

**COMPUTAEX**  
Centro de Supercomputación  
de Extremadura

## **MEMORIA ANUAL 2023**

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





© Fundación COMPUTAEX  
Edición: Fundación COMPUTAEX  
Diseño: Fundación COMPUTAEX  
Autores: Javier Corral García, Daniel Flores Martín, Moisés Gaitán Fernández, Felipe Lemus Prieto, Miguel Ángel Mahillo Paniagua, Julio Mañas Viniegra, Renata Sánchez Méndez, Gema Villa Galán y Juan Antonio Rico Gallego.

Impreso en España. Printed in Spain  
ISBN: 978-84-09-77302-2

Depósito Legal: CC-000217-2025

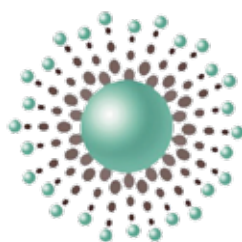
Reconocimiento – NoComercial – SinObraDerivada (by-nc-nd)



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

<b>1. FUNDACIÓN COMPUTAEX</b>	<b>07</b>
1.1. Objeto y fines	07
1.2. Patronato	08
1.3. Equipo COMPUTAEX 2023	08
1.4. RES (Red Española de Supercomputación)	10
1.5. Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS)	11
<b>2. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR COMPUTAEX</b>	<b>12</b>
2.1. EDIH T4E - Extremadura Digital Innovation Hub	12
2.2. CéniTS-CPD: resilient datacenter	12
2.3. ICTS Red Española de Supercomputación 2022	13
2.4. LUSITANIA 5G/6G PORT	13
2.5. Quantum Spain	14
2.5. Plan Complementario de Biotecnología aplicada a la Salud	14
2.6. Supercomputador LUSITANIA IV	15
2.7. Detección de Ataques mediante técnicas Side-channel y de Inteligencia Artificial en entornos IoT (DASIA-IoT)	15
2.8. Entorno software para el desarrollo de códigos de programación eficientes en centros de supercomputación (EfiHPC)	16
2.9. Quantum Circuit Simulator as a Service on LUSITANIA III (QCS-LUSITANIA)	16
2.10. Anemoi2	16
2.11. ExQNet	17
2.12. Mejora, implementación e implantación de plataforma de comunicación digital y e-learning en Moodle	17
2.13. Modernización de la infraestructura de Lusitania para una inteligencia artificial competitiva (MILIAC)	18
<b>3. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN SOPORTADOS</b>	<b>19</b>
<b>4. RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN</b>	<b>27</b>
4.1. Publicaciones	27
<b>5. CONVENIOS DE COLABORACIÓN, ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN</b>	<b>38</b>
5.1. Convenios de Colaboración	38
5.2. Convenio con la UEx y colaboración en los másteres TIC	40
5.3. Acciones formativas y difusión	41
5.3.1. Semana Administración Abierta	41
5.3.2. XII Transfiere	41
5.3.3. Encuentro RIS3	42
5.3.4. Curso de doctorado en la Bertionoro International Spring School	42
5.3.5. Sixth International Workshop on Gerontechnology	43
5.3.6. World Quantum Day	44
5.3.7. COMPUTAEX recibe una estancia de investigación procedente de la Universidad de Jyväskylä, Finlandia	44
5.3.8. Curso de Introducción a HPC & IA en Lusitania III	45
5.3.9. Curso de Introducción al Desarrollo de Software Cuántico	45
5.3.10. 3rd International Workshop on Quantum Software Engineering and Technology	46
5.3.11. Noche Europea de los Investigadores 2023	46
5.3.12. VII Semana de la Ciencia de Extremadura	47
5.3.13. Lusitania	47
5.4. Visitas guiadas	48
5.5. Patrocinios	49

<b>6. COMPUTAEX - CPD</b> .....	<b>49</b>
6.1. COMPUTAEX-CPD y Supercomputador LUSITANIA III .....	51
6.2. Consumo de recursos .....	54
6.2.1. Uso de recursos .....	54
6.2.2. Relación de recursos por proyecto .....	54
6.2.3. Uso de CPU .....	56
6.2.4. Uso de Memoria Principal .....	56
6.3. Usuarios .....	57
6.3.1. Incidencias .....	57
6.4. Software .....	57



# COMPUTAEX

## Centro de Supercomputación de Extremadura

### 1. FUNDACIÓN 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. El Decreto 237/2023, de 12 de septiembre, establece la nueva estructura orgánica de la Consejería de Educación, Ciencia y Formación Profesional, adscribiéndose la Fundación, a la Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación.

#### OBJETIVO 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.

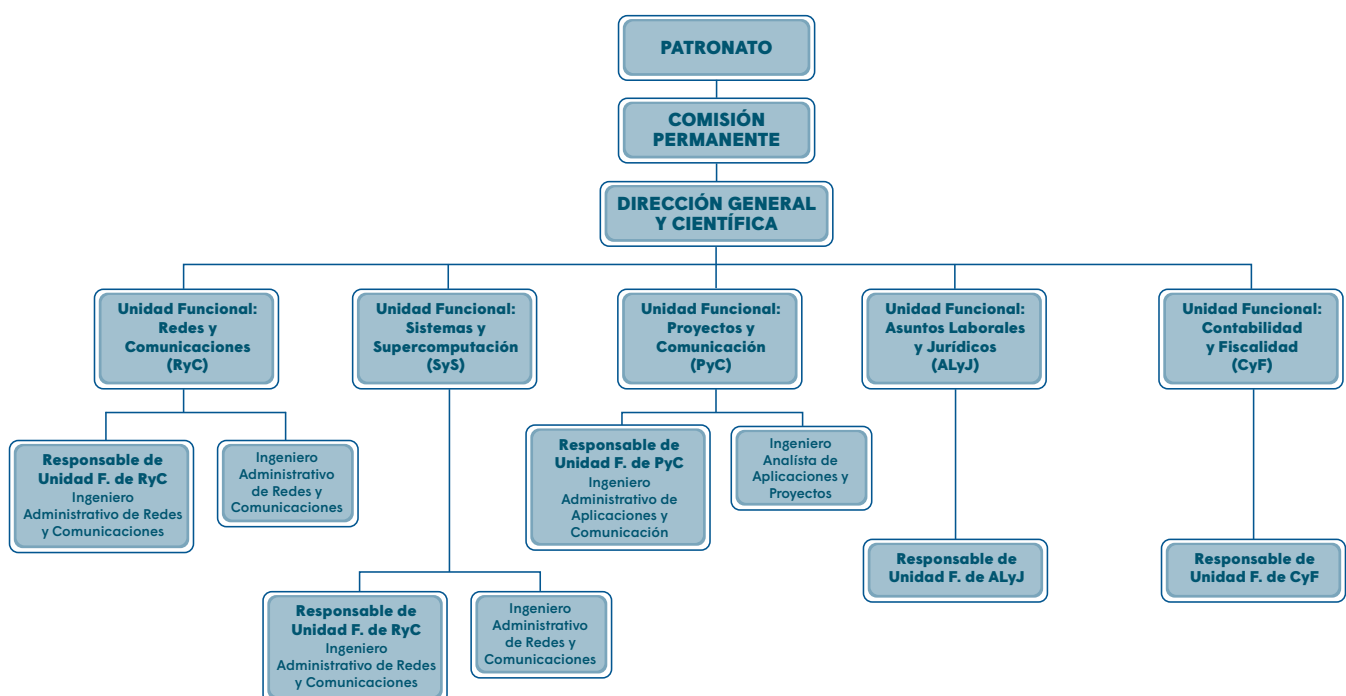
## PATRONATO

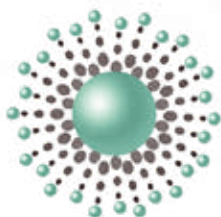
Fundación COMPUTAEX
PATRONATO
<b>D<sup>a</sup> María Mercedes Vaquera Mosquera</b> Presidenta de la Fundación COMPUTAEX Consejera de Educación, Ciencia y Formación Profesional
<b>D. Javier de Francisco Morcillo</b> Vicepresidente de la Fundación COMPUTAEX Secretario General de Ciencia, Tecnología e Innovación
<b>D<sup>a</sup> Celina Pérez Casado</b> Patrona de la Fundación COMPUTAEX Directora General de Empresa
<b>D<sup>a</sup> Víctor Valentín Píriz Mayo</b> Patrón de la Fundación COMPUTAEX Secretario General de Economía, Empresa y Comercio
<b>D. Jesús Coslado Santibañez</b> Patrón de la Fundación COMPUTAEX Director General de Digitalización Regional
<b>D<sup>a</sup> Carmen González Ramos</b> Patrona de la Fundación COMPUTAEX Directora General de CICYTEX
<b>D<sup>a</sup> Inés María del Puerto García</b> Patrona de la Fundación COMPUTAEX Profesora Titular de la UEX
<b>D. José Manuel Pérez Morales</b> Patrón de la Fundación COMPUTAEX Director del Departamento de Tecnología del CIEMAT
<b>D. Pedro M. Fernández Salguero</b> Patrón de la Fundación COMPUTAEX Rector de la UEX
<b>D. Juan Antonio Rico Gallego</b> Secretario del Patronato Director General de la Fundación COMPUTAEX

Fundación COMPUTAEX
DIRECCIÓN GENERAL
<b>D. Juan Antonio Rico Gallego</b> Director General de la Fundación COMPUTAEX
COMISIÓN PERMANENTE
<b>D. Javier de Francisco Morcillo</b> Vicepresidente de la Fundación COMPUTAEX Directora General de Empresa
<b>D<sup>a</sup> Celina Pérez Casado</b> Patrona de la Fundación COMPUTAEX Directora General de Empresa
<b>D<sup>a</sup>. Carmen González Ramos</b> Patrona de la Fundación COMPUTAEX Directora General de CICYTEX
<b>D. Juan Antonio Rico Gallego</b> Director General de la Fundación COMPUTAEX

## EQUIPO COMPUTAEX 2023

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





# COMPUTAEX



**Juan Antonio Rico**

Director general

**Felipe Lemus**

Responsable de redes y comunicaciones

**Julio Mañas**

Responsable de personal y de asuntos jurídicos

**Javier Corral**

Responsable de proyectos y comunicación

**Moisés Gaitán**

Administrador de sistemas y supercomputación

**Renata Sánchez**

Analista de Proyectos y Comunicación

**Gema Villa**

Auxiliar de administración

**Miguel Mahillo**

Administrador de redes y comunicaciones

**José Manuel Delgado**

Técnico en contabilidad y fiscalidad

Técnicos de apoyo a la I+D+i

**Javier Sánchez**

**Jorge Cancho**

**Pablo Fernández**

**Daniel Talaván**

**Miguel Baños**

**Alejandro Domínguez**

**Juan Antonio Pérez**

**Andrés Ventura**

Alumnos que realizaron sus prácticas curriculares en Computaex durante 2023:

- Grado de Ingeniería Informática en Ingeniería del Software:
  - Sergio López.
  - Carlos Cambero.
  - Arturo Mejías.
- Grado en Ingeniería Informática en Ingeniería de Computadores:
  - Javier Solís.
- Módulo de FP de Grado Superior de Administración de Sistemas Informáticos en Red:
  - José Pedro Morgado.

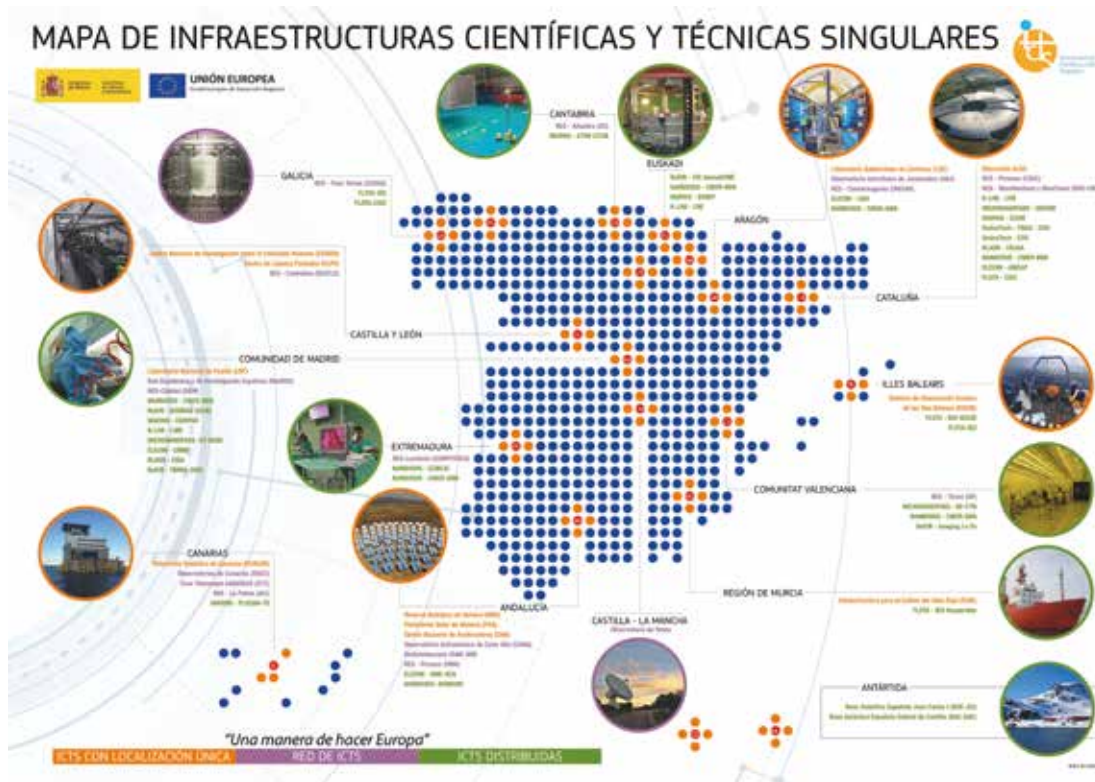
## RES (RED ESPAÑOLA DE SUPERCOMPUTACIÓN).

COMPUTAEX forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una Infraestructura Científica y Técnica Singular (ICTS) distribuida por toda la geografía española, consistente en la interconexión de 14 nodos con el objetivo de ofrecer recursos de computación de alto rendimiento a la comunidad científica. La RES gestiona estos recursos con el fin de impulsar el avance de la ciencia y la innovación en España. Para alcanzar este propósito, ofrece sus recursos mediante un sistema de acceso abierto, común y competitivo. El proceso de solicitud es único para todos los nodos de la RES y se basa en criterios de eficacia, eficiencia y transparencia. Este acceso común garantiza la utilización óptima de todos los recursos disponibles en la red. El tiempo de cómputo en las máquinas de la RES es concedido a través de convocatorias competitivas. Las propuestas recibidas son evaluadas cada cuatro meses por el Comité de Acceso, que es asesorado por un Panel de Expertos formado por reconocidos investigadores. Por otra parte, la RES también promueve acciones de interés común para sus nodos, como planes de inversión, actividades de formación y divulgación, o participación conjunta en proyectos nacionales e internacionales.

BSC (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), UC (Universidad de Cantabria), UMA (Universidad de Málaga), UV (Universitat de València), BIFI (Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos), CESGA (Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia), CSUC (Consorti de Serveis Universitari de Catalunya), SCAYLE (Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León), UAM (Universidad Autónoma de Madrid), Nasertic (Navarra de Servicios y Tecnologías S.A.), PIC (Port d'Informació Científica), CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas), y CénitS-COMPUTAEX.



