



Supercomputación Castilla y León

Anuario · Informe de actividad

2017

Supercomputación Castilla y León

Anuario · Informe de actividad

2017



universidad
de León



Junta de
Castilla y León

Anuario · Informe de actividad · 2017
Supercomputación de Castilla y León, SCAYLE

Depósito Legal LE-121-2017

Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León
Edificio CRAI-TIC, Campus de Vegazana s/n • Universidad de León • 24071 León (España)
Teléfono: (+34) 987 293 160
www.scayle.es

Otras marcas y nombres son propiedad de sus respectivos propietarios.
Other brands and name are property of their respective owners.

Caja España – Obra social
Premio Medio Ambiente Caja España 2009



I Edición enerTIC Awards 2013
"Innovación y Reconocimiento a las mejores prácticas"
Proyecto Ganador Categoría: Smart IT Infrastructure



El Mundo Diario de Castilla y León
Premios Innovadores 2016
Premio Innovador al Mejor Proyecto de León



Índice de contenidos

Presentación Dirección General	pág.5
Composición del Patronato	pág.7
Consejo Asesor	pág.9
SCAYLE	
Descripción	pág.11
Descripción técnica	pág.13
Cartera de servicios	pág.15
SCAYLE, Supercomputación y RES	pág.17
Red de ciencia y tecnología de Castilla y León	pág.19
Servicios TIC para las administraciones públicas	pág.21
Proyectos I+D+i	
Miembro del consorcio	pág.23
Colaborador	pág.26
Colaborador en proyectos I+D+i a través de la RES	pág.51
Publicaciones científicas	pág.52
Formación	pág. 57
Datos de SCAYLE	pág.61

presentación

Dirección General

En Julio de 2017 me incorporé como director general de SCAYLE con un sentimiento combinado de responsabilidad e ilusión. Conocía bien el centro desde su creación en 2008 porque sus funciones son el objeto principal de trabajo del área de conocimiento a la que pertenezco como investigador y profesor universitario, la arquitectura y tecnología de computadores. Además, tuve el honor de ser patrono de su fundación desde 2011 al 2016 a propuesta de la Universidad de León y por lo tanto estaba al tanto de su potencial y situación.

Muy resumidamente las funciones del centro durante 2017 se centraron en tres servicios básicos. La asistencia a investigadores en las tareas de cálculo intensivo, la gestión de la red regional de I+D+i (RedCAYLE) y la provisión de infraestructuras TIC virtuales a las administraciones públicas.

En el área de cálculo, SCAYLE aportó recursos a diferentes grupos de investigación de Castilla y León, pero también a proyectos de investigadores nacionales como parte de la Red Española de Supercomputación (RES), siendo una de las colaboraciones de más repercusión la colaboración en el Nobel de física como uno de los nodos de la RES que aportó tiempo de cálculo. Esta participación ha supuesto el reconocimiento de SCAYLE como una ICTS, una Infraestructura Científico-Técnica Singular por el Consejo Asesor de Infraestructuras Singulares del Ministerio de Economía y Competitividad, la primera de titularidad exclusivamente autonómica de Castilla y León.

RedCAYLE ha continuado su despliegue y durante el segundo semestre de 2017 se ha comenzado a cursar tráfico de los primeros centros que se conectan a Internet a través de la red. Hasta ese momento la red se estaba utilizando únicamente para las comunicaciones entre los diferentes campus de las universidades de Castilla y León.

En cuanto a la prestación de servicios TIC a la administración pública, durante 2017 ha continuado creciendo el número de servidores y la capacidad de almacenamiento puestos en servicio para diferentes administraciones como la gerencia de Salud de Castilla y León (SACyL), o el Ayuntamiento de León, manteniendo una elevada calidad de servicio.

Finalmente, en la gestión interna, se actualizó el convenio con la Universidad de León por el que SCAYLE ha podido ampliar sus dependencias en el edificio CRATIC lo que supondrá una mejora en las condiciones de trabajo de los técnicos del centro.

Para 2018 pretendemos potenciar la participación directa de SCAYLE en propuestas de proyectos que tengan necesidades de cálculo intensivo, en particular proyectos europeos e intensificar la colaboración con los agente innovadores de Castilla y León más allá de las universidades: INCIBE, CARTIF, etc. También durante el año 2018 queremos culminar la migración a RedCAYLE de todos los centros de investigación de Castilla y León y seguir prestando servicios de calidad a todas las administraciones que nos los soliciten.

Vicente Matellán Olivera
Director General de la SCAYLE

composición del **patronato**

El Patronato de la Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León está compuesto por:

Presidente

D. Juan Carlos Suárez-Quiñones y Fernández

*Consejero de Fomento y Medio Ambiente
Junta de Castilla y León*

Vicepresidente

D. Juan Francisco García Marín

Rector Magnífico de la Universidad de León

Vocales

D. Juan Casado Canales

*Secretario General de la Consejería de Educación
Junta de Castilla y León*

D^a. M^a Victoria Seco Fernandez

*Directora General de Telecomunicaciones, Consejería de Fomento y Medio Ambiente
Junta de Castilla y León*

D^a. Susana García Dacal

*Directora General de Infraestructuras y Tecnologías de la Información de la Gerencia Regional de Salud, Consejería de de Sanidad
Junta de Castilla y León*

D. Ricardo González Mantero

*Director General de Energía y Minas, Consejería de Economía y Hacienda
Junta de Castilla y León*

D. Ana Isabel Álvarez de Felipe

*Vicerrectora de Investigación
Universidad de León*

D. Adolfo Rodríguez de Soto

*Vicerrector de Gestión de Recursos e Infraestructuras
Universidad de León*

D. Luis Panizo Alonso

*Profesor Titular de Universidad
Universidad de León*

Secretario

D. Jesús Ignacio Sanz Valdivieso

*Coordinador de Servicios de la Dirección General de Telecomunicaciones
Consejería de Fomento y Medio Ambiente
Junta de Castilla y León*

Vicesecretario

D. Pablo Carlos Vicente Villafila

*Jefe del Servicio de Medios Audiovisuales y Régimen Jurídico de la Dirección
General de Telecomunicaciones
Consejería de Fomento y Medio Ambiente
Junta de Castilla y León*

El Consejo Asesor de la Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León está compuesto por:

Presidente

D. Juan Francisco García Marín

*Rector Magnífico de la Universidad de León
Vicepresidente del Patronato de la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León*

Vocales

D. Manuel Pérez Mateos

Rector Magnífico de la Universidad de Burgos

D. Ricardo Rivero Ortega

Rector Magnífico de la Universidad de Salamanca

D. Daniel Miguel San José

Rector Magnífico de la Universidad de Valladolid

Secretario

D. Jesús Ignacio Sanz Valdivieso

*Coordinador de Servicios de la Dirección General de Telecomunicaciones
Consejería de Fomento y Medio Ambiente
Junta de Castilla y León*



universidad
de León



UNIVERSIDAD
DE BURGOS



UNIVERSIDAD
DE SALAMANCA
CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL



Universidad de Valladolid

SCAYLE

Descripción

Descripción técnica

Cartera de servicios

SCAYLE, Supercomputación y RES

Red de ciencia y tecnología de Castilla y León

Servicios TIC para las administraciones públicas

El **Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE)** es una Organización no lucrativa, perteneciente al Sector Público de Castilla y León, que tiene como actividad principal, la mejora de las tareas de investigación en las Universidades, los centros de I+D+i y las empresas de Castilla y León, promoviendo y desarrollando acciones de innovación en el mundo de la Sociedad del Conocimiento, el área del cálculo intensivo, las comunicaciones y los servicios avanzados, contribuyendo mediante el perfeccionamiento tecnológico al desarrollo económico de la Comunidad y a la mejora de la competitividad de las empresas.

Misión

Gestionar infraestructuras basadas en las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones para dar servicio a Organismos Públicos de Investigación, Empresas e Instituciones, impulsando la cooperación científica y el uso de infraestructuras comunes, **actuando como centro de servicios de computación y comunicaciones avanzadas** en Castilla y León y promoviendo el desarrollo de la ciencia y la transferencia de tecnología. **Impulsar** la **mejora de la Eficiencia Energética** en el ámbito de las Tecnologías de la Información y las Comunicaciones.

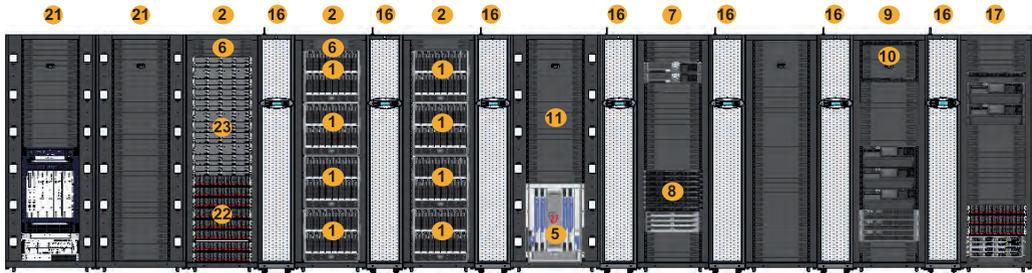
Visión

Liderar la gestión y el uso de las Tecnologías de la Información HPC, las redes de comunicaciones avanzadas y la mejora de la Eficiencia Energética en Centros de Proceso de Datos en Castilla y León para apoyar y mejorar la calidad y la eficiencia de los sistemas de investigación, los sistemas públicos de tratamiento de la información y la productividad y competitividad del tejido empresarial compatibilizando las necesidades de los servicios con los objetivos de desarrollo de los empleados.

Valores

- **Compromiso social** contribuyendo mediante el perfeccionamiento tecnológico al desarrollo económico de la Comunidad y a la mejora de la competitividad de las empresas.
- Desarrollo de líneas estratégicas fundamentadas en el **establecimiento de redes de colaboración permanente** que garanticen el uso eficiente de recursos tecnológicos compartidos y el diseño de nuevos modelos organizativos.

- **Actualización constante** contribuyendo de forma eficiente al desarrollo de la ciencia y a la transferencia de la tecnología.
- **Adopción del paradigma ecológico** formalizado con la integración de la gestión ambiental en el sistema de gestión, principalmente basado en la dinamización de modelos de gestión de recursos tecnológicos con criterios de máxima eficiencia energética.
- **Compromiso con el medio ambiente extrapolado al ámbito científico** consolidando una línea de investigación propia en el ámbito de la eficiencia energética en entornos HPC.
- **Participación destacada en la construcción de la ventaja competitiva** adoctrinada por la Estrategia Regional de Investigación Científica, Desarrollo Tecnológico e Innovación de Castilla y León.
- **Profesionalidad** gracias a un personal competente, con rigor profesional y comprometido con el servicio, procurando la estabilidad y desarrollo profesional de los trabajadores.



Caléndula. Racks, fila delantera. © SCAYLE. Plataforma Tecnológica 2017.

Cluster MPI

El clúster para proceso paralelo **2** o clúster MPI está compuesto por 371 nodos en la siguiente distribución:

- 256 servidores HP BL2x220c sobre 8 chasis Blade C7000. Son equipos de alta densidad, permitiendo instalar en dos armarios 128 servidores con un consumo a plena carga de 44Kw por armario. Cada uno de estos nodos cuenta con dos procesadores Intel Xeon E5450 de 4 cores, 16GB de RAM e Interfaz Infiniband DDR. **1**
- 6 servidores HP Proliant SL270s Gen8 cuentan cada uno con dos procesadores Intel Xeon E5-2670 de 10 cores, 128GB de RAM e interfaz Infiniband FDR. **3**
- 30 servidores Supermicro SS 6028TR-HTFR con 2 procesadores Intel Xeon E5-2630V3 con 8 cores, 32GB de RAM e interfaz infinid FDR. Estos nodos integran una tarjeta coprocesadora Intel Xeon Phi 5110P con 8GB de RAM y 60 cores de proceso. **22**
- 84 servidores Supermicro SS 2028TP-DC1FR con 2 procesadores Intel Xeon E5-2630V3 de 8 cores, 32 GB de RAM e interfaz infiniband FDR. **23**
- 1 servidor Dell R715 con tarjeta coprocesadora Intel Xeon Phi 5110P. **4**

Sistemas Auxiliares **7**

Los sistemas auxiliares son responsables de la propia gestión interna de SCAYLE, servidor de hora, monitorización, gestión de despliegue, de colas, etc. Se trata de 2 servidores Proliant DL360, 4 servidores DELL/EMC R610 y 4 HP Proliant DL160. **8**

Granja de Virtualización

Está basada en un clúster VMWare VSphere 6.0 **17** y contiene máquinas virtuales tanto de gestión interna de SCAYLE como de clientes.

Está compuesto por 15 servidores de diferentes fabricantes, entre los que están Huawei, Dell, Supermicro y HP. Todos ellos con 4 interfaces 10Gbe, 256 GB de RAM y entre 12 y 16 cores por servidor.

El servidor de copias de seguridad de esta granja es un HP Proliant DL160 g5 con dos procesadores Intel Xeon E5472 con 4 cores (teniendo un total de 8), 16 GB RAM. Con el software Veeam Backup instalado.

Redes de Interconexión Internas

En SCAYLEL existen tres redes, y todos los servidores están conectados a ellas: **9**

- Red 10G: el backbone de esta red lo forman dos conmutadores Force10 S4810 en configuración de alta disponibilidad y ubicados en el interior de los racks 7 y 15 **10**.
- Red Gigabit: el backbone de esta red es 1GbE, utilizando conmutadores Procurve 5412zl ubicados en el interior del rack 4 **11**.
- Red Infiniband: el núcleo del cálculo intensivo es la red Infiniband. Existe un fabric con un conmutador Voltaire ISR 2012 **5**, de tecnología DDR, y un segundo fabric de tecnología FDR basado en switches SX6036. **6**

cartera de servicios

Cálculo intensivo (HPC, High Performance Computing)

La vocación fundamental del Centro es la prestación de servicios de cálculo intensivo, tanto en programas que demandan proceso paralelo masivo (bajo estándar MPI, *Message Passing Interface*), como en aquellos que necesitan gran capacidad en ejecuciones secuenciales o para los que requieran en su ejecución disponer de alta capacidad de memoria RAM. Pero la orientación de SCAYLE no es sólo poner las infraestructuras a disposición de los usuarios para ejecución de programas en el clásico esquema FIFO (First In-First Out).

Caléndula dispone de un datacenter innovador y eficiente que permite el cumplimiento de SLA's (Service Level Agreement-Acuerdo de Nivel de Servicio) exigentes, por lo que el Centro se define como un socio tecnológico idóneo en proyectos HPC donde las condiciones de contorno requieran cumplimientos de plazos estrictos, alta seguridad, etc.

SCAYLE facilita a los usuarios la capacidad de cálculo y de almacenamiento necesario y el software de aplicación. El Centro dispone de un equipo de expertos multidisciplinar para asesorar a los grupos de usuarios en la mejor solución para sus necesidades.

Desarrollo de Proyectos

SCAYLE participa en proyectos de investigación en diferentes campos (astrofísica, meteorología, biotecnología, etc.), aportando conocimiento sobre soluciones innovadoras de cálculo. Esta modalidad de trabajo permite la incorporación de nuevas metodologías basadas en modelización, simulación y uso intensivo de datos en proyectos de investigación de diferentes áreas científicas y tecnológicas, contribuyendo a la mejora de las tareas desarrolladas en los mismos. Esto supone un valor añadido para los usuarios, favoreciéndose el alcance de resultados más precisos en un menor intervalo de tiempo y optimizando los costes.

Servicios TIC para las administraciones públicas

Desde sus comienzos, el Centro ha hecho una apuesta decidida por el *Cloud Computing* y sus tecnologías y metodologías asociadas, sobre la base de que el *Cloud* supone una forma eficiente de utilización de infraestructuras TI. Por ello el centro participa en proyectos de desarrollo de tecnología *Cloud*, y ofrece servicios basados en ella. Para ello se ha creado el concepto de Datacenter Virtual (*Datacenter-as-a-Service*), y presta servicios para diversas organizaciones.

SCAYLE puede llevar a cabo la prestación de servicios de Cloud Computing a la Junta de Castilla y León actuando como *medio propio instrumental* y *servicio técnico* de la misma, no incurriendo en conflictos de competencia:

- Servicio de *Backup*: realización de copias de seguridad de los centros usuarios y almacenamiento de las mismas en el Centro. Los centros usuarios obtienen un doble beneficio:
 - Bajo coste debido a las economías de escala que ofrece una infraestructura como la de SCAYLE.
 - Cumplimiento de la norma: alojar la copia de seguridad fuera de las dependencias donde reside el dato (requisito legal).
- Servicio de *DataCenter Virtual*: se mantiene un entorno virtual completo (servidores, redes, etc.) que puede complementar la demanda de los centros usuarios y acabar reemplazando centros de proceso de datos:
 - Reemplazar CPDs de pequeña entidad y, por tanto, poco rentables.
 - Complementar la capacidad de CPDs con picos de demanda.
- Servicios de Big Data: la capacidad de proceso de los sistemas de SCAYLE permiten ofrecer servicios donde son necesarias metodologías Big Data.

