

Anexo 02 - Cadro da convocatoria

I) Nome do proxecto

PROXECTO DE ACTUALIZACIÓN TECNOLÓXICA DO NODO DE COMPUTACIÓN E DATOS DA FUNDACIÓN PÚBLICA GALEGA CENTRO TECNOLÓXICO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA (CESGA) NO MARCO DO PLAN ESTRATÉXICO DA ICTS DISTRIBUIDA RES (Acrónimo: **PERTE47 - 2025/04**)

II) Programa/proxecto/contrato/convenio que financia o contrato

O proxecto que financia o contrato é o ICTS-MRR-2024-10-CESGA (RES), amparado pola orde ministerial citada a continuación:

ORDE DA MINISTRA DE CIENCIA, INNOVACIÓN E UNIVERSIDADES POLA QUE SE CONCEDE Á FUNDACIÓN CENTRO TECNOLÓXICO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA (CESGA) A SUBVENCIÓN PREVISTA NO REAL DECRETO 714/2024, DE 23 DE XULLO, POLO QUE SE REGULA A CONCESIÓN DIRECTA DE DIVERSAS SUBVENCIÓNS PARA O FORTALECEMENTO DAS CAPACIDADES, INFRAESTRUTURAS E EQUIPAMENTO DE SALAS BRANCAS DE MICRO E NANOFABRICACIÓN E DE CENTROS DE SUPERCOMPUTACIÓN NO MARCO DO PLAN DE RECUPERACIÓN, TRANSFORMACIÓN E RESILIENCIA, FINANCIADO POLA UE NEXT GENERATION.

As bases xerais polas que se establece o procedemento de selección de persoal investigador e técnico non permanente da **“FUNDACIÓN PÚBLICA GALEGA CENTRO TECNOLÓXICO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA” (FUNDACIÓN CESGA)** e condicións singulares establecidas na presente convocatoria, poden consultarse no documento BASES DA CONVOCATORIA.

As contratacións suxeitaranse á normativa do Mecanismo de Recuperación e Resiliencia, en particular, ao Regulamento (UE) número 2021/241, do Parlamento Europeo e do Consello, do 12 de febreiro de 2021, polo que se establece o Mecanismo de Recuperación e Resiliencia, á Orde HFP/1030/2021, do 29 de setembro, á Orde HFP/1031/2021, do 29 de setembro e a Orde HFP/55/2023, do 24 de xaneiro, relativa á análise sistemática do risco de conflito de interese nos procedementos que executan o Plan de Recuperación Transformación e Resiliencia.

Estas contratacións serán financiadas exclusivamente dentro do Compoñente 17 (Reforma institucional e fortalecemento das capacidades do sistema nacional de ciencia, tecnoloxía e innovación) Investimento 2 (Fortalecemento das capacidades, infraestruturas e equipamentos dos axentes do SECTI) e Obxectivo CID 260, do Plan de Recuperación, Transformación e Resiliencia, financiado a través do Mecanismo de Recuperación e Resiliencia (MRR)_ NextGenerationEU e o Ministerio para a Transformación Dixital e da Función Pública.

A actuación tamén forma parte do PERTE Chip. En concreto, as actividades que levarán a cabo intégranse na actuación 1 do Eixo I de devandito PERTE (Desenvolvemento de I+D+i sobre microprocesadores de vangarda e de arquitecturas alternativas).



Estas contratacións imputaranse á partida orzamentaria do CESGA 640 e subcontas para o salario do traballador e 642 e subcontas para a seguridade social.

III) Descrición do proxecto

Este proxecto ten como obxecto a realización das actualizacións do nodo CESGA dentro do Plan Estratéxico 2021-2024 da ICTS distribuída RES, que aumentarán significativamente as capacidades da RES e mellorarán aínda máis a diversidade de arquitecturas e servizos relacionados.