## 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 COMPUTAEX 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, operación y/o mantenimiento muy elevado y cuya importancia y carácter estratégico justifica su disponibilidad para todo el colectivo de I+D+i. El reconocimiento de 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.

## 2. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR COMPUTAEX

Durante 2023, el equipo de COMPUTAEX ha trabajado en múltiples proyectos de investigación, desarrollo e innovación tecnológica, aportando soluciones en ámbitos realmente heterogéneos.

### EDIH T4E - EXTREMADURA DIGITAL INNOVATION HUB: TECH FOR EFFICIENCY.



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

Entidades: Fundación Fundecyt Parque Científico y Tecnológico de Extremadura (Fundecyt-PCTEx), Diputación Provincial de Badajoz, Diputación Provincial de Cáceres, Universidad de Extremadura (UEX), Fundación COMPUTAEX, Asociación Empresarial Extremeña de Tecnologías de la Información y Comunicación (AEXTIC); Clúster de la Energía de Extremadura; Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura (CICYTEX), Institución Ferial de Extremadura (FEVAL), Cámara de Comercio Cáceres, y Cámara de Comercio de Badajoz, Asociación Empresarial Extremeña de Tecnologías de la Información y Comunicación.

El proyecto está cofinanciado por la Unión Europea, NextGeneration, y por el Ministerio de Industria, Comercio y Turismo, en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia, a través de la convocatoria Digital-2021-EDIH-01 (European Digital Innovation Hubs).



### CÉNITS-CPD: RESILIENT DATACENTER.

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

El proyecto está financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación, en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia, NextGeneration dentro de las ayudas públicas para la mejora de Infraestructuras Científicas y Tecnológicas Singulares. Convocatoria ICTS 2021, Orden CIN/538/2021, de 29 de mayo, por la que se aprueban las bases reguladoras.



## ICTS RED ESPAÑOLA DE SUPERCOMPUTACIÓN 2022.

COMPUTAEX forma parte de la Red Española de Supercomputación (RES), una infraestructura distribuida consistente en la interconexión de 15 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 sus servicios 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 medios 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: BSC (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), UC (Universidad de Cantabria), UMA (Universidad de Málaga), UV (Universitat de València), BIFI (Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos), CESGA (Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia), CSUC (Consorci de Serveis Universitari de Catalunya), SCAYLE (Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León), UAM (Universidad Autónoma de Madrid), Nasertic (Navarra de Servicios y Tecnologías S.A.), PIC (Port d'Informació Científica), CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas), y COMPUTAEX.



## LUSITANIA 5G/6G PORT. EQUIPAMIENTO CIENTÍFICO PARA LA IMPLANTACIÓN DE UN ENTORNO DE PRUEBAS DE TECNOLOGÍAS 5G/6G EN LA INFRAESTRUCTURA DE SUPERCOMPUTACIÓN LUSITANIA.

Este proyecto tiene como objetivo potenciar la capacidad investigadora en tecnologías 5G y 6G en la región de Extremadura mediante la adquisición, despliegue y puesta en marcha de un entorno de pruebas real que permita validar y demostrar investigaciones realizadas previamente en este ámbito mediante técnicas de simulación.

El equipamiento solicitado estará ubicado en el centro de procesamiento de datos del Centro de Supercomputación de Extremadura (COMPUTAEX)

El nuevo equipamiento tecnológico permitirá a los usuarios de los supercomputadores incrementar el nivel de maduración tecnológica de sus investigaciones en 5G y ayudar a sentar las bases para el desarrollo del denominado 6G. Se pretende por ello que el entorno de pruebas resultante abarque todos los componentes de la arquitectura de red 5G, considerando los dispositivos finales, la red de acceso radio, el core y los equipos que forman el denominado MEC (Multi-Access Edge Computing).

El entorno de pruebas resultante será potenciado además por la infraestructura de Inteligencia Artificial con que cuenta COMPUTAEX.

Proyecto financiado por la Unión Europea, NextGeneration y por el Ministerio para la Transformación Digital y de la Función Pública en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia, a través de una concesión de ayudas en infraestructuras de investigación, adquisición de equipamiento científico-técnico y proyectos de I+D en 5G avanzado del Programa UNICO I+D 6G.



## QUANTUM SPAIN: CREACIÓN DE UN ECOSISTEMA DE COMPUTACIÓN CUÁNTICA PARA LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL.



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

Un total de 27 instituciones de investigación colaboran en el desarrollo de este proyecto que está formado por 11 nodos de la Red Española de Supercomputación, 13 universidades y tres centros de investigación: BSCCNS (Consortio Barcelona Supercomputing Center, Centro Nacional de Supercomputación), CESGA (Fundación Centro de Supercomputación de Galicia), SCAYLE (Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León), NASERTIC (Navarra de Servicios y Tecnologías), BIFI (Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza), CSUC (Consortio de Servicios Universitarios de Cataluña), PIC CIEMAT-IFAE (Port d'Informació Científica de la Universidad de Barcelona), UAM (Universidad Autónoma de Madrid), Fundación COMPUTAEX, UMA (Universidad de Málaga), IAC (Instituto de Astrofísica de Canarias), UNIOVI (Universidad de Oviedo), UNICAN (Universidad de Cantabria), UPV/EHU (Universidad del País Vasco), TECNUN (Universidad de Navarra), UAB (Universidad Autónoma de Barcelona), UB (Universidad de Barcelona), UV (Universidad de Valencia), UPV (Universidad Politécnica de Valencia), UCM (Universidad Complutense de Madrid), US (Universidad de Sevilla), UGR (Universidad de Granada), UIB (Universidad de Islas Baleares), DIPC (Donostia International Physics Center), ICFO (Institut de Ciències Fotòniques), CSIC (Consejo Superior de Investigaciones Científicas).

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



## PLAN COMPLEMENTARIO DE BIOTECNOLOGÍA APLICADA A LA SALUD.

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

de análisis-ómicas, se permitirá la integración y contextualización de los datos, favoreciendo la identificación personalizada de biomarcadores.



### **SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA IV.**

Proyecto para la adquisición del supercomputador LUSITANIA IV. La nueva infraestructura, que se unirá a los actuales supercomputadores LUSITANIA II y III en el CPD de COMPUTAEX, cuenta con procesadores x86\_64 de última generación, mayor cantidad de memoria RAM de alta velocidad y nuevos servidores de memoria compartida, superando la capacidad de LUSITANIA II y III en potencia de cálculo. Los equipos estarán interconectados con dispositivos InfiniBand y Ethernet para proporcionar alta velocidad y baja latencia. También se incluirá un sistema de almacenamiento mejorado para aumentar la capacidad y la fiabilidad de los datos de cómputo. Todo esto mejorará la capacidad de cómputo del centro, permitiendo una mayor contribución a la investigación científica y tecnológica, e impulsando el procesamiento de datos y el aprendizaje automático.

Financiado con fondos de la Unión Europea, NextGeneration, el Ministerio de Ciencia e Innovación en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Convocatoria del año 2021 del procedimiento para la concesión de ayudas para la adquisición de equipamiento científico-técnico, correspondientes al Subprograma Estatal de Infraestructuras de Investigación y Equipamiento Científico-Técnico del Programa Estatal de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico del Sistema de I+D+i, en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2020.



### **DETECCIÓN DE ATAQUES MEDIANTE TÉCNICAS SIDE-CHANNEL Y DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN ENTORNOS IOT (DASIA-IOT).**

La eclosión de la tecnología Internet de las cosas ha derivado en el desarrollo de múltiples aplicaciones en muchos y diversos campos. Las posibilidades brindadas por esta tecnología, en combinación con las tecnologías de comunicación inalámbricas modernas, permiten obtener datos de diversos dispositivos en tiempo real y habilitan una toma de decisiones mejor informada. El objetivo de este proyecto es mejorar la seguridad de los dispositivos IoT mediante la implementación de un sistema de detección de intrusos (IDS), basado en la monitorización de su consumo eléctrico y la aplicación de técnicas de aprendizaje automático.

Proyecto financiado por la Unión Europea, NextGeneration, Ministerio de Trabajo y Economía Social, Junta de Extremadura y SEXPE en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Programa Investigo. Decreto 137/2021, de 15 de diciembre, por el que se establecen las bases reguladoras para la concesión de subvenciones destinadas a la financiación de los programas de empleo.



## ENTORNO SOFTWARE PARA EL DESARROLLO DE CÓDIGOS DE PROGRAMACIÓN EFICIENTES EN CENTROS DE SUPERCOMPUTACIÓN (EFIHPC).

El proyecto se centra en la escritura de códigos más eficientes y persigue que los usuarios puedan aumentar de forma significativa el rendimiento de sus programas, reduciendo los tiempos de ejecución (y en consecuencia se posibilite también una reducción del consumo energético), gracias a la aplicación de un conjunto de técnicas software. De este modo, se contribuirá además a que los programadores sean conscientes del notable impacto que la aplicación de ciertas técnicas, en pequeños y simples fragmentos de sus códigos, puede tener sobre la eficiencia. Se pretende que comprendan el importante impacto que la utilización de ciertas técnicas puede tener en el rendimiento final de sus aplicaciones, especialmente en aquellas que están en continua ejecución o bien consumen un número considerablemente elevado de horas de CPU.

Proyecto financiado por la Unión Europea, NextGeneration, Ministerio de Trabajo y Economía Social, Junta de Extremadura y SEXPE en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Programa Investigo. Decreto 137/2021, de 15 de diciembre, por el que se establecen las bases reguladoras para la concesión de subvenciones destinadas a la financiación de los programas de empleo.



## QUANTUM CIRCUIT SIMULATOR AS A SERVICE ON LUSITANIA III (QCS-LUSITANIA).

La computación cuántica está atrayendo el interés de una gran parte de la comunidad científica y de la industria por las múltiples aplicaciones que tiene para atacar aquellos problemas a los que la computación clásica no proporciona una solución satisfactoria. Todavía los computadores cuánticos reales disponibles son pocos y, en consecuencia, el acceso a ellos es muy costoso. En este sentido, la posibilidad de acceder a recursos de simulación se está convirtiendo en un recurso clave para los equipos científicos de diversas áreas como la Salud, Biología o Ingeniería.

El propósito de este proyecto es implementar un simulador de circuitos cuánticos en el supercomputador LUSITANIA III, lo que permitiría proporcionar servicios avanzados de simulación y facilitar acceso a estos servicios.

El proyecto está financiado por la Unión Europea, NextGeneration, Ministerio de Trabajo y Economía Social, Junta de Extremadura y SEXPE en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Programa Investigo. Decreto 137/2021, de 15 de diciembre, por el que se establecen las bases reguladoras para la concesión de subvenciones destinadas a la financiación de los programas de empleo.



## ANEMOI2: MODELO PREDICTIVO DE PRODUCTIVIDAD Y OPERATIVIDAD DE PARQUES EÓLICOS.

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

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

Proyecto cofinanciado por la Junta de Extremadura, Consejería de Educación y Empleo-SEXPE y el Fondo Social Europeo, a través de la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la Comunidad Autónoma de Extremadura, modificado por el Decreto 18/2018, de 6 de febrero, y de Resolución de 22 de julio de 2021, por la que se aprueba la convocatoria de las mismas correspondientes al ejercicio 2021-2022. (DOE número 149, de 4 de agosto de 2021).



### **EXQNET (EXTREMADURA QUANTUM NETWORK).**

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

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



### **MEJORA, IMPLEMENTACIÓN E IMPLANTACIÓN DE PLATAFORMA DE COMUNICACIÓN DIGITAL Y E-LEARNING EN MOODLE.**

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

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



## **MODERNIZACIÓN DE LA INFRAESTRUCTURA DE LUSITANIA PARA UNA INTELIGENCIA ARTIFICIAL COMPETITIVA (MILIAC).**

La inteligencia artificial es la capacidad de un sistema informático de imitar funciones cognitivas humanas como el aprendizaje o la solución de problemas, utilizando como base las matemáticas y la lógica. Los sistemas basados en IA hacen predicciones o realizan acciones basándose en los patrones identificados en los datos disponibles y poseen la capacidad de aprender de sus errores para ser más precisos. En el caso de COMPUTAEX se hace necesario actualizar la infraestructura de inteligencia artificial, así como prepararla y configurarla con el fin de facilitar la integración del equipamiento a incorporar, Mare-Nostrum-IV y LUSITANIA IV. También es prioritario potenciar la capacitación del personal en inteligencia artificial y en sistemas de almacenamiento como elemento clave para la prestación del mejor servicio posible.

Una vez estén disponibles los servicios de IA, y se hayan adquirido los conocimientos necesarios para su adecuada prestación, se propone realizar múltiples acciones de difusión como la participación en eventos de distinta índole o la realización de acciones formativas dirigidas a potenciales usuarios (empresas, investigadores, etc.), en las que se expliquen los servicios prestados por COMPUTAEX (supercomputación, inteligencia artificial, etc.), el software y las herramientas disponibles y cómo hacer uso de ellos.

En el DOE n.º 67 de 10 de abril de 2023, se publicó el convenio por el que se formalizó la transferencia específica a favor de la Fundación Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura (COMPUTAEX) para la realización del proyecto “Desarrollo de Proyectos de Investigación en Supercomputación, Proyecto MILIAC” en el ejercicio 2023. El proyecto MILIAC fue aprobado por la Dirección General de Agenda Digital (Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital) de la Junta de Extremadura, en el marco del Programa 332A “Tecnologías de la Información y las Comunicaciones”, y cofinanciado en un 80% por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).



### 3. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN PARTICIPADOS O DIRIGIDOS POR COMPUTAEX

COMPUTAEX 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 COMPUTAEX durante el ejercicio 2023. 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.

#### **Modelling the NPC1-NPC2 protein-protein interaction using AlphaFold Multimer and Molecular dynamics simulations.**

Llabrés Prat, Aitor Valdivia. Universitat de Barcelona (UB).

Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: BCV-2022-3-0011. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

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

#### **Triphenylene-based molecules as Organic Spacers for tuning structure and electronic properties of 2D perovskites materials.**

Gregorio García Moreno. Universidad de Valladolid (UVA).

Ciencias de la Tierra.

[Cód. Proyecto: FI-2022-3-0008. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

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

#### **Theoretical prediction of the environmental impact of pesticides.**

Manuel Alcami, Maitreyi Robledo, Alicia Palacios Cañas, Yang, Cristina Díaz Blanco, Sergio Díaz-Tendero Victoria, Dariusz Piekarski, Antonio Pulgar. Universidad Autónoma de Madrid (UAM).  
Ciencias de la Tierra.

[Cód. Proyecto: QH-2022-3-0004. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

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

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

**Computational modelling of the lattice thermal conductivity of alloys with thermoelectric applications.**

José Javier Plata Ramos, Antonio M. Márquez Cruz, Javier Fernández Sanz, Julia Santana Andreo, Javier Amaya Suárez, Ernesto Blancas Jiménez, Pinku Nath, Elena Rodríguez Remesal. Universidad de Sevilla. Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: QHS-2022-3-0032. Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

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

**Segregation assessment in the manufacturing process of metal powder cored-wire.**

Elena Beatriz Martín Ortega, Alba Rois Gonzalez. Universidad de VIGO - CITMAGA. Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: IM-2023-1-0006. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

Cored wires, used as addition material in different steel and foundry industries, must contain specific concentrations of different metal powders with very different densities and particle sizes. Therefore, undesirable segregation occurs during the wire filling process, especially at the beginning of the production, making the first portion of the final manufactured cored wire unsuitable due to its high inhomogeneity.

This project proposes to use HPC numerical simulation to predict the segregation during the initial production stage of the cored wire using Discrete Element Models. First, the granular flow in simplified configurations will be studied numerically and experimentally to calibrate the material parameters involved in the model. Then, the simulation of the industrial initial filling process will be carried out and validated.

**Computational modelling of the lattice thermal conductivity of skutterudites under pressure.**

José Javier Plata Ramos, Antonio M. Márquez Cruz, Javier Fernández Sanz, Julia Santana Andreo, Javier Amaya Suárez, Ernesto Blancas Jiménez, Pinku Nath, Elena Rodríguez Remesal. Universidad de Sevilla (US). Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: QHS-2023-1-0028. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

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

### **3D solar magneto-convection simulations extended to the corona with the MANCHA3D code.**

Ana María Navarro Noguera. Instituto de Astrofísica de Canarias.

Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: AECT-2023-2-0030. Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

The aim of our research project is to investigate via numerical modeling one of the fundamental unsolved problems in solar physics - the heating mechanisms of the solar chromosphere. It will be done by a thorough examination of the most important non-ideal effects derived by the low ionization degree of the plasma using the single and two-fluid (plasma-neutral) frameworks.

As an intermediate step, here we perform 3D realistic magneto-convection models extended to the corona in the one-fluid approximation. For the first time, we will examine the chromospheric heating due to joint action of the thermal conduction and ambipolar diffusion in a large span of magnetic field topologies and field strengths in a self-consistent coupled model from the upper convection zone to the solar corona.

### **Computational modelling of the effect of pressure on the electronic transport properties of skutterudites.**

José Javier Plata Ramos, Antonio M. Márquez Cruz, Javier Fernández Sanz, Julia Santana Andreo, Javier Amaya Suárez, Ernesto Blancas Jiménez, Pinku Nath, Elena Rodríguez Remesal. Universidad de Sevilla (US). Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: QHS-2023-2-0025. Proyecto soportado en CénitS procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

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

### **Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides.**

José Ángel Silva Guillen, Víctor Manuel García Suárez, Pablo Alonso González, Javier Martín Sánchez. Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia). Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: FI-2023-3-0013. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

Vanadium pentoxide is a van der Waals material that recently has been found extremely promising for manipulating light at the nanoscale. Since it exhibits phonon-polaritons, it has brought a lot of excitement to the nano-optics community. In addition the properties can be tuned through cation intercalation.

In the proposed Activity we will study the structure, phonon dispersions, electronic, optical and magnetic properties of  $V_2O_5$  and  $NaV_2O_5$  in bulk and flakes at different temperatures in order to understand key aspects to control the optical emission properties in van der Waals materials.

The work will be carried out in close collaboration with experimental partners.

### **Harnessing Thermoelectric Potential of Fe-Ni Skutterudites: A Combined Experimental and Theoretical Approach.**

José Javier Plata Ramos, Antonio M. Márquez Cruz, Javier Fernández Sanz, Julia Santana Andreo, Javier Amaya Suárez, Ernesto Blancas Jiménez, Pinku Nath, Elena Rodríguez Remesal. Universidad de Sevilla (US).

Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: QHS-2023-3-0026. Proyecto soportado en COMPUTAEX procedente de la Red Española de Supercomputación (RES)].

In our society, more than 66% of generated energy is wasted, most of it as heat. Thermoelectric, TE, devices stand as the most promising technology to recover part of this wasted heat. Traditionally, TE material efficiency is measured by the figure of merit,  $zT$ . Reducing lattice thermal conductivity,  $\kappa_l$ , is probably the most straightforward approach to enhance  $zT$ .

While most of these models are designed to predict directly one of the quantities that are related to  $zT$ , the biggest challenge is to establish connections between real space (atomic structure, chemical composition and microstructure) and reciprocal space properties (transport properties and  $zT$ ).

Our goal is to connect the variables that can be controlled during the design, synthesis and processing of a TE material with their final transport properties and efficiency.

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

José Agustín García, Guadalupe Saenz García, Francisco Javier Acero Díaz y María Cruz Gallego Herrezuelo Universidad de Extremadura (UEX).

Ciencias de la Tierra.

[Cód. Proyecto: WACCM]

Objetivos:

Realizar una serie de integraciones climáticas con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model); Este modelo tiene la particularidad de incorporar multitud de especies químicas de interés meteorológico dentro del proceso de integración, muy interesantes desde el punto de vista de la estratosfera. La idea es analizar el papel que juega la estratosfera en el estudio del cambio climático; Estudios similares a los que se llevan a cabo en el supercomputador Lusitania de COMPUTAEX se están realizando en el supercomputador MareNostrum del BSC (Centro de Supercomputación de Barcelona) y en el supercomputador FINIS TERRAE del CESGA (Centro de Supercomputación de Galicia). Por ello, otro objetivo fundamental es la coordinación entre los grupos de investigación que llevan a cabo estos experimentos.

Objetivos alcanzados:

Se han realizado dos simulaciones del clima, una con el modelo WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) y la otra con el modelo CESM (Community earth system model). La primera se ha realizado para complementar una realizada el año anterior pero con un forzamiento externo de  $8.5 \text{ W/m}^2$  en 2100. La segunda se ha realizado para poder realizar una simulación del siglo XXI en España mediante el uso de un modelo global y un modelo regional; Se está trabajando también en la simulación mediante un modelo regional. Esta segunda integración se espera que será útil entre otros proyectos, al proyecto RITECA, en el que se encuentra involucrado el propio COMPUTAEX; Se puso a punto y se realizó una simulación del clima del siglo XX (1953-2006) mediante el modelo WACCM versión 3.5.48. Así mismo, se realizó una integración de un periodo similar (1955-2005) mediante el modelo CESM (Climate Earth System Model); La idea de este proyecto es analizar la posibilidad de la realización de simulaciones climáticas mediante el supercomputador LUSITANIA. Los modelos anteriores son modelos desarrollados en el NCAR (National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, USA) y están especialmente adaptados para uso en sus ordenadores; Resulta del máximo interés conocer si estos programas, convenientemente compilados, se pueden ejecutar en otro tipo de máquinas y si los resultados obtenidos en éstas son comparables a los obtenidos en el NCAR; Un análisis de los datos obtenidos indica que, efectivamente, los resultados son comparables a los obtenidos en los ordenadores del NCAR.

**Estudio teórico de la reacción de cicloadición 1,3-dipolar de compuestos mesoiónicos (1,3-dipolo) frente a dipolarófilos (dip. Acetilenicos, olefinas heterocumulenos, azocompuestos, aldehidos.**

Juan García. Grupo de investigación QUOREX, Universidad de Extremadura (UEX).  
[Cód. Proyecto: QUOREX]

La reacción de cicloadición 1,3-dipolar se introdujo en 1960 como un método general de síntesis de anillos de cinco miembros y, en la actualidad, constituye una herramienta muy útil para la síntesis de sistemas heterocíclicos. En este sentido, el objetivo principal de la presente Tesis Doctoral está dirigido a sintetizar una serie de heterociclos mesoiónicos (entre ellos tioisomünchnonas) de estructura rígida. Estos sistemas se comportan como 1,3-dipolos frente a dipolarófilos, dando lugar a heterociclos complejos ricos en heteroátomos que son muy difíciles de obtener a través de otras rutas sintéticas. El otro objetivo principal de esta Tesis Doctoral fue llevar a cabo el estudio teórico de estas reacciones de cicloadición 1,3-dipolar para estudiar los efectos estereoelectrónicos que controlan estos procesos.

**Cálculos AB-Initio.**

Javier Sánchez Montero, Pedro L. de Andrés. Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja. CSIC.  
Ciencias de la Tierra.  
[Cód. Proyecto: AB-Initio]

Objetivos:

Existe evidencia de la variación de parámetros mecánicos, pero la fragilización por hidrógeno no está explicada teóricamente. En este sentido, varios modelos tratan de explicar la propagación de la fisura por la presencia en el metal de átomos de hidrógeno; Generalmente se asume que el hidrógeno se genera electroquímicamente en la superficie del material y difunde hasta la zona en proceso de fractura. Para explicar el proceso por el cual el hidrógeno fragiliza el material existen varias teorías: Cambio estructural o de fase producido por el hidrógeno; Plastificación producida por el Hidrógeno o hydrogen-enhanced localized plasticity (HELP); Reducción de la energía cohesiva por el efecto del hidrógeno.

Metodología:

Los cálculos de Ab-Initio o por Primeros Principios se basan en el formalismo del Funcional de la Densidad, la teoría de pseudo-potenciales y el teorema de Bloch. Se va a definir una base de ondas planas para representar las funciones de onda de Kohm-Sham.

En esta aproximación, la precisión de los cálculos viene determinada básicamente por dos parámetros: la máxima energía de corte ("cut off"); El número de puntos usados en espacio recíproco para representar las funciones de onda ("puntos k").

El problema del canje y la correlación electrónica se representa a través de un funcional de canje y correlación aproximado calculado con correcciones de gradientes y se utilizarán pseudopotenciales ultra-suaves.

Para resolver auto-consistentemente este problema, se empleará el código de ordenador CASTEP, donde se implementará un método iterativo basado en las ideas de Carr y Parrinello.

En una segunda aproximación se pretenden realizar cálculos de Dinámica Molecular Ab-Initio empleando el mismo programa CASTEP.

En estos cálculos se considerará la aproximación de Born-Oppenheimer que aplica los principios de la mecánica clásica a los iones. Las funciones de onda de Khon-Sham se desarrollarán en una base de ondas planas.

### **Glicoconjugados basados en el esqueleto de aminopoliol. Estructura agregación y modificación superficial.**

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

Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: QUOREX]

QUOREX está integrado por docentes e investigadores cuyas líneas de trabajo se encuentran financiadas a través de proyectos nacionales y regionales. El grupo trabaja en las siguientes líneas de investigación, en las cuáles la supercomputación es una herramienta importante: 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; y modelización de las interacciones de glicolípidos y sustancias anfipáticas derivadas de carbohidratos con superficies metálicas. Entre los objetivos alcanzados en este proyecto destacan los siguientes:

- 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, aminopoliololes 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 kcal.mol<sup>-1</sup>). A través de un 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 encaja con los resultados experimentales obtenidos por difracción de rayos X de monocristal.
- Se han 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. El mecanismo mediante el que las cápsulas moleculares aceleran las reacciones es tema de debate. 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. 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.

#### **Proyecto InteliPAC.**

Adolfo Lozano Tello. Universidad de Extremadura (UEx).

[Cód. Proyecto: InteliPAC]

En Extremadura, la ayuda de la Política Agraria Común (PAC) tiene un presupuesto de unos 500 millones de euros para los 41,633 km<sup>2</sup> que tiene como extensión la comunidad autónoma.

Hacer visitas al terreno para comprobar el cultivo es extremadamente costoso, y sólo es posible hacer inspección a un pequeño porcentaje de las explotaciones con cultivos declarados.

Para solucionar este problema, un equipo multidisciplinar de investigadores de la Universidad de Extremadura, formado por Ingenieros Informáticos, Ingenieros en Cartografía y Fotogrametría e Ingenieros Agrónomos viene desarrollando desde 2019 un sistema inteligente de detección de cultivos a raíz de un convenio con la Consejería de Medio Ambiente y Rural, Políticas Agrarias y Territorio, llamado INTELIPAC.

El sistema se basa en el aprendizaje de patrones mediante redes neuronales, y se está aplicando, entre otros usos, a la detección de más de 79 tipos de cultivos. Para el aprendizaje se toman los recintos de ayuda de la PAC de los años 2017, 2018, 2019 y 2020, y se han descargado para cada parcela, las imágenes de los satélites Sentinel-2 (que pasan aproximadamente cada 5 días) en estos años. El sistema software se basa en el análisis de la evolución anual de cada píxel del interior del recinto de cultivo, tratando cada zona de la parcela. Para el aprendizaje del patrón de tabaco, por ejemplo, se han usado unos 3 millones de píxeles. Con esta gran cantidad de información se obtienen unos extraordinarios porcentajes de acierto con el modelo conseguido, con valores superiores al 97%.

Con los patrones aprendidos de estos cultivos, y con el enfoque de tratamiento de las imágenes de satélite por píxel, se consigue que para las declaraciones gráficas de próximos años se pueda detectar de forma automática la coincidencia de la parcela con el patrón de cultivo declarado, evitando los costosos controles sobre el terreno.

### **Galemys: Alineamiento, ensamblado y secuenciación del genoma del desmán de los Pirineos.**

Juan Luis García Zapata, Universidad de Extremadura (UEx)

Ciencias de la Vida.

[Cód. Proyecto: Galemys]

Se propone realizar la secuenciación, alineamiento y construcción de una base de datos genómica a partir de extracción de ADN completo del Desmán de los Pirineos (*Galemys pyrenaicus*), así como desarrollar la infraestructura bioinformática necesaria para su comparativa con otros genomas pertenecientes a especies de micromamíferos, aplicando metodologías de Deep Learning y Aprendizaje por Refuerzo.

Las técnicas genómicas de construcción de la base de datos, de procesamiento y comparación demandan tanto gran capacidad de almacenamiento como gran capacidad de cómputo, tanto por volumen de datos como por el uso de algoritmos estadísticos y combinatorios específicos de este campo, lo que implica el uso de instalaciones de altas prestaciones (High performance computing, HPC), así como metodologías de computación científica específicas en el campo de la bioinformática.

Se cuenta con el apoyo de un equipo de investigadores que ha sido integrante de diversas colaboraciones con la Administración para usar métodos moleculares para la identificación de la especie desmán, evaluación de su variabilidad genética e identificación individual, incluyendo la diferenciación de otras especies insectívoras que comparten hábitat. Otra parte del equipo proponente, de base tecnológica, aporta experiencia en computación científica así como también en el análisis para optimización del rendimiento de plataformas HPC y el uso de GPU (graphics processing unit) en aprendizaje profundo y otras técnicas de inteligencia artificial. En particular para el proyecto se pretende no solo el estudio del genoma del desmán junto con el desarrollo de pipelines de análisis genómico de esta especie, sino también la aplicación de herramientas basadas en técnicas de Deep Learning en la comparativa de genomas, que hasta ahora venía haciéndose mediante métodos estadísticos clásicos.

### **Estudios computacionales en reacciones multicomponentes.**

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

Ciencias de la Tierra.

[Cód. Proyecto: RMCI]

Dada la gran demanda actual de productos con finalidades biomédicas, la síntesis de compuestos bioactivos supone un reto para la investigación en química orgánica y química médica. El grupo de investigación que desarrolla el proyecto está interesado en el desarrollo de nuevas reacciones multicomponente de isonitrilos (RMCI) para la síntesis de compuestos de interés biológico. En estas reacciones se combinan simultáneamente 3 o más reactivos con una gran eficiencia atómica, para dar lugar a un nuevo producto que incluye la mayoría de los átomos de partida. Ejemplos clásicos de RMCI son las condensaciones de Ugi y Passerini, que han encontrado múltiples aplicaciones en la industria farmacéutica. Estas reacciones están gobernadas por una serie de equilibrios reversibles e irreversibles, que pueden verse afectados por sutiles modificaciones en los reactivos de partida o en las condiciones de reacción. Los métodos computacionales son útiles para explicar y fundamentar los resultados experimentales, así como para hacer previsiones con un alto grado de fiabilidad.

El objetivo principal es el estudio teórico de nuevas RMCI y, en concreto, el estudio computacional de dos tipos de reacciones: reacciones tipo Ugi con enoles y procesos tándem de cicloadición de isonitrilos para la obtención de aminas aromáticas. El proyecto consta de una parte de cálculos computacionales, que se llevarán a cabo utilizando el programa Gaussian y constarán de tres etapas diferenciadas: una primera fase de estudio será la localización de los mínimos de energía, frecuencias, cargas, etc. de todos los reactivos implicados en las reacciones, y de los productos a los que se llega; en una segunda fase mucho más compleja, se elaborará un perfil energético completo de la reacción, calculando estados de transición, orbitales moleculares y estudiando los posibles caminos que pueden llevar a los productos; en una tercera etapa se racionalizarán los datos obtenidos para un entendimiento y conexión entre los resultados experimentales y los calculados o bien, haremos uso de la información obtenida para el diseño de nuevas estrategias de síntesis.

## 4. RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN

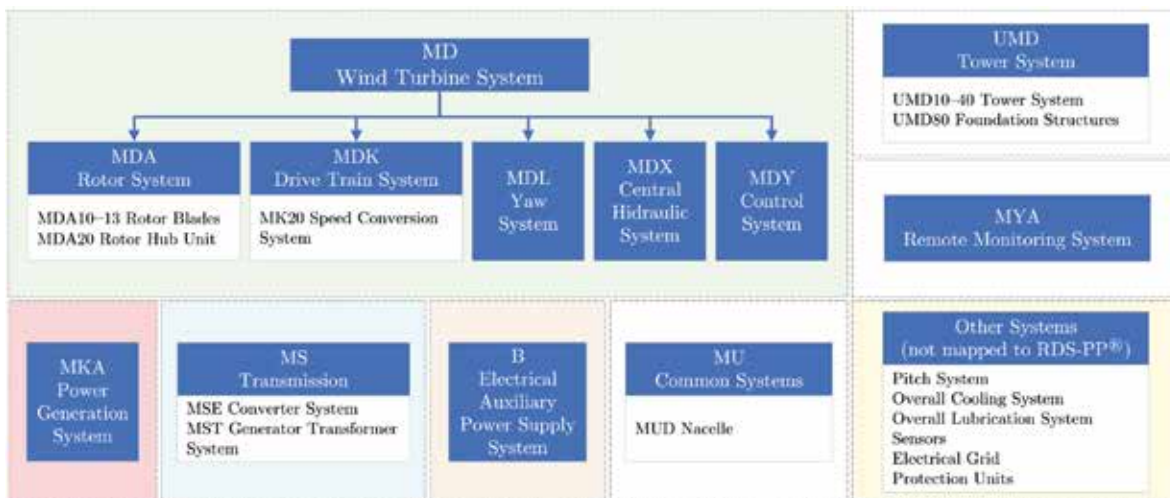
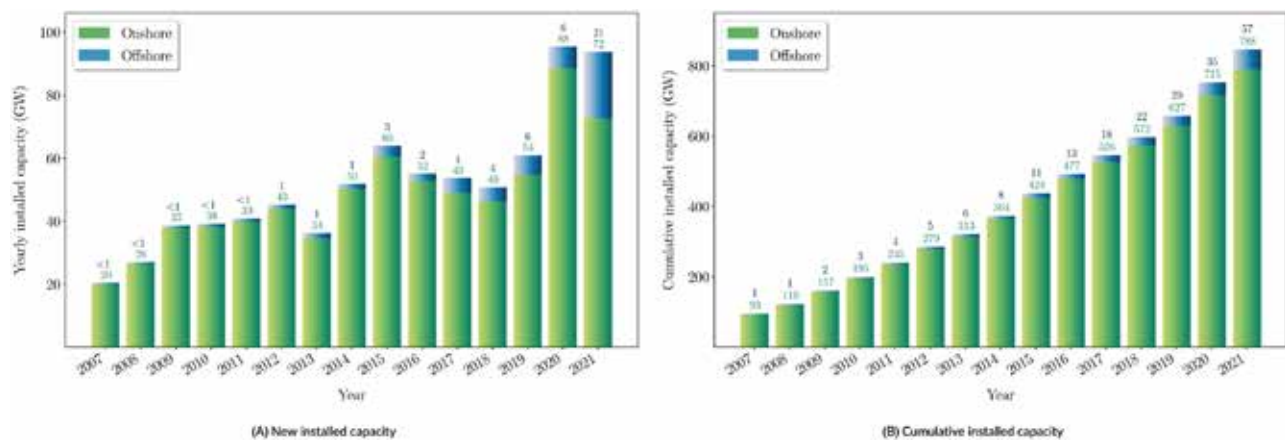
La obtención de resultados de investigación es esencial para un centro de investigación e innovación tecnológica como COMPUTAEX, que permite a un destacado número de investigadores e innovadores acometer sus actividades. Muchos de estos proyectos alcanzan una notable visibilidad con publicaciones de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

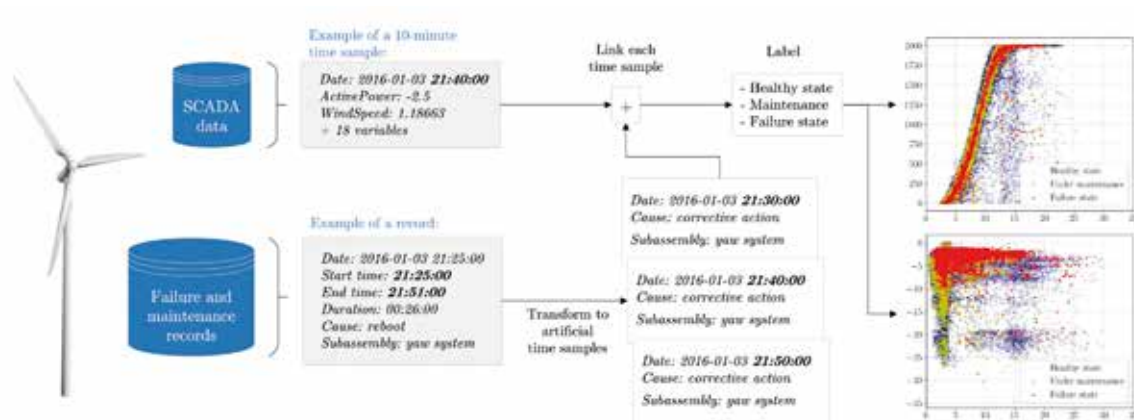
Esta sección presenta los resultados más destacables que han sido publicados en congresos y revistas durante el año 2023.

### PUBLICACIONES

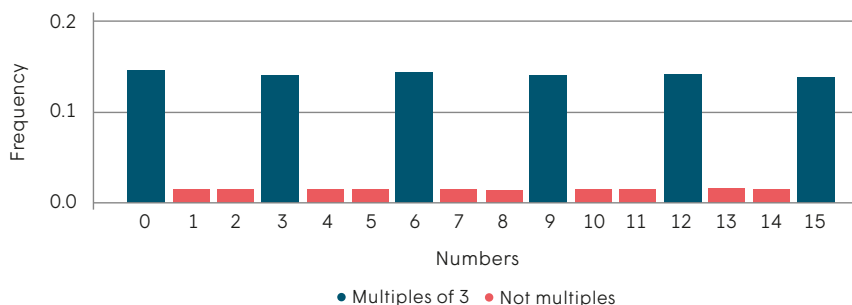
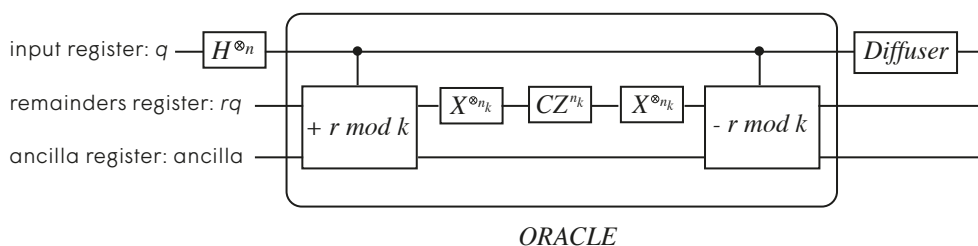
**Reliability of onshore wind turbines based on linking SCADA data to failure and maintenance records: a case study in central Spain.**

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





**Operating with Quantum Integers: an Efficient Multiples of Oracle**  
 Sánchez-Rivero, J., Talaván, D., García-Alonso, J., Ruiz-Cortés, A., & Murillo, J. M. (2023).  
[http://dx.doi.org/10.1007/978-3-031-45728-9\\_7](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-031-45728-9_7)



**Case Study on the Moving of Patients Using Blockchains' Federation**  
 Dulce, E., Rojo, J., Hernández, J., Murillo, J.M., Hurtado Alegría, J.A., García-Alonso, J. (2023). In: Moguel, E., de Pinho, L.G., Fonseca, C. (eds) Gerontechnology V. IWoG 2022. Lecture Notes in Bioengineering. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-29067-1\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-031-29067-1_1).

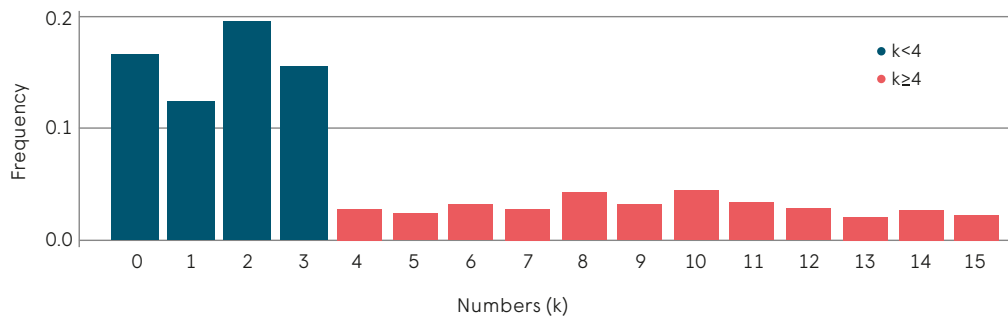
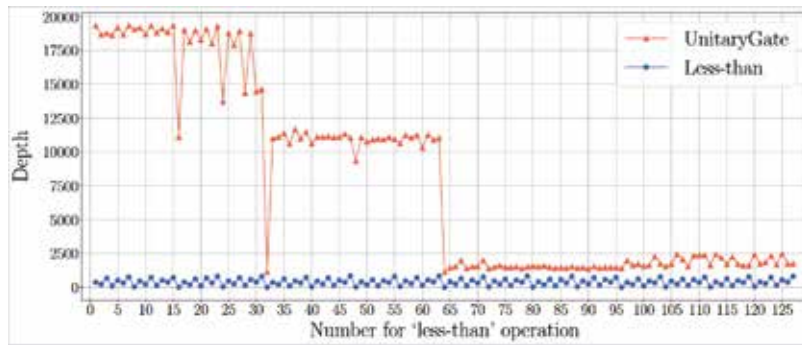
**IoT System for Occupational Risks Prevention at a WWTP.**  
 Sergio Laso, Daniel Flores-Martin, Juan Pedro Cortés-Pérez, Miguel Soriano Barroso, Alfonso Cortés-Pérez, Javier Berrocal & Juan M. Murillo (2023). Service-Oriented Computing – ICSC 2022 Workshops. ICSC 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13821. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-26507-5\\_39](https://doi.org/10.1007/978-3-031-26507-5_39)

**Using Open API for the Development of Hybrid Classical-Quantum Services.**

Romero-Álvarez, J., Alvarado-Valiente, J., Moguel, E., García-Alonso, J., Murillo, J.M. (2023). Service-Oriented Computing – ICSOC 2022 Workshops. ICSOC 2022. Lecture Notes in Computer Science, vol 13821. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-26507-5\\_34](https://doi.org/10.1007/978-3-031-26507-5_34).

**Automatic Generation of an Efficient Less-Than Oracle for Quantum Amplitude Amplification.**

Sánchez-Rivero, J., Talaván, D., García-Alonso, J., Ruiz-Cortés, A., & Murillo, J. M. (2023). 2023 IEEE/ACM Workshop on Quantum Software Engineering (Q-SE). <https://doi.ieeecomputersociety.org/10.1109/Q-SE59154.2023.00011>

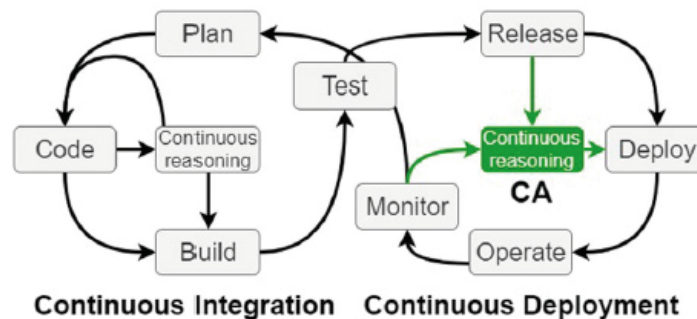


**Knowledge Sharing in Proactive WoT Multi-environment Models.**

Rentero-Trejo, R., Galán-Jiménez, J., García-Alonso, J., Berrocal, J., Murillo, J.M. (2023). Current Trends in Web Engineering. ICWE 2022. Communications in Computer and Information Science, vol 1668. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-25380-5\\_4](https://doi.org/10.1007/978-3-031-25380-5_4).

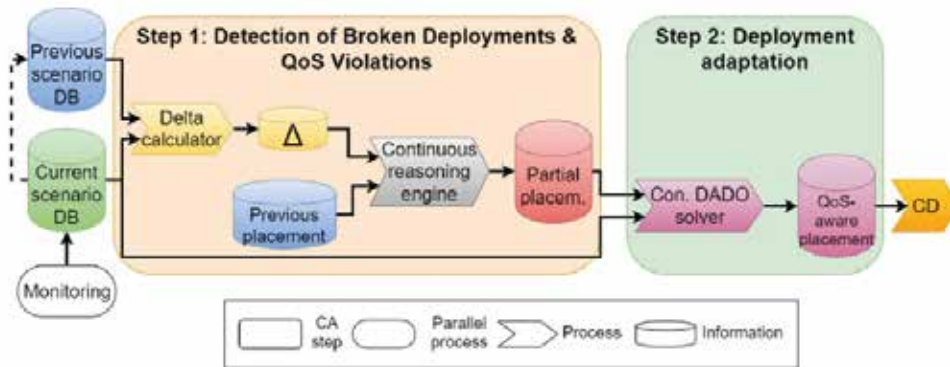
**Continuous QoS-aware adaptation of Cloud-IoT application placements.**

JL Herrera González, JJ Berrocal Olmeda, S Forti, A Brogi, JM Murillo Rodríguez (2023). Computing (2023). <https://doi.org/10.1007/s00607-023-01153-1> ..



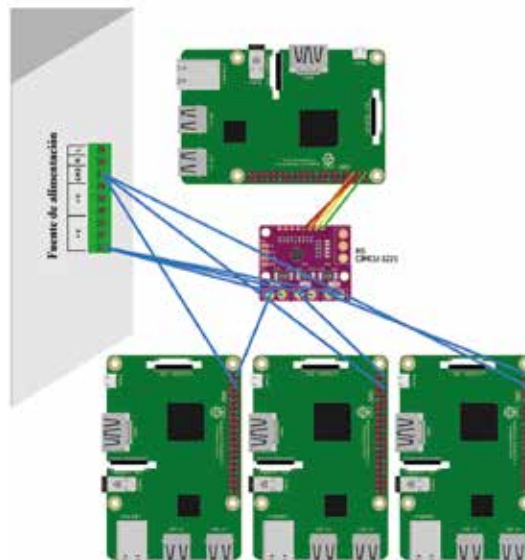
**Paving the way to the synthesis of PAHs in dark molecular clouds: The formation of cyclopentadienyl radical (c-C5H5).**

de la Concepción, J. G., Jiménez-Serra, I., Rivilla, V. M., Colzi, L., & Martín-Pintado, J. (2023). *Astronomy & Astrophysics*, 673, A118. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202345854>.



**Detección de ataques en entornos IoT mediante técnicas de canal lateral y de Inteligencia Artificial.**

Prieto, F. L., Rivero, J. S., Cañas, C. C., Lindo, A. C., & Sánchez, J. L. G. (2023). In *Actas de las VIII Jornadas Nacionales de Investigación en Ciberseguridad: Vigo, 21 a 23 de junio de 2023* (pp. 299-304). Universidad de Vigo. ISBN: 978-84-8158-970-2.



**Entorno software para la mejora del rendimiento del código mediante la aplicación de técnicas de programación eficientes.**

Cancho-Casado, J., Baños-González, M., Corral-García, J.. In: Durán Toro, A. (ed.) *Actas de las XXVII Jornadas de Ingeniería del Software y Bases de Datos (JISBD 2023)*. Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JISBD/2023/1613>.

**Evolucionando un Emulador del Cloud Continuum a un Digital Twin.**

Laso, S., Martín, L., Herrera, J. L., Galán-Jiménez, J., Berrocal, J., Murillo, J. M. . In: Durán Toro, A. (ed.) *Actas de las XXVII Jornadas de Ingeniería del Software y Bases de Datos (JISBD 2023)*. Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JISBD/2023/1506>.

#### **QoS-Aware Fog Node Placement for Intensive IoT Applications in SDN-Fog Scenarios.**

Herrera, J. L., Galán-Jiménez, J., Foschini, L., Bellavista, P., Berrocal, J., Murillo Rodríguez, J. M.. In: Durán Toro, A. (ed.) Actas de las XXVII Jornadas de Ingeniería del Software y Bases de Datos (JISBD 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JISBD/2023/2912>.

#### **Servicios Cuánticos: Un proceso de generación y despliegue orientado a la calidad.**

Alvarado-Valiente, J., Romero-Álvarez, J., Díaz, A., Rodríguez, M., García-Rodríguez, I., García-Alonso, J., Moguel, E., Murillo Rodríguez, J. M.. In: Durán Toro, A. (ed.) Actas de las XXVII Jornadas de Ingeniería del Software y Bases de Datos (JISBD 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JISBD/2023/1124>

#### **Continuous QoS-Aware Adaptation of Cloud-IoT Application Placements.**

Herrera, J. L., Berrocal, J., Forti, S., Brogi, A., Murillo Rodríguez, J. M.. In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/8479>.

#### **Diseño de Servicios Cuánticos a través de la Especificación AsyncAPI.**

Casco Seco, J., Alvarado-Valiente, J., Romero-Álvarez, J., Moguel, E., García-Alonso, J., Canal, C., Murillo, J. M.. In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/8473>.

#### **Elastic Data Analytics for the Cloud-to-Things Continuum.**

Laso, S., Berrocal, J., Fernández, P., García, J. M., García-Alonso, J., Murillo Rodríguez, J. M., Dustdar, S. . In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/945>.

#### **Optimización del tiempo de respuesta en arquitecturas de microservicios mediante algoritmos bioinspirados.**

Moya, A., Herrera, J. L., Berrocal, J., Murillo Rodríguez, J. M., Navarro, E.. In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/7025>.

#### **Ingeniería de servicios cuánticos: desarrollo, calidad, pruebas y seguridad (Proyecto Q-SERV).**

Moguel, E., García-Alonso, J., Terres, E., Arias, D., García Bringas, P., Rodríguez Monje, M., Oviedo Lama, J. R., García Rodríguez de Guzmán, I., Murillo, J. M.. In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/2293>.

#### **Quantum Service-Oriented Computing: current landscape and challenges.**

Moguel, E., Rojo, J., Berrocal, J., García-Alonso, J., Murillo, J. M.. In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/4296>.

#### **Towards Dynamic and Heterogeneous Social IoT Environments.**

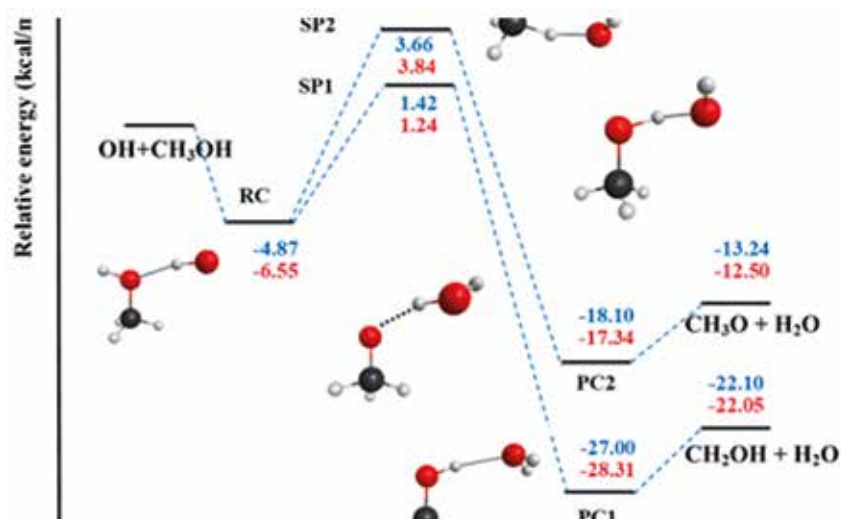
Flores-Martin, D., Berrocal, J., García-Alonso, J., Murillo Rodríguez, J. M.. In: Berrocal, J. (ed.) Actas de las XVIII Jornadas de Ciencia e Ingeniería de Servicios (JCIS 2023). Sistedes (2023). <https://hdl.handle.net/11705/JCIS/2023/8237>.

#### **In silico modeling of inorganic thermoelectric materials.**

Plata, J. J., Nath, P., Sanz, J. F., & Márquez, A. (2023). <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823144-9.00133-3>.

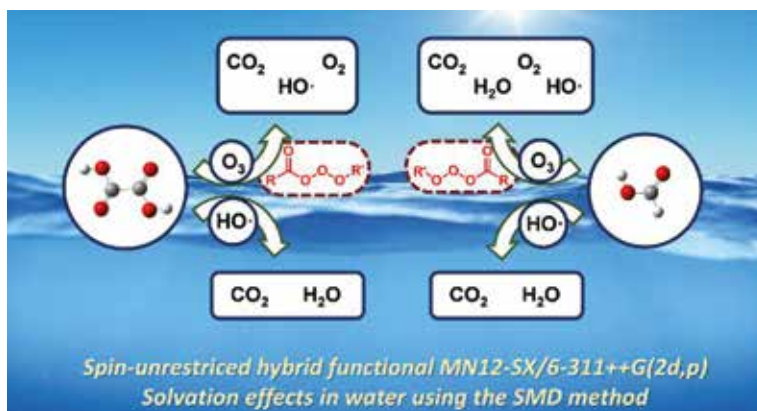
### Analytical potential energy surface and dynamics for the OH+ CH<sub>3</sub>OH reaction.

Espinosa-García, J., & Rangel, C. (2023). The Journal of Chemical Physics, 158(5), 054302. <https://doi.org/10.1063/5.0137372>.



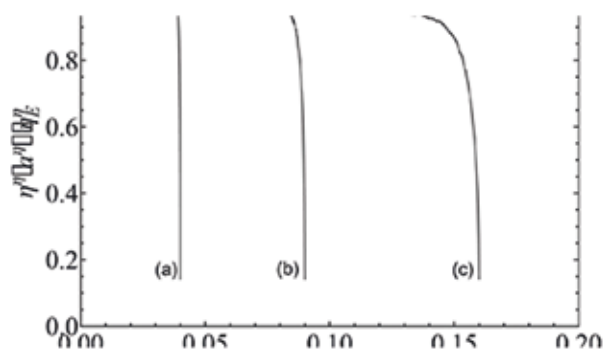
### Mechanistic Insights into the Oxidative Degradation of Formic and Oxalic Acids with Ozone and OH Radical.

Beltrán, F. J., Chávez, A. M., Cintas, P., & Martínez, R. F. (2023). A Computational Rationale. The Journal of Physical Chemistry A, 127(6), 1491-1498. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c08091>



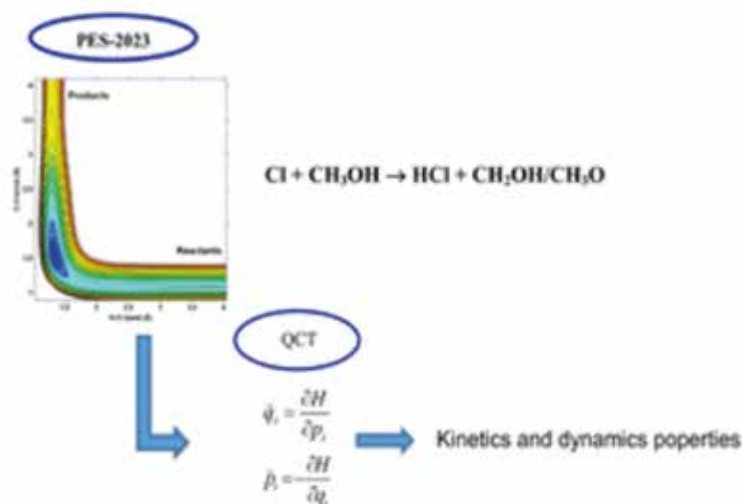
### Assessment of kinetic theories for moderately dense granular binary mixtures: Shear viscosity coefficient.

Chamorro, M. G., & Garzó, V. (2023). Physics of Fluids, 35(2), 027121. <https://doi.org/10.1063/5.0134408>



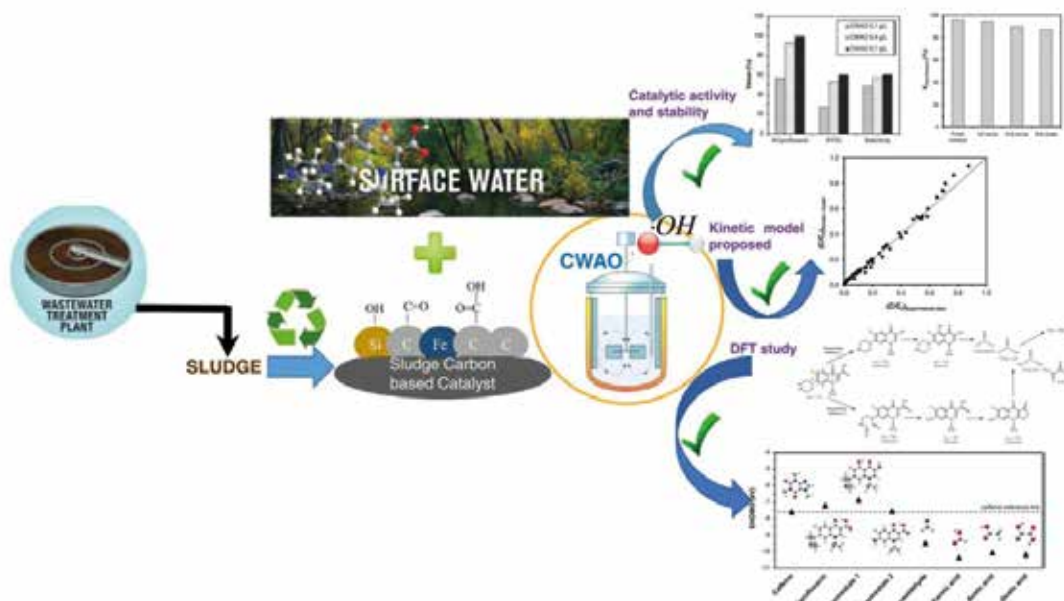
**Kinetics and dynamics study of the  $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{OH}$  reaction based on an analytical potential energy surface.**

Rangel, C., & Espinosa-García, J. (2023). *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25(15), 10678-10688. <https://doi.org/10.1039/D3CP00224A>.



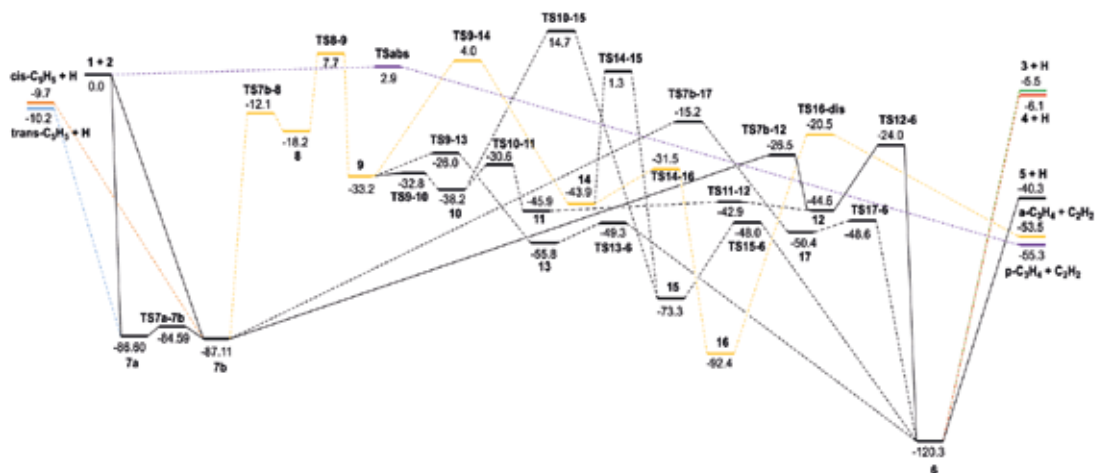
**Efficient removal of antibiotic ciprofloxacin by catalytic wet air oxidation using sewage sludge-based catalysts: Degradation mechanism by DFT studies.**

Gutiérrez-Sánchez, P., Álvarez-Torrellas, S., Larriba, M., Gil, M. V., Garrido-Zoido, J. M., & García, J. (2023). *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 11(2), 109344. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2023.109344>.



**Paving the way to the synthesis of PAHs in dark molecular clouds: The formation of cyclopentadienyl radical (c-C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>).**

de la Concepción, J. G., Jiménez-Serra, I., Rivilla, V. M., Colzi, L., & Martín-Pintado, J. (2023). *Astronomy & Astrophysics*, 673, A118. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202345854>.



**Revisiting Homochiral versus Heterochiral Interactions through a Long Detective Story of a Useful Azobis-Nitrile and Puzzling Racemate.**

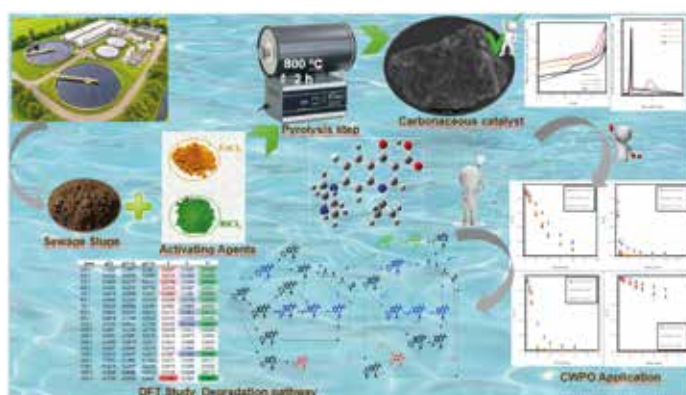
García de la Concepción, J., Flores-Jiménez, M., Cuccia, L. A., Light, M. E., Viedma, C., & Cintas, P. (2023). *Crystal Growth & Design*, 23(8), 5719-5733. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.3c00372>.



*Spontaneous resolution of radical initiator disentangled*  
*Complete crystal data for meso compound and enantiomers*  
*Homochiral domains favored*  
*Metadynamics simulations account for experimental results*

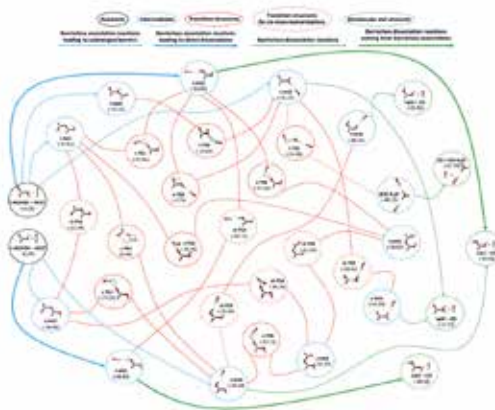
**Influence of transition metal-based activating agent on the properties and catalytic activity of sewage sludge-derived catalysts. Insights on mechanism, DFT calculation and degradation pathways.**

Gutiérrez-Sánchez, P., Álvarez-Torrellas, S., Larriba, M., Gil, M. V., Garrido-Zoido, J. M., & García, J. (2023). *Journal of Molecular Liquids*, 381, 121840. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121840>



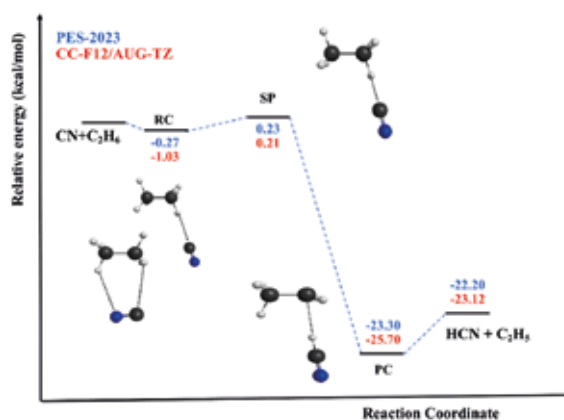
**A sequential acid-base mechanism in the interstellar medium: The emergence of cis-formic acid in dark molecular clouds.**

de la Concepción, J. G., Jiménez-Serra, I., Corchado, J. C., Molpeceres, G., Martínez-Henares, A., Rivilla, V. M., ... & Martín-Pintado, J. (2023). *Astronomy & Astrophysics*, 675, A109. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202243966>



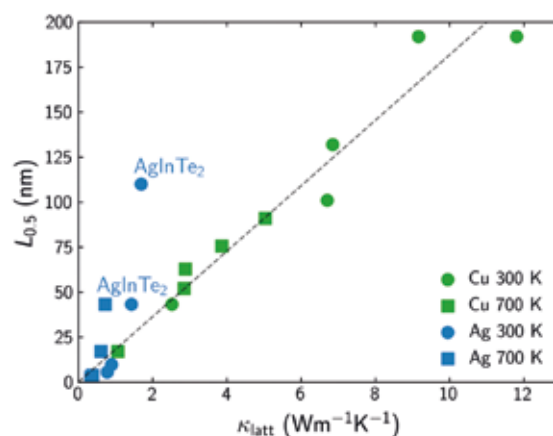
**The CN+ C2H6 reaction. Dynamics study based on an analytical full-dimensional potential energy surface.**

Espinosa-García, J., & Rangel, C. (2023). <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-pr8jn>.



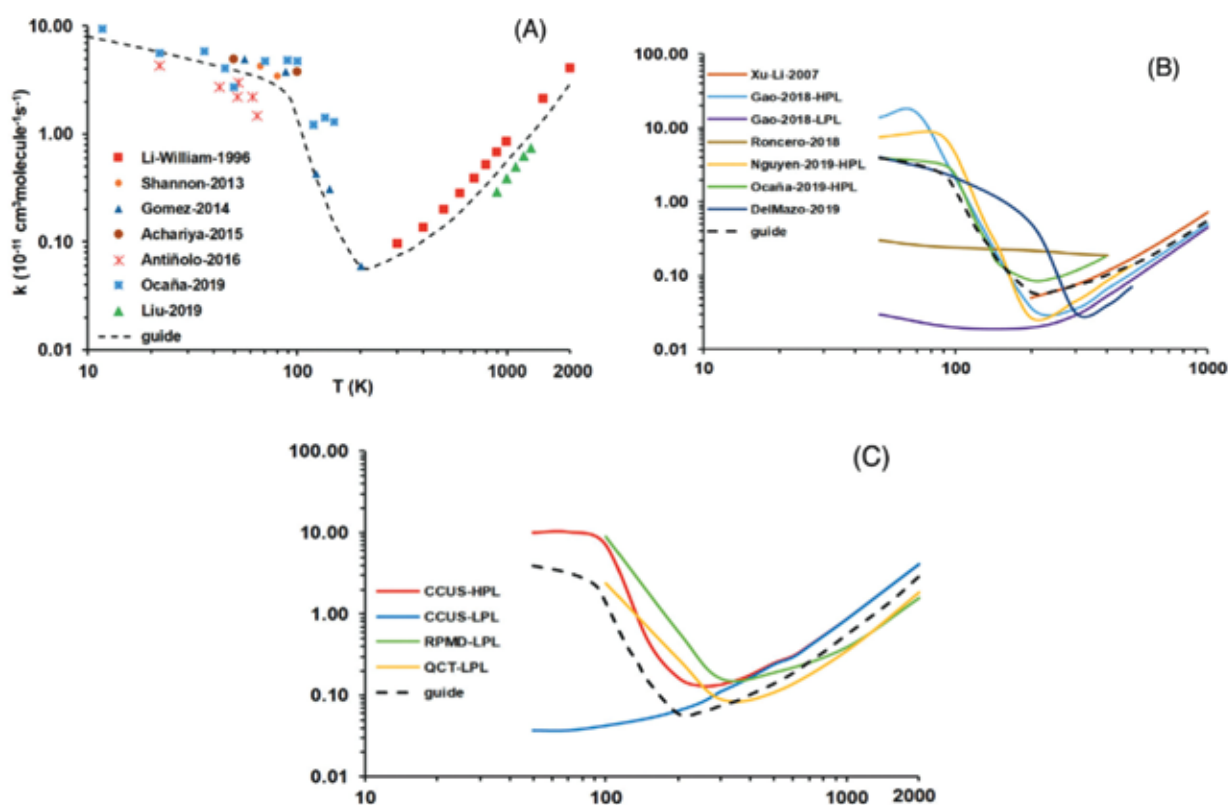
**Harnessing the unusually strong improvement of thermoelectric performance of AgInTe2 with nanostructuring.**

Plata Ramos, J. J., Blancas, E. J., Márquez Cruz, A. M., Posligua, V., Fernández Sanz, J., & Grau Crespo, R. (2023). *Journal of material chemistry*, 11 (31), 16734-16742. <https://doi.org/10.1039/D3TA02055J>



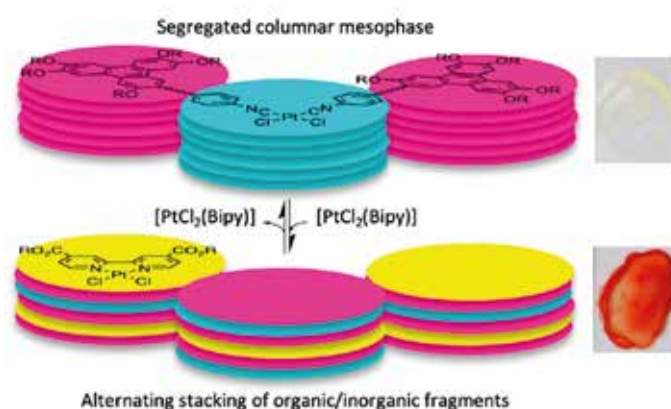
**Theoretical kinetics analysis of the OH+ CH<sub>3</sub>OH hydrogen abstraction reaction using a full-dimensional potential energy surface.**

Espinosa-García, J., & García-Chamorro, M. (2023). *International Journal of Chemical Kinetics*, 55(9), 525-536. <https://doi.org/10.1002/kin.21653>



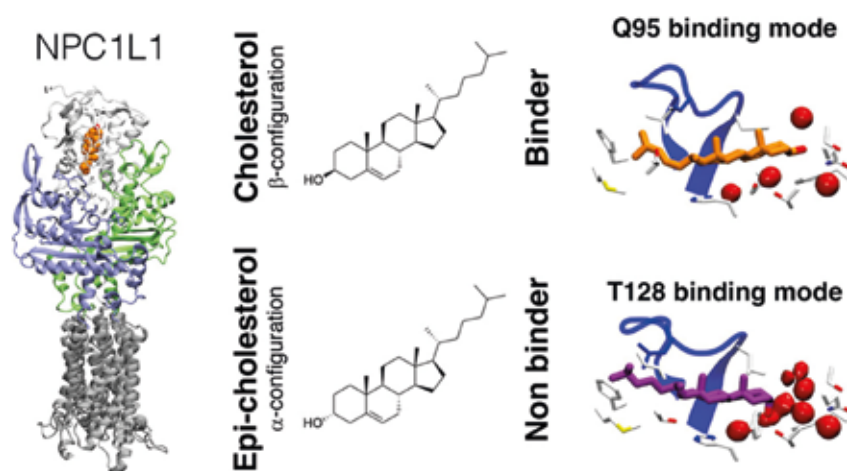
**Modulating Organic/Inorganic Segregation in Columnar Mesophases.**

De Domingo, E., García, G., Folcia, C. L., Ortega, J., Etxebarria, J., & Coco, S. (2023). *Crystal Growth & Design*, 23(9), 6812-6821. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.3c00660>



**Binding of Cholesterol to the N-Terminal Domain of the NPC1L1 Transporter: Analysis of the Epimerization-Related Binding Selectivity and Loop Mutations.**

Valdivia, A., Luque, F. J., & Llabrés, S. (2023). *Journal of Chemical Information and Modeling*, 64(1), 189-204. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c01319>.



**Theoretical Investigation of the Lattice Thermal Conductivities of II–IV–V<sub>2</sub> Pnictide Semiconductors.**

Posligua, V., Plata, J. J., Márquez, A. M., Sanz, J. F., & Grau-Crespo, R. (2023). *ACS Applied Electronic Materials*, 6(5), 2951-2959. <https://doi.org/10.1021/acsaelm.3c01242>.



## 5. 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 2023 en el ámbito de la formación, la difusión y la divulgación, destacando la colaboración en eventos, así como la organización de diversas jornadas.

### CONVENIOS DE COLABORACIÓN.

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



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



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



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



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



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



Acuerdo marco de colaboración para la creación del Nodo de Innovación “Tecnologías para Extremadura (**DIH Tech4E/ Extremadura DIH**)”, entre la Fundación COMPUTAEX y la Fundación FUNDECYT-Parque Científico y Tecnológico de Extremadura, la Excm. Diputación Provincial de Badajoz, la Excm. Diputación de Cáceres, la Universidad de Extremadura, la Asociación Empresarial Extremeña de Tecnologías de la Información y Comunicación AEXTIC, el Cluster de la Energía de Extremadura, Centro de Investigaciones Científicas y Tecnológicas de Extremadura (CICYTEX), FEVAL Institución Ferial de Extremadura, la Cámara de Comercio, Industria y Servicios de Cáceres y la Cámara Oficial de Comercio, Industria y Servicios de Badajoz.



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



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



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



**NATURGY** Renovables, S.L.U. firmó un convenio con COMPUTAEX para colaborar en el proyecto “Anemoi2: avances en el modelo predictivo de productividad y operatividad de parques eólicos”, en la convocatoria de ayudas destinadas al fomento de la contratación de personal de apoyo a la investigación en la comunidad autónoma de Extremadura.



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



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



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



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



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



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



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



### **CONVENIO CON LA UEX Y COLABORACIÓN EN LOS MÁSTERES TIC.**

COMPUTAEX y **la Universidad de Extremadura** han firmado varios convenios desde 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, COMPUTAEX 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.

La Fundación colabora además en los Másteres TIC de la UEX impartiendo docencia en la asignatura "Computación de Altas Prestaciones" del Máster en Ingeniería Informática.

Además, desde el año 2009, se han concedido más de 30 becas de formación a estudiantes de distintas titulaciones de la Universidad de Extremadura, directamente relacionadas con las Tecnologías de la Información y la Comunicación. Estas becas tienen como objetivo la colaboración en proyectos de investigación desarrollados en COMPUTAEX.

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.



### **ACCIONES FORMATIVAS Y DIFUSIÓN.**

#### **SEMANA ADMINISTRACIÓN ABIERTA.**

Jornada de puertas abiertas en COMPUTAEX con motivo de la Semana de la Administración Abierta 2023. Entre el 20 y el 24 de marzo, se celebró en toda España la Semana de la Administración Abierta, una iniciativa cuyo objetivo principal es acercar las Administraciones Públicas a la ciudadanía y ofrecer eventos en torno a los principios del Gobierno Abierto: transparencia, rendición de cuentas, participación ciudadana, integridad pública y colaboración. En España, la Semana de la Administración Abierta es coordinada e impulsada por la Dirección General de Gobernanza Pública, con la colaboración del Foro de Gobierno Abierto.

COMPUTAEX se sumó a esta iniciativa organizando el evento "Jornada de puertas abiertas de la Fundación COMPUTAEX", el día 21 de marzo, gracias al cual fue posible visitar las instalaciones del Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación. En la jornada se celebró una ponencia en la que se presentó el centro y los proyectos desarrollados, abarcando, estos últimos, varias áreas de la informática y la investigación: supercomputación, computación cuántica, biotecnología aplicada a la salud, inteligencia artificial, etc. Además, fue posible visitar el Centro de Procesamiento de Datos (CPD) de la Fundación COMPUTAEX.



### **XII TRANSFIERE, EL FORO EUROPEO PARA LA CIENCIA, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN.**

Del 15 al 17 de febrero tuvo lugar en el Palacio de Ferias y Congresos de Málaga, la duodécima edición de Transfiere, el Foro Europeo para la Ciencia, Tecnología e Innovación, que reúne anualmente a los principales agentes públicos y privados relevantes en el ámbito de la investigación y la transferencia de conocimiento científico y tecnológico. Entre sus objetivos destacaba, el de promover la innovación y conectar ciencia y empresa. Se trataba, por tanto, de un foro profesional y multisectorial clave para la mejora de la competitividad en el sector empresarial y la generación de oportunidades de negocio y networking.

La Fundación COMPUTAEX participó un año más en este foro, junto a otros ocho centros y entidades referentes en Extremadura, con objeto de promocionar el talento, la capacidad y el potencial del Sistema de Ciencia, Tecnología e Innovación de la región. De este modo, en el evento se difundió las capacidades de las entidades extremeñas para dar a conocer sus proyectos actuales y generar nuevas sinergias y posibilidades de colaboración.



### **ENCUENTRO RIS3 DE PLATAFORMAS COLABORATIVAS.**

El 28 de febrero se celebró el Encuentro RIS3 de Plataformas Colaborativas, en el Parque Científico y Tecnológico de Extremadura en Badajoz. En él se presentaron las Plataformas Colaborativas como instrumento para la Gobernanza de la RIS3 y, fundamentalmente, para el despliegue de los procesos de descubrimiento emprendedor en la región. Tienen como objetivo promover, crear, consolidar y gestionar procesos colaborativos en materia de I+D+I para identificar oportunidades y abordar retos de forma conjunta.

COMPUTAEX colaboró en este primer Encuentro RIS3 en varias mesas de trabajo sectoriales y transversales, ayudando a profundizar en sus ámbitos de especialización RIS3, analizando además las posibilidades de hibridación, los ámbitos de oportunidad existentes y los posibles retos a abordar en la región.



### **CURSO DE DOCTORADO EN LA BERTINORO INTERNATIONAL SPRING SCHOOL.**

El Director General de COMPUTAEX, D. Juan Manuel Murillo, ha impartido en Bertinoro (Italia) entre el 15 y el 18 de marzo, el curso "Hybrid Quantum Computing - A gentle introduction to Quantum Computing from a Software Engineering perspective". La Bertinoro International Spring School es posiblemente la escuela de doctorado internacional más prestigiosa en Europa en el área de Ingeniería de Software. Es una escuela promovida por la Universidad de Pisa, la Universidad de Bolonia y el Politécnico de Milano, donde se forman los doctorandos de estas instituciones. Para la Fundación ha sido un honor recibir la invitación para impartir este curso.

Este curso ha abordado conceptos básicos de computación cuántica, mostrando la estructura de un programa cuántico, así como las principales técnicas y patrones utilizados para desarrollarlos. Asimismo, también se ha tratado la integración de programas cuánticos en sistemas de software clásico, todo desde una perspectiva práctica.



Este curso ha abordado conceptos básicos de computación cuántica, mostrando la estructura de un programa cuántico, así como las principales técnicas y patrones utilizados para desarrollarlos. Asimismo, también se ha tratado la integración de programas cuánticos en sistemas de software clásico, todo desde una perspectiva práctica.

### **SIXTH INTERNATIONAL WORKSHOP ON GERONTECHNOLOGY.**

La Fundación COMPUTAEX ha participado en el Sixth International Workshop On Gerontechnology, celebrado en la ciudad portuguesa de Évora el viernes 31 de marzo. Los objetivos científicos del workshop se han centrado en conseguir que nuestros mayores puedan disfrutar de mejores condiciones de salud. De este modo, el workshop afrontó este reto desde múltiples perspectivas, mejorando la calidad de vida de los ancianos gracias, tanto a la tecnología, como a una correcta gestión del conocimiento y la provisión de respuestas específicas y rápidas a los respectivos desafíos, entre otros.

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



## **WORLD QUANTUM DAY.**

El 14 de abril, se celebró el World Quantum Day, un evento que tiene por objeto promocionar la comprensión de la ciencia y la tecnología cuántica, fomentando su difusión y conocimiento. La Fundación COMPUTAEX participó organizando una jornada en la que ofreció una visión general sobre los avances realizados en los proyectos de investigación que desarrolla en torno a la computación cuántica.

Así, tras recibir dos charlas destinadas a introducir los conceptos fundamentales de la computación cuántica y la computación de alto rendimiento, los asistentes recibieron una conferencia en la que se describieron los objetivos establecidos y los avances realizados por la Fundación en el proyecto Quantum Spain. Este proyecto, persigue la construcción e instalación del primer ordenador cuántico basado en tecnología europea. Su objetivo estratégico es crear un ecosistema sólido de computación cuántica en España, involucrando a 25 universidades y centros de infraestructuras y supercomputación de 14 Comunidades Autónomas.



## **COMPUTAEX RECIBE UNA ESTANCIA DE INVESTIGACIÓN PROCEDENTE DE LA UNIVERSIDAD DE JYVÄSKYLÄ, FINLANDIA.**

Durante el mes de junio, el investigador Majid Haghparast, de la Universidad de Jyväskylä, Finlandia, desarrolló una estancia de un mes en las instalaciones de COMPUTAEX con objeto de desarrollar trabajos conjuntos en el área de la computación cuántica.

Majid Haghparast es miembro sénior del IEEE, editor asociado de la revista "Cluster Computing" (Springer) y de la revista "Journal of Computational Electronics" (Springer). Majid también es miembro del Comité Editorial de la revista "Optical and Quantum Electronics" (Springer). Participa como revisor en más de 30 revistas de prestigio, incluyendo "IEEE Internet of Things," "IEEE Transactions on Computer," "IEEE Transactions on Circuits and Systems" "IEEE Transactions on Industrial Electronics," e "IEEE Transactions on Quantum Engineering." Su línea de investigación principal se centra en la computación cuántica, habiendo participado en el desarrollo de diversos proyectos.

### CURSO DE INTRODUCCIÓN A HPC & IA EN LUSITANIA III.

Del 27 al 28 de junio, se desarrolló en el centro CénitS de manera virtual dos jornadas de formación denominadas "Introducción a HPC & IA en Lusitania III".

Estas jornadas, dirigidas a usuarios de Empresas, centros tecnológicos, estudiantes, investigadores e innovadores, tuvieron el fin de mostrar los recursos disponibles y los servicios prestados por CénitS. Se pretendió mostrar a los usuarios actuales y potenciales del supercomputador, como utilizar y obtener un mejor desempeño de los recursos hardware y software del centro.

Esta actividad se enmarcó dentro del proyecto MILIAC, cofinanciado por la Dirección General de Agenda Digital (Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital) de la Junta de Extremadura, cuyo objetivo consiste en facilitar, promover y atraer la inversión en investigación, desarrollo e innovación por parte del tejido empresarial extremeño mediante la integración en sus procesos productivos de servicios de inteligencia artificial de alto valor añadido provistos por la infraestructura de LUSITANIA.



### CURSO DE INTRODUCCIÓN AL DESARROLLO DE SOFTWARE CUÁNTICO.

Del 12 al 16 de junio, se ha celebrado en la Escuela Politécnica de Cáceres un curso de Introducción al Desarrollo de Software Cuántico, de 30 horas, centrado en enseñar los principios fundamentales del desarrollo de software cuántico, organizado por el laboratorio SPILab de la Universidad de Extremadura (UEx), Alhambra IT y la Fundación COMPUTAEX.

Durante el curso, los alumnos han podido adquirir habilidades esenciales como conocer las principales puertas cuánticas y su uso, comprender las aplicaciones más relevantes del software cuántico actual y aprender el uso de algoritmos cuánticos en software orientado a servicios. Además, aprendieron a utilizar las herramientas más importantes de simulación y acceso a computadoras cuánticas reales, para llevar sus conocimientos a la práctica.

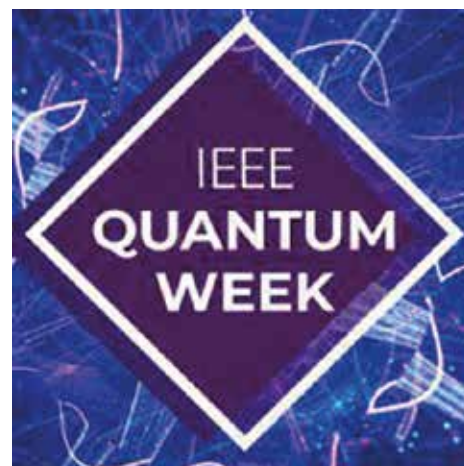


### 3RD INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTUM SOFTWARE ENGINEERING AND TECHNOLOGY EN EL MARCO DE LA IEEE QUANTUM WEEK.

La Fundación COMPUTAEX ha participado en la organización del 3rd International Workshop on Quantum Software Engineering and Technology, desarrollado del 17 al 22 de septiembre en Washington y ubicado conjuntamente con la IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (IEEE Quantum Week).

El workshop se ha centrado en el desarrollo de software cuántico, considerando tanto las lecciones aprendidas por la ingeniería software clásica como nuevas perspectivas. De este modo, se considera la aplicación o adaptación de los procesos, métodos, técnicas y principios ya establecidos en la ingeniería software clásica, así como la innovación en la creación de nuevos métodos y técnicas que contribuirán a desarrollar software cuántico con los niveles adecuados de calidad.

En su organización han colaborado la Universidad de Extremadura (UEx), la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) y la Universidad de Jyväskylä, en Finlandia.



### NOCHE EUROPEA DE LOS INVESTIGADORES 2023.

El 30 de septiembre ha tenido lugar la Noche Europea de los Investigadores, un evento en el que han participado más de 1000 investigadores, con el objetivo de divulgar ciencia y demostrar que la investigación y los avances científicos y tecnológicos están al alcance de todos los públicos.

La Universidad de Extremadura (UEx) ha celebrado este evento en Badajoz, Mérida, Cáceres y Plasencia. La Fundación COMPUTAEX ha participado, por duodécimo año consecutivo, en esta ocasión en la Antigua Escuela de Magisterio de Cáceres, situada en Avenida Virgen de la Montaña, 14. Se ha ofrecido el taller "De bloques a bytes: construye tu mini-supercomputador con piezas de LEGO" en sesiones de 25 minutos para un máximo de 10 personas. En ellas los asistentes han aprendido a construir un supercomputador compuesto por pequeños ordenadores del tamaño de una tarjeta de crédito y ensamblado con piezas de LEGO. El principal objetivo era aprender a utilizar un clúster doméstico de ordenadores de bajo coste, sobre el que se han ejecutado distintos problemas que típicamente son resueltos gracias a la supercomputación. El acceso era libre, hasta completar aforo.



El programa de la UEx formaba parte del nuevo proyecto conjunto G9 Missions de las universidades que forman parte del Grupo G-9, a través de sus respectivas unidades de cultura científica, concedido en el marco del programa Horizonte Europa (proyecto nº 101061455). En Extremadura la actividad estaba organizada por el Servicio de Difusión de la Cultura Científica de la UEx y Fundecyt-PCTEx, con la colaboración de Cultura Emprendedora Universidad de la Junta de Extremadura y la financiación de la O4i, la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura y del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

El programa de la UEx formaba parte del nuevo proyecto conjunto G9 Missions de las universidades que forman parte del Grupo G-9, a través de sus respectivas unidades de cultura científica, concedido en el marco del programa Horizonte Europa (proyecto nº 101061455). En Extremadura la actividad estaba organizada por el Servicio de Difusión de la Cultura Científica de la UEx y Fundecyt-PCTEx, con la colaboración de Cultura Emprendedora Universidad de la Junta de Extremadura y la financiación de la O4i, la Consejería de Economía, Ciencia y Agenda Digital de la Junta de Extremadura y del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER).

## VII SEMANA DE LA CIENCIA DE EXTREMADURA.

Del 2 al 17 de noviembre ha tenido lugar la VII Semana de la Ciencia de Extremadura, promovida por la Secretaría General de Ciencia, Tecnología, Innovación y Universidad de la Junta de Extremadura, a través de Fundecyt-PCTEx y en colaboración con el Servicio de Difusión de la Cultura Científica de la Universidad de Extremadura.

El objetivo era fomentar el interés de la sociedad extremeña y promover las vocaciones científicas y tecnológicas, gracias a la colaboración de diversos centros de educación primaria y secundaria, centros tecnológicos, ayuntamientos y asociaciones profesionales dedicadas a la cultura científica, así como varios departamentos y grupos de investigación de la Universidad de Extremadura.

Mediante la actividad "Descubre el Centro de Supercomputación de Extremadura", la Fundación COMPUTAEX ha vuelto a participar, por séptimo año consecutivo, ofreciendo la posibilidad de visitar sus instalaciones y acceder a su Centro de Procesamiento de Datos (CPD), que alberga los supercomputadores LUSITANIA.

En primer lugar, los ingenieros de COMPUTAEX expusieron en una charla los beneficios que aporta la supercomputación de alto rendimiento a la sociedad, para afrontar las mayores oportunidades y desafíos del siglo XXI. Además, los participantes conocieron, entre otros, los servicios de cómputo, inteligencia artificial y almacenamiento masivo ofrecidos por el Centro, así como sus proyectos de investigación y desarrollo más representativos. Posteriormente, se realizó una visita guiada en la que descubrieron el CPD de COMPUTAEX y las infraestructuras de alto rendimiento con las que cuenta, comprendiendo el funcionamiento y las principales características de sus supercomputadores.



## VISITAS GUIADAS

Durante el año 2023, COMPUTAEX recibió la visita de más de 500 personas de diversos ámbitos, como investigadores, empresarios, innovadores, y especialmente universitarios y estudiantes de educación primaria, secundaria y Formación Profesional. Desde su creación en el año 2009, muchas de estas visitas se han ido traduciendo en colaboraciones en proyectos de investigación, en prestación de servicios o en la difusión de conocimiento a los agentes regionales, nacionales e internacionales.



## PATROCINIOS

La Fundación ha patrocinado:

- **XI Olimpiada Informática de Extremadura.**

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

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



## 6. COMPUTAEX – CPD.

COMPUTAEX 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, COMPUTAEX también dispone de otros recursos tecnológicos para dar servicios de Cloud Computing, Big Data, Machine Learning y Open Data, entre otros, a la comunidad investigadora.

En el año 2021 se construyó un Centro de Proceso de Datos en el edificio de la Bioincubadora de la Ciudad de la Salud de Cáceres para alojar las infraestructuras de cómputo de la Fundación COMPUTAEX. La infraestructura del CPD está compuesta por varias áreas que se describen a continuación:

### Sala IT



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

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

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

En la sala existen dos cuadros eléctricos que otorgan redundancia eléctrica a la infraestructura de cómputo.

### Sala técnica

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

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

En esta sala se encuentra instalado el BMS o sistema de gestión de edificios es un sistema informático instalado para supervisar y controlar los equipos de climatización, los equipos de energía y los dispositivos de seguridad.



### **Sala de grupos**

Se dispone de una sala de 61 m<sup>2</sup> para albergar los grupos electrógenos de la infraestructura. Actualmente se dispone de un único grupo capaz cubrir las necesidades actuales (otorgando a la infraestructura una autonomía de aproximadamente 24 horas con la carga actual) y las que surjan a medio plazo, aunque la sala puede llegar a albergar otros dos grupos electrógenos más para alcanzar una configuración N+1 (con el doble de potencia y un grupo de respaldo).

### **Recinto de Chillers**

En el exterior del edificio se ha habilitado un recinto donde están las enfriadoras. El sistema actual cuenta con 300 kW frigoríficos totales, con una configuración N+1 (200 kW + 100 kW). Se dispone de dos enfriadoras adquiridas durante la construcción del nuevo CPD y otra enfriadora que formaba parte del anterior sistema de refrigeración del centro y que sirve ahora de respaldo. Los equipos nuevos cuentan con tecnología free-cooling que es un sistema que emplea la temperatura del aire exterior para enfriar o refrigerar, mejorando la eficiencia energética de la infraestructura.

### **COMPUTAEX-CPD Y SUPERCOMPUTADOR LUSITANIA III**



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

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

A continuación, se detallan sus características técnicas:

#### **Clúster de cómputo para inteligencia artificial.**

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

#### **Nodo de cómputo Fat.**

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

#### **Clúster de memoria distribuida.**

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

#### **Clúster hiperconvergente de cloud computing.**

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

#### **Nodos de servicio.**

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

#### **Nodos de desarrollo.**

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

#### **Almacenamiento.**

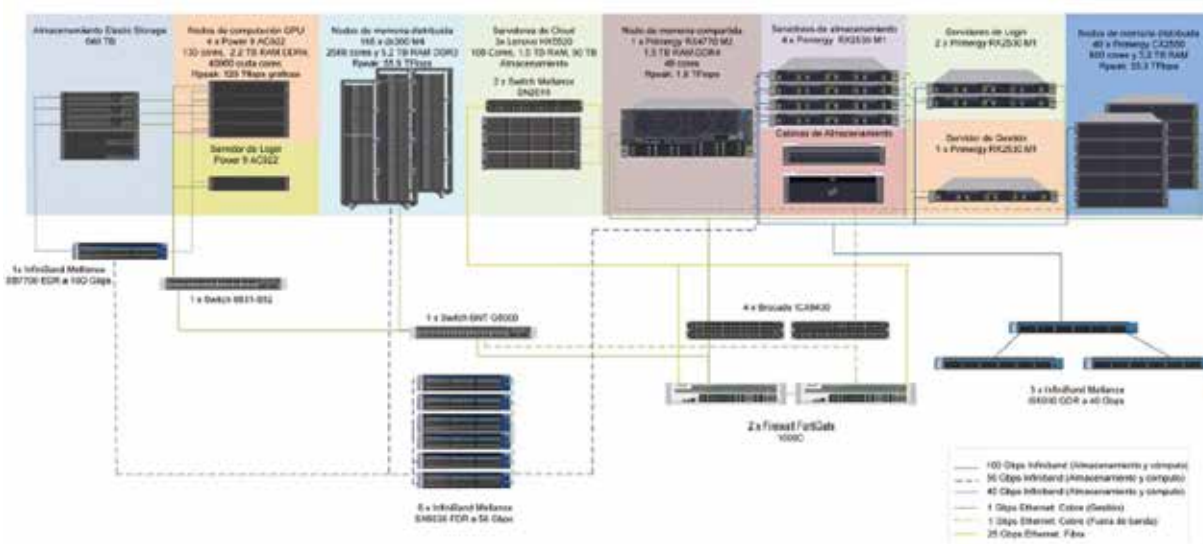
- Elastic Storage Server GL1S con una capacidad de almacenamiento de 656TB RAW:
- 1 enclosure con 84 slots: 82 x 8TB Enterprise HDD y 2x 800GB SSD.
- 2 Data Servers: 2 x 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 256GB RAM.
- 1 ESS Management Server: 10-core 3.42 GHz POWER8 Processor Card 64GB RAM.
- Licenciamiento 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.
- 2 firewalls Fortinet Fortigate 600E como sistema de seguridad perimetral, capacidad de firewall, VPN, antivirus, detección de intrusiones y gestión de ancho de banda por conexión, configurados como un clúster redundante activo-pasivo de alto rendimiento y gran capacidad de procesamiento.
- 14 switches Infiniband Mellanox SX6036 de 36 puertos FDR a 56Gbps para red de cómputo.
- 4 switches BNT G8052F de 48 puertos y 1 switch BNT G8000 de 48 puertos.
- 3 switches Brocade ICX6430 de 48 puertos y un switch Brocade ICX6430 de 24 para la red de comunicación y de gestión del supercomputador.
- 3 switches InfiniBand Mellanox IS5030 de 36 puertos QDR a 40Gbps para la red de cómputo.



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

Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional

“Una manera de hacer Europa”



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



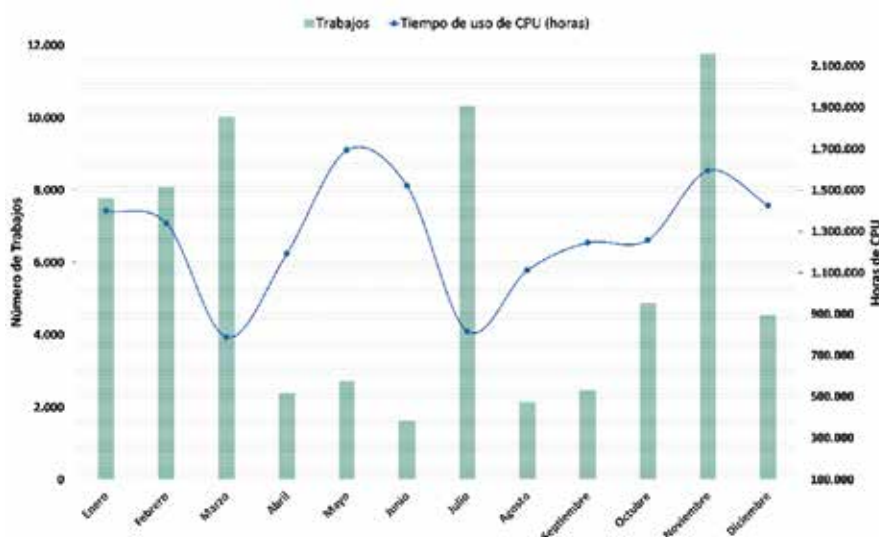
Unión Europea

## CONSUMO DE RECURSOS

### Uso de recursos

Durante el año 2023, 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 empleadas, así como los trabajos ejecutados durante el ejercicio de 2023, obteniendo un total de 15.378.264 horas de cómputo.



### Relación de recursos por proyecto.

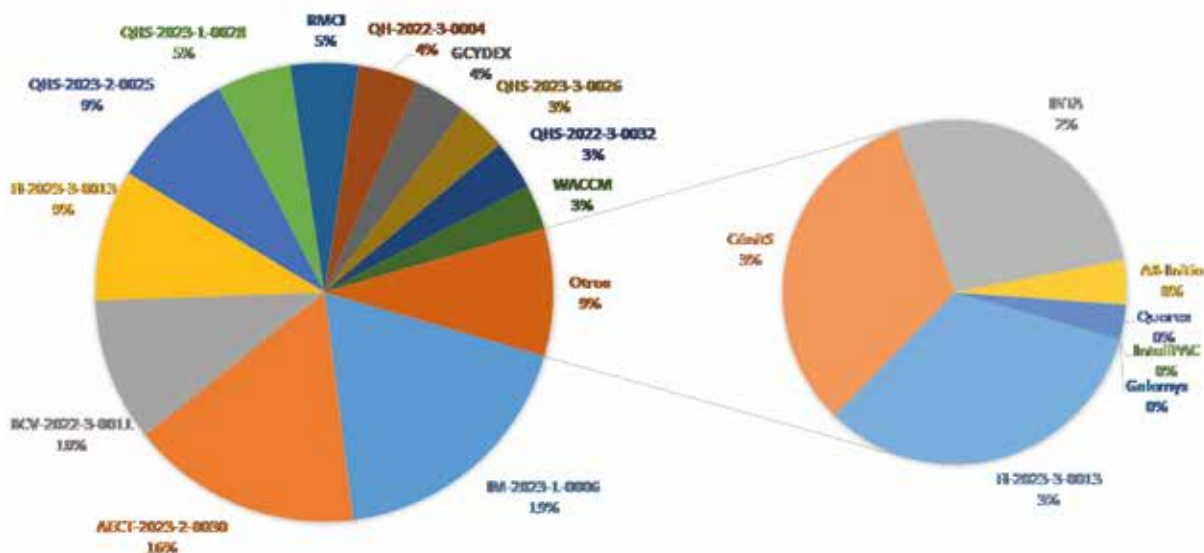
La siguiente tabla resume los proyectos que se han soportado durante el año 2023:

Código proyecto	Nombre del proyecto	Institución
IM-2023-1-0006	Segregation assessment in the manufacturing process of metal powder cored-wire	Universidad de Vigo (Vigo)
AECT-2023-2-0030	3D solar magneto-convection simulations extended to the corona with the MANCHA3D code	Instituto Astrofísico de Canarias (IAC)
BCV-2022-3-0011	Modelling the NPC1-NPC2 protein-protein interaction using AlphaFold Multimer and Molecular dynamics simulations	Universitat de Barcelona (UB)

Código proyecto	Nombre del proyecto	Institución
FI-2023-3-0013	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia)
QHS-2023-2-0025	Computational modelling of the effect of pressure on the electronic transport properties of skutterudites	Universidad de Sevilla (US)
QHS-2023-1-0028	Computational modelling of the lattice thermal conductivity of skutterudites under pressure	Universidad de Sevilla (US)
RMCI	Estudios computacionales en reacciones multicomponentes	Universidad de Extremadura (UEx)
QH-2022-3-0004	Theoretical prediction of the environmental impact of pesticides	Universidad Autónoma de Madrid (UAM)
GCYDEX	Superficies de energía potencial en sistemas poliatómicos. Estudios cinéticos y dinámicos teóricos	Universidad de Extremadura (UEx)
QHS-2023-3-0026	Harnessing Thermoelectric Potential of Fe-Ni Skutterudites: A Combined Experimental and Theoretical Approach	Universidad de Sevilla (US)
QHS-2022-3-0032	Computational modelling of the lattice thermal conductivity of alloys with thermoelectric applications	Universidad de Sevilla (US)
WACCM	Simulación del clima mediante el modelo WACCM	Universidad de Extremadura (UEx)
Quorex	Estudio teórico de la reacción de cicloadición 1,3-dipolar de compuestos mesiónicos (1,3-dipolo) frente a dipolarofilos (dip. Acetilenicos, olefinas heterocumulenos, azocompuestos, aldehidos...	Universidad de Extremadura (UEx)
AB-Initio	Cálculos AB-Initio	Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja. CSIC)
Quorex	Glicoconjugados basados en el esqueleto de aminopolio. Estructura agregación y modificación superficial	Universidad de Extremadura (UEx)
InteliPAC	Proyecto InteliPAC	Universidad de Extremadura (UEx)
Galemys	Galemys: Alineamiento, ensamblado y secuenciación del genoma del desmán de los Pirineos	Universidad de Extremadura (UEx)
FI-2022-3-008	Triphenylene-based molecules as Organic Spacers for tuning structure and electronic properties of 2D perovskites materials.	Universidad de Valladolid (UVa)

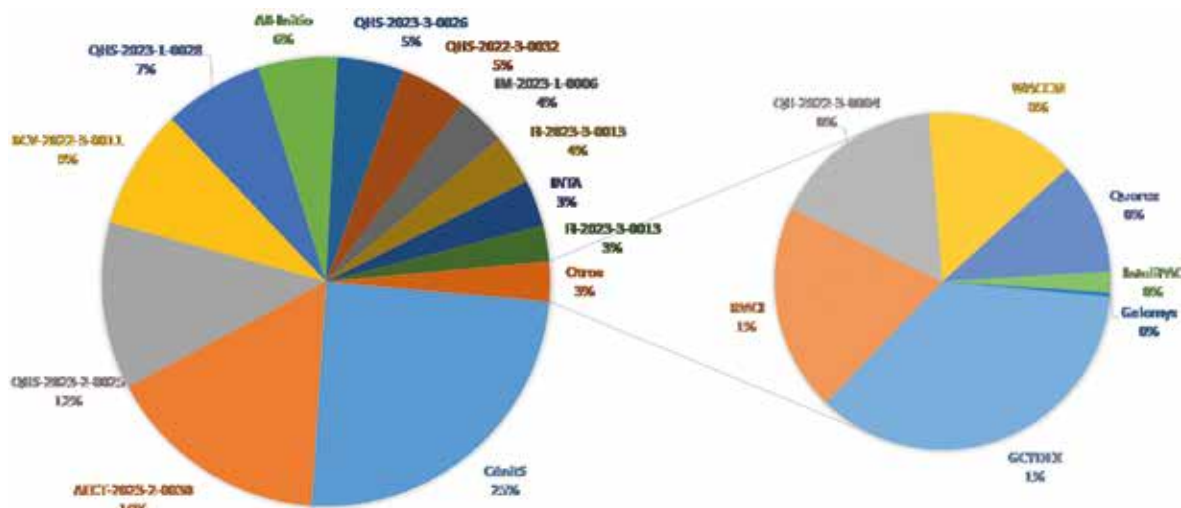
### Uso de CPU.

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



### Uso de Memoria Principal

De la misma manera, se representa el consumo anual de memoria RAM referente a los proyectos de investigación ejecutados, que ha estado parcialmente repartida entre todos los proyectos siendo el proyecto *Computational modelling of the lattice thermal conductivity of alloys with thermoelectric applications* el principal consumidor con un casi 30 % del total.



## USUARIOS.

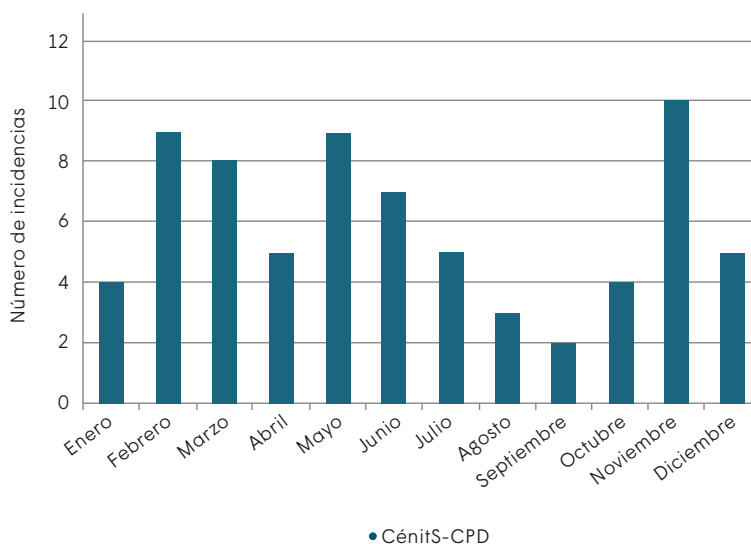
Durante el año 2023, 46 técnicos, investigadores e innovadores han accedido regularmente para ejecutar sus cálculos y simulaciones en los supercomputadores LUSITANIA II y LUSITANIA III, alojados en COMPUTAEX-CPD.

## Incidencias.

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

Toda solicitud es asignada a un técnico del equipo COMPUTAEX mediante un identificador único para poder realizar un seguimiento exhaustivo en todo momento. Además, se proporciona un archivo y un histórico de todos los tickets para que los propios usuarios conozcan el estado de sus peticiones. Aunque este sistema proporciona la flexibilidad y control suficientes para solventar cualquier incidencia, muchos usuarios han seguido utilizando el correo electrónico y el teléfono para ponerse en contacto con el equipo CénitS y así agilizar las incidencias que exigen una respuesta más rápida. En estos casos, el técnico recoge y categoriza la información transmitida por estas vías alternativas en el sistema de gestión de tickets para poder remitir al usuario el estado y la evolución de su incidencia a continuación.

Se han resuelto un total de 70 incidencias distribuidas entre los distintos meses de 2023, tal y como se muestra a continuación:



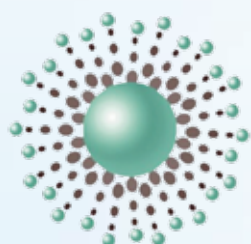
## SOFTWARE

Sistemas Operativos
Suse Linux Enterprise Server
Red Hat Linux Enterprise
Debian
71
Ubuntu
Windows Server

Computación Técnica	
Gaussian 16	GATK
GaussView 6	SnEff
netCDF	Hisat2
NWChem	Cufflinks
R	Anaconda
Python	ADFR
Biopython	ParaView
WIEN2k	XTB
Trinity	IGV
Bowtie	BAGEL
MIRA	Bismark
Singularity	Censo
Orca	Crest
VASP	MUMPS
CPMD	OpenBABEL
Schrödinger	OpenFOAM
Salmon	OpenMolcas
Jellyfish	RPMRate
FastQC	Plumed
Fastp	VTK
Fastx Toolkit	
BWA	
SAMtools	
Picard	

Compiladores
Intel C/C++ Compiler
Intel Fortran Compiler
GNU GCC





**COMPUTAEX**  
Centro de Supercomputación  
de Extremadura

Carretera N-521, Km 41, 8  
10071 - Cáceres

+34 927 049 070

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

Fondo Europeo de  
Desarrollo Regional

"Una manera de hacer Europa"

**JUNTA DE EXTREMADURA**

Consejería de Educación, Ciencia y Formación Profesional  
Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación



Unión Europea