Qué necesidades tecnológicas tiene nuestro sector agroalimentario para su transformación digital y ecológica?* y expusieron su visión sobre el propio sector, la agricultura de precisión, y las últimas novedades en investigación, desarrollo e innovación. En este panel participaron: Pedro Clemente Martín, Director de la Cátedra Telefónica de la Universidad de Extremadura “*Internet de las Cosas para el sector agroganadero*”; Francisco Llanos Mera, Ingeniero Técnico Agrícola y propietario de explotación de almendros en riego deficitario; Fernando Llera Cid, Jefe de Sección de Investigación Principal en Cultivos Extensivos y Coordinador de Área de CICYTEX; Carlos Ortiz Moreno, Gestor del Departamento de suministros y agrícola de CASAT; y Francisco Plaza Casado, Presidente de la Cooperativa Agrícola San Isidro; siendo moderado por José Luis González Sánchez, Director General de COMPUTAEX. El acceso fue libre, sin necesidad de inscripción previa, a través de Zoom y Youtube.

EL CULTIVO DE DATOS AGRARIOS A DISPOSICIÓN DE UN SECTOR ESENCIAL

Panel de expertos: ¿Qué necesidades tecnológicas tiene nuestro sector agroalimentario para su transformación digital y ecológica?



Pedro Clemente Martín
Director de la Cátedra Telefónica de la UEX “*Internet de las Cosas para el sector agroganadero*”



Francisco Llanos Mera
Ingeniero Técnico Agrícola y propietario de explotación de almendros en riego deficitario.



Fernando Llera Cid
Jefe de Sección de Investigación Principal en Cultivos Extensivos y Coordinador de Área de CICYTEX



Carlos Ortiz Moreno
Gestor del Departamento de suministros y agrícola de CASAT



Francisco Plaza Casado
Presidente de la Cooperativa Agrícola San Isidro

MODERADOR:
José Luis González Sánchez
Director General de CénitS-COMPUTAEX



Jornada internacional de puertas abiertas de CénitS

Jornada internacional de puertas abiertas de CénitS

**COMPUTACIÓN PARA LA COMPETITIVIDAD,
LA TRANSFORMACIÓN DIGITAL Y LA TRANSICIÓN ECOLÓGICA**

www.cenits.es

Jornada virtual a través de videoconferencia
Lunes 21 de diciembre de 2020

España:	17:00 a 20:30 h.
Argentina:	13:00 a 16:30 h.
Chile:	13:00 a 16:30 h.
Colombia:	14:00 a 14:30 h.
México Centro:	10:00 a 13:30 h.

Jornada dirigida a empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores. Acceso libre. Información en www.cenits.es

Organización: CénitS COMPUTAEX, Junta de Extremadura, Consejo de Economía, Ciencia y Agenda Digital, Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad

Colaboración: I+D+i, MINECO, CADS, etc.

JUNTA DE EXTREMADURA

El lunes 21 de diciembre CénitS ofreció de forma virtual una jornada internacional de puertas abiertas que, con el título “*Computación para la competitividad, la transformación digital y la transición ecológica*”, estuvo dirigida a empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores, interesados en la actualidad y el trabajo diario del centro de supercomputación, las tecnologías de vanguardia y sus proyectos de I+D+i. El acceso fue libre sin necesidad de inscripción previa, a través de Zoom, retransmitiéndose también en directo a través de Youtube.

El evento comenzó a las 17:00 horas (GMT+1) con el acto de apertura, a cargo de D. José Luis González Sánchez, Director General de la Fundación COMPUTAEX.

Una vez inaugurada la jornada, los ingenieros e investigadores de CénitS ofrecieron diversas ponencias sobre los proyectos más significativos desarrollados actualmente en el centro, basados en líneas de investigación realmente heterogéneas.

De este modo, se trataron diversos aspectos relacionados con áreas como: la computación de alto rendimiento; la agricultura de precisión; la ultrasecuenciación genética y el estudio de enfermedades genéticas y hereditarias; la actualidad del sector TIC en Extremadura; la transformación digital de las empresas; la energía inteligente; y la propia infraestructura de supercomputación del centro de procesamiento de datos de CénitS-COMPUTAEX.

Asimismo, el acto contó además con las intervenciones de un panel de expertos internacionales de ámbito profesional, académico e investigador que debatió ampliamente y por espacio de 90 minutos sobre las posibilidades que ofrece la computación de alto rendimiento (HPC, High-Performance Computing) para potenciar la competitividad, la transformación digital y la transición ecológica desde la eficiencia y la eficacia que pueden ofrecer este tipo de infraestructuras.

Jornada Internacional de puertas abiertas.
Panel de expertos: *Computación para la competitividad, la transformación digital y la transición ecológica*

MODERADOR:
José Luis González Sánchez
Director General de CénitS-COMPUTAEX

Marcela A. Cruchaga
Profesora Titular de la Universidad de Santiago de Chile

Jorge Arboleda Valencia
Director Científico del Centro de Bioinformática y Biología Computacional (BIOS) de Colombia

Daniel Hernández Beneyto
CEO y fundador de Metaphase07 Software Engineering, España

Lizette Robles Dueñas
Responsable del Centro de Análisis de Datos y Supercomputo (CADS) de la UDG, México

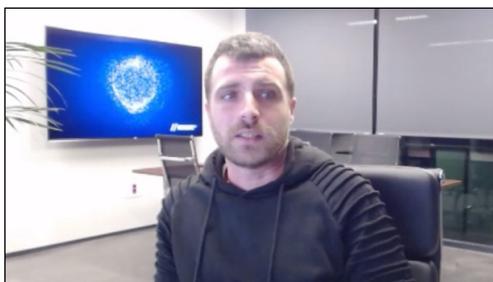
Mario Storti
Centro de Investigaciones de Métodos Computacionales (CIMEC) de Santa Fe, Argentina

En concreto, intervinieron: Marcela Andrea Cruchaga, Profesora Titular de la Universidad de Santiago de Chile (USACH); Jorge William Arboleda Valencia, Director Científico del Centro de Bioinformática y Biología Computacional (BIOS) de Colombia; Daniel Hernández Beneyto, CEO y fundador de Metaphase07 Software Engineering; Veronica Lizette Robles Dueñas, responsable del Centro de Análisis de Datos y Supercómputo (CADS) de la Universidad de Guadalajara, México; y Mario Storti, del Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC) de Santa Fe, Argentina.



El panel fue moderado por José Luis González Sánchez, Director General de COMPUTAEX.

A las 20:30 horas tuvo lugar el acto de clausura, a cargo de D. Jesús Alonso Sánchez, Secretario General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad de la Junta de Extremadura.



Portal web

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

Funciones

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



Contenidos

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

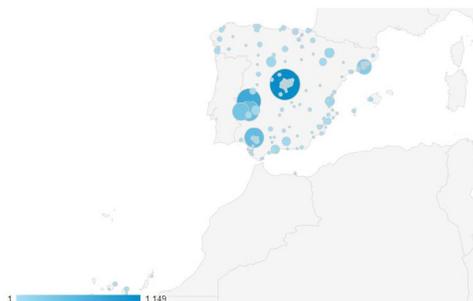
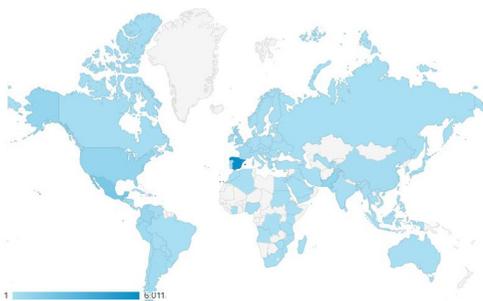
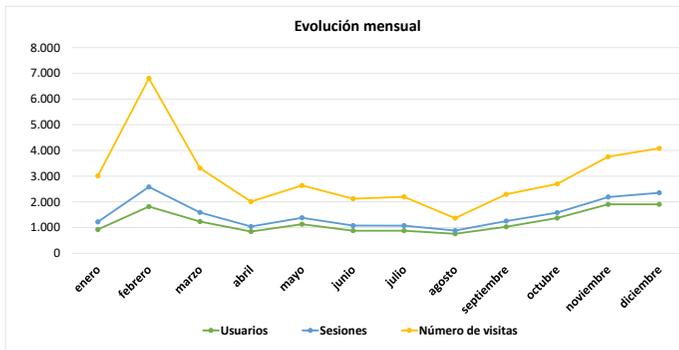
- La Fundación: información relativa a COMPUTAEX, el patronato de la Fundación, el perfil del contratante, las memorias anuales editadas por la Fundación desde su creación, los premios y reconocimiento recibidos, así como los casos de éxito publicados y la identidad corporativa. Cabe destacar especialmente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

Datos estadísticos

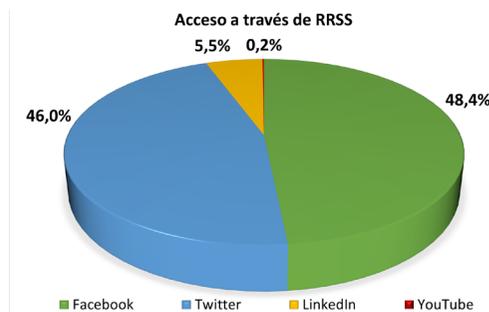
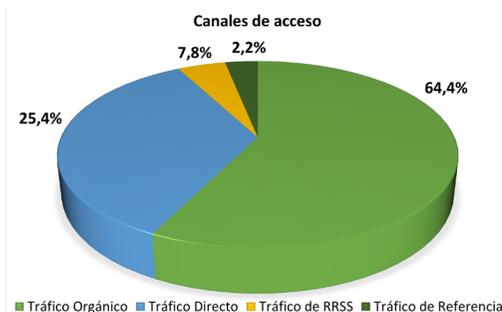
A continuación se muestran los datos estadísticos más relevantes del ecosistema web, relativos al año 2020, según Google Analytics.

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

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



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



Redes sociales

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



facebook.com/computaex

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



twitter.com/cenits

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



linkedin.com/company/cenits/

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



[CénitS COMPUTAEX](#)

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

Difusión y divulgación



Durante el año 2020, exclusivamente entre los meses de enero y marzo (con motivo de la pandemia de COVID-19), CénitS recibió la visita de más de 232 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, y especialmente universitarios y estudiantes de educación primaria y secundaria. Desde su creación en el año 2009, muchas de estas visitas se han ido traduciendo en colaboraciones en proyectos de investigación, en prestación de servicios o en la difusión de conocimiento a los agentes regionales, nacionales e internacionales.

Adicionalmente, las distintas jornadas organizadas tuvieron un total de 153 asistentes mediante la herramienta Zoom y 490 a través de Youtube (118 en directo y 372 en diferido).

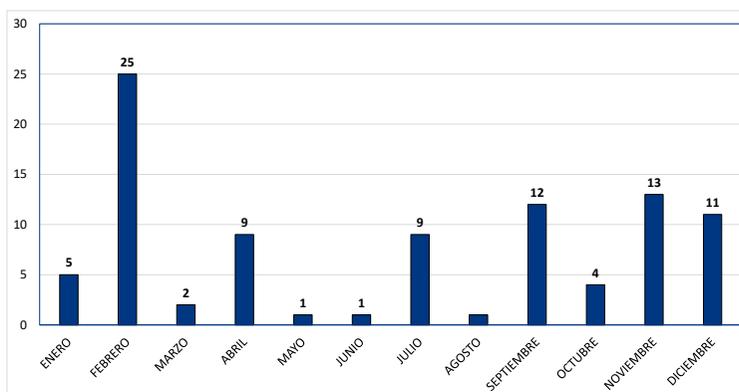
CénitS-COMPUTAEX en los medios

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

Televisión	Radio	Prensa escrita	Prensa digital
4	6	3	93

Fecha	Titular	Fuente
TELEVISIÓN		
21/02/2020	Inauguración del supercomputador LUSITANIA III	RTVE Noticias Extremadura
21/02/2020	Inauguración del nuevo supercomputador de Extremadura	Canal Extremadura Televisión
15/10/2020	Entrevista Think IBM 2020	IBM España
15/10/2020	Sesión Think Digital Summit	IBM España
RADIO		
21/02/2020	Un supercomputador extremeño para afrontar nuevos retos	Las mañanas de RNE
21/02/2020	Inauguración del supercomputador LUSITANIA III	RNE Noticias Extremadura
21/02/2020	Inauguración del nuevo supercomputador de Extremadura	Hora Punta - C.Extremad.Radio
21/02/2020	Inauguración del supercomputador LUSITANIA III	Mente inquieta - Cadena SER
14/04/2020	Proyecto sobre COVID-19	Por tres razones - RNE
16/04/2020	Proyecto sobre COVID-19	Crónica Extremadura - RNE
PRENSA ESCRITA		
18/02/2020	Un nuevo supercomputador se pone en marcha este viernes en el campus de Cáceres	Diario Hoy
22/02/2020	El nuevo supercomputador LUSITANIA simulará el comportamiento de procesos físicos y químicos	Diario Hoy
11/09/2020	COMPUTAEX participará en la red europea de centros de alta computación	Diario Hoy

PRENSA DIGITAL



Asistencia a congresos, jornadas, cursos y eventos

Fecha	Nombre	Lugar	Participación
14/01/2020	Grupo de trabajo RIS3	Badajoz	Asistente
31/01/2020	IX Olimpiada Informática de Extremadura	Escuela Politécnica, Cáceres	Patrocinador
13/02/2020	Reunión red temática Go2Edge	Valladolid	Asistente
12-13/02/2020	Feria Transfiere (9º Foro Europeo para la Ciencia, Tecnología e Innovación)	Málaga	Asistente
21/02/2020	Inauguración del Supercomputador LUSITANIA III	CénitS	Organizador y Ponente
27/02/2020	Jornada Fundae "La formación como factor esencial para la empleabilidad"	F.Estatal para la Formación en el Empleo, Madrid	Ponente
05/03/2020	Jornada sobre el nuevo programa marco de investigación de la Unión Europea	Institutos Universitarios de Investigación de Cáceres	Asistente
06/03/2020	Visita de delegación del Servicio Público de Empleo Estatal, Fundae y CFTIC	CénitS	Organizador y Ponente
10/03/2020	Visita del consorcio latinoamericano Mimir Andino	CénitS	Organizador y Ponente
08/04/2020	Ciclo de Arte Salud y Naturaleza (ASN)	El Torno, Cáceres	(cancelado por confinamiento)
15/04/2020	Formación TIC en Extremadura	D.Gral Formación para el empleo, Junta Extremadura	Asistente
21/04/2020	Personal CTO.ready. Mesa redonda Cloud publica:retos y oportunidades	IBM Madrid (virtual)	Ponente
30/04/2020	Jornada resultados HeritaGen	CénitS	(cancelado por confinamiento)
05-06/05/2020	Think Digital Event Experience	IBM (virtual)	Asistente
25/05/2020	Formación en Big Data	Hazerta (Formación online)	Asistente
03/06/2020	JNIC 2020	Ciudad Real	(cancelado por confinamiento)
15/06/2020	Reunión del Patronato de la Fundación COMPUTAEX	CénitS (virtual)	Asistente
18/06/2020	La potencia del dato en la era digital. R software en el mundo Big data	AEC, Asociación Española para la Calidad (virtual)	Asistente
30/06/2020	Uso de imágenes satelitales, zonificación de suelos, sensores IoT y redes para agricultura de precisión	FEVAL, Don Benito (virtual)	Asistente

29/07/2020	Derechos y obligaciones de la Ley de la Cadena Alimentaria	Alimentos de España (Formación online)	Asistente
04/08/2020	Curso básico de Arduino	Udemy (Formación online)	Asistente
16-17/09/2020	14th Users Conference	RES (virtual). Cancelado en Cáceres por COVID-19	Organizador
23/09/2020	Mesa de Trabajo: TIC + Agricultura	Grupo operativo APGFERT (virtual)	Asistente
29/09/2020	Workshop Nutanix Live	(virtual)	Asistente
30/09 al 02/10 de 2020"	IWBBIO 2020 (International Work-Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering)	Universidad de Granada (virtual)	Ponente
15/10/2020	Think Digital Summit Spain 2020	IBM Madrid (Jornada virtual)	Organizador y Ponente
22/10/2020	Curso GlobalGAP	KIWA (Formación online)	Asistente
26/10 al 9/11 de 2020	Semana de la Ciencia 2020	CénitS (virtual)	Organizador y Ponente
29/10/2020	Agricultura inteligente: innovación y nuevas tecnologías aplicadas a la agricultura	CDTIC. Don Benito, Badajoz (virtual)	Asistente
30/10/2020	Presentación del Centro de Servicios Compartidos de Transformación Digital de Colombia- CSCTD	Bogotá, Colombia (virtual)	Asistente
13/11/2020	Reunión del Patronato de la Fundación COMPUTAEX	CénitS (virtual)	Asistente
19/11/2020	Inauguración Centro Secuenciación Masiva Nasertic	Nasertic Pamplona, Navarra (virtual)	Asistente
27/11/2020	Noche Europea de los Investigadores 2020	CénitS (virtual)	Organizador y Ponente
01/12/2020	Jornada TaxoTIC: "Observatorio de un sector esencial en situación de pandemia"	CénitS (virtual)	Organizador y Ponente
03/12/2020	VI Foro Small Smart Cities	Centro Demostrador TIC Extremadura (virtual)	Ponente
11/12/2020	Jornada de presentación de resultados del proyecto CultivData	CénitS (virtual)	Organizador y Ponente
19/12/2020	II Congreso mundial de la ciudadanía extremeña en el exterior	Junta de Extremadura (virtual)	Asistente
21/12/2020	Jornada internacional de puertas abiertas de CénitS-COMPUTAEX	CénitS (virtual)	Organizador y Ponente
28/12/2020	Reunión del Patronato de la Fundación COMPUTAEX	CénitS (virtual)	Ponente



RECURSOS TECNOLÓGICOS

CénitS tiene como objetivo principal la explotación de los Supercomputadores LUSITANIA, pero también el fomento, la difusión y la prestación de servicios de cálculo intensivo, 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.

CénitS-CPD y Supercomputador LUSITANIA III



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

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

A continuación se detallan sus características técnicas:

Nodo de cómputo

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

Nodo de cómputo de memoria compartida

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

Clúster de memoria distribuida

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

Clúster hiperconvergente de cloud computing

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

Nodos de servicio

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

Nodos de desarrollo

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

Almacenamiento

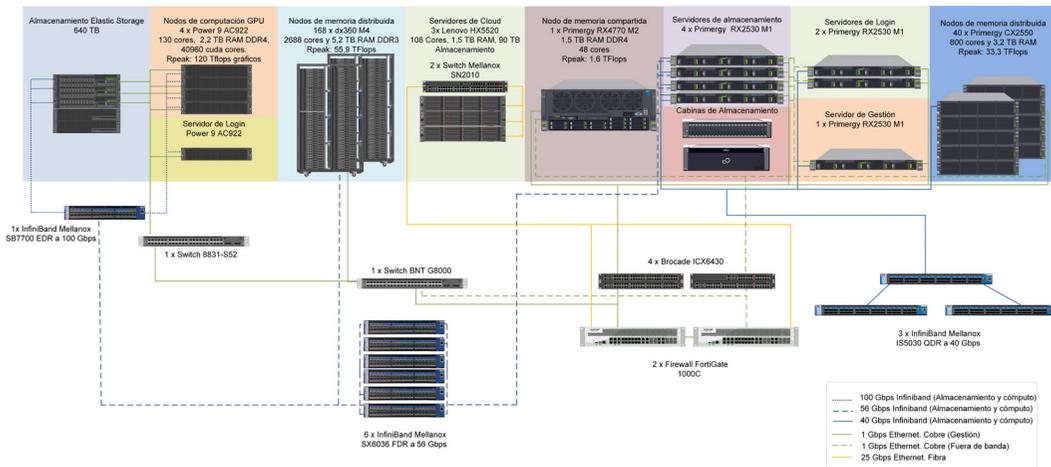
- Elastic Storage Server GL1S con una capacidad de almacenamiento de 656TB RAW:
 - 1 enclosure con 84 slots: 82 x 8TB Enterprise HDD y 2x 800GB SSD.
 - 2 Data Servers: 2 x 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 256GB RAM.
 - 1 ESS Management Server: 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 64GB RAM.
 -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

Topología de red

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

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

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



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

Fondo Europeo de
Desarrollo Regional

"Una manera de hacer Europa"