Os investimentos contemplados no Plan Estratéxico 2021-2024 da ICTS distribuída RES, teñen como un dos seus obxectivos fundamentais desenvolver unha infraestrutura de datos e HPC de clase mundial e servizos de soporte para ofrecer recursos á comunidade científica. Só aumentando o rendemento computacional que ofrece a rede poderase manter a calidade e competitividade do servizo prestado á comunidade científica. Este obxectivo estratéxico pódese lograr fundamentalmente actualizando os sistemas informáticos dos nodos actuais, entre os que CESGA foi desde a súa inclusión na RES uno dos nodos máis relevantes.

Desde a súa incorporación á RES, CESGA participa activamente na mesma e foi un dos nodos que máis contribúe aos diferentes servizos que a RES estivo implantando, entre os que cabe mencionar os de máis recente implantación como o servizo de datos, o de intelixencia artificial e o de computación cuántica. A idoneidade da contribución do CESGA á RES pode constatarase pola elevada capacidade do nodo para a captación de proxectos procedentes das convocatorias abertas da RES.

O nodo CESGA destaca actualmente por ter tanto unha gran Infraestrutura de Computación Clásica (Finisterrae III) como de Computación Cuántica (QMIO), así como por participar en multitude de proxectos e iniciativas europeas. Ademais do obxectivo de actualizar e reforzar estas infraestruturas, CESGA ten tamén o obxectivo de reforzar o seu persoal que investiga en temáticas altamente relacionadas coa infraestrutura, por exemplo os novos grupos de investigación en computación cuántica e comunicacións cuánticas.

As actividades a realizar dentro do proxecto descríbense na seguinte táboa:

Proxecto	Actividade
RES-CESGA-03	<i>Finisterrae IV:</i> A actividade consiste no despregamento dun novo supercomputador cunha potencia pico estimada de 20 PFLOPS. O proxecto supón a adquisición da que será a infraestrutura principal de HPC do CESGA nos próximos anos complementando e substituíndo a Finisterrae III.
RES-CESGA-06	<i>Datacenter:</i> O obxectivo desta actuación é construír o centro de datos imprescindible para albergar todas as infraestruturas do CESGA, especialmente incluídas neste plan. A actuación incluírá todos os elementos necesarios para a instalación de electricidade, refrixeración, detección e extinción de incendios, equipos de seguridade, liña eléctrica, etc. dos novos sistemas de supercomputación e almacenamento.
RES-CESGA-02b	<i>Quantum computer PHASE II:</i> Consiste en instalar unha infraestrutura de computación baseada en tecnoloxía de hardware cuántico.
RES-CESGA-	<i>Permanent Data Storage System: second expansion of storage capacity:</i>



04b	Adquisición dun sistema de almacenamento de alta capacidade que incluíra capacidade estimada de 100 PB en tecnoloxía de cinta e 25 PB de almacenamento en liña baseado en tecnoloxía de disco ou flash. Proporcionará funcións de arquivo e copia de seguridade a longo prazo.
------------	--

Os postos requiridos na presente convocatoria desenvolverán as diferentes tarefas necesarias para a adquisición, despregue e posta en operación das infraestruturas e obras contidas nas actividades indicadas na táboa anterior.



IV) Posicións ofertadas

1. Referencia do posto: PERTE47-25-INV-POS-QC – NRP: 6090044

DATOS DA ACTIVIDADE / PROXECTOS DE INVESTIGACIÓN PARA O QUE PRESTARÁ SERVIZOS	
Denominación	Investigador postdoutoral en Química Computacional
Centro de traballo	CESGA, Avenida de Vigo s/n, Campus Vida, 15705 – Santiago de Compostela.
CONDICIÓNS DO POSTO	
Tipo de contrato	Contrato de Actividades Científico-Técnicas
Categoría laboral	Investigador postdoutoral
Número de postos do grupo	1
Descrición	Os postos teñen como cometido a realización de tarefas de deseño, adquisición, instalación, configuración, posta en operación e servizo de arranque inicial das infraestruturas e servizos dos proxectos do Plan Estratéxico da RES 2021-2024 (denominados no seu conxunto proxecto PERTE47). Terá como actividade principal a realización de todas aquelas tarefas técnicas necesarias para a posta en operación dos proxectos do PERTE47, particularmente os de "RES-CESGA-03 Finisterrae IV" e "RES-CESGA-04b Permanent Data Storage System". Realizará actividades de investigación orientada á posta en marcha no CESGA de optimización de técnicas avanzadas de simulación de Dinámica Molecular (MD) para o estudo de biomoléculas e as súas interaccións con fármacos, automatización de simulacións para produción masiva de datos e análise mediante metodoloxías de Big Data e Machine Learning.
Funcións a realizar	Investigación e soporte avanzado en simulación computacional: - Execución de simulacións de dinámica molecular (MD) para moléculas biolóxicas e fármacos, incluíndo a simulación de interaccións proteína-ligando, proteína-proteína, e a análise de sistemas biomoleculares complexos. - Optimización de protocolos de simulación: Axustar os protocolos de simulación para mellorar a precisión e a eficiencia na obtención de descritores moleculares relevantes como enerxía libre, constantes de disociación, e interaccións moleculares. - Simulacións avanzadas utilizando métodos de mostraxe mellorada (Enhanced Sampling) e cálculos de enerxía libre para mellorar a predición de interaccións e mecanismos en sistemas biolóxicos. Automatización de procesos:



	a. Desenvolvemento e optimización de código para a automatización de fluxos de traballo, permitindo a xestión eficiente de grandes volumes de datos de simulación, utilizando recursos de supercómputo de CESGA. b. Automatización de simulacións a gran escala para a produción masiva de datos de simulacións, analizándoos automaticamente e sincronizándoos con bases de datos en rede. c. Implementación de scripts e ferramentas que melloren a reproducibilidade dos experimentos e a eficiencia computacional. b. Desenvolvemento de modelos predictivos e xerativos que empreguen técnicas de IA para predicir propiedades moleculares, como a actividade biolóxica de novos fármacos. c. Aplicación de modelos de aprendizaxe automático para a identificación de biomarcadores potenciais ou novos candidatos a fármacos, baseándose en grandes bases de datos moleculares. 3. Participación no despregue e evolución de infraestruturas: a. Colaboración na implementación e mellora das plataformas e ferramentas necesarias para soportar o desenvolvemento do proxecto. b. Participación na evolución das infraestruturas tecnolóxicas para garantir a escalabilidade das solucións empregadas no proxecto. 4. Tarefas xerais de apoio ao proxecto: Asistencia a reunións científicas e de xestión, participación en conferencias e cursos especializados, elaboración de informes e presentacións, e outras tarefas asociadas ao correcto desenvolvemento e monitorización do proxecto de investigación.		
Retribución bruta anual	34.251,39€		
Duración do contrato	Dende a sinatura ata a finalización do proxecto PERTE47 (establecida inicialmente para o 30 de xuño de 2026)		
Data de inicio prevista	Xullo de 2025		
Xornada laboral	Tempo completo, posibilidade de teletraballo.		
REQUISITOS DOS/DAS ASPIRANTES			
Titulación requirida	Doutoramento internacional na área de Química ou modelización química computacional		
Experiencia requirida	Non se require		
Idiomas	Non se require		
Outros	Non se require		
MÉRITOS A VALORAR			
Ítem	Concepto do ítem	Puntos max.	Puntos mín.



1	Valoración curricular Teranse en conta os seguintes aspectos en base aos méritos acreditables e claramente especificados no Curriculum Vitae aportado polo candidato: ▪ CRITERIO CV1: Doutoramento internacional. Calificación cum laude. ▪ CRITERIO CV2: Formación: ○ Posesión de titulacións adicionais á esixida para o acceso á convocatoria en áreas afíns ao posto. ○ Formación en programación aplicada especializada en Python, R ou linguaxes similares ○ Formación en analítica e visualización de datos ○ Outra formación que se considere de utilidade de cara as funcións a realizar. ▪ CRITERIO CV3: Nivel de idiomas superior ao esixido. ▪ CRITERIO CV4: Experiencia académica ou profesional previa relacionada coas funcións do posto : ○ Experiencia profesional previa relacionada coas funcións do posto como, por exemplo, Bioinformática, Intelixencia Artificial, Docking e/ou Simulacións de Dinámica molecular. ○ Avaliaranse as contribucións do candidato/a que demostren a súa evolución e achegas no ámbito científico-técnico: Publicacións científicas en revistas con revisión por pares relacionadas coa simulación computacional de dinámica molecular e/ou Big Data e Intelixencia Artificial Seleccionaranse para a fase seguinte de avaliación da memoria técnica un máximo de 3 candidatos por posto de entre os que superen o limiar mínimo requirido.	30	15
2	Memoria técnica Elaboración dunha memoria técnica en formato libre cun máximo de 4 páxinas de extensión, en letra Arial de tamaño 10 e interliñado sinxelo (non se terán en conta as partes que supere esa extensión). O contido será elaborado de forma persoal e exclusiva polo candidato e poderá resaltar, entre outros, as fortalezas en termos de coñecementos e/ou experiencias previas do candidato aliñadas coas funcións do posto, experiencias previas que supuxesen un reto persoal, profesional ou académico, propostas innovadoras para un centro de supercomputación nas áreas identificadas na descrición da praza, e en xeral, calquera outro aspecto que permita avaliar a idoneidade do candidato para o posto. Na cumprimentación da memoria destacaranse, en caso de dispor deles, os coñecementos avanzados e capacidades seguintes: ▪ Aplicacións comúns en contornos de supercomputación sobre simulación molecular como AMBER, GROMOS, GROMAC, CHARMM, e ou outras afíns ao posto.	60	30



	Terase en conta a claridade na redacción e a organización e presentación da memoria.		
3	Entrevista A entrevista centrarase en avaliar as competencias e habilidades transversais do candidato/a, así como a súa adecuación ao posto ofertado. - Competencias Técnicas: Dominio de conceptos nas áreas relacionadas co posto. - Habilidades Transversais: Capacidade de comunicación, traballo en equipo e resolución de problemas. - Adecuación ao Perfil do Posto: Avaliarase a motivación, interese e aliñamento do candidato/a con os obxectivos e funcións do posto, así como a súa dispoñibilidade. - Outras consideradas relevantes para o posto.	10	5

A valoración curricular farase tendo en conta as seguintes:

- O expediente académico** valorarase segundo a nota media recollida no expediente sendo valorado mediante as normas acordadas na RESOLUCIÓN do 15 de setembro de 2011, da Secretaría Xeral Técnica da Consellería de Educación e Ordenación Universitaria, pola que se dispón a publicación do protocolo de colaboración para a valoración dos expedientes académicos.
Non se avaliarán expedientes de titulacións obtidos en España onde non veña recoñecida a nota media segundo o Real Decreto 1125/2003, do 5 de setembro, polo que se establece o sistema europeo de créditos e o sistema de cualificacións nas titulacións universitarias de carácter oficial e validez en todo o territorio nacional.
No caso de titulacións obtidas no estranxeiro, deberá presentarse a declaración de equivalencia de notas medias de estudos universitarios realizados en centros estranxeiros, segundo a resolución do 21 de marzo de 2016 da Dirección General de Política Universitaria do Ministerio de Educación, Cultura e Deporte e a resolución do 21 de xullo de 2016 (<https://www.universidades.gob.es/equivalencia-de-notas-medias-de-estudios-universitarios-realizados-en-centros-extranjeros/>).
- A participación en proxectos ou contratos** valorarase en función da súa duración por proxecto e mes completo traballado, sen ponderarse proporcionalmente no caso de ser inferiores a un mes. Tomarase como referencia a vida laboral, dividindo por 30 a acumulación dos días correspondentes aos contratos avaliados que figuren na vida laboral (ou documento internacional substitutorio). Só se computará un proxecto por mes, independentemente da categoría na que se encadre o mesmo.

A data de inicio prevista pode sufrir modificacións en función da data de resolución de adxudicación do contrato.



V) Prazo máximo de resolución da convocatoria

Tres (3) meses a partir do día seguinte ao da publicación da presente convocatoria, no Diario Oficial de Galicia.

VI) Acreditación de requisitos e méritos

A/as persoa/s que resulten seleccionadas deberán presentar a documentación acreditativa do cumprimento dos requisitos e dos méritos baremables na fase de concurso e restante documentación adicional incluída no Anexo 2 a través da sede electrónica <https://sede.xunta.gal> seguindo o mesmo procedemento da sección de presentación de solicitudes indicando neste caso o seguinte:

- “Asunto relacionado”: Indicar “Documentación acreditativa da convocatoria do proceso selectivo PERTE47 - 2025/04, no posto de referencia PERTE47-25-INV-POS-QC.

A documentación a remitir será:

- **Titulacións**

- Copia simple do/s título/s ou documentos que acrediten de modo fidedigno a posesión do correspondente título académico (Grao, Máster, Doutoramento, e demais titulacións).
- Copia simple do expediente académico.
- Naqueles casos onde se avalíe a temática do TFG, TFM ou tese doutoral, declaración responsable onde figure o título e un resumo no que quede claramente reflexado que a temática principal está relacionada coa valorada.

- **Cursos e formacións**

Certificado de asistencia ou superación, incluíndo o temario do curso e o número de horas. Non se considerarán como cursos os créditos obtidos en estudos regulados.

- **Certificacións**

Certificado oficial

- **Publicacións**

DOI da publicación e copia da mesma

- **Experiencia**

Xustificarase coa seguinte documentación:

- Contrato de traballo onde figure expresamente o nome e código do proxecto ou contrato ou certificación da entidade onde participou, incluíndo as datas de inicio e fin da participación.
- Copia da vida laboral para os contratos laborais en España ou documento internacional substitutorio que inclúa a duración en días ou meses do contrato.
- Declaración responsable asinada polo solicitante, cunha descrición de



cada un dos proxectos ou contratos nos que traballou, de non máis dunha cara dun folio A4 cada un, onde se xustifique a relación do mesmo co obxecto do criterio.

- Naqueles casos onde se valore experiencia relacionada co desenvolvemento de ferramentas e aplicativos dixitais, enlace a repositorios de código ou portafolios: enlaces a repositorios públicos (GitHub, GitLab, etc.) ou portafolios que mostren exemplos de scripts ou ferramentas desenvolvidas. Cada exemplo debe incluír unha breve descrición do seu propósito e contexto.

- **Idiomas**

- Se é o caso, copia simple do título de perfeccionamento en lingua galega, do CELGA 4 ou dos estudos equivalentes homologados polo órgano competente en materia de política lingüística.
- Se é o caso, copia simple do título ou certificado de inglés no nivel requirido no Anexo 2 ou acreditación/certificación equivalente atendendo á escala CEFR (Common European Framework of Reference). Os/as aspirantes que non estean en posesión do certificado requirido, serán convocados para a realización dunha proba de valoración do nivel. Dependendo do nivel esixido no Anexo 2, a proba consistirá no seguinte:
 - Nivel básico (B1): na tradución dun texto técnico de castelán ou galego a inglés.
 - Nivel medio (B2): redacción dun texto en inglés.
 - Nivel alto (C1): realización dunha entrevista en inglés dun máximo de 10 minutos e a redacción dun informe en dita lingua.

VII) Publicacións

Todas as publicacións relativas ao proceso selectivo destas prazas realizaranse na páxina web do CESGA, na sección de emprego, no seguinte enlace:

<https://www.cesga.es/transparencia/emprego/>