Operación y Gestión de la Red Regional de Ciencia y Tecnología (RedCAYLE)

El primer propósito de la red es la prestación de servicios de conectividad y telecomunicaciones, pero además es el medio idóneo para canalizar servicios de valor añadido:

- Servicios de Operación de Red:
 - Gestión de las incidencias de la red.
 - Control de las métricas.
 - Gestión de los equipos de la red regional.
 - Control del inventario y versiones.
- Servicios de Valor Añadido:
 - Consolidación de servidores.
 - Optimización de licencias de SW.
 - Centros de respaldo.
 - Copias de seguridad remotas.
 - Administración electrónica.
 - Gestión de bibliotecas.
 - Servicios de aulas virtuales.



SCAYLE, Supercomputación y RES

Supercomputación

Los superordenadores son equipos informáticos extremadamente potentes, diseñados para hacer frente a complejos cálculos científicos o técnicos.

Están formados por centenares, miles o decenas de miles de potentes ordenadores pero que son convencionales en cuanto a diseño y componentes. Cuentan con diferentes tecnologías que permiten dividir un problema complejo en tareas más pequeñas y asumibles por los ordenadores que lo forman. Cada uno de estos ordenadores calcula una pequeña parte del problema y finalmente todos contribuyen a la solución buscada.

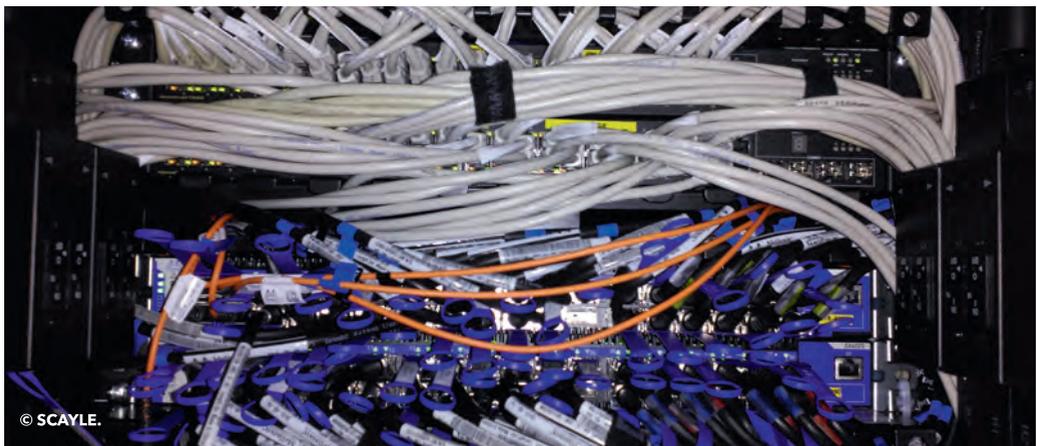
Su rendimiento se mide en una unidad denominada flops del inglés floating point operations, operaciones de coma flotante. De forma simplificada, podemos definir que cada una de estas operaciones de coma flotante, puede ser una suma, resta, multiplicación o división realizadas cada segundo.

En la actualidad el superordenador más potente del mundo, según la lista Top500.org que mide los 500 superordenadores más potentes del mundo, es el superordenador chino Sunway TaihuLight con 125 petaflops (125×10^{15} operaciones de coma flotante por segundo).

Algunas de las aplicaciones de la supercomputación son bien conocidas y llevan entre nosotros bastante tiempo, como la predicción meteorológica y climatológica, o distintas aplicaciones que modelizan el comportamiento de diferentes fluidos como el aire o el agua, para diseñar coches o barcos.

Otros usos de la supercomputación no han llegado aún al gran público. Quizá el caso más relevante es el uso de superordenadores por parte de investigaciones relacionadas con las Ciencias de la Vida. Las investigaciones genéticas y el desarrollo de nuevos fármacos son ejemplo de nuevas técnicas que demandan grandes potencias de cálculo.

Caléndula y el equipo de SCAYLE han sido el actor necesario para poner los sistemas de cálculo, las herramientas y el conocimiento adquirido, a disposición de los usuarios durante estos 10 años.



El Centro de Supercomputación en la ICTS distribuida Red Española de Supercomputación

En el año 2015 el Centro de Supercomputación de Castilla y León dio un importante paso al incorporarse como miembro de la Red Española de Supercomputación RES. La RES está reconocida por el Ministerio de Economía, Industria y Competitividad como una Infraestructura Científico y Técnica Singular ICTS distribuida.

Se trata de una red que interconecta a 12 superordenadores distribuidos por todo el territorio nacional y que colaboran juntos para proporcionar recursos de supercomputación a diferentes proyectos de investigación.

Desde su incorporación a la RES, Caléndula a dedicado parte de su sistema de cálculo para proporcionar horas de cálculo. También se proporciona soporte a los investigadores por parte del personal técnico del Centro, para conseguir que los cálculos realizados se hagan de la forma más optimizada posible.

La incorporación efectiva a las distintas convocatorias públicas publicadas por la RES, se realizó en la convocatoria que comenzó en Noviembre de 2015. Desde entonces, se han asignado aproximadamente 18 millones de horas de procesador a los diferentes proyectos asignados y han hecho uso de nuestro sistema de cálculo más de 20 grupos investigadores con más de 70 usuarios.

Entre los proyectos asignados a Caléndula podemos mencionar proyectos de investigación sobre nuevas técnicas de radioterapia, cálculos sobre tectónica de placas o investigación sobre nuevos materiales.

Por su importancia reciente, debemos destacar aquí la asignación de 1.500.000 de horas de procesador para los cálculos realizados sobre los datos del observatorio LIGO que llevaron al descubrimiento de las ondas gravitacionales. Los directores del proyecto recibieron el Premio Princesa de Asturias de Investigación Científica y Técnica 2017 y el Premio Nobel de Física 2017.



Pasillo frío de Caléndula. © SCAYLE.

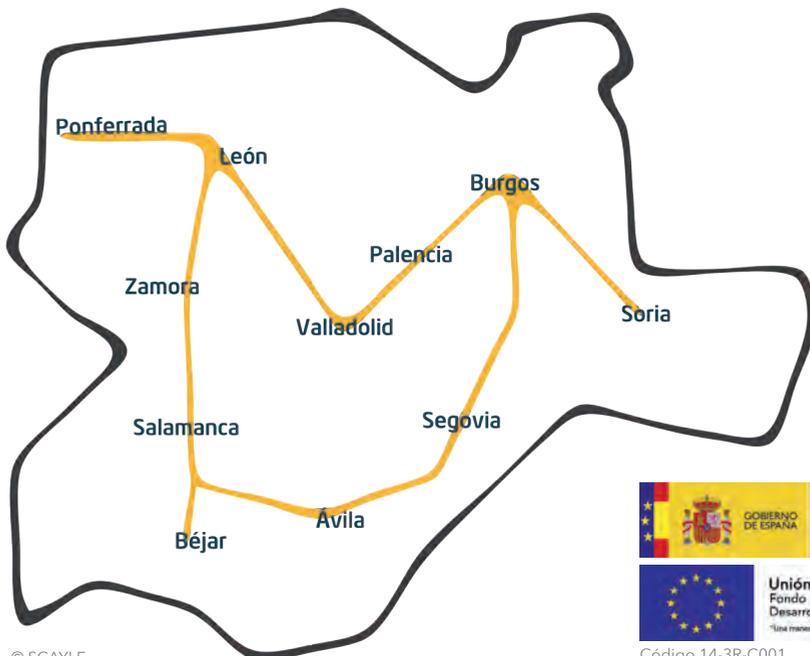
Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León

La ciencia se desarrolla cada vez más a través de proyectos de colaboración en los que los investigadores acceden a instrumentos y otros recursos científicos de forma remota, intercambiando datos y resultados a gran velocidad. Para ello hacen falta redes, que están por encima de los servicios comerciales que ofrecen los operadores de telecomunicaciones: circuitos de muy alta capacidad (10/100 Gbps), con muy baja latencia, plazos de activación muy reducidos o capacidad de gestión extremo a extremo.

RedIRIS-NOVA es la respuesta estratégica del Gobierno Español al servicio de la cohesión y la competitividad en torno a la ciencia y la innovación. La nueva generación de RedIRIS permite a los investigadores disponer de una infraestructura tecnológica de primer nivel para poder utilizar de manera flexible y eficiente los nuevos instrumentos científicos.

La Junta de Castilla y León, a través de la Consejería de Educación, ha trabajado en el proyecto de la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León (RedCAYLE). El establecimiento y puesta en servicio de la RedCAYLE que ha consistido en la contratación de infraestructura de fibra oscura en las mismas condiciones que en RedIRIS-NOVA

La ejecución hasta ahora del proyecto contempla la interconexión con fibra oscura de los campus universitarios localizados en las nueve capitales de provincia y pertenecientes a las universidades públicas de Castilla y León, las instalaciones científico-tecnológicas singulares, los institutos de investigación, los parques científicos y la Red Hospitalaria Universitaria.



El Centro de Supercomputación de Castilla y León actúa como oficina técnica y centro de coordinación de la RedCAYLE.

A finales de 2015 la Red se había desplegado en su totalidad con los 11 campus universitarios públicos de Castilla y León conectados a ella. Estas interconexiones suponen un gran salto cualitativo respecto a lo que disponen actualmente, pero apenas suponen una fracción de la capacidad posible de la Red. La Red está técnicamente diseñada para poder soportar sobre ella redes de alta capacidad superpuestas y separadas. Este diseño técnico facilita otros usos: permite incorporar los más de 1.000 centros de enseñanza primaria y secundaria existentes en la Comunidad mediante un proyecto puesto en marcha por Red.es, y de esta forma disponer de una red de interconexión de muy alta capacidad para centros docentes universitarios y no universitarios. De la misma manera, la propia administración autonómica puede rentabilizar la Red al tener la posibilidad de utilizarse los enlaces entre capitales para los usos corporativos de la Junta de Castilla y León.

El Centro de Supercomputación de Castilla y León ha sido el responsable del diseño y despliegue de la red Regional de Castilla y León, y lo es también de su operación y explotación. Asimismo, SCAYLE es el interlocutor con RedIRIS para las tareas necesarias de coordinación entre redes, participa en el Grupo de Trabajo de Redes Regionales de RedIRIS, en el que tiene un papel muy relevante, y es LIR (Local Internet Registry) de RIPE, la organización que controla el espacio de direcciones de Internet en Europa, Oriente Medio y Asia Central.

Para la puesta en marcha de la red, el centro adquirió los correspondientes equipos, que están basados en tecnología de multiplexación densa en longitud de onda (Dense Wavelength Division Multiplexing, DWDM). Gracias a la Red Regional se ha multiplicado por diez la velocidad de conexión entre los campus universitarios periféricos y centrales, de esta forma las conexiones de los campus de Zamora, Ávila y Béjar con el de Salamanca; las de Palencia, Segovia y Soria con el de Valladolid y la conexión de Ponferrada con León se realizan actualmente a través de circuitos de 10Gbs. A finales de 2016 se instalaron dos Routers de altas prestaciones, uno en León y otro en Valladolid, que absorberán todo el intercambio de tráfico IP entre los centros conectados a la Red Regional y el resto de redes académicas nacionales e internacionales. La instalación de estos Routers supone también un salto de calidad del servicio, ya que actualmente sólo existe uno para dar servicio a Castilla y León y, en caso de fallo, podría quedar incomunicada la región.

En un futuro próximo la red no sólo conectará los centros de investigación y docentes universitarios, sino que gracias al Proyecto "Escuelas conectadas" todos los centros de primaria y secundaria de la Comunidad también podrán conectarse a alta velocidad a la Red Regional.



Equipamiento óptico adquirido para la Red Regional de Castilla y León. © SCAYLE.

Servicios TIC para las administraciones públicas

El centro de datos entendido como entidad física y aislada que proporciona servicios físicos a terceros, ha dado paso a otro modelo. Ahora estamos en la era de la virtualización y de las infraestructuras distribuidas geográficamente.

Los centros de datos son el núcleo central de soporte físico de los servicios ofrecidos por Internet. Desde el hospedaje de equipos, comercio electrónico, redes sociales y en general conceptos recientemente puestos en práctica a raíz del modelo de computación en la nube o modelo *cloud*:

- SaaS, *software* como servicio: modelo de distribución del *software* a los usuarios a través de Internet, pagan sólo por su uso y se desentienden de las operaciones de mantenimiento del mismo.
- PaaS, plataforma como servicio: el cliente cuenta con un servicio que le permite alojar y desarrollar sus propias aplicaciones en una plataforma que dispone de herramientas de desarrollo para que el usuario pueda completar una solución. El usuario sólo tiene control sobre sus aplicaciones pero no sobre la plataforma ni las infraestructuras que subyacen.
- IaaS, infraestructura como servicio: el usuario tiene acceso a infraestructuras tecnológicas (capacidad de procesamiento, almacenamiento y red), donde podrá alojar sus aplicaciones y plataformas.

En definitiva el *cloud*, apoyado en técnicas de virtualización, nos permite la optimización de recursos y mejora la redistribución de éstos en función de las necesidades de los servicios que lo requieran.

Se están llevando a la nube los servicios asociados al nicho de negocio de SCAYLE para su virtualización, hecho que permite despreocuparse de la infraestructura física, dejando esa gestión a entidades que poseen la tecnología, y que proporcionan el mismo servicio a costes más bajos. Sería un error dar salida a toda esta demanda únicamente construyendo centros de datos más grandes y potentes, sin tener en consideración otros aspectos que ayuden a llevar a cabo estos nuevos retos.

La creación y gestión de plataformas globales para la virtualización de centros de datos en el ámbito de las administraciones públicas, proporciona la posibilidad de tener escalabilidad no limitada, movilidad de la plataforma completa y gestión operacional centralizada que facilita el mantenimiento, control y monitorización de la misma. Estos objetivos marcados, suponen una reducción de costes significativa comparados con una implementación tradicional de la misma infraestructura a nivel local, así como dotar de capacidad móvil al conjunto de la plataforma hacia cualquier otra infraestructura física.



PROYECTOS I+D+i

Miembro del Consorcio

SKA, Square Kilometre Array

Colaborador

METEORISK

Análisis del transcriptoma de la mucosa y los ganglios abomasales para la identificación de genes involucrados en la resistencia a los nematodos gastrointestinales en ovejas adultas

Captura de CO2 en post-combustión utilizando líquidos iónicos

Ajuste, Validación e Implantación del Modelo Físico PHFFS de Simulación de Incendios Forestales

Análisis de múltiples pathways

Nuevos escenarios de la óptica de pulsos de Femto y Attosegundos

Carácter multifactorial de los polifenoles: oportunidad para el desarrollo de herramientas terapéuticas frente a obesidad y enfermedades infecciosas

Cirugía Oncológica: modelo de gestión y formalización del conocimiento (casos de estudio cáncer colorrectal - CCR)

Diseño y caracterización de líquidos porosos para la captura y el almacenamiento de CO2

Nuevas tecnologías de secuenciación (NGS) para el estudio de los micovirus en *Fusarium circinatum*

Colaboraciones en proyectos I+D+i a través de la RES

Publicaciones científicas

SKA, Square Kilometre Array

Objetivo del proyecto

El SKA es un proyecto de ciencia mundial sin precedentes en tamaño y escala en el campo de la radioastronomía.

Tiene como misión construir el mayor radiotelescopio del mundo con un kilómetro cuadrado de área de recolección. Esta escala representa un salto adelante en ingeniería e investigación que se traducirá en un incremento correspondiente en la capacidad científica cuando comience a operar, hecho que hará del SKA el mayor conjunto de radiotelescopios que se haya construido.

Esta infraestructura constituirá una revolución en astronomía, astrofísica, astrobiología y física fundamental, áreas objeto de investigación en los principales centros astrofísicos de España, así como en geofísica y geodesia. Asimismo también supondrá una revolución tecnológica en campos como la distribución y procesado masivo de datos a gran velocidad, la generación, almacenamiento y distribución de calor y electricidad, o la e-Ciencia como herramienta clave para permitir la colaboración a nivel mundial necesaria para desarrollar y explotar este instrumento.

Periodo de ejecución

1 de enero de **2013** al 31 de diciembre de **2017**.

Financiación del proyecto

La SKA Organization es la responsable de coordinar las actividades mundiales del Proyecto SKA. Tiene su sede en Manchester, Reino Unido.

Distintas instituciones públicas de los estados miembros financian el proyecto:

Alemania: Federal Ministry of Education and Research, www.bmbf.de/en

Australia: Department of Industry, www.innovation.gov.au

Canada: National Research Council (NRC), www.nrc-cnrc.gc.ca

China: National Astronomical Observatories perteneciente a la Chinese Academy of Sciences (NAOC), <http://english.nao.cas.cn>

Holanda: Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO), www.nwo.nl/en

India: National Centre for Radio Astrophysics (NCRA) (como miembro asociado de SKA), www.ncra.tifr.res.in/ncra

Italia: National Institute for Astrophysics (INAF), www.inaf.it

Nueva Zelanda: Ministry of Economic Development, www.med.govt.nz

Reino Unido: Science and Technology Facilities Council (STFC), www.stfc.ac.uk

Sudafrica: National Research Foundation (NRF), www.nrf.ac.za

Suecia: Onsala Space Observatory, www.chalmers.se/rss/oso-en

Funciones de SCAYLE

SCAYLE participa dentro del Paquete de Trabajo *Science Data Processor SDP* www.skatelescope.org/skadesign/wp/sdp, el cual se centra en el diseño de los recursos de *hardware*, *software* y algoritmos necesarios para procesar los datos científicos generados por otros componentes del proyecto y convertirlos en productos usables por los científicos. Las tasas de datos producidas y procesadas excederán diariamente todo el tráfico mundial diario de Internet.

Los datos que deberán procesarse alcanzarán tasas del orden de cientos de gigabits por segundo. Esto quiere decir que serán necesarias grandes infraestructuras de supercomputación para el procesamiento de esa información, a la vez que serán necesarios nuevos desarrollos de ingeniería del *software*, algoritmos y nuevas tecnologías de gestión y cálculo en los supercomputadores.

El consorcio que forma el SDP está dirigido por el profesor Paul Alexander de la Universidad de Cambridge.

Justificación del proyecto

El SKA pretende ser el mayor radiotelescopio que se haya construido, y para ello utilizará varios miles de platos de alta frecuencia así como platos de baja frecuencia y de media frecuencia de la matriz de apertura de los telescopios, con un diámetro de los platos de 15 metros. Los telescopios se pueden organizar en múltiples configuraciones de brazos en espiral, con los platos que se extienden a grandes distancias de los núcleos centrales creando lo que se conoce como una serie de interferómetro de línea de base.

En dicha matriz, la distancia física que separa a los telescopios y la distancia entre ellos se calcula con precisión utilizando la diferencia de tiempo entre la llegada de señales de radio en cada receptor. Posteriormente los ordenadores calcularán cómo combinar estas señales para sintetizar parte del tamaño equivalente de un solo plato de la medición de la anchura de la distancia entre los dos ámbitos.

Estas técnicas de interferometría permiten a los astrónomos emular un telescopio con un tamaño igual a la máxima separación entre los telescopios de la matriz, o si es necesario, sólo la distancia entre un subconjunto de los telescopios, o de varios

grupos de la principal array.

De esta manera, en lugar de construir un plato gigante, en el que las capacidades de un enorme plato son superadas por la flexibilidad de esta configuración de interferometría, se construye un sistema que pueda actuar como un gigantesco telescopio, o múltiples telescopios más pequeños o como cualquier combinación intermedia.

Este diseño en espiral optimiza la configuración para obtener mejores resultados proporcionando una capacidad de resolución de imagen muy alta.

Líder del proyecto

El PROYECTO SKA está dirigido por la Organización SKA, www.skatelescope.org, con sede en el Observatorio de Jodrell Bank (Reino Unido). Es una empresa sin ánimo de lucro establecida en diciembre de 2011 para la formalización de las relaciones entre los socios y centralizar el liderazgo de este gran esfuerzo.

La historia del SKA comienza en septiembre de 1993 cuando la Unión Internacional de Radio (URSI) establece el Grupo de Trabajo Gran Telescopio para comenzar un esfuerzo mundial para desarrollar los objetivos científicos y las especificaciones técnicas de un observatorio de radiotelescopio de última generación.

La Oficina de la Organización SKA es responsable de coordinar las actividades globales del proyecto SKA. Esto incluye la ingeniería, la ciencia, la evaluación del emplazamiento, el funcionamiento y alcance público.





Radiotelescopio SKA. Fuente: Ska, www.skatelescope.org

Participantes del proyecto

Los países miembros de SKA Organization son: Australia, Canadá, China, Alemania, Italia, Nueva Zelanda, Sudáfrica, Suecia, Holanda y el Reino Unido.

Además de los países miembros, en la actualidad también participan unas cien instituciones de Brasil, Francia, Japón, Malta, Corea del Sur, Polonia, Portugal, Rusia, España y Estados Unidos.

En España se ven involucradas veintiuna entidades:

- Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), www.scayle.es
- Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT), www.ciemat.es
- Observatorio Astronómico Nacional (OAN-IGN), www.oan.es
- Universidad de Granada (UGR), www.ugr.es
- Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA-CSIC), www.iaa.es
- Centro Nacional de Supercomputación (BSC), www.bsc.es
- Instituto de Física de Cantabria (IFCA-CSIC), www.ifca.unican.es
- Departamento de Ingeniería de Comunicaciones de la Universidad de Cantabria (DICOM-UC), www.unican.es
- Universidad Pública de Navarra (UPNA), www.unavarra.es
- Laboratorio de Sistemas Integrados de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM), www.etsit.upm.es
- TTI norte, www.ttinorte.es
- Anteral, www.antal.com
- DAS Photonics, www.dasphotonics.com
- 7Solutions, www.7solutions.com
- ISDEFE, www.isdefe.es
- GTD (a través de su filial alemana GTD GmbH), www.gtd-gmbh.de
- CSP Sunless (Vinci ingeniería), www.ingevinci.com
- Aora Solar Spain, www.protermosolar.com
- Torresol Energy, www.torresolenergy.com
- Arraelae, <http://arraela.com>
- iGrid-TD, www.igrid-td.com

METEORISK,

Plataforma para la predicción de eventos meteorológicos de Alto Impacto Socio-económico

Objetivo del proyecto

Con el Proyecto METEORISK se pretende:

- **Desarrollar un sistema para la predicción en tiempo real (nowcasting), a muy corto y a corto plazo (very short-range and short-range) de riesgos meteorológicos de alto impacto socioeconómico.**
- **Construir un sistema que supervisa las predicciones de forma automatizada y genera alarmas en situaciones donde se prevén daños socioeconómicos.**
- **Generar un sistema escalable, de manera que pueda operar con grandes cantidades de datos (Big Data) con información georreferenciada de aquellas regiones que sean de interés.**
- **Integrar las soluciones en las lógicas de negocio correspondientes a cada ámbito (hidrología, ayuda a los servicios de protección civil, transporte, infraestructuras críticas, optimización de logística frente a situaciones meteorológicas adversas, etc.).**

Periodo de ejecución

8 de diciembre del 2014 al 31 de junio del 2017.

Financiación del proyecto

Programa Retos - Colaboración del Programa Estatal de Investigación, Desarrollo e Innovación Orientada a los Retos de la Sociedad del Ministerio de Economía y Competitividad, MINECO, www.mineco.es

Participantes del proyecto

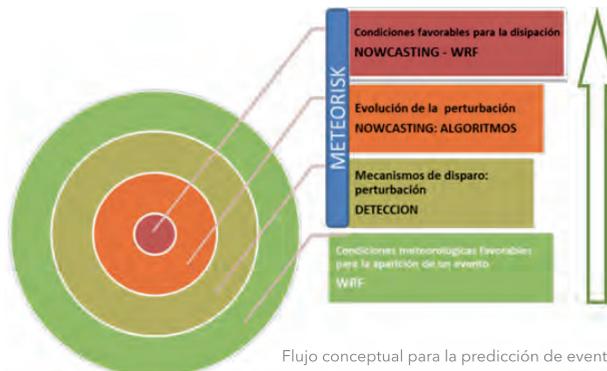
Dominion, www.dominion.es

Near Technologies, www.neartechnologies.com

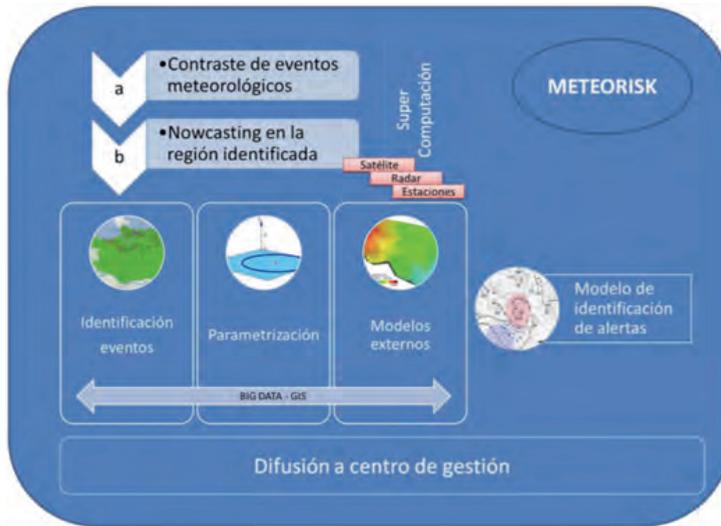
Vicomtech, www.vicomtech.org

Grupo de Física de la Atmósfera (GFA) de la Universidad de León, gfa.unileon.es

Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), www.scayle.es



Flujo conceptual para la predicción de eventos meteorológicos adversos.



Flujo de operaciones a realizar en METEORISK.

Funciones de SCAYLE

El desarrollo del proyecto prevé la participación SCAYLE. Sus recursos de cálculo científico-HPC y del personal asignado al proyecto, permitirá la ejecución de las tareas operativas de predicción numérica meteorológica mediante el modelo mesoescalar Weather Research and Forecasting WRF, implementando asimismo los campos meteorológicos y los modelos de nowcasting que se desarrollen durante el proyecto METEORISK, dando cobertura a las tareas informáticas en gestión de predicciones en tiempo real, a muy corto y corto plazo y análisis post-evento.



Código RTC-2014-1872-5

Líder del proyecto

DOMINION, www.dominion.es, es un grupo tecnológico multisectorial de origen español, fundado en 1999, que aporta valor combinando conocimiento e innovación para generar eficiencia aplicada a las actividades productivas de sus clientes. Dominion cuenta con más de 5.500 profesionales y presencia en más de 20 países, con 7 Centros de Ingeniería. Dominion está mayoritariamente participada por el Grupo CIE Automotive, cotizado en la Bolsa Española (MC: CIE) e India, con una facturación en 2013 de: 1.760,3 M€, con presencia estable en 5 continentes y un equipo de más de 25.000 empleados.

Con una oferta basada en la innovación aplicada, Dominion ofrece soluciones & EPCs y servicios tecnológicos centrados en facilitar la permanente actualización de modelos productivos en un entorno crecientemente global y digital.

La misión de la empresa es ofrecer Soluciones Tecnológicas en el ámbito de la Educación, Sanidad, Sostenibilidad, Transportes y Comunicaciones y sobre la base de nuestras capacidades, ofrecer Servicios Tecnológicos en los mercados de Telecomunicaciones y Finanzas.

Justificación del proyecto

Según la definición propuesta por la Comisión Económica para América Latina y el Caribe, CEPAL, un desastre es un repentino e imprevisto evento que ocasiona daños, pérdidas y paralización temporal de las actividades de un área determinada y que afecta a una parte importante de la población, que puede tener su origen en un fenómeno meteorológico natural, en la acción del ser humano o la tecnología.

En los últimos años, la magnitud y frecuencia de aparición de fenómenos meteorológicos extremos, que pueden considerarse peligrosos, ha aumentado considerablemente, entre cuyas causas se encuentra el cambio climático producido por la interacción de factores meteorológicos con otros de origen ambiental o/y humano, dando lugar a numerosos desastres naturales cuyas pérdidas, tanto humanas como materiales, han tenido una gran repercusión a nivel internacional.

La naturaleza y la gravedad de los impactos debidos a fenómenos meteorológicos extremos no dependen solo de los propios fenómenos sino también de la exposición y la vulnerabilidad, influenciadas por un gran número de factores, incluidos el cambio climático provocado por la acción del ser humano, la variabilidad natural del clima y el desarrollo socioeconómico del lugar donde se produce el fenómeno, siendo muy diferente la repercusión de un fenómeno dado en un país desarrollado o en un país en vías de desarrollo.

En este contexto, es donde la gestión de los riesgos de desastre se vuelve más importante a través de la puesta en marcha de proyectos para llevar a cabo una adecuada observación y la mejora de las predicciones meteorológicas, mediante la utilización de nuevas herramientas y desarrollos tecnológicos. Esto supone un avance en la prevención y mitigación de los desastres meteorológicos y, por consiguiente, un gran beneficio para la sociedad.

Existen evidencias de cambios en algunos fenómenos climáticos extremos obtenidas a partir de las observaciones realizadas desde 1950. La fiabilidad de esta información depende de la calidad y la cantidad de datos disponibles, que varían en función de la región de ocurrencia, el tamaño considerado de la región de estudio y los distintos fenómenos climáticos extremos

observados. Así, en regiones pequeñas de países desarrollados, se dispone de una cantidad de información mucho mayor que en zonas de mayor tamaño de países o regiones en vías de desarrollo, por lo tanto, el nivel de confianza con respecto a la información obtenida de la evolución de estos fenómenos es diferente en cada caso, haciendo necesario el desarrollo de modelos de observación más precisos y fiables, cuyos datos puedan ser tratados con un alto nivel de confianza y que ello permita una mejor definición del alcance de los riesgos existentes.

A partir de la observación de los fenómenos meteorológicos más extremos se pueden definir con un nivel de fiabilidad aceptable las situaciones de riesgo a las que está expuesta la sociedad, y definir el modo de actuación en el caso de producirse uno de estos fenómenos.

Complementariamente, la predicción de las condiciones meteorológicas con una incertidumbre reducida, y la detección a tiempo de estos fenómenos, es el objetivo a perseguir por los modelos predictivos para, una vez detectado el riesgo inminente, poner en marcha las actuaciones preventivas y de protección para mitigar y minimizar, en la medida de lo posible, los daños producidos ante la aparición de un fenómeno meteorológico extremo.

La puesta en marcha de los planes de emergencia diseñados ante un evento de estas características depende en gran medida del uso de los canales de comunicación y las opciones de lo que comúnmente conocemos como "media" para el envío de la información necesaria para la gestión de estos fenómenos que, en el caso de realizarse de manera correcta, reduce el impacto del fenómeno y mejora la distribución, comprensión y coordinación de los agentes intervinientes en la presentación de la información.

Análisis del transcriptoma de la mucosa y los ganglios abomasales para la identificación de genes involucrados en la resistencia a los nematodos gastrointestinales en ovejas adultas

Objetivo del proyecto

El objetivo del proyecto es la utilización de la secuenciación masiva paralela para identificar nuevos genes candidatos, y mutaciones, relacionados con la respuesta inmune diferencial en ovejas "resistentes" y "susceptibles" a las infecciones por nematodos gastrointestinales (GIN). Esto se realizará mediante el estudio comparativo del perfil de expresión génica de los ganglios abomasales y de la mucosa abomasal en ovejas adultas resistentes y susceptibles a la infección por GIN.

Periodo de ejecución

19 de noviembre del **2014** al 30 de septiembre del **2017**.

Financiación del proyecto

Convocatoria de Apoyo a proyectos de investigación a iniciar en el año 2014, de la Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León, www.educa.jcyl.es

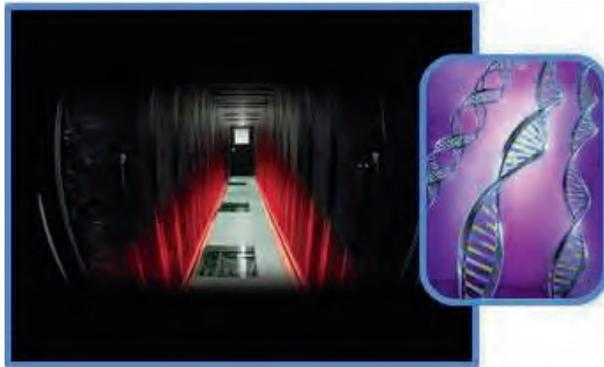
Participantes del Proyecto

Grupo de Mejora Genética Animal del Departamento de Producción Animal de la Universidad de León, www.unileon.es

Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), www.scayle.es



Las infecciones por nematodos gastrointestinales constituyen un grave problema para el ganado ovino con manejo semi-extensivo.



Este proyecto utilizará técnicas de secuenciación masiva paralela para identificar los genes activados de forma diferencial en animales resistentes y susceptibles a estas infecciones.

Líder del proyecto

El DEPARTAMENTO DE PRODUCCIÓN ANIMAL, Universidad de León (ULE), www.unileon.es

El Departamento de Producción Animal ejerce su docencia en 4 titulaciones diferentes, actividad que engloba desde el primer y segundo ciclo, hasta la docencia en tercer ciclo-doctorandos.

Su actividad investigadora se centra en varias líneas de trabajo que desarrollan los siguientes grupos de investigación:

- Acuicultura Continental.
- Alimentación de Rumiantes.
- Ecología Ruminal.
- Etología y Manejo de Animales Útiles.
- Mejora Genética Animal.
- Producción y Conservación de Forrajes.

Los servicios de I+D+i que ofrecen van desde las Técnicas de cultivo de astácidos o de la tenca, hasta el Análisis bromatológico de leche, pasando por la Gestión de riesgos en la empresa agroalimentaria o la Identificación y verificación genealógica mediante pruebas de ADN, entre otros.

Asimismo posee innumerables publicaciones y documentos fruto de su actividad investigadora.

Justificación del proyecto

Este proyecto se plantea como una estrategia complementaria a la identificación de genes con influencia sobre la resistencia a la infección por GIN en ganado ovino por métodos clásicos de mapeo génico. En este caso se seguirá una aproximación funcional basada en las diferencias de los genes que se activan de forma diferencial entre animales resistentes y susceptibles en el lugar de la infección. La identificación de genes y mutaciones relacionadas con la resistencia a las parasitosis gastrointestinales hace que los resultados de este estudio puedan servir para establecer las bases del uso de la selección genética, auxiliada por esta información molecular, como complemento de los métodos de control utilizados actualmente, de esta forma se espera que se dé lugar a una reducción en el uso de fármacos antihelmínticos. Asimismo, de forma directa, también se va a proporcionar una mejora del bienestar animal y un incremento de la productividad/rentabilidad de las explotaciones ovinas, conllevando además de forma indirecta una reducción de residuos farmacológicos en los productos animales, y por tanto un beneficio para la salud pública.

Funciones de SCAYLE

Este proyecto se basa en el análisis de datos de RNA-Seq, en los que gracias al uso de las tecnologías de secuenciación de tercera generación se secuenciará el transcriptoma completo de los ganglios y la mucosa del abomaso de los dos grupos de animales en estudio. Es decir que se generará información de todos los genes que se expresan en el lugar de la infección. Además de la gran capacidad de almacenamiento necesaria para albergar la información generada, los análisis bioinformáticos que se realizarán con los datos de RNA-Seq necesitan de una gran capacidad de procesamiento y se verán altamente beneficiados por la utilización de la computación en paralelo ofrecida por el supercomputador de SCAYLE.



Captura de CO₂ en post-combustión utilizando líquidos iónicos

Objetivo del proyecto

En el proyecto se plantean varias metas:

- **Analizar la capacidad de captura de CO₂ utilizando líquidos iónicos funcionalizados y desarrollados a partir de iones biodegradables.**
- **Caracterización a nivel nanoscópico de la absorción de CO₂ y otros gases relevantes (SO₂, NO_x, N₂ y agua) en los líquidos iónicos seleccionados utilizando métodos de química computacional (DFT y dinámica molecular).**
- **Predicción teórica de las propiedades termofísicas más relevantes para la captura de CO₂: densidad, viscosidad, estabilidad térmica y capacidad calorífica. Así como la predicción de la solubilidad del CO₂ en los líquidos iónicos diseñados utilizando dinámica molecular y métodos tipo Monte Carlo.**
- **Caracterización teórica de las propiedades de las interfases líquido iónico - gases de combustión.**
- **Análisis cinético teórico del proceso de absorción. Y Análisis tecnoeconómico de los procesos de absorción utilizando los fluidos seleccionados, en comparación con los métodos clásicos basados en aminas.**

Periodo de ejecución

1 de enero del 2015 al 31 de diciembre del 2017.

Financiación del proyecto

Convocatoria de Apoyo a proyectos de investigación a iniciar en el año 2015, de la Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León, www.educa.jcyl.es

Participantes del Proyecto

Grupo Análisis y Simulación Molecular de Fluidos, Departamento de Química. Universidad de Burgos, www.ubu.es/ubu/cm/ubu/temas/DepQuimica

Grupo Thermodynamics for Energy and Environment, Department of Chemical Engineering, Qatar University, Doha, Qatar, www.qu.edu.qa/engineering/chemical

Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), www.scayle.es



Junta de
Castilla y León

Proyecto JCYL, Código BU324U14

Líder del proyecto

GRUPO DE ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE FLUIDOS de la Universidad de Burgos, www.ubu.es/ubu/cm/ubu/temas/DepQuimica, es liderado por el Prof. Santiago Aparicio, Profesor Titular del Departamento de Química junto a cuatro investigadores. El Grupo colabora de forma continua con los grupos del Profesor Mert Atilhan (Qatar University, Qatar), C. Yavuz (Korea Advanced Institute of Science, Corea del Sur) y L. Costa (Universidade Federal Fluminense, Brasil), entre otros grupos nacionales e internacionales.

El Grupo posee más de 100 artículos publicados en revistas científicas internacionales en los últimos 5 años. El IP del Grupo ha participado como ponente en multitud de conferencias internacionales.

Tienen proyectos activos financiados por la Junta de Castilla y León, el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) y entidades internacionales como Qatar National Research Fund.

Justificación del proyecto

Existen pruebas experimentales crecientes que muestran que el cambio climático global está ocurriendo. Asimismo, todos los estudios muestran que la causa principal de este cambio es la emisión antropogénica de Gases de Efecto Invernadero (GEI) en la atmósfera. El CO₂ es el GEI más importante (57 %), y de este gas, la fuente más importante son las emisiones relacionadas con la producción de energía (26 %). Los modelos muestran que las emisiones de CO₂ relacionadas con la producción de energía aumentarán desde las 31,2 billones de toneladas (toneladas US) métricas en 2010 a 36,4 en 2020 y a 45.5 en 2040. Este incremento se justifica considerando que el consumo previsto de combustibles fósiles para la generación de electricidad se incrementará a lo largo de los próximos años, a un ritmo del 2,5 % y del 1,8 % anual para el gas natural y el carbón, respectivamente en el intervalo 2010 a 2040. Por tanto, los combustibles fósiles seguirán siendo en las próximas décadas la principal fuente para la generación de electricidad, ya que las fuentes renovables, a pesar de su crecimiento, serán insuficientes para cubrir el incremento de la demanda energética. De esta forma, controlar las emisiones de CO₂ procedentes de la combustión de combustibles fósiles en la producción de energía eléctrica es fundamental para minimizar la contribución al efecto invernadero y al cambio climático, sin frenar el desarrollo económico, tecnológico y social.

Las principales alternativas para el CO₂ procedente de la combustión de combustibles fósiles para la producción de electricidad son: a) Uso en determinados procesos de producción industriales y b) secuestro e inyección en formaciones geológicas tales como yacimientos agotados de petróleo o gas, formaciones salinas, y yacimientos de carbón no explotables. La alternativa del secuestro tendría un mayor impacto en la reducción de las emisiones de CO₂, considerando el volumen de emisiones. Sin embargo, cualquier alternativa considerada requiere la captura previa de CO₂ de las fuentes en donde se ha formado. Existen tres principales alternativas para la captura de CO₂ en las centrales que funcionan con combustibles fósiles: 1) post-combustión, 2) pre-combustión y 3) oxi-combustión. La captura en post-combustión es aplicable a la mayoría de las plantas ya existentes.

El CO₂ es producido por la combustión de combustibles fósiles en las centrales eléctricas en una mezcla de gases, a presión atmosférica, y con una baja presión parcial del CO₂ (menor de 0,15 atm normalmente), lo cual dificulta el proceso de captura al requerir absorbentes muy eficaces.

Entre los nuevos tipos de materiales propuestos para la captura de CO₂ procedente de plantas de generación de electricidad que utilizan combustibles fósiles, aquellos basados en líquidos iónicos se encuentran entre los más prometedores. Desde un punto de vista químico, los líquidos iónicos son una clase de compuestos que, a pesar de estar formados por cationes y aniones son líquidos a temperaturas próximas a la T^a ambiente. El notable interés

de los líquidos iónicos, tanto en investigación básica como a nivel industrial, tiene sus raíces en la gran versatilidad de estos nuevos fluidos, considerando la posibilidad de combinar aniones y cationes seleccionados, para obtener las propiedades deseadas para una aplicación específica. El número teórico de posibles líquidos iónicos es muy grande, en torno a 106 considerando solamente fluidos puros, este hecho tiene dos consecuencias principales: a) conduce a una nueva química y b) hace necesario el desarrollo de relaciones estructura-propiedad para desarrollar aplicaciones industriales de forma efectiva. En los últimos años, numerosos estudios han propuesto el uso de líquidos iónicos como absorbentes alternativos de CO₂ en post-combustión. El uso de estos absorbentes puede tener varias ventajas, incluyendo que su naturaleza no volátil evita la contaminación de la corriente de gas durante el proceso de captura y no se producen pérdidas de absorbente, reduciendo así el impacto ambiental y los costes económicos. Por otra parte, la regeneración del absorbente es relativamente simple y moderadamente costosa, sin contaminación cruzada.

Para diseñar líquidos iónicos con propiedades mejoradas para la captura de gases ácidos, como el CO₂, se necesita un gran conocimiento del proceso de solubilidad a nivel molecular, es decir de las interacciones intermoleculares entre las moléculas del gas y los iones correspondientes. Esto nos permitirá obtener información acerca del proceso de captura de CO₂ y su relación con la estructura química, y así poder proponer unas pautas para el diseño racional de líquidos iónicos comenzando por su estructura molecular. El comportamiento de un líquido iónico para su uso en la captura de CO₂ depende de varios factores moleculares, la química computacional ha probado ser una poderosa herramienta para obtener información a nivel nanoscópico del proceso de captura.

Cuando se trata de la aplicación de los métodos computacionales al estudio de la captura de CO₂ usando líquidos iónicos, principalmente podemos distinguir dos tipos de aproximaciones, las cuales pueden ser a su vez combinadas con medidas experimentales para ayudar a la racionalización del comportamiento observado. Como una primera aproximación al análisis de las propiedades de los líquidos iónicos, existen trabajos que aplican la teoría del funcional de la densidad (*Density Functional Theory*, DFT) con el fin de encontrar una relación entre la estructura electrónica en fase gas del líquido iónico y el comportamiento observado. En la mayoría de los estudios teóricos con DFT, estos se emplean para estudiar las interacciones usando proporciones 1:1 entre el par iónico y la molécula de CO₂, y buscan calcular propiedades energéticas relacionadas con la captura de CO₂, tales como la energía de interacción (o *binding energy*) y factores entálpicos. Además, las interacciones intermoleculares por enlaces de hidrógeno también pueden ser caracterizadas.

Cuando se trabaja con muestras reales de gases, estas además de CO₂ pueden contener otros gases en menores proporciones, como puede ser H₂, N₂ o CH₄. Sin embargo,

hay pocos trabajos donde la selectividad de familias de líquidos iónicos para la captura de CO₂ frente a otros gases se analice desde un punto de vista molecular.

A pesar de las limitaciones que ofrecen los métodos DFT, sobre todo en relación al reducido número de átomos que se pueden estudiar con respecto a otros métodos de la química computacional, este tipo de trabajos han demostrado ser útiles para la predicción de tendencias en las solubilidades de gases en líquidos iónicos basadas en interacciones a nivel molecular con pequeñas moléculas como puede ser el CO₂. Así, estudios sistemáticos para familias de líquidos iónicos permitiría obtener información en función de la naturaleza del catión, del anión, o de la longitud de la cadena alquílica.

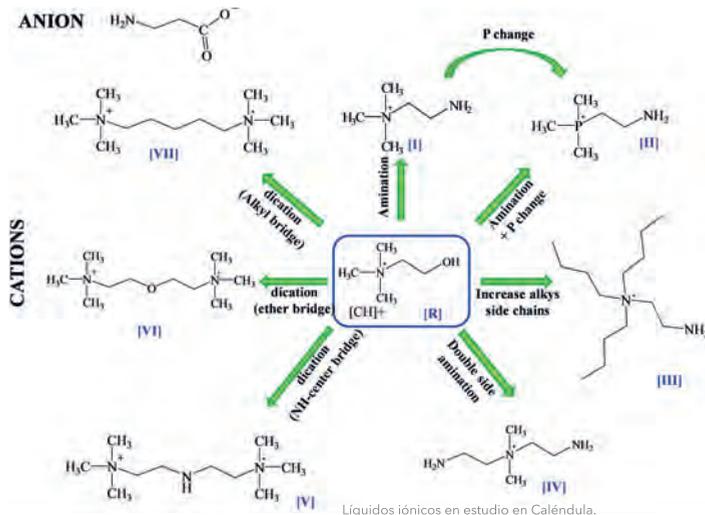
Para optimizar la captura de gases usando líquidos iónicos, es necesario estudiar como los cambios estructurales afecta a las propiedades físicas, tanto la solubilidad del gas en el líquido, como las propiedades fisicoquímicas del disolvente, tales como la densidad y la viscosidad. En este sentido, las simulaciones de dinámica molecular (*Molecular Dynamics*, MD) son muy útiles para estudiar la relación entre la estructura molecular y propiedades macroscópicas. Además, las simulaciones de Monte-Carlo son ampliamente usadas para predecir la solubilidad de los gases en líquidos iónicos. La determinación experimental de la solubilidad de CO₂ en líquidos iónicos es muy costosa, tanto en tiempo como en recursos, considerando el número de posibles líquidos iónicos y sus posibles funcionalidades. En las simulaciones de dinámica molecular, la fiabilidad de estas va a depender en gran medida de los campos de fuerza seleccionados para describir el comportamiento de las moléculas que forman nuestro sistema. Existen varias aproximaciones para tal fin, podemos encontrar validaciones basadas en el cálculo y comparación con propiedades físicas que se pueden medir experimentalmente. Para estas simulaciones, se usan campos de fuerza parametrizado en nuestro grupo.

En definitiva, el empleo de los métodos de la química computacional permite el calcular y analizar todas aquellas propiedades relacionadas con la captura de CO₂, acercarnos a la racionalización de dichas propiedades en base a la estructura molecular del líquido iónico. Todo este conocimiento ayuda a proponer un diseño racional de nuevos sistemas de los cuales se espera unas propiedades mejoradas. Además, los estos métodos computacionales se pueden emplear para verificar las mejoras esperadas en estos nuevos líquidos iónicos, antes de proceder a su estudio experimental.

Funciones de SCAYLE

El elevado número de moléculas estudiado en este proyecto, así como la utilización de métodos de modelización molecular tipo DFT y dinámica molecular para los sistemas considerados, da lugar a la necesidad de grandes recursos computacionales para poder lograr los objetivos propuestos. El uso de los recursos computacionales provistos por SCAYLE a través del supercomputador Caléndula permite la ejecución en paralelo de los códigos de química computacional requeridos para un gran número de procesadores simultáneos. Las simulaciones llevadas a cabo consumen un gran número de horas de computo (varios millones) así como requieren grandes recursos de memoria que son provistos por SCAYLE.

Por otra parte, el personal de SCAYLE se encarga de la instalación y mantenimiento del software requerido para las simulaciones propuestas, lo que permite realizar cálculos en Caléndula de forma continua y eficiente. De esta forma las simulaciones son llevadas a cabo de forma sistemática, lo cual permite el avance del proyecto.



Líquidos iónicos en estudio en Caléndula.

Ajuste, Validación e Implantación del Modelo Físico PhFFS de Simulación de Incendios Forestales

Objetivo del proyecto

El propósito principal de este proyecto de investigación es mejorar, validar y ajustar el modelo físico de propagación de incendios forestales PhFFS (Physical Fast Fire Simulator) desarrollado por el grupo de investigación en Simulación Numérica y Cálculo Científico SINUNCC, de la Universidad de Salamanca, así como transferir la tecnología resultante a los sectores públicos y privados dedicados a la prevención, seguridad y gestión de incendios forestales.

El proyecto se concreta a través de los siguientes objetivos y actividades:

- *Mejora del modelo PhFFS mediante la incorporación de la fase gaseosa y el efecto de la radiación solar sobre el combustible.*
- *Mejora de eficiencia de las técnicas de asimilación de datos que permiten la incorporación de datos reales de forma interactiva.*
- *Identificación de las características de los combustibles forestales relacionadas con los parámetros del modelo PhFFS.*
- *Recopilación y análisis de casos reales de incendios forestales para su posterior uso en la validación del modelo PhFFS.*
- *Simulación mediante el modelo PhFFS mejorado tanto de casos experimentales como reales de incendios para la puesta en práctica del modelo, el ajuste de sus parámetros y la asimilación de datos a través de casos prácticos.*
- *Comparación del modelo PhFFS mejorado con modelos de propagación de incendios de tipo semi-empírico.*
- *Integración del modelo PhFFS mejorado en sistemas de información geográfica y visualización a través de plataforma on-line.*

Periodo de ejecución

21 de marzo de 2016 al 30 de junio de 2018.

Participantes del proyecto

Grupo de Investigación de Simulación Numérica y Cálculo Científico de la Universidad de Salamanca. Reconocido como Unidad de Investigación Consolidada de la Junta de Castilla y León UIC018, <https://diarium.usal.es/sinumcc>

Financiación del proyecto

Subvención del programa de apoyo a proyectos de investigación de la Conserjería de Educación de la Junta de Castilla y León, cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), al amparo de la orden de 25 de febrero de 2016 (tramo 2016-2018), www.educa.jcyl.es

Justificación del proyecto

Todos los informes internacionales sobre incendios forestales (FAO, EFFIS) señalan que los incendios forestales suponen una amenaza actual y futura para los ecosistemas del planeta. Estos informes inciden en el aumento del riesgo de incendios forestales debido a las anomalías climáticas que se vienen produciendo recientemente, en cuanto a temperaturas más elevadas y sequías más severas. El cambio climático pone de nuevo en primer término el riesgo que suponen para nuestros bosques los incendios forestales, puesto que además, los sistemas forestales son a su vez fundamentales para la reducción de los gases del efecto invernadero, y por tanto son un punto clave en el reto de frenar el cambio climático.

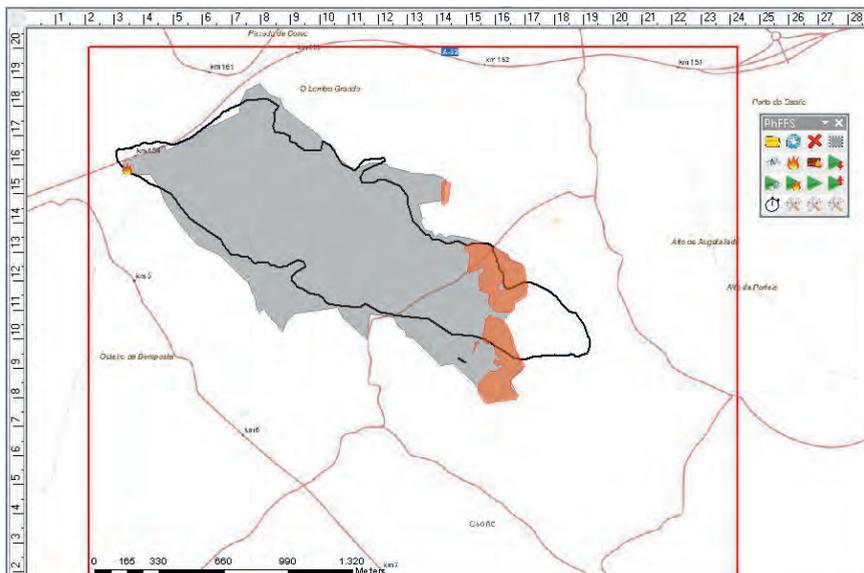
España es uno de los países de la cuenca mediterránea más afectados por los incendios forestales. Según fuentes del Ministerio de Agricultura, Alimentación y Medio Ambiente, en la primera década del siglo XXI, el fuego arrasó más de un millón de hectáreas de superficie forestal en nuestro país; y en el año 2012, especialmente dramático, más de 200.000 hectáreas de superficie forestal, de las cuales más de 40.000 hectáreas pertenecían a Castilla y León.

Los esfuerzos para luchar contra los incendios

forestales deben reforzarse a todos los niveles, desde todas las administraciones pero también desde todos los sectores que puedan aportar una mejora en el conocimiento de los incendios forestales y por lo tanto en la lucha para atajar este problema. En este sentido, el sector científico, con la colaboración de investigadores de diversas áreas de conocimiento, y la participación del sector tecnológico y empresarial, junto con las administraciones públicas, puede proporcionar importantes avances.

Desde el punto de vista de la investigación científica, la modelización matemática se ha convertido hoy en día en una herramienta esencial para el análisis y la predicción de un gran número de fenómenos físicos, en particular el tema que compete a este proyecto sobre modelización de la propagación de incendios forestales.

El aumento de la potencia de cálculo de los sistemas informáticos actuales, así como la mejora de las capacidades de la actual tecnología de información espacial (sistemas de información geográfica, sistemas de detección remota), ofrecen un enorme potencial para la simulación efectiva del comportamiento de los incendios forestales, permitiendo mejorar tanto los modelos de propagación del fuego como los modelos de combustibles.



Comparación de la simulación proporcionada por el modelo PhFFS (gris-área quemada, rojo-frente activo) y el perímetro real (línea negra) del incendio ocurrido en Osoño (Orense) en agosto de 2009.

Líder del proyecto

GRUPO SINUMCC (UIC018), <https://diarium.usal.es/sinumcc>, el grupo SINUMCC es un grupo de Investigación reconocido de la Universidad de Salamanca desde 2005, y Unidad de Investigación Consolidada de La Junta de Castilla y León desde 2015, y está formado por 5 investigadores senior de la Universidad de Salamanca y 2 investigadores senior de la Universidad de las Palmas de Gran Canaria, que suman 20 sexenios de investigación. Además actualmente hay 2 contratados a cargo de diversos proyectos de investigación y contratos con empresas.

La investigación del grupo se centra en diversos aspectos de la simulación numérica y el cálculo científico, con especial interés en las aplicaciones a problemas medioambientales. En concreto se han desarrollado diversos modelos de simulación: campos de viento, incendios forestales, dispersión de contaminantes y radiación solar.

El grupo trabaja habitualmente en colaboración con otros grupos de investigación nacionales como el Instituto Universitario de Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en Ingeniería de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria y el Laboratorio de Cálculo Numérico de la Universidad Politécnica de Barcelona; e internacionales como Ricardo H. Nochetto del Institute for Physical Science and Technology de la University of Maryland, USA; y Erwin Hernández del Grupo de Análisis y Modelamiento Matemático Valparaiso de la Universidad Técnica Federico Santa María de Chile.

Funciones de SCAYLE

Algunos aspectos clave para la mejora del modelo de simulación de propagación de incendios forestales PhFFS son el análisis de sensibilidad del modelo, el ajuste de sus parámetros y la utilización de técnicas de asimilación de datos. Todos estos aspectos requieren de la ejecución de miles de simulaciones dentro de un tiempo razonable y es ahí donde el supercomputador de SCAYLE juega un papel fundamental. Caléndula permite realizar los cálculos requeridos por el modelo utilizando recursos en paralelo y con un gran número de procesadores con altas prestaciones de memoria. Gracias a SCAYLE se está consiguiendo obtener resultados de forma rápida y eficiente que permiten mejorar el modelo PhFFS en los aspectos señalados, y en consecuencia mejorar sustancialmente la ejecución del proyecto.



Código SA020U16

Análisis de múltiples pathways

Objetivo del proyecto

El objetivo general del estudio MCC-Spain es evaluar los factores ambientales y genéticos asociados con los tumores a estudio: cáncer colorrectal, de mama, de estómago, de próstata y las leucemias linfáticas crónicas. Los objetivos específicos son:

- **Evaluar el riesgo de cáncer de cada localización tumoral en relación a exposiciones ambientales y ocupacionales incluyendo contaminantes del agua potable (arsénico, nitratos, cromo, subproductos de cloración), disruptores hormonales y otros contaminantes orgánicos persistentes, así como la disrupción del ritmo circadiano a raíz de los trabajos con turno de noche, y otros factores.**
- **Evaluar el riesgo de los cánceres en relación al consumo de determinados fármacos, incluyendo estatinas y analgésicos.**
- **Evaluar el riesgo de cáncer relacionado con diversos factores como estilos de vida, nutrición y actividad física, historia médica y familiar y otros factores.**
- **Evaluar el riesgo de cáncer de mama y próstata en relación a factores hormonales, infecciones y fenotipos permanentes relacionados con exposiciones ambientales en fases precoces de la vida.**
- **Validar la evaluación de la exposición a agentes químicos ambientales mediante modelos de exposición utilizando biomarcadores de exposición, información individual y medidas de exposición ambiental.**
- **Evaluar, en una primera fase, una serie limitada de genes tanto en relación a efectos principales como en relación a su interacción con factores ambientales.**
- **Almacenar suficiente material biológico para su utilización en el futuro en estudios GWAS (Genome Wide Association Studies) y otros.**



El equipo multidisciplinar que realiza la investigación del MCC-Spain durante la reunión que celebró en León.

Periodo de ejecución

Del año 2016 al 2019.

Financiación del proyecto

El estudio MCC-Spain está financiado por:

- CIBERESP, www.ciberesp.es
- Financiación del Fondo de Investigación Sanitaria (FIS), <https://portalfis.isciii.es>
- Otras agencias de financiación en determinadas áreas.

Participantes del proyecto

CREAL - ISGlobal, Instituto de Salud Global, www.creal.cat/es

Instituto de Salud Carlos III, www.isciii.es

CIBERESP - Consorcio de Investigación Biomédica en Red de España, www.ciberesp.es

Justificación del proyecto

Investigar la influencia de factores ambientales y su interacción con factores genéticos en tumores frecuentes o con características epidemiológicas peculiares en nuestro país, en las que los factores ambientales implicados no son suficientemente conocidos

Funciones de SCAYLE

La necesidad de utilización de Caléndula es debida a la necesidad de una precisión de potencia estadística y el uso continuado de grandes ordenadores, permitiendo de esta manera la obtención de resultados de una manera más rápida y eficaz.

Líder del proyecto

CREAL - ISGLOBAL, INSTITUTO DE SALUD GLOBAL, www.creal.cat/es

CREAL es un centro público de investigación que abarca una amplia gama de exposiciones ambientales como el agua, la radiación o la contaminación del aire, y efectos en la salud tanto salud infantil, cáncer como enfermedades respiratorias.

INSTITUTO DE SALUD CARLOS III, www.isciii.es

El instituto Carlos III es el principal Organismo Público de Investigación (OPI), que financia, gestiona y ejecuta la investigación biomédica en España. Con una trayectoria de más de 20 años de investigación en ciencias de la vida y de la salud y prestación de servicios de referencia, es además el organismo gestor de la Acción Estratégica en Salud (AES) en el marco del Plan Nacional de I+D+I.



El último proyecto concedido de Fondo de Investigaciones Sanitarias: PI15/01032.

Supervivencia de cáncer colorrectal en el proyecto MCC-Spain: Modelos de predicción que integran datos genéticos y clínico-epidemiológicos.

Nuevos escenarios de la óptica de pulsos de Femto y Attosegundos

Objetivo del proyecto

Los pulsos láser ultracortos, con duración de unos cuantos femtosegundos (10^{-15} s) han supuesto una auténtica revolución tecnológica en la física de fenómenos ultrarrápidos. Hoy en día, el desarrollo de nuevas tecnologías de anclaje de modos y postcompresión permiten la generación de pulsos en el infrarrojo (IR) de pocos ciclos de duración (unos cuantos femtosegundos), perfectamente coherentes y con parámetros controlados. El desarrollo de esta tecnología láser, unido a la aparición de nuevas técnicas de generación de armónicos, permiten generar pulsos con radiación en el ultravioleta lejano (XUV) o, incluso, en los rayos X blandos, coherentes y con duraciones de unas decenas de attosegundos (10^{-18} s). Estos pulsos láser de attosegundo constituyen las herramientas más precisas para observar y controlar los procesos más rápidos que ocurren en la naturaleza, como por ejemplo el movimiento de electrones dentro de sistemas atómicos o moleculares. Comparado con otros escenarios en la frontera de la física, la investigación en este campo no requiere de grandes instalaciones, lo que fomenta la diversidad y competencia entre laboratorios, permitiendo un rápido desarrollo a partir de la interacción constante entre teoría, experimentos y desarrollos tecnológicos.

En este proyecto se propone tres objetivos fundamentales para la investigación en los próximos tres años. En primer lugar, se trata de afianzar y extender los modelos de simulación de la generación de armónicos y su propagación, y de la generación de pulsos de attosegundo. El constante desarrollo de estos métodos permite la colaboración con grupos experimentales de vanguardia en la propuesta de nuevos esquemas y técnicas que les sitúan en la frontera del conocimiento. El continuo desarrollo de éstas estimula a introducir nuevos escenarios, como por ejemplo, gases a alta presión, haces con polarizaciones arbitrarias, esquemas de doble haz, etc. Entre ellos cabe resaltar la generación de armónicos de orden alto con vórtices de luz, tema del que son pioneros en la aproximación teórica. El segundo objetivo se centra en la descripción de la propagación no lineal del campo infrarrojo que genera los armónicos y los pulsos de attosegundo. El estudio de la variación de estos pulsos de femtosegundo durante la propagación es fundamental para describir situaciones realistas de generación de armónicos y, por tanto, es un objetivo muy interrelacionado con el primero. Exploraran también nuevos escenarios de propagación basados en fibras de cristal fotónico, especialmente "twisted fibres", como las que están siendo desarrolladas actualmente en el Instituto Max Planck (Erlangen). Finalmente, plantearan un tercer objetivo que representa una exploración de recientes escenarios cuya aplicación a la generación de armónicos y pulsos de attosegundo está todavía muy poco investigada. En este sentido, las propiedades ópticas inusuales del grafeno y de las resonancias plasmónicas en puntas nanométricas ofrecen un apasionante punto de ruptura con respecto a las aplicaciones tradicionales de los pulsos ultracortos.

Financiación del proyecto

Programa Estatal de Fomento de la Investigación Científica y Técnica de Excelencia, Subprograma Estatal de Generación de Conocimiento, en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016. Convocatoria 2016, www.idi.mineco.gob.es

Participantes del proyecto

Grupo ALF-USAL (UIC016), Universidad de Salamanca, <https://laser.usal.es>, www.usal.es

Ministerio de Economía, industria y competitividad, www.mineco.gob.es

Periodo de ejecución

Del año 2016 al 2019.

Justificación del proyecto

En las últimas décadas, el desarrollo de la ciencia y de la tecnología de los pulsos láser ultracortos ha sido espectacular. El grupo desarrolla su actividad en este ámbito, contando con un equipo teórico en la vanguardia para las simulaciones de los procesos de interacción láser-materia, que ofrece apoyo teórico a grupos experimentales, tanto del ámbito nacional como internacional. La colaboración con los grupos experimentales es estratégica puesto que amplifica el impacto de nuestros trabajos. Gracias a ésta han tenido el privilegio de formar parte de los equipos de investigación que lideran el desarrollo de las fuentes coherentes de XUV y rayos X, estando en la primera propuesta de método para la generación de rayos X intensos basados en armónicos, proponiendo nuevos métodos para el control de la polarización y demostrando nuevas vías para la generación de armónicos y su detección. Todos estos resultados publicados en revistas de alto impacto, algunas de ellas, como Science, evaluadas en los ranking internacionales de universidades, lo que redundan en la mejora de la posición de Castilla y León en ellos.

La investigación que proponen permitirá, por un lado, seguir posicionando sus modelos y métodos entre los más eficientes en el panorama internacional, y por tanto seguir contribuyendo de forma colegiada con grupos experimentales a la ampliación de las fronteras actuales de la femto- y atto-física. Por otro lado, exploran nuevos escenarios desde el punto de vista teórico, con el fin de elaborar propuestas originales que signifiquen puntos de ruptura con los métodos actuales y, por tanto, con un fuerte potencial innovador.

Funciones de SCAYLE

La forma más precisa de calcular armónicos de orden alto (cuyas siglas en inglés son HHG), es mediante la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, es bien conocido que para obtener soluciones de esta ecuación, las cuales recrean las interacciones luz láser-materia que dan lugar a la generación de armónicos de alta frecuencia, se necesitan ingentes cantidades de

memoria. Dichos recursos hoy en día sólo están disponibles en supercomputadores, dónde muchas máquinas comunicadas entre sí cooperan para la realización de una tarea. En este caso, el tamaño de los cálculos viene dado por la longitud de onda de la luz láser utilizada en la interacción: a mayor longitud de onda, mayor la memoria requerida para el cálculo. Por esta razón, el cálculo de interacciones con láseres de longitudes de onda en el infrarrojo medio (entorno a unas dos micras), es especialmente problemático, porque los recursos computacionales necesarios llegan incluso al límite de capacidad de los actuales supercomputadores, convirtiendo esta tarea en irrealizable de forma práctica.

Por ello se hace indispensable utilizar modelos simplificados que permitan reducir el coste computacional de este tipo de cálculos. Para este fin nos servimos de la SFA+, una extensión de la aproximación de campo fuerte (SFA son sus siglas en inglés) en su versión convencional. De esta manera conseguimos reducir en horas, incluso minutos, el tiempo de cálculo que de otra manera, utilizando la ecuación de Schrödinger, nos podría llevar semanas.

Una vez que obtenemos el espectro de armónicos para un sólo átomo, pasamos a calcular la propagación de estos armónicos en un medio (por ejemplo un gas) sirviéndonos de las ecuaciones del electromagnetismo de Maxwell. Considerando cada átomo como una fuente de radiación, podemos sumar coherentemente las contribuciones de todos los átomos para finalmente obtener la radiación total.

Este esquema de resolución del problema nos permite plantear estrategias de distribución y paralelización del cálculo en supercomputadores, en la que cada procesador pueda calcular independientemente el espectro de armónicos de un átomo en particular, para posteriormente comunicar todas las contribuciones locales y obtener el resultado final. Es aquí donde el uso intensivo de los recursos de SCAYLE es crucial para la obtención de los cálculos, y por lo tanto para la continuidad de la investigación.

Líder del proyecto

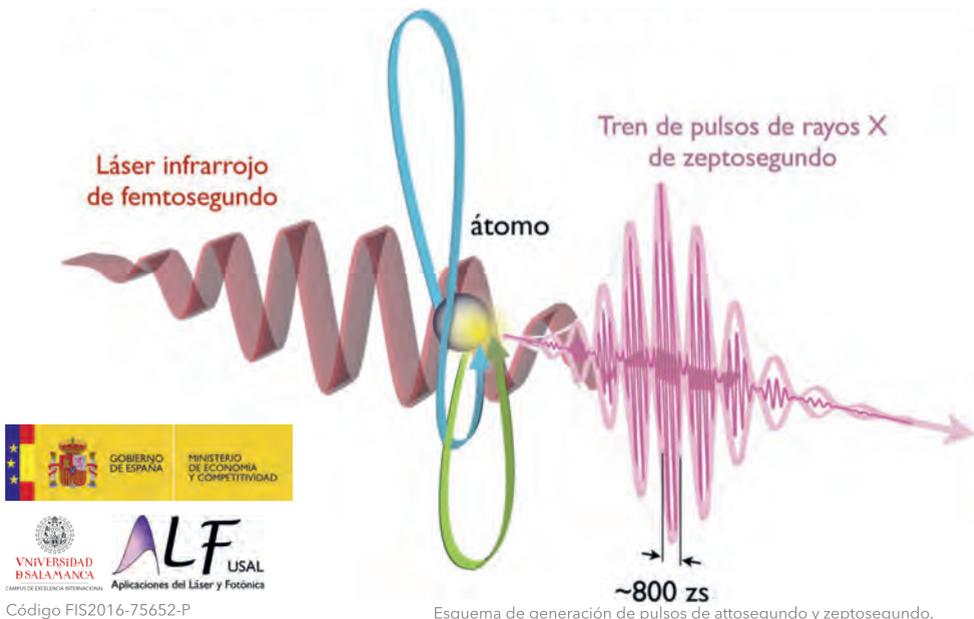
GRUPO ALF-USAL (UIC016), <https://laser.usal.es>

Los miembros del grupo ALF-USAL (UIC016) llevan desarrollando sus investigaciones en torno a los láseres de potencia de pulso corto desde 1992. Desde esa fecha la Universidad de Salamanca ha desarrollado un papel de creciente relevancia en el ámbito internacional. El grupo está compuesto de 7 investigadores sénior, cada uno reconocido con dos o más sexenios de investigación continuada. La participación en el grupo de profesores de varios departamentos (Física Aplicada e Ingeniería Mecánica) introduce un carácter interdisciplinar que permite abordar su ámbito de investigación desde las diferentes perspectivas de la I+D+i (fundamental, aplicada y tecnológica), sin descuidar la transferencia de tecnología y servicios a otros centros y empresas. Por otro lado, como profesores de universidad ponen un esfuerzo especial en que su tarea científica revierta en la formación de los jóvenes, a todos los niveles de educación universitaria (grado, máster y doctorado), así como en la captación de talento pre-universitario y en la divulgación en general.

Entre sus líneas de investigación, orientadas siempre al estudio de los láseres de pulso ultracorto y alta potencia, se encuentran:

- Propagación no lineal de pulsos ultracortos (filamentación y postcompresión).
- Técnicas de caracterización de pulsos ultracortos.
- Procesos paramétricos con pulsos ultracortos.
- Generación de armónicos de orden elevado.
- Ablación de materiales con pulsos ultracortos.
- Fabricación de dispositivos fotónicos mediante escritura láser.
- Microprocesado láser 3D.
- Fotónica aplicada a la biomedicina (transiluminación).

Colaboran con numerosos grupos del panorama internacional, resaltando el Prof. Feng Chen (State Key Laboratory on Crystal Materials, Shandong University, China), que lidera uno de los grupos líderes mundiales en fotónica integrada en cristales no lineales, o el grupo del Prof. Helder Crespo (Universidade do Porto), reconocido por su método de caracterización d-Scan.



Esquema de generación de pulsos de attosegundo y zeptosegundo.

Carácter multifactorial de los polifenoles: oportunidad para el desarrollo de herramientas terapéuticas frente a obesidad y enfermedades infecciosas

Objetivo del proyecto

Uno de los objetivos de este proyecto es hacer un cribado "in silico" de posibles moduladores de la actividad biológica de las proteínas AMPK, PPARalpha, beta y gamma, y de la proteína de unión a la penicilina (PBP2a). Adicionalmente se quieren cribar los compuestos polifenólicos frente a distintas polimerasas de virus humanos.

Periodo de ejecución

Del año 2016 al 2018.

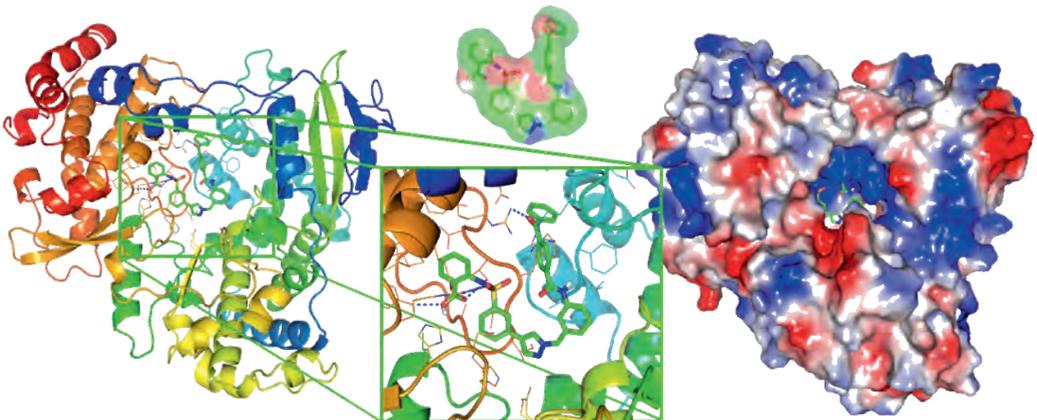
Financiación del proyecto

Financiación propia del Grupo de Investigación.

Participantes del proyecto

Instituto de Biología Molecular y Celular,
<http://ibmc.umh.es>

Departamento de Física y Arquitectura de
Computadores de la Universidad Miguel Hernandez
de Elche,
www.umh.es/contenido/pas/:uor_33/datos_es.html



Ejemplo de resultados de experimentos de acoplamiento molecular de un inhibidor de la RNA-polimerasa dependiente de RNA del virus del Dengue.

Justificación del proyecto

Las plantas generan una gran diversidad de compuestos que presentan una acción farmacológica múltiple alcanzando una gran variedad de dianas moleculares. Entre ellos, los compuestos polifenólicos han demostrado propiedades potenciales en la prevención y el tratamiento de enfermedades no transmisibles y también de enfermedades infecciosas. En el presente proyecto se plantean dos aproximaciones multidisciplinares para la búsqueda de herramientas terapéuticas a base de mezclas de compuestos polifenólicos dirigidos a dos áreas de máximo interés en la salud humana: la prevención y/o tratamiento de patologías asociadas a la obesidad y el tratamiento de infecciones nosocomiales. Para el desarrollo de ingredientes enfocados a la obesidad, se recurrirá al cribado "*in silico*" de compuestos polifenólicos de librerías virtuales que sean moduladores de las dianas moleculares AMPK y/o PPAR que luego serán validados en ensayos celulares, bien utilizando compuestos puros o extractos enriquecidos, buscando finalmente una actividad sinérgica entre los mejores candidatos. Por otra parte, para el desarrollo de ingredientes antimicrobianos contra bacterias resistentes (*Staphylococcus aureus* resistente a metilicina, se partirá de datos previos obtenidos por el grupo de investigación sobre el efecto de compuestos polifenólicos puros conocidos y extractos polifenólicos en bacterias no resistentes que se ensayarán en un panel de 100 cepas resistentes hospitalarias. Se realizará un estudio "*in silico*" de la interacción molecular de estos compuestos y dos dianas moleculares: la membrana de *S. aureus* y la proteína de unión a penicilina 2a (PBP2a), responsable de la resistencia en cepas estafilocócicas. En el mismo sentido, se quieren cribar los compuestos polifenólicos frente a distintas polimerasas de virus humanos..

Funciones de SCAYLE

La infraestructura de HPC de SCAYLE ha permitido realizar el cribado virtual de librerías de unos 300.000 compuestos sobre sitios activos de RNA polimerasas dependientes de RNA de diversos virus humanos. Se ha ejecutado software no comercial y programas en lenguaje Python desarrollados por los autores del proyecto.

Líder del proyecto

El IBMC, Instituto de Biología Molecular y Celular, <http://ibmc.umh.es>, se constituye como Instituto Universitario de Investigación de la Universidad Miguel Hernández de Elche en 2002. Su mayor éxito ha sido la comercialización de productos innovadores generados por los proyectos de investigación en los campos de nutracéuticos, cosmecéuticos y biotecnología, mediante el desarrollo de dos líneas principales de investigación: "Diseño Molecular y Celular", destacando estudios en Reconocimiento molecular e ingeniería y biofísica de proteínas, Relaciones estructura-función en proteínas de membrana, y Plataforma de modelado molecular. La otra línea es "Diagnóstico y Terapia Moleculares" investigando en materias como son la Moléculas bioactivas, Estrategias antivirales y Oncología molecular y celular.

Además también ofrecen servicios como la Plataforma de cribado biológico de alto rendimiento (HTS), Cultivos celulares eucariotas y procariotas, Análisis celular, desarrollo de métodos de cribado de alto rendimiento, Análisis microcalorimétrico, espectroscopia molecular, Centrifugación y ultra centrifugación, Análisis y fraccionamiento cromatográfico, Procesamiento de ácidos nucleicos, Adquisición y tratamiento de imágenes, Laboratorio de zumos y planta piloto anexa (Campus de Orihuela), Ultracongelación y criopreservación de muestras biológicas, Bioinformática, Agua, lavado y esterilización.

Tienen proyectos activos financiados por convocatorias europeas y nacionales. También reciben financiación privada de empresas con las que colaboran, afianzando el compromiso de transferencia de tecnología que tiene, facilitando la traslación de la ciencia básica al mundo productivo y clínico, hecho que les lleva a conseguir sus éxitos en la comercialización de los productos desarrollados.

Cirugía Oncológica: modelo de gestión y formalización del conocimiento (casos de estudio cáncer colorrectal - CCR)

Objetivo del proyecto

En el proyecto se plantean dos metas:

- *La creación de un sistema de gestión de pacientes específico para las unidades médicas de coloproctología.*
- *El análisis posterior usando inteligencia artificial (IA) y herramientas estadísticas.*

Ambos objetivos están orientados a aumentar la supervivencia y disminuir las complicaciones de los pacientes con cáncer de colon.

Hasta el momento, la gestión de los pacientes se lleva a cabo con varias aplicaciones, pero ninguna se ajusta a las necesidades concretas de las unidades de coloproctología, lo cual hace que se pierda información muy significativa para el equipo médico al no encontrarse correctamente vinculada. Debido a ello surge la necesidad de la creación de un sistema de gestión de pacientes específico para las unidades de coloproctología de toda Castilla y León que ayude a la atención de los pacientes con cáncer de colon.

Este sistema permitirá la creación de una base de datos consistente, usable y útil para facilitar la práctica diaria de la unidad médica de coloproctología. Los datos recabados se usarán en la segunda fase del proyecto para estudiar la supervivencia a largo plazo de los tratamientos quirúrgicos aplicados al cáncer de colon, junto con las complicaciones derivadas de las mismas. De esta forma se mejora la ayuda al modificar las tasas de supervivencia y de complicaciones usando herramientas de última generación que hagan uso de la inteligencia artificial sobre los datos almacenados de los pacientes.

El sistema de gestión de pacientes será una aplicación basada en tecnologías Web 2.0, al que se podrá acceder por medio de cualquier navegador web, permitiendo que pueda ser usado desde distintos dispositivos con acceso a internet (ordenadores, móviles y tablets), con lo cual se obtendrá un sistema que soportará muchos usuarios concurrentes y en multiplataforma.

El objeto del convenio es establecer un marco de colaboración en el que SCAYLE presta servicios y recursos para el desarrollo de diferentes proyectos de informática médica que requieren el acceso a datos de carácter personal contenidos en ficheros automatizados pertenecientes al Complejo Asistencial Universitario de León, (CAULE).



Código FI4VDI-SOE4/P3/E804

Periodo de ejecución

Fase I. Desarrollo de sistema de gestión de pacientes, iniciado en 2011 y en fase de ejecución.

Fase II. Adaptación de la aplicación al entorno *cloud*, julio 2013 y en fase de ejecución.

Financiación del proyecto

Fase I. Desarrollo de sistema de gestión de pacientes, financiación propia de SCAYLE.

Fase II. Adaptación de la aplicación al entorno *cloud* e integración en el plan de sistemas (Red de Infraestructuras Federadas), Financiación a través de Fondos FEDER en el marco del Proyecto FI4VDI-SOE4/P1/E804 y cofinanciado por SCAYLE - Consejería de Fomento y Medio Ambiente de la Junta de Castilla y León.

Participantes del proyecto

Complejo Asistencial Universitario de León, (CAULE)

Departamento de Ciencias Biomédicas (Área de Medicina Preventiva y Salud Pública) de la Universidad de León, <http://www3.unileon.es/dp/e/>

Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), www.scayle.es

Red de Centros - Red de Infraestructuras Federadas, Proyecto FI4VDI-SOE4/P1/E804

Justificación del proyecto

Según datos del Centro Nacional de Epidemiología del Instituto de Salud Carlos III, en España hay 25.000 casos nuevos y 13.000 defunciones por CCR al año (López Abente, 2005).

En cuanto a la distribución municipal, según los datos del mismo Instituto, hay un núcleo de municipios de mayor riesgo en Cataluña (Barcelona y Gerona), en Baleares, en Castilla y León (León y Palencia) y en Andalucía (municipios de Sevilla y Cádiz), y aunque la tendencia a la supervivencia ha mejorado debido al diagnóstico más temprano, la mayor eficacia de los tratamientos adyuvantes y neoadyuvantes y un abordaje quirúrgico más agresivo con las recidivas locales y metástasis, el CCR sigue siendo un problema de salud pública y de consumo de recursos de primera magnitud.

En el Complejo Asistencial Universitario de León, según el registro de tumores del Complejo, se diagnostican algo más de 350 CCR al año y en la actividad del Servicio de Cirugía, más de 400 intervenciones están motivadas por el CCR.

Todo lo anterior ha motivado la puesta en marcha de un proyecto cuyo objetivo es el diseño y desarrollo de un Sistema de gestión, predicción y análisis inteligente de cáncer colorrectal en Castilla y León.



Hospital de León.

Líneas futuras de desarrollo

Dentro del marco del proyecto-convenio se establecen como desarrollo de líneas futuras el estudio de la obesidad, actividad física y adherencia a la dieta mediterránea en el cáncer colorrectal en el área de salud de León, y su interacción con variantes y vías genéticas (*pathways*) relacionadas con el metabolismo. Será imprescindible el apoyo de Caléndula en cuanto a capacidad de almacenamiento, facilitando la creación de una base de datos y sus copias de seguridad, y en cuanto a potencia de cálculo mediante la ejecución de las herramientas de inteligencia artificial y de análisis estadístico.

Funciones de SCAYLE

La potencia de cálculo y el almacenamiento de Caléndula permitirán ejecutar el servidor web y el motor de la base de datos. La gran capacidad de almacenamiento del superordenador posibilitará alojar la base de datos, y facilitará la creación de copias de seguridad del sistema de gestión de pacientes, garantizando la seguridad de los datos, su disponibilidad y consistencia.

En la etapa del estudio de la supervivencia y de las complicaciones, el poder de cálculo de Caléndula será imprescindible para ayudar a ejecutar con éxito las herramientas de inteligencia artificial y de análisis estadístico.

Integración en el plan de sistemas desarrollado en el marco del Proyecto FI4VDI-SOE4/P1/E804.

Líder del proyecto

COMPLEJO ASISTENCIAL UNIVERSITARIO DE LEÓN (CAULE). El Complejo Asistencial Universitario de León, www.saludcastillayleon.es/CHLeon/es, está integrado por diversos centros asistenciales, como son el Hospital de León -Complejo Sanitario integrado por los Hospitales Virgen Blanca de la Seguridad Social, el Princesa Sofía de la Diputación Provincial de León y el edificio San Antonio Abad-, la Residencia de Santa Isabel y el Hospital Monte San Isidro.

Lidera el proyecto la dirección del Servicio de Cirugía del CAULE.

Diseño y caracterización de líquidos porosos para la captura y el almacenamiento de CO₂

Objetivo del proyecto

Se basa en el estudio bottom-up de los líquidos porosos para la separación de gases; el estudio químico físico de las propiedades micro y macroscópicas de los sistemas líquidos con porosidad permanente, y en el estudio de la capacidad de dichos sistemas para separación de gas.

Periodo de ejecución

1 de marzo de 2017 al 28 de febrero de 2021.

Financiación del proyecto

Convocatoria de propuestas H2020-MSCA-RISE-2016(MSCA-RISE).

Entidades Participantes del proyecto.

Università di Sassari, www.uniss.it

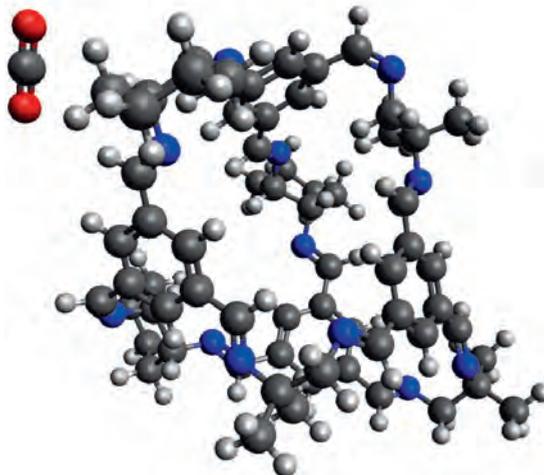
Universidad de Burgos, www.ubu.es

Helmholtz-Zentrum Geesthacht Zentrum für Material und Küstenforschung GmbH, www.hzg.de

Monolithos katalitis kai anakiklosi etaireia periorismenis efthinis Vlachos Nicholas,

Universidad de Chile, www.uchile.cl

Comisión Nacional de Energía Atómica, www.cnea.gov.ar/es



Interacción entre una molécula porosa con el gas CO₂.

Justificación del proyecto

En el proyecto CO2MPRISE se propone buscar nuevos sistemas para la captura y el almacenamiento de CO₂, desde el diseño y la caracterización de nuevas estructuras moleculares hasta la implementación a una escala más grande y el análisis de sus propiedades macroscópicas. En concreto, el proyecto de investigación se enfoca en la búsqueda de líquidos porosos (sistemas formados para un solvente y una molécula porosa que, por el tamaño del agujero, no deja entrar el solvente, manteniendo así la estructura líquida). Estas estructuras pueden almacenar CO₂ y funcionar, así, como sistemas de separación y almacenamiento de los gases. Dichos sistemas pueden encontrar aplicaciones en varios ramos industriales, debido a su potencial capacidad de separar CO₂ a partir del mismo flujo de gas (durante el proceso) y no, como en el caso de materiales porosos sólidos, cuando el proceso se haya acabado.

Funciones de SCAYLE

El acceso a las infraestructura de SACYLE dota de los recursos computacionales necesarios para poder realizar los cálculos DFT y MD.

Líder del proyecto

UNIVERSIDAD DE BURGOS, www.ubu.es.

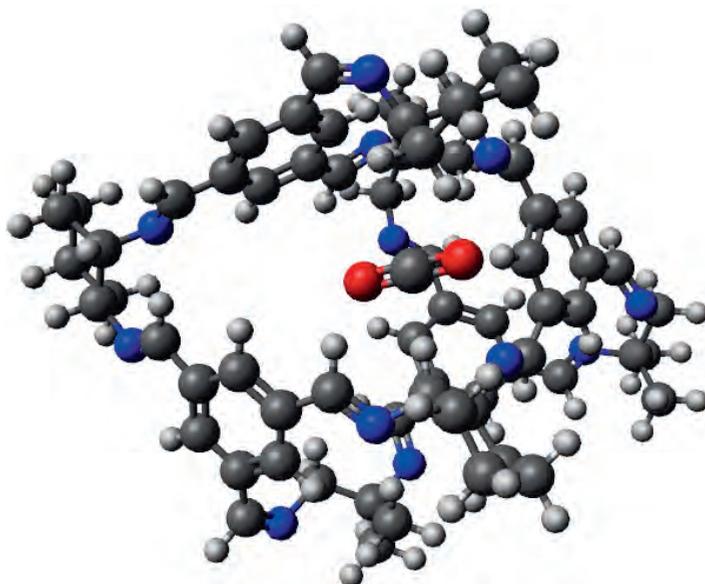
El grupo de investigación está formado por los profesores Santiago Aparicio (IP) y Rafael Alcalde, junto con los estudiantes de doctorado Claudia Pecoraro, Loukia Maritsa, Alberto Gutiérrez, Cesar Herrera y la investigadora postdoctoral María A. Monge.

El grupo lidera la parte computacional del proyecto CO2MPRISE y se ocupa de buscar estructuras para la captura y el almacenamiento de CO₂ y estudiar sus propiedades termodinámicas, a través de cálculos mecanocuánticos, y de analizar sus propiedades dinámicas a través de simulaciones MD, MC, KMC.

El objetivo que se persigue en el grupo de investigación es el de encontrar estructuras con una alta capacidad de almacenamiento de CO₂.



RISE-2016-CO2MPRISE-734873



Interacción entre una molécula porosa con el gas CO₂. Uno de los objetivos del estudio es el comprobar si las moléculas porosas pueden acoger el CO₂ y almacenarlo.

Nuevas **tecnologías** de **secuenciación** (NGS) para el estudio de los **micovirus** en *Fusarium circinatum*

Objetivo del proyecto

El objetivo principal del proyecto es utilizar las nuevas tecnologías de secuenciación para:

- *Identificar las moléculas víricas existentes en los aislamientos de *F. circinatum*,*
- *estudiar el efecto de los micovirus sobre *F. circinatum*, y*
- *estudiar el efecto de la inoculación de *F. circinatum* con y sin micovirus sobre plántulas de pino.*

La consecución de estos objetivos clarificará las posibilidades de esta estrategia para el control la enfermedad del Chancro Resinoso del Pino en España.

Periodo de ejecución

Desde el año **2016** al **2019**.

Financiación del proyecto

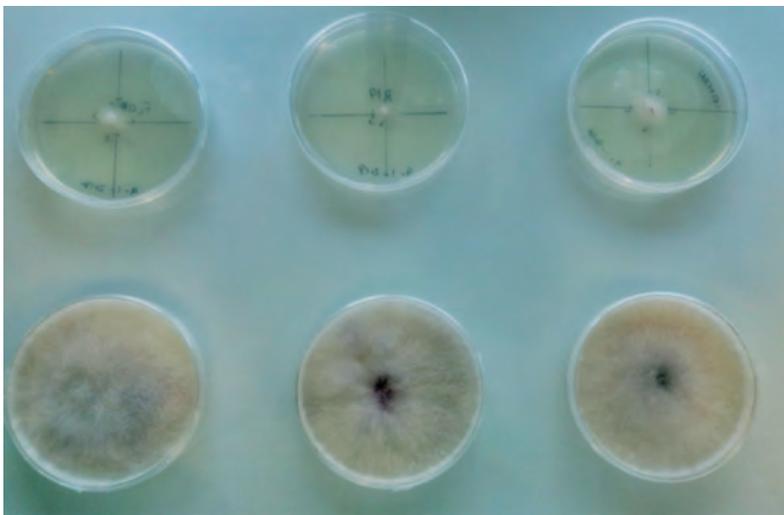
Convocatorias 2015, Proyectos EXCELENCIA y Proyectos RETOS, Dirección General de Investigación Científica y Técnica, Subdirección General de Proyectos de Investigación, MINECO, www.mineco.gob.es

Entidades Participantes del proyecto.

Universidad de Valladolid, España, www.uva.es

Natural Resources Institute, Luke, Finlandia, www.luke.fi/en

Forestry and Agricultural Biotechnology Institute, FABI, Sudáfrica, www.fabinet.up.ac.za



Cepas del hongo *Fusarium circinatum* creciendo en medio de cultivo para la posterior extracción de ARN/E. Jordán Muñoz Adalia.

Justificación del proyecto

Fusarium circinatum Nirenberg & O'Donnell (teleomorfo = *Gibberella circinata*) es un hongo ascomiceto causante del Chancro Resinoso del Pino (PPC, de sus iniciales en inglés), una enfermedad que causa importantes daños y pérdidas en bosques y plantaciones de pinos, siendo además considerado el patógeno más importante de viveros forestales en varios países de todo el mundo.

La enfermedad del PPC llegó a Europa en el año 2004, cuando España notificó la presencia del patógeno en varios viveros de pinos en Asturias, y en plantaciones de Cantabria. Desde entonces, diversos estudios científicos han evaluado la diversidad genética de las poblaciones del hongo, su patogenicidad, y el papel de algunas especies de insectos como posibles vectores de la enfermedad. Recientemente, el grupo de investigación ha detectado la presencia de diferentes moléculas de RNA de origen vírico en algunos aislamientos de la población española de *F. circinatum*, tres cepas que pertenecen a dos nuevas especies del género *Mitovirus*, *Fusarium circinatum mitovirus 1* (FcMV1), FcMV2- 1 y FcMV2-2. La detección ha sido frecuente en la población española del patógeno, donde un 32% de los aislamientos estaban infectados por al menos una de las tres cepas víricas detectadas. Estas moléculas de RNA podrían desencadenar procesos hipovirulentos en el hongo hospedante, como ocurre en *Cryphonectria parasitica*, el agente causal del chancro del castaño, que es controlado eficazmente con este método en el monte. Sin embargo, las primeras pruebas de inoculación llevadas a cabo parecen descartar este efecto, lo que nos obliga a la búsqueda de nuevos micovirus. Las técnicas de detección de virus rutinariamente utilizadas, como la reacción en cadena de la polimerasa con transcriptasa inversa (RT-PCR) requieren de un conocimiento previo del virus para ser detectado, y por tanto no son aconsejables para la detección de micovirus desconocidos en hongos.

La utilización de la metagenómica, apoyada en las nuevas tecnologías de secuenciación (NGS, de sus iniciales en inglés), posibilita determinar toda la comunidad vírica de un organismo, incluyendo micovirus.

Funciones de SCAYLE

La capacidad de supercomputación de Caléndula ha sido requerida para el manejo de las secuencias procedentes de secuenciación masiva de ARN de cadena corta.

Así mismo, Caléndula ha servido para el ensamblaje de estas lecturas para su posterior análisis.

Líder del proyecto

Julio Javier Diez Casero es Catedrático de Patología Forestal, de la Escuela de Ingenierías Agrarias, de la Universidad de Valladolid. Lleva más de 20 años ejerciendo como profesor en materia de enfermedades forestales. Realizó su doctorado en la Universidad Politécnica de Madrid y la Licenciatura de Biología en la Universidad de Salamanca. Ha publicado más de 130 artículos en revistas científicas y participado en numerosos congresos nacionales e internacionales. Ha dirigido 15 tesis doctorales y más de 60 tesis de máster proyectos fin de carrera. Ha coordinado numerosos proyectos técnicos y de investigación, nacionales e internacionales y actualmente lidera la acción COST FP1406 *Pine pitch canker - strategies for management of Gibberella circinata in greenhouses and forests (PINESTRENGTH)*.



AGL2015-69370-R

Colaboraciones en proyectos I+D+i a través de la RES

Modeling the Topographic Evolution of Iberia (MITE) - AECT-2017-1-0019

Grupo líder del proyecto: Institute of Earth Sciences Jaume Almera (ICTJA-CSIC)

Charm physics on fine lattices - FI-2017-1-0041

Grupo líder del proyecto: Dpto. Física Teórica, Universidad Autónoma de Madrid e Instituto de Física Teórica UAM-CSIC

Design of 2D covalent organic frameworks based on open and closed shell building blocks - QCM-2017-1-0020

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona / ICREA

Rational design of peptidomimetics targeting epidermal growth factor (EGF) protein - BCV-2017-2-0002

Grupo líder del proyecto: Institute for Research in Biomedicine

Rational design of peptidomimetics targeting vascular epidermal growth factor (VEGF) protein - BCV-2017-2-0003

Grupo líder del proyecto: Institute for Research in Biomedicine

CO2 adsorption and activation by early transition metal oxycarbides - QCM-2017-2-0001

Grupo líder del proyecto: University of Barcelona

Effect of Dispersive Forces on the Enantioselective Separation by Chemical Resolution - QCM-2017-2-0004

Grupo líder del proyecto: University of Barcelona

First-principles modelling of irradiation effects on light species retention and diffusion in materials relevant for nuclear technologies - QCM-2017-2-0012

Grupo líder del proyecto: University of Oviedo

First-principles modelling of irradiation effects on light species retention and diffusion in materials relevant for nuclear technologies (2nd period) - QCM-2017-3-0018

Grupo líder del proyecto: University of Oviedo

CO2 adsorption and activation by early transition metal oxycarbides - QCM-2017-3-0002

Grupo líder del proyecto: University of Barcelona

Effects of time-periodic spanwise fluidic actuation on the flow around a cylinder - FI-2017-3-0009

Grupo líder del proyecto: Universitat Politècnica de Catalunya

Understanding the molecular interactions that allow drug molecules to passively diffuse across the blood brain barrier - BCV-2017-3-0008

Grupo líder del proyecto: King's College London

Publicaciones científicas SCAYLE

TESIS DOCTORAL

Meteorología numérica en un entorno de supercomputación. Asimilación de datos y predicción por conjuntos multifísica

Autor: *Jesús Lorenzana Campillo*

Directores: *Dr. Eduardo García Ortega, Dr. Jesús Gonzalo de Grado. Universidad de León*

Resumen

Las sociedades avanzadas demandan unas previsiones meteorológicas cada vez más exactas. Ante eventos meteorológicos extremos, unas previsiones precisas salvan vidas, permiten gestionar de forma eficiente los equipos de emergencias y pueden ayudar a evitar las pérdidas económicas, permitiendo reaccionar con tiempo y proteger vidas y posesiones.

Los beneficios para la sociedad, compensan los costes de la investigación científica necesaria para conocer mejor los procesos físicos que suceden en la atmósfera y poder representarlos de forma matemática. También el desarrollo de las costosas infraestructuras necesarias, tanto para la recopilación de observaciones (satélites de observación terrestre, por ejemplo) como para la resolución de los modelos mediante el uso de superordenadores, capaces de realizar unos cálculos cada vez más complejos en unos tiempos de ejecución cada vez menores, suponen una inversión imprescindible.

En los últimos años se han multiplicado los instrumentos de observación atmosférica que son capaces de recoger información muy frecuentemente, sobre una gran cantidad de variables que definen de forma precisa el estado de la atmósfera. Esta información debe ser procesada y, mediante el uso de técnicas de asimilación de datos computacionalmente muy exigentes, ser introducida en los modelos numéricos de predicción que producen predicciones meteorológicas en función del estado inicial de la atmósfera.

En paralelo, se ha hecho necesario considerar el comportamiento no lineal de la atmósfera y sus consecuencias en la generación de las predicciones numéricas. La incertidumbre asociada a ellas es un hecho que debe ser considerado, pasando de ser la predicción meteorológica, un problema determinista a un problema probabilista. Para determinar esta incertidumbre se han de ejecutar conjuntos de modelos meteorológicos ligeramente diferentes entre ellos para poder estimar la dispersión de los resultados obtenidos y así establecer la incertidumbre de la predicción. Este paradigma se denomina también predicción por conjuntos o ensembles.

La predicción por ensembles, ejecuta un elevado número de modelos numéricos simultáneamente. Esto hace imprescindible el uso eficiente de la potencia de cálculo que proporcionan los superordenadores. En la presente Tesis Doctoral se ha realizado un trabajo de investigación centrado en el desarrollo de un sistema de predicción numérica meteorológica en un entorno de supercomputación HPC, abordando diferentes aspectos de su problemática tanto desde una orientación informática (adecuación del sistema diseñado al sistema de cálculo y sus características) como desde una perspectiva meteorológica (generación de una predicción por conjuntos con aplicación directa a la predicción de eventos de convección severa y campos de vientos).

Una primera área de interés en la investigación realizada, ha sido la puesta en funcionamiento de un sistema de predicción probabilista en el superordenador Caléndula de la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (en adelante FCSCCL) evolucionando desde la predicción determinista que ha venido ejecutándose en los últimos años.

La potencia de cálculo disponible determina, en gran medida, el alcance de un sistema de predicción por conjuntos, ya que este tipo de predicción demanda muchos más recursos computacionales que las predicciones deterministas.

Es por esto, por lo que se deben determinar las prestaciones de los recursos disponibles en el superordenador, mediante la caracterización de las capacidades de los distintos subsistemas que forman el sistema de cálculo: número de nodos de cálculo necesarios y garantizar su disponibilidad mediante la configuración apropiada en el sistema de gestión de trabajos, tipo de procesadores y su microarquitectura, memoria RAM con la que están equipados, capacidades de las redes de comunicaciones con las que interconectan. Finalmente, un importante factor, como es la capacidad y rendimiento del sistema de archivos donde se almacena la gran cantidad de información de datos de entrada (datos de análisis procedentes de otros modelos meteorológicos y datos de observaciones) y datos de salida producidos tras las simulaciones (predicciones realizadas).

La dependencia sensible a las condiciones iniciales hace necesario obtener la mejor representación del estado inicial de la atmósfera en cada simulación. Por lo tanto, una segunda área de interés se centra en el diseño de un sistema de asimilación de datos, capaz de integrar información procedente de distintas fuentes de observación, tanto tradicionales (observaciones de aviones o barcos, estaciones meteorológicas, etc.) como de teledetección (instrumentos a bordo de satélites, radares meteorológicos, radiómetros, etc.). Este sistema de asimilación de datos permitirá determinar con mayor precisión las condiciones iniciales de la atmósfera utilizadas por los modelos numéricos para calcular su evolución a lo largo de un determinado periodo de tiempo.

En las predicciones a corto plazo, la selección de las parametrizaciones físicas constituye un elemento fundamental para la obtención de predicciones coherentes y más precisas. En particular, la realización de análisis de sensibilidad a las parametrizaciones físicas es fundamental para el diseño de una predicción por conjuntos o ensemble.

La identificación de las parametrizaciones físicas más adecuadas al tipo de predicción deseada y al área geográfica de interés, constituyó una tercera área de investigación.

La aplicación de los resultados obtenidos en el desarrollo de esta Tesis Doctoral, ha permitido diseñar un sistema de asimilación, identificando las fuentes de observación más adecuadas y utilizando las mismas, en el flujo de trabajo automatizado para el cálculo de predicciones meteorológicas.

Por otra parte, se ha diseñado un sistema de predicción por conjuntos o ensembles, a corto plazo, a partir de un análisis de sensibilidad a distintos esquemas de parametrizaciones físicas. Este diseño ha permitido determinar las características óptimas del ensemble para la predicción de eventos meteorológicos de convección severa.

Finalmente, se realizó una aplicación del sistema de predicción por conjuntos desarrollado, para el cálculo óptimo de rutas aeronáuticas, es decir, determinar las trayectorias que deberían seguir los aviones que realizan sus rutas en el área de estudio para lograr minimizar el índice de coste aeronáutico, teniendo en cuenta el campo de vientos predicho a la altura de vuelo. El índice de coste es utilizado para determinar la velocidad óptima que permite minimizar los costes del vuelo, por lo que la precisión de las predicciones meteorológicas, en lo referente a los datos de viento a la altura de vuelo, es de gran importancia para los operadores aéreos.

ARTÍCULOS CIENTÍFICOS

Performance of multi-physics ensembles in convective precipitation events over northeastern Spain

E. García-Ortega^a, J.Lorenzana^b, A.Merino^a, S. Fernández-González^c, L.López^a, J.L.Sánchez^a

^a Atmospheric Physics Group, Environmental Institute, University of León, Spain

^b Supercomputing Center of Castile and Leon, University of León, Spain

^c Department of Earth Physics, Astronomy and Astrophysics II, Faculty of Physics, Complutense University of Madrid, Spain

<http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosres.2017.02.009>

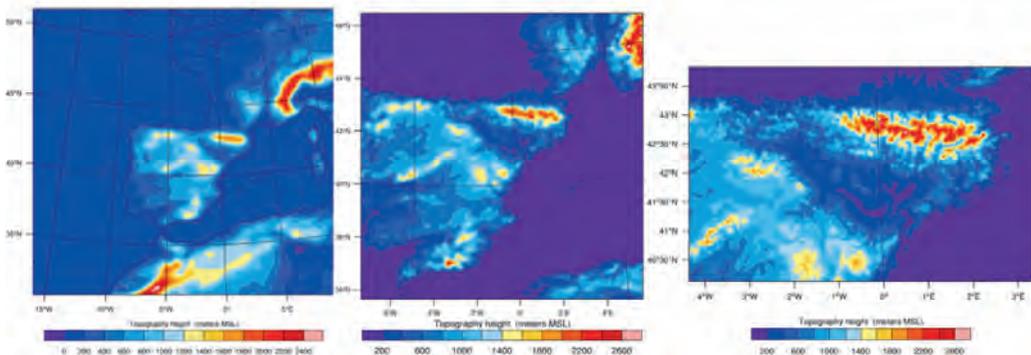
Atmospheric Research 190 (2017) 55-67

0169-8095/© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved

ISSN: 0169-8095

Abstract

Convective precipitation with hail greatly affects southwestern Europe, causing major economic losses. The local character of this meteorological phenomenon is a serious obstacle to forecasting. Therefore, the development of reliable short-term forecasts constitutes an essential challenge to minimizing and managing risks. However, deterministic outcomes are affected by different uncertainty sources, such as physics parameterizations. This study examines the performance of different combinations of physics schemes of the Weather Research and Forecasting model to describe the spatial distribution of precipitation in convective environments with hail falls. Two 30-member multi-physics ensembles, with two and three domains of maximum resolution 9 and 3km each, were designed using various combinations of cumulus, micro-physics and radiation schemes. The experiment was evaluated for 10 convective precipitation days with hail over 2005–2010 in northeastern Spain. Different indexes were used to evaluate the ability of each ensemble member to capture the precipitation patterns, which were compared with observations of a rain-gauge network. A standardized metric was constructed to identify optimal performers. Results show interesting differences between the two ensembles. In two domain simulations, the selection of cumulus parameterizations was crucial, with the Betts-Miller-Janjic scheme the best. In contrast, the Kain-Fristch cumulus scheme gave the poorest results, suggesting that it should not be used in the study area. Nevertheless, in three domain simulations, the cumulus schemes used in coarser domains were not critical and the best results depended mainly on microphysics schemes. The best performance was shown by Morrison, New Thomson and Goddard microphysics.



Domains of the simulations, with topography.

Sensitivity Analysis of the WRF Model: Wind-Resource Assessment for Complex Terrain

Sergio Fernández-González^a, María Luisa Martín^b, Eduardo García-Ortega^c, Andrés Merino^c, Jesús Lorenzana^d, José Luis Sánchez^e, Francisco Valero^a, and Javier Sanz Rodrigo^e

^a Department of Earth Physics, Astronomy and Astrophysics II, Faculty of Physics, Complutense University of Madrid, Madrid, Spain

^b Department of Applied Mathematics, Faculty of Computer Engineering, University of Valladolid, Segovia, Spain

^c Atmospheric Physics Group, Instituto de Matemática Interdisciplinar, University of León, León, Spain

^d Supercomputing Center of Castile and León, University of León, León, Spain

^e National Renewable Energy Centre (CENER), Sarriguren, Spain

Journal of Applied Meteorology and Climatology 57 (2017) 733-753

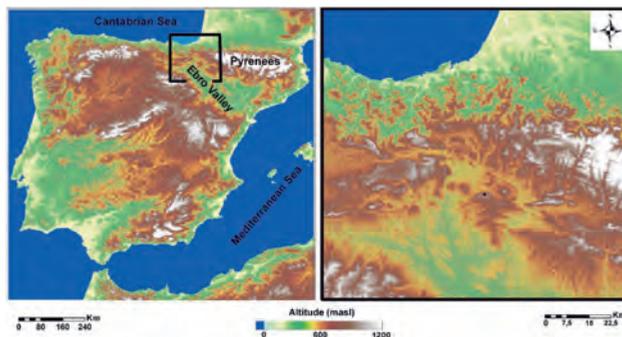
<https://doi.org/10.1175/JAMC-D-17-0121.1>

©2018 American Meteorological Society Privacy Policy and Disclaimer

ISSN: 1558-8424

Abstract

Wind energy requires accurate forecasts for adequate integration into the electric grid system. In addition, global atmospheric models are not able to simulate local winds in complex terrain, where wind farms are sometimes placed. For this reason, the use of mesoscale models is vital for estimating wind speed at wind turbine hub height. In this regard, the Weather Research and Forecasting (WRF) Model allows a user to apply different initial and boundary conditions as well as physical parameterizations. In this research, a sensitivity analysis of several physical schemes and initial and boundary conditions was performed for the Alaiiz mountain range in the northern Iberian Peninsula, where several wind farms are located. Model performance was evaluated under various atmospheric stabilities and wind speeds. For validation purposes, a mast with anemometers installed at 40, 78, 90, and 118 m above ground level was used. The results indicate that performance of the Global Forecast System analysis and European Centre for Medium-Range Weather Forecasts interim reanalysis (ERA-Interim) as initial and boundary conditions was similar, although each performed better under certain meteorological conditions. With regard to physical schemes, there is no single combination of parameterizations that performs best during all weather conditions. Nevertheless, some combinations have been identified as inefficient, and therefore their use is discouraged. As a result, the validation of an ensemble prediction system composed of the best 12 deterministic simulations shows the most accurate results, obtaining relative errors in wind speed forecasts that are <15%.



Orography of Iberian Peninsula (left panel). A zoomed view around Alaiiz mountain.

MENCIONES A SCAYLE EN PUBLICACIONES CIENTÍFICAS

Tesis: Modelo de predicción subespacial: Regresión Multivariante Gaussiana Subespacial.

Author: Víctor Vicente Palacios.

Behavior of Deep Eutectic Solvents under External Electric Fields: A Molecular Dynamics Approach.

Authors: Mert Atilhan, Santiago Aparicio.

Journal: Physical Chemistry.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b09714

A theoretical study on aminoacid-based ionic liquids with acid gases and water.

Authors: Cesar Herrera, Gabriela De Carvalho, Mert Atilhan, Luciano T Costa, Santiago Aparicio.

Journal: Molecular Liquids.

DOI: 10.1016/j.molliq.2016.11.086

ISSN: 0167-7322

Simultaneous CO₂ and SO₂ capture by using ionic liquids: a theoretical approach †.

Author: Gregorio Garci.

Journal: Royal Society of Chemistry.

DOI: 10.1039/C6CP08151G

Elucidating the Properties of Graphene – Deep Eutectic Solvents Interface.

Authors: Mert Atilhan, Luciano T Costa, Santiago Aparicio.

Journal: Langmuir.

DOI: 10.1021/acs.langmuir.7b00767

Insights into Glycol Ether – Alkanol Mixtures from a Combined Experimental and Theoretical Approach.

Authors: Rafael Alcalde, Alberto Gutie, Mert Atilhan, Jose Luis Trenzado, Santiago Aparicio.

Journal: Physical Chemistry.

DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b03598

Microscopic Characterization of CO₂ and H₂S Removal by Sulfolane.

Authors: Mert Atilhan, Santiago Aparicio.

Journal: energy & fuels.

DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7b01577

Optimization of the mechanical collimation for minibeam generation in proton minibeam radiation therapy.

Authors: Consuelo Guardiola, Cecile Peucelle, Yolanda Prezado.

Journal: Medical physics.

DOI: 10.1002/mp.12131

ISSN: 2473-4209 (Electronic)

Transcriptome expression analysis of candidate milk genes affecting cheese-related traits in 2 sheep breeds.

Authors: A. Suárez-Vega, B. Gutiérrez-Gil, J J. Arranz.

Journal: Dairy Science.

DOI: 10.3168/jds.2016-11048

ISSN: 0022-0302

FORMACIÓN

Curso Práctico de Iniciación al uso de la Supercomputación aplicado al Análisis de datos RNA-Seq

Curso Práctico del uso de la Supercomputación aplicado a la Metagenómica y Genómica comparada

Otras Colaboraciones

Asignatura de Computación de Altas Prestaciones, Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Asignatura de Computación grid y supercomputación.

Asignatura de Computación de Altas Prestaciones, Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Curso Práctico de Iniciación al uso de la Supercomputación aplicado al Análisis de datos RNA-Seq

Objetivos

En este curso se proporcionará una formación básica para el manejo e interpretación de datos de expresión génica global procedentes de *Next Generation Sequencing* (RNA-Seq). Para ello, además de explicar las bases teóricas de la generación de los datos y del proceso de análisis, se pretende trabajar con datos reales de expresión génica en los que se realizará: el control de calidad, el alineamiento frente al genoma de referencia, ensamblado, cuantificación y normalización de la expresión génica, análisis de expresión diferencial y análisis de enriquecimiento funcional.

Destinatarios

El curso está dirigido a investigadores interesados en estudios genómicos, a profesionales del sector de las Ciencias Computacionales, Biología y/o Biotecnología relacionados con el diagnóstico genético y a Alumnos Universitarios (titulaciones técnicas del ámbito experimental y/o económico) de posgrado y, en general, cualquier persona afín a la temática tanto en la dimensión de la investigación, como de la innovación y el desarrollo.

Profesorado

Aroa Suárez Vega.

Dpto de Producción Animal, Universidad de León.

Beatriz Gutiérrez Gil.

Dpto de Producción Animal, Universidad de León.

Beatriz Rosón Burgo.

Instituto Karolinska, Estocolmo, Suecia.

Cristina Esteban Blanco

Supercomputación de Castilla y León, León.

Juan José Arranz Santos.

Dpto de Producción Animal, Universidad de León.

Fecha y lugar

3 al 7 de julio de 2017. Edificio CRAI-TIC, Campus de Vegazana, Universidad de León

Duración 36 horas

Contenidos

Seminario de Introducción al uso de la Supercomputación aplicado a la bioinformática.

NGS y RNA-Seq Supercomputación.

Control de Calidad y Trimming (FASTQC, otras herramientas Trimmomatic, etc.).

Alineamiento de lecturas (TopHat) y visualización (IGV).

Manipulación de secuencias (SamTools).

Transcript assembly (Cufflinks).

Cuantificación de lecturas (Cufflinks y HTSeq).

Introducción a R y Bioconductor. Toma de contacto.

Qué es el análisis de expresión diferencial

Análisis de expresión diferencial de RNAseq

Introducción a las anotaciones funcionales.

Bases de datos y ontologías para anotación funcional (KEGG, GO, INTERPRO).

Análisis de enriquecimiento funcional (DAVID and GeneTermLinker).

Redes funcionales (FGNet package).

Visita al Superordenador Caléndula (voluntario).

Curso Práctico del uso de la Supercomputación aplicado a la Metagenómica y Genómica comparada

Objetivos

Se proporciona la formación necesaria para el análisis de datos procedentes de técnicas de *Next Generation Sequencing*, centrada particularmente en su aplicación al estudio metagenómico de muestras de diversos ambientes y emplear la supercomputación en la recopilación y ensamblado de los fragmentos de ADN secuenciados, así como su posterior anotación y análisis.

Destinatarios

El curso está dirigido a investigadores interesados en estudios genómicos, a profesionales del sector de las Ciencias Computacionales, Biología y/o Biotecnología relacionados con el diagnóstico genético y a Alumnos Universitarios (titulaciones técnicas del ámbito experimental y/o económico) de posgrado y, en general, cualquier persona afín a la temática tanto en la dimensión de la investigación, como de la innovación y el desarrollo.

Profesorado

Cristina Esteban Blanco.

Dpto de Producción Animal, Universidad de León.

Giuseppe D'Auria.

Fundación para el Fomento de la Investigación Sanitaria y Biomédica de la Comunitat Valenciana. (FISABIO), Valencia.

Javier Tamames de la Huerta.

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), Madrid.

Duración 36 horas

Fecha y lugar

16 al 20 de octubre de 2017. Edificio CRAI-TIC, Campus de Vegazana, Universidad de León

Contenidos

Introducción acceso a Caléndula - Descripción técnica de los recursos de la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León.

Introducción al entorno Linux.

Control de calidad de las secuencias.

Asignación taxonómica.

Estimación de abundancia.

Análisis de datos de taxonomía.

Ensamblaje y coensamblaje de metagenomas.

Predicción de genes y búsqueda de homología.

Asignación funcional y taxonómica.

Mapping de lecturas sobre contigs para estimar abundancias.

Binning: Separación de MAGs (genomas de especies individuales).

Reconstrucción de genomas presentes en el metagenoma.

Estimación de expresión de genes presentes en el metagenoma.

Comparación de niveles de expresión en diferentes condiciones.

Visita al Superordenador Caléndula (voluntario).

Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE

Asignatura de Computación de Altas Prestaciones, Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Departamento de Ingeniería Mecánica, Informática y Aeroespacial, Área de Ingeniería Aeroespacial.
Universidad de León.

18 de octubre de 2016 al 10 de febrero 2017.

Asignatura de Computación grid y supercomputación. 4º de Graduado en Ingeniería Informática

Departamento de Ingeniería Mecánica, Informática y Aeroespacial, Área de Ingeniería Aeroespacial.
Universidad de León.

16 de febrero al 5 de julio 2017.

Asignatura de Computación de Altas Prestaciones, Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Departamento de Ingeniería Mecánica, Informática y Aeroespacial, Área de Ingeniería Aeroespacial.
Universidad de León.

2 de octubre de 2017 al 10 de febrero 2018.

DATOS DE SCAYLE

Datos técnicos

Datos económicos

Protocolos y convenios de colaboración

Visitas a SCAYLE

Actividades de promoción, difusión y comunicación

Utilización del Sistema

Cálculo científico

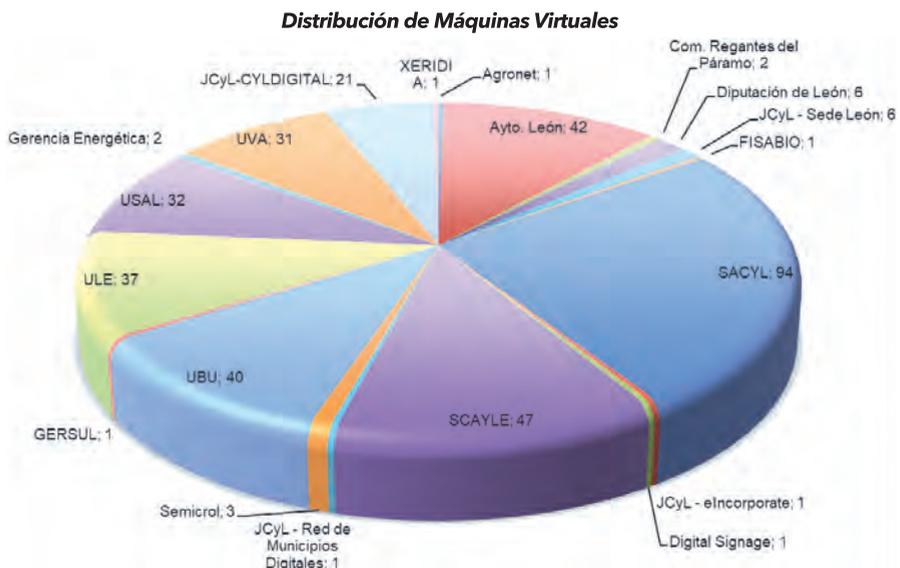
Durante el año 2017 se han ejecutado 1.836.319 trabajos que han ocupado 15.183.772 horas de cálculo.

En cuanto al número de trabajos ejecutados y el número de horas de cálculo, el dato más representativo es que ha aumentado respecto al año 2016 en un 62.4% aproximadamente. Este crecimiento se debe a:

- La incorporación completa de SCAYLE a la Red Española de Supercomputación, cuyos investigadores ocupan al 100%.
- El incremento de usuarios que no son de la Red Española de Supercomputación: Grupos de investigación de las Universidades de CyL, que han hecho un uso intensivo de la máquina de cálculo científico.
- La ampliación de la potencia de cálculo del propio supercomputador.

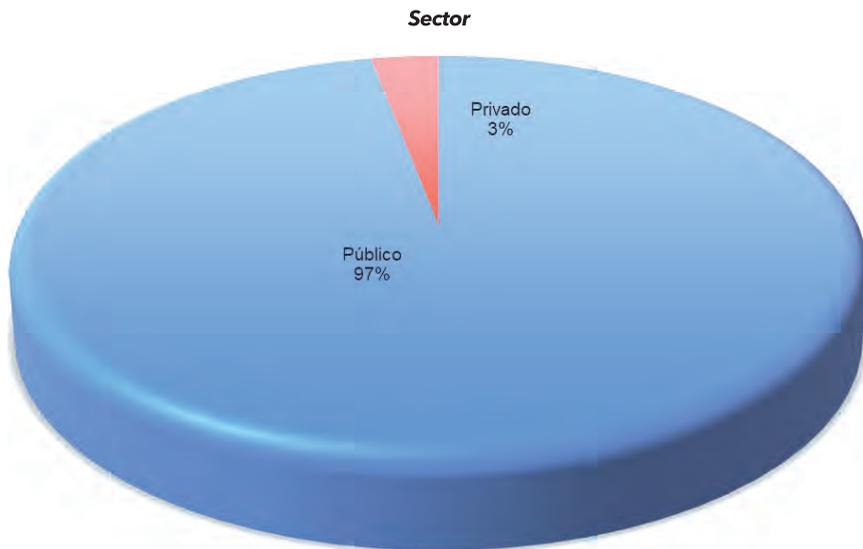
Servicios Cloud

Se encuentran desplegados 321 servidores virtuales en la nube de SCAYLE:



Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2017.

La distribución por sectores es:



Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2017.

Actualización tecnológica