JUNTA DE EXTREMADURA

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

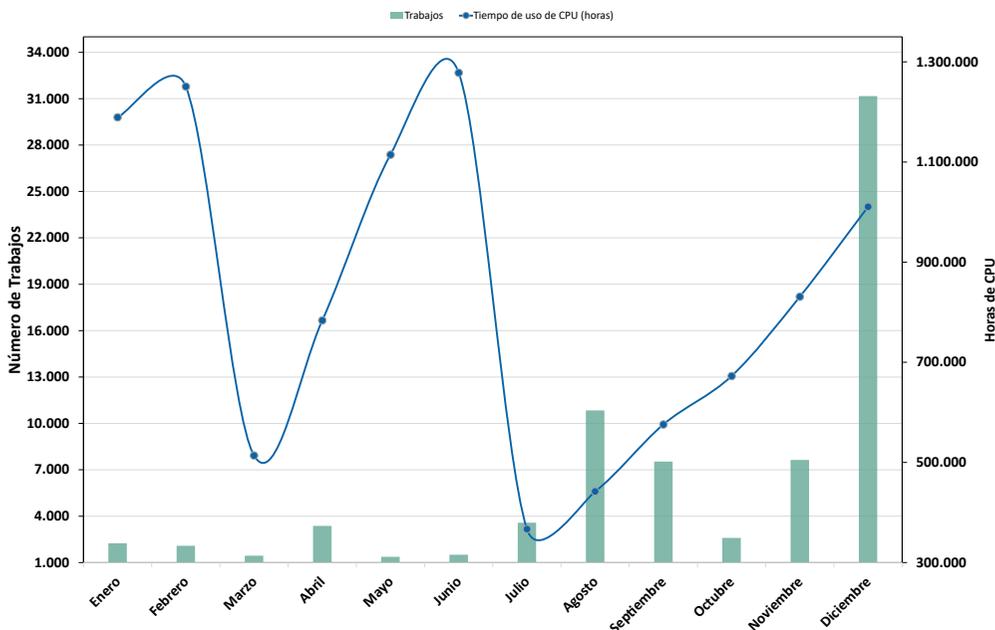


Unión Europea

Consumo de recursos

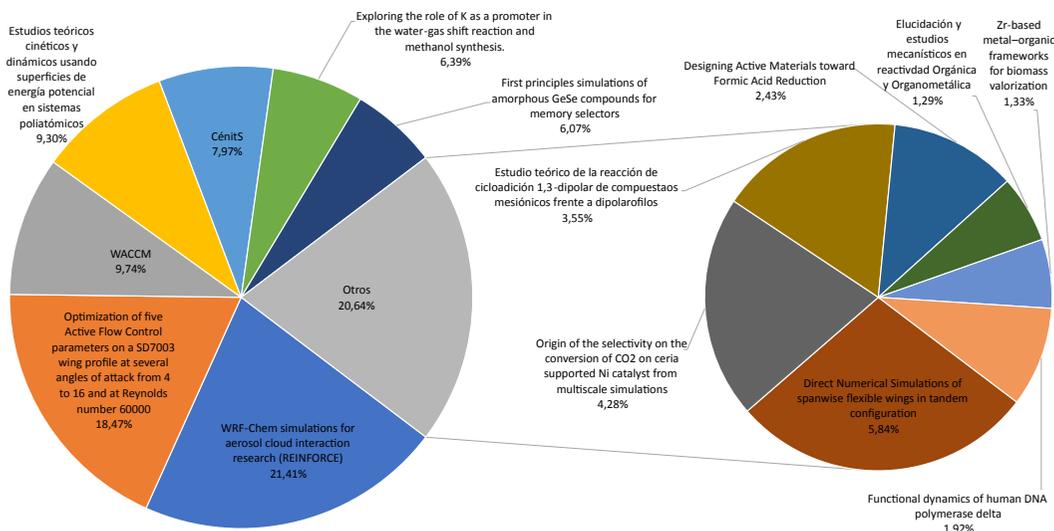
Uso de recursos

Durante el año 2020, 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 2020, obteniendo un total de 10.028.866 horas de cómputo.



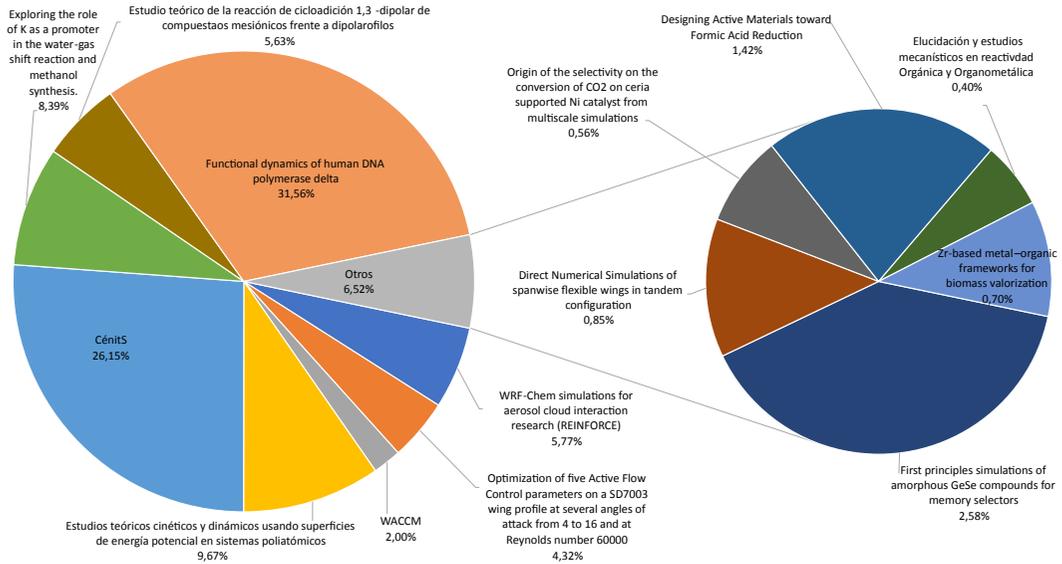
Uso de CPU

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



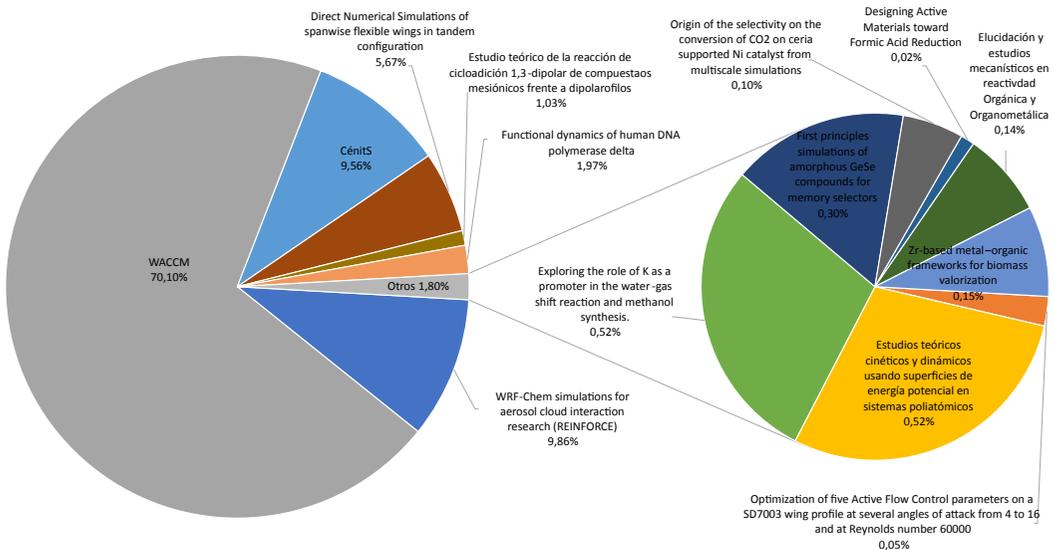
Uso de memoria principal

De la misma manera, se representa el consumo anual de memoria RAM referente a los proyectos de investigación ejecutados, que ha estado parcialmente repartida entre todos los proyectos siendo el proyecto *Functional Dynamics of Human DNA Polymerase Delta* el principal consumidor con un casi 32% del total.



Uso de almacenamiento

La gráfica que se presenta a continuación muestra el volumen en disco de los proyectos de investigación que más recursos han utilizado, siendo representativo que la mayor parte de consumo de almacenamiento en discos ha sido realizada por dos proyectos principalmente, alcanzando un 80% aproximadamente del consumo total.



Usuarios

Durante el año 2020, un importante número de técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en los supercomputadores LUSITANIA II y LUSITANIA III, alojados en CénitS-CPD.

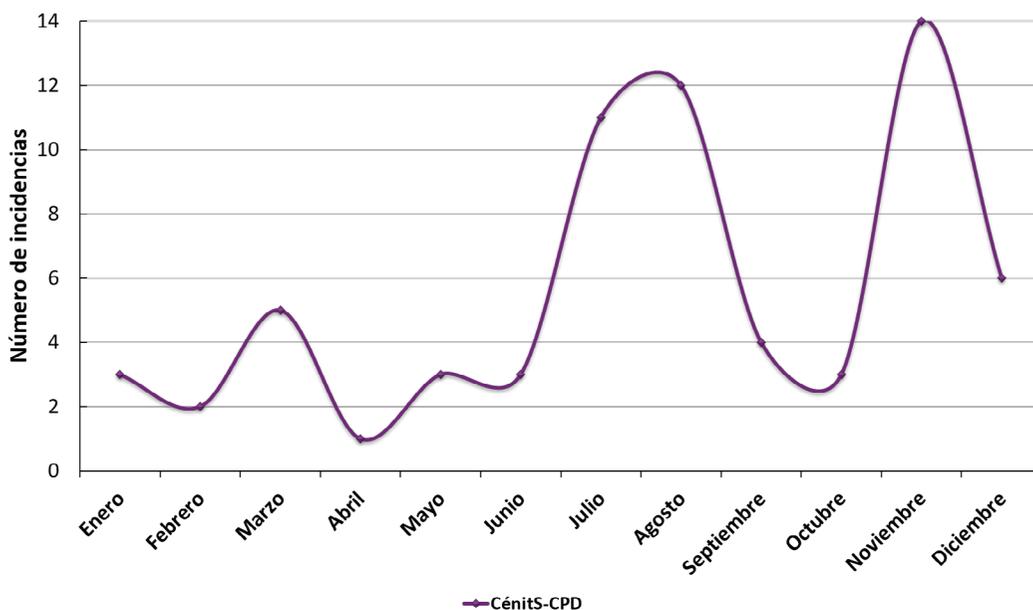
Consultas de asesoramiento técnico

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

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

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

El número de incidencias de usuario se han mantenido estable con respecto al año anterior, debido a las continuas tareas de mantenimiento llevadas a cabo por el equipo de CénitS. Se han resuelto un total de 67 incidencias distribuidas entre los distintos meses de 2020, tal y como se muestra a continuación.



COMPUTACIÓN TÉCNICA

Biopython

Bowtie

BWA

COMSOL

CPMD

Cufflinks

Fastp

FastQC

GATK

Gaussian 16

GaussView 6

Hisat2

IDL

Jellyfish

Matlab

MIRA

netCDF

NWChem

Octave

Picard

Python

R

Ray

Salmon

SAMtools

Schrödinger

Singularity

SnpEff

Trinity

VASP

WIEN2k

COMPILADORES

GNU GCC

Intel C/C++ Compiler

Intel Fortran Compiler

Java JDK

PGI Compilers & Tools

SISTEMAS OPERATIVOS

CentOS

Debian

Red Hat Enterprise

Suse Linux Enterprise Server

Ubuntu

Windows Server



PROYECTOS CONCLUIDOS

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

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



Ciencias de la Tierra

1. ABAQUS

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

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

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

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

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

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

CénitS-COMPUTAEX.

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

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

6. ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (Phase II)

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

7. Cálculos ab-initio

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

8. Distribución de niveles electromagnéticos en determinados entornos geográficos

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

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

Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.

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

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

11. Estudios computacionales en reacciones multicomponentes

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

12. Evaluación de los recursos eólicos y solares en Andalucía mediante un modelo meteorológico de mesoscala (RENEVA)

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

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

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

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

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

15. Magnetic connectivity through the Solar Partially Ionized Atmosphere

Ángel de Vicente. Dpto. de Física Solar del Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC).

16. Procesamiento paralelo de imágenes hiperespectrales de la superficie terrestre

Antonio Plaza Miguel. Dpto. de las Tecnología de Computadores y de Comunicaciones de la de la Universidad de Extremadura.

17. Reactions of complex organic molecules at the low temperatures of interstellar media

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

18. Relationship between thermoelectric features and dimensionality in monochalcogenide compounds

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

19. SIATDECO: Sistema de Información para la Ayuda a la Toma de Decisiones en Energías Ecológicas

Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal (ICMC), CETIEX, Fundecyt y CénitS-COMPUTAEX.

20. The impact of the 11 year cycle in WACCM simulations

Gabriel Chiodo del Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica 2 de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid. Natalia Calvo de la Universidad Complutense de Madrid, José Agustín García de la Universidad de Extremadura, Katja Matthes de Helmholtz-Zentrum Ozeanforschung Kiel GEOMAR (Kiel, Alemania) y Daniel R. Marsh del National Center for Atmospheric Research, Boulder (CO, EEUU).

21. Supercomputing and e-science.

Gabriel Chiodo. Dpto. de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica, Universidad Complutense de Madrid.



Ciencias de la Vida

- 1. Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces.**
Sergio Diaz Tendero. Universidad Autónoma de Madrid.
- 2. Ab-initio simulation of the electronic and magnetic properties in iridate-based oxide heterostructures.**
Juan Ignacio Beltrán (I.P.). Universidad Complutense de Madrid. [Proyecto soportado en CéniS procedente de la Red Española de Supercomputación]
- 3. Activación molecular mediante complejos organometálicos con enlaces múltiples heterometálicos**
Miguel Angel Ruiz Alvarez (IP), Daniel García-Vivó, M^a Esther García Díaz, M^a Angeles Alvarez Fidalgo. Área de Química Inorgánica, Universidad de Oviedo.
- 4. Análisis clínico, inmunológico y genético del déficit selectivo de IGA. Estudio longitudinal de los pacientes acumulados en un centro de referencia durante los últimos 18 años**
FundSalud, Hospital San Pedro de Alcántara, Universidad de Extremadura y CéniS-COMPUTAEX.
- 5. Atomistic Simulations to Investigate Phosphocholine Micelle Self-assembly and Degradation**
Christian Lorenz (I.P.). King's College London. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación].
- 6. Cálculo de la corriente de bootstrap en el Stellarator TJ-II**
José Luis Velasco Garasa. Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 7. Consolider TECNO_FUS**
José M^a Gómez Ros. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 8. Construcción de superficies de energía potencial**
Eloísa González Lavado, Dpto. de Ingeniería Química y Química Física (GCYDEX), de la UEx.
- 9. Desarrollo de nuevas reacciones multicomponentes de isonitrilos**
Carlos Fernández Marcos. Dpto. de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad de Extremadura.
- 10. DFT simulations on the study of the dielectric function of novel nanostructured materials**
Francesca Peiró. Universitat de Barcelona. [Proyecto soportado en CéniS procedente de la Red Española de Supercomputación]

- 11. Dinámica fuera del equilibrio del modelo de Heisenberg tridimensional en presencia de un campo magnético**
Juan Jesús Ruiz Lorenzo, Dpto. de Física de la Universidad de Extremadura. Antonio Gordillo Guerrero, Dpto. de Ingeniería Eléctrica, Electrónica y Automática de la Universidad de Extremadura.
- 12. Discovery of new peptides to rescue the mutated p53 tetramer**
Ernest Giralt Lledó. Institute for Research in Biomedicine (IRB).
- 13. Discovery of p53 tetramer stabilization peptides**
Ernest Giralt Lledó. Institute for Research in Biomedicine (IRB). [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación].
- 14. Effect of oxygen vacancies in bismut oxide Energy-Loss Near-Edge Structure spectra by ab initio simulations**
Francesca Peiró (I.P.), Javier Blanco Portals, Sonia Estrade Albiol and Catalina Coll Benejam. Universitat de Barcelona.
- 15. Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico**
Francisco Javier Olivares del Valle (coordinador), Manuel Ángel Aguilar Espinosa, José Carlos Corchado Martín-Romo, María Luz Sánchez Mendoza, María Elena Martín Navarro, Ignacio Fernández Galván, Aurora Muñoz Losa y Francisco Fernández García-Prieto. Grupo de investigación QCAMM (Quantum Chemistry And Molecular Modelling), Dpto. de Ingeniería Química y Física, Universidad de Extremadura.
- 16. Electronic and Thermoelectric Properties of doped-Cu₃SbSe₄ based compounds from First Principles.**
Pablo Palacios Clemente. Dpto. de Física Aplicada a las Tecnologías Aeronáutica y Naval, Universidad Politécnica de Madrid.
- 17. Estirpex**
CénitS-COMPUTAEX.
- 18. Estirpex-2**
CénitS-COMPUTAEX.
- 19. Estudio sobre la HemoDiálisis Progresiva en Pacientes Incidentes (DiPPI)**
Javier Deira Lorenzo y Miguel Ángel Suarez, del Servicio de Nefrología del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres, Fundación para la Formación e Investigación de los Profesionales de la Salud de Extremadura (FundeSalud) y CénitS-COMPUTAEX.
- 20. Estudios computacionales para simulación de reacciones químicas.**
Guadalupe Silvero Enríquez, Ignacio López-Coca Martín y María José Arévalo Caballero. Grupo de investigación Laboratory of Applied and Sustainable Organic Chemistry (LABASOC). Departamento de Química Orgánica e Inorgánica. Universidad de Extremadura.
- 21. Estudio de efectos estereoelectrónicos en heterociclos saturados hidroxilados**
Juan Manuel Garrido Zoido. Grupo de investigación QUOREX (Química Orgánica), Universidad de Extremadura.

- 22. Estudio cinético de reacciones poliatómicas mediante el método RPMD**
Joaquín Espinosa García. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.
- 23. Estudio teórico de la fotofísica y fotoquímica de complejos cromóforo-ciclodextrina y cromóforo-proteínas PYP y GFP**
Manuel Ángel Aguilar Espinosa. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.
- 24. Expedición Shelios 2009**
Instituto de Astrofísica de Canarias, Astronomía 2009, AGH Consultores, Hispaweb, Facultad de Informática de la Universidad Politécnica de Madrid y CénitS-COMPUTAEX.
- 25. Flow-induced anisotropy in metallic glasses**
Daniel Crespo, Eloi Pineda y Jorge E. Velasco. Dpto. de Física de la Universidad Politécnica de Catalunya. Amadeu Concustell. Centro de proyección térmica de la Universidad de Barcelona.
- 26. 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.
- 27. Grupo Operativo APMEF: Agricultura de precisión aplicada para la mejora de explotaciones frutales.**
Grupo Fruvaygo Machuca, Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, ADEVICE, Cellnex Telecom, Agrodrono, Tepro Consultores Agrícolas, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Sevilla Escuela Técnica Superior de Ingeniería (Telecomunicaciones) y CénitS-COMPUTAEX.
- 28. Grupo Operativo GAPTER (Ganadería de precisión para terneros, sostenibilidad y bienestar animal)**
Copreca, Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería, ADEVICE, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Sevilla Escuela Técnica Superior de Ingeniería (Telecomunicaciones) y CénitS-COMPUTAEX.
- 29. High-throughput search of dopants for efficient ferroelectric oxide based solar cells**
José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
[Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación]
- 30. IFMIF-EVEDA España**
Fernando Mota García y Ángela García Sanz. Laboratorio Nacional de Fusión. CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 31. Mechanisms of Molecular Motion in Polymers with Nonuniform Stiffness**
Jorge Ramírez García. Universidad Politécnica de Madrid. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].

- 32. Medidas de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia**
Juan Ignacio Lagares, Unidad de Aplicaciones Médicas del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas). Francisco Sánchez Doblado y María Teresa Romero Expósito, Dpto. de Fisiología Médica y Biofísica/Servicio de Radio-física de la Facultad de Medicina, Universidad de Sevilla.
- 33. Modelización de reacciones multicomponente**
Carlos Fernández Marcos. Grupo de investigación Laboratorio de Química Bioorgánica y Biofísica de Membranas de la Universidad de Extremadura.
- 34. Novel genomic regions associated to specific complex chromatin marks**
Ángel Carlos Román. Instituto Cajal - CSIC. Dpto. Systems Circuits Group.
- 35. Nuevas sustancias gelificantes derivadas de monosacáridos e hidrazidas derivadas de diácidos**
Pedro Cintas Moreno y Ana María Sánchez León. Grupo de investigación Química Orgánica (QUOREX), Universidad de Extremadura.
- 36. Pedigreex: gestión automatizada de pedigrís humanos en consejo genético**
Noelia Alonso Sánchez. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática.
- 37. Photo-sensitization of doped ferroelectric oxides using a high-throughput framework.**
Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
- 38. PIT (Programa de Innovación y Talento): Análisis y consultoría del proyecto OncoGenTIC: Tecnologías Informáticas y de las Comunicaciones al servicio asistencial de especialistas y pacientes de enfermedades oncológicas**
CLOUDEX, S.L. y CénitS.
- 39. PIT (Programa de Innovación y Talento): IoTAgro 4.0**
SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L, y CénitS.
- 40. Plataforma de integración y gestión de datos geolocalizados destinados a mejorar la eficiencia agraria de los cultivos.**
Álvaro Huertas Martín. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software, Universidad de Extremadura
- 41. Predicting temperature-dependent elastic constants for ultra-high temperature ceramics**
José Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla. [Proyecto asignado a través de la Red Española de Supercomputación]
- 42. Predicting thermoelastic properties of 2D materials**
Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
- 43. Predicting thermoelastic properties of materials with advanced exchange correlation functionals**
Jose Javier Plata Ramos. Universidad de Sevilla.
- 44. Propuesta y análisis de viabilidad de un servicio asistencial para la disposición de ultrasecuenciación genética en un centro de supercomputación**
Manuel Alfonso López Rourich. Trabajo Final de Máster en dirección TIC.

- 45. Propuesta y análisis de viabilidad de un sistema automatizado de diagnóstico e investigación aplicado a la tecnología de ultra-secuenciación genética en un centro de supercomputación**
Manuel Alfonso López Rourich. Trabajo Final de Máster universitario en investigación, UEx.
- 46. Prospéctica: Big Open Data para el análisis y estudio de la influencia del entorno en enfermedades oncológicas**
CLOUDEX, S.L. y CénitS-COMPUTAEX.
- 47. Quantum Chemistry and Molecular Modeling**
Francisco J. Olivares del Valle. Grupo de investigación Quantum Chemistry And Molecular Modelling, Universidad de Extremadura.
- 48. Química computacional**
José Carlos Corchado Martín-Romo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, Universidad de Extremadura.
- 49. Quorex**
Pedro Cintas Moreno, Martín Ávalos González, Reyes Babiano Caballero, José Luis Jiménez Requejo, Rafael Fernando Martínez Vázquez, Juan Carlos Palacios Albarrán, Abraham Rodríguez Cano. Grupo de investigación Química Orgánica (QUOREX), Universidad de Extremadura.
- 50. RUMIMETA: Disminución de la huella de metano por inclusión de polifenoles vitivinícolas en la alimentación de rumiantes. Monitorización de su efecto en el bienestar de los animales durante el cebo de terneros**
Copreca (coordinador), Set Informática, Comunicaciones, e Ingeniería S.L., Heral Enología S.L, CICYTEX (Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura), Universidad de Extremadura y CénitS-COMPUTAEX.
- 51. SCINAP: Sistema Ciberfísico basado en la Inmótica, para su aplicación en Agricultura de Precisión**
Domotys (Asociación española para el impulso y la innovación en la domótica, la inmótica y las ciudades inteligentes), SET Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., Sinapse Energía S.L., Amaisys Technologies S.L., Albufera Energy Storage S.L. y CénitS.
- 52. SCioT**
SET Informática, Comunicaciones, e Ingeniería y CénitS-COMPUTAEX.
- 53. Simulación de procesos químicos**
Santiago Tolosa Arroyo. Dpto. de Ingeniería Química y Química Física, UEx.
- 54. Simulaciones girocinéticas globales de plasmas de fusión con Euterpe**
Edilberto Sánchez González, Francisco Castejón Magaña, Iván Calvo Rubio. Unidad de Teoría del Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).
- 55. Simulaciones moleculares de docking (acoplamiento molecular) para buscar potenciales inhibidores de diferentes virus**
Vicente Galiano, José Villalaín, Emmanuel Fajardo. Departamento de Física y Arquitectura de Computadores, Universidad Miguel Hernández de Elche.

- 56. Sistema bioinformático de apoyo a la investigación en la unificación del patrimonio genealógico y genético**
Álvaro Rodríguez San Pedro. TFG en Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Software. Universidad de Extremadura.
- 57. Sistema Ciberfísico para la Optimización de una Explotación Agropecuaria**
Juan Francisco Bermejo y José Luis González (CénitS-COMPUTAEX) y Félix R. Rodríguez (Escuela Politécnica de Cáceres, Universidad de Extremadura). Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería del Software.
- 58. Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional**
Santiago Aparicio. Dpto. de Química de la Universidad de Burgos.
- 59. Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos**
Joaquín Espinosa García. Universidad de Extremadura.
- 60. The mechanism of the two-step spin-transition of a thiazyl-diradical-based material presenting geometrical frustration.**
Juan José Novoa Vide. Facultat de Química. Universitat de Barcelona. [Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación].
- 61. Ultrasecuenciación genética mediante técnicas de supercomputación**
Servicio de Inmunología y Genética Molecular del Hospital San Pedro de Alcántara de Cáceres y CénitS-COMPUTAEX.
- 62. Understanding a novel mode of non-canonical CaM activation**
Alvaro Villarroel. Insituto Biofísica (Basque Centre for Biophysics), CSIC, UPV/EHU.



Ciencias Informáticas y de Comunicaciones

- 1. Accesibilidad web**
CénitS-COMPUTAEX.
- 2. Adecuación de la red de comunicaciones para CénitS**
CénitS-COMPUTAEX.
- 3. Adecuación del CPD de LUSITANIA II**
CénitS-COMPUTAEX.
- 4. Adquisición de equipamiento científico-tecnológico de la Fundación COMPUTAEX**
CénitS-COMPUTAEX.
- 5. Adquisición, traslado e instalación de infraestructura científica y tecnológica para CénitS**
CénitS-COMPUTAEX.
- 6. Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal**
David Valencia Corrales. Dpto. Tecnologías de los computadores y de las comunicaciones de la Universidad de Extremadura.
- 7. Alojamiento de plataformas virtuales y WebTV (Aldealab c3)**
CénitS-COMPUTAEX.
- 8. Análisis de imágenes en profundidad en terapias de rehabilitación supervisadas por robots autónomos.**
Eva María Mógena Cisneros. Trabajo Final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.
- 9. Análisis de un sistema de gobierno para federaciones de centros de procesamiento de datos con computación de alto rendimiento.**
Javier Rubio Bravo. Trabajo Final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.
- 10. Cálculos de eficiencia condicionada con datos internacionales**
José Manuel Cordero Ferrera. Departamento de Economía, Universidad de Extremadura.
- 11. CEDIN (Centro Extremeño de Diseño Industrial)**
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura)
- 12. COM.INFO.COM: Predictibilidad de infoestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPV6 y FTTX**
Alfonso Gazo Cervero, José Luis González Sánchez, Francisco Javier Rodríguez Pérez y Javier Carmona Murillo. Grupo de investigación GÍTACA de la Universidad de Extremadura.

- 13. Colaboración con el observatorio tecnológico UEX-HP**
Universidad de Extremadura, Hewlett Packar y CénitS-COMPUTAEX.
- 14. ConSumar**
CénitS-COMPUTAEX.
- 15. Consumo energético de operaciones colectivas MPI en plataformas multicores**
Álvaro Cortés Fácila y Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Dpto. de Arquitectura de Computadores y Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 16. Contribución al desarrollo de discretizaciones y optimización eficientes para el análisis y diseño de filtros, antenas y agrupaciones de antenas.**
Jesús Rubio Ruiz, Rafael Gómez Alcalá, Juan F. Izquierdo León y Yolanda Campos Roca. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 17. Creación de un ecosistema de negocio en cloud computing. Gestión automatizada de la infraestructura**
Emilio José Muñoz Fernández y Juan Francisco Rodríguez Cardoso.
- 18. Diseño y Simulación de Dispositivos y Sistemas de Comunicaciones Ópticas**
Rafael Gómez Alcalá. Universidad de Extremadura.
- 19. Eco-traffic**
CénitS-COMPUTAEX.
- 20. ENGAGE: Banda ancha de alta velocidad en zonas rurales**
Diputación Provincial de Badajoz, la Diputación Provincial de Cáceres y la Asociación de Universidades Populares de Extremadura (AUPEX), CénitS-COMPUTAEX.
- 21. Deployment of next generation services in the Scientific and Technological Network of Extremadura**
Jesús Calle Cancho. Trabajo Final de Máster Universitario en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.
- 22. Despliegue de un testbed de redes definidas por software para la gestión de recursos de red en un CPD.**
Laura Amarilla Cardoso. Trabajo final de Máster en Ingeniería de Telecomunicación.
- 23. Diseño de un sistema de gestión por procesos de negocio en CénitS/COMPUTAEX**
Felipe Lemus Prieto. Trabajo Final de Máster.
- 24. EISTER - e-Infranet Sustainability Training and Educational Resource**
University College of West Flanders (Howest, Bélgica), University College Dublin (Dublin, Irlanda), Leeds Metropolitan University (Leeds, Reino Unido) y Technical University of Lisbon (Lisboa, Portugal), Riga Technical University (Riga, Letonia) y Open Universiteit (Países Bajos), Kajaani University of Applied Sciences (Kajaani, Finlandia) y CénitS-COMPUTAEX.
- 25. Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects**
Levent Gürel. Director, Computational Electromagnetics Research Center (BiLCEM)

- 26. Electromagnetismo y supercomputación para nanoestructuras plasmónicas. Aplicación a nanoantenas ópticas y metamateriales**
Luis Landesa Porras, José Manuel Taboada Varela, Francisco Javier Rivero Campos, Luis Bote Curiel y Mario Fernández Manzano. Dpto. de Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 27. Estudio y análisis de nuevos mecanismos para redes inalámbricas de próxima generación haciendo uso de técnicas de computación de altas prestaciones.**
José Javier Rico Palomo. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.
- 28. Estudio y evaluación de los mecanismos de gestión de la movilidad en redes de próxima generación**
Jesús Calle Cancho. Trabajo Final de Máster en Ingeniería Informática, Universidad de Extremadura.
- 29. Evaluación de AzequiaMPI**
Juan Carlos Díaz Martín. Grupo GIM (Grupo de Ingeniería de Medios). Universidad de Extremadura.
- 30. Evaluación de la movilidad IP y posibilidades de integración en redes programables 5G**
José Manuel Mendoza Rubio. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Telemática, Universidad de Extremadura.
- 31. FI4VDI - Desarrollo de una Red de Infraestructuras Federadas para la Generación de Servicios de Virtualización de Puestos de Trabajo**
FCSCCL (Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León), CénitS-COMPUTAEX, UDL (Universitat de Lleida), Université Montpellier 2, Inovaria y Consorcio PCiTAL (Parc Científic i Tecnològic Agroalimentari de Lleida).
- 32. Future Internet: eficiencia en las redes de altas prestaciones**
Red Temática Fierro (incluyendo CénitS-COMPUTAEX).
- 33. Gestión de la movilidad en redes de transporte de paquetes para la mejora de la calidad de servicio en la convergencia entre las redes fijas y móviles**
David Cortés Polo. Tesis Doctoral, Universidad de Extremadura.
- 34. Green code**
CénitS-COMPUTAEX.
- 35. Implementación de un Sistema para el Control de Consumos Energéticos en Entornos HPC.**
Manuel José Casillas, José Luis González (CénitS-COMPUTAEX) y Miguel Ángel Vega (Universidad de Extremadura). Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Computadores de la Universidad de Extremadura.
- 36. Implementación del modelo Cloud Computing en un centro de supercomputación.**
Jaime Rivero Ramos. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC.

- 37. INRETEL - Investigación para la obtención de una nueva metodología y un prototipo TIC para el tratamiento y procesamiento de reclamaciones de servicios de telecomunicaciones.**
Trecone, Grupo Área de Derecho S.L.P., Solucionex Consultoría y Desarrollo S.L., CETA-Ciemat, Feval, CénitS, y la Unión de Consumidores de Extremadura.
- 38. Mecanismos de Monitorización y Análisis de Tráfico en Redes de Próxima Generación**
Daniel González Sánchez. Trabajo de Fin de Grado en Ingeniería en Telemática, Universidad de Extremadura.
- 39. Mecanismos para la distribución de contenidos a través de redes móviles**
Javier Carmona Murillo. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.
- 40. Mecanismos para la Gestión Eficiente del Plano de Control y del Plano de Datos en Redes Móviles 5G**
Jesús Calle Cancho. Tesis Doctoral, Universidad de Extremadura.
- 41. Medianell Virtual Press**
Potenciación y Desarrollo Empresarial S.L.
- 42. Metodología y framework para el desarrollo de aplicaciones científicas en entornos HPC.**
Javier Corral García. Diploma de Estudios Avanzados.
- 43. MITTIC - Modernización e Innovación Tecnológica con base TIC en sectores estratégicos y tradicionales**
Gobierno de Extremadura, ICMC (Instituto del Corcho, la Madera y el Carbón Vegetal), INTROMAC (Instituto Tecnológico de Rocas Ornamentales y Materiales de Construcción), CCMIJU (Centro de Cirugía de Mínima Invasión Jesús Usón), FEVAL (Institución Ferial de Extremadura), CénitS-COMPUTAEX, Fundecyt-PCTEX, CTAEX (Centro Tecnológico Agroalimentario Extremadura), Universidade de Évora, IPP (Instituto Politécnico de Portalegre), CEBAL (Centro de Biotecnología Agrícola e Agro-Alimentar do Alentejo), CEVALOR (Centro Tecnológico da Pedra Natural de Portugal), ADR-IPP y CATAA (Associação Centro de Apoio Tecnológico Agro-Alimentar de Castelo Branco).
- 44. NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología**
Luis Landesa y José Manuel Taboada. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 45. Optimización de la red de acceso conmutada para provisión de QoS a dispositivos móviles mediante programación lineal**
David Miguel Cortés Polo. Trabajo Final de Máster universitario en investigación.
- 46. Optimization of the diffused matrix format for heterogeneous parallel computing**
David Valencia Corrales y Alejandro Cristo García. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 47. PIT (Programa de Innovación y Talento): Publicidad, marketing digital y diseño web**
Synopsis 103 y CénitS.

- 48. Proyecto SEDE**
SET Informática, Comunicación e Ingeniería, y CénitS-COMPUTAEX.
- 49. Proyecto SysGobEx**
CénitS-COMPUTAEX.
- 50. Red-Integra**
Ayuntamiento de Cáceres, Câmara Municipal de Portalegre, Município de Castelo Branco, Fundación COMPUTAEX-CénitS, Ayuntamiento de Plasencia, Triángulo Urbano Ibérico Rayano Triurbir AEIE y Universidad de Extremadura.
- 51. Red NOVA sostenible**
CénitS-COMPUTAEX.
- 52. Redes inalámbricas MIMO de última generación en zonas rurales**
Francisco Luna Valero. Dpto. de Ingeniería de Sistemas Informáticos y Telemáticos, Universidad de Extremadura.
- 53. S4I - Software Sensor for Smart Infraestructures**
Set Informática, Comunicaciones e Ingeniería S.L., Grupo OHL: Obrascon Huarte Lain S.A., Auditoriza Diagnóstico de Sistemas S.L.P., Grupo Hypercomp (UEX) y CénitS-COMPUTAEX.
- 54. SIBE**
CETIEX (Centro Tecnológico Industrial de Extremadura).
- 55. Simulación de dispositivos ópticos integrados**
Rafael Gómez Alcalá. Dpto. de Tecnología de los Computadores y las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 56. Simulación del cómputo masivo de LSP en sistemas interdominio**
Manuel Domínguez-Dorado. Universidad de Extremadura.
- 57. Sistema de Gobierno de Federaciones de CPD**
CénitS-COMPUTAEX.
- 58. Sistema de vigilancia tecnológica para un centro de supercomputación.**
Javier Lázaro Jareño. Trabajo Final de Máster en Dirección TIC, Universidad de Extremadura.
- 59. Smart Green Data Center**
Cobra Instalaciones y Servicios, S.A., ASELCOM, TEKNICAM, SET i.c.i, CénitS-COMPUTAEX, CETIEX e INTROMAC.
- 60. Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones**
Luis Landesa y José Manuel Taboada. Dpto. de Tecnología de los Computadores y de las Comunicaciones, Universidad de Extremadura.
- 61. Soporte en porting a usuarios del CIEMAT en la plataforma de LUSITANIA**
Antonio Muñoz Roldán. Dpto. de Informática del CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas).

62. Supercomputación y Desarrollo GRID

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

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

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

64. TaxonomTIC 2013

CénitS-COMPUTAEX.

65. TaxonomTIC 2014

CénitS-COMPUTAEX

66. TaxonomTIC 2015

CénitS-COMPUTAEX

67. TaxonomTIC 2016

CénitS-COMPUTAEX

68. TaxonomTIC 2017

CénitS-COMPUTAEX

69. TaxonomTIC 2018

CénitS-COMPUTAEX

70. TaxoTIC 2019

CénitS-COMPUTAEX

71. Unidad Interactiva 3D

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

72. Vale tecnológico Degusta San Juan S.L.

CénitS-COMPUTAEX

73. Vale tecnológico Instituto Stetica S.L.

CénitS-COMPUTAEX

74. Vale tecnológico Afimec Centro de Formación Profesional

CénitS-COMPUTAEX

75. Vale tecnológico Bobimex S.L.

CénitS-COMPUTAEX

76. Vale tecnológico Isatex, CEE.

CénitS-COMPUTAEX

77. Vale tecnológico Network Languages Formación S.C.

CénitS-COMPUTAEX

78. Vale tecnológico Proigam Instalaciones S.L.

CénitS-COMPUTAEX

79. Vale tecnológico Omicrón Elevadores S.A.

CénitS-COMPUTAEX

80. Vale tecnológico Méntor e-Learning

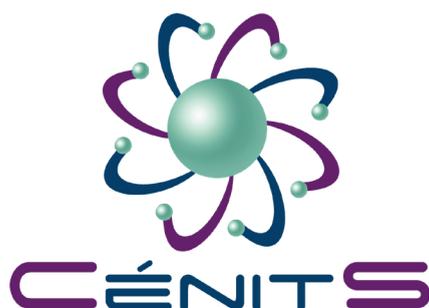
CénitS-COMPUTAEX

Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación

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

☎ +34 927 049 070

🌐 www.cenits.es



Fondo Europeo de
Desarrollo Regional

“Una manera de hacer Europa”

JUNTA DE EXTREMADURA

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



Unión Europea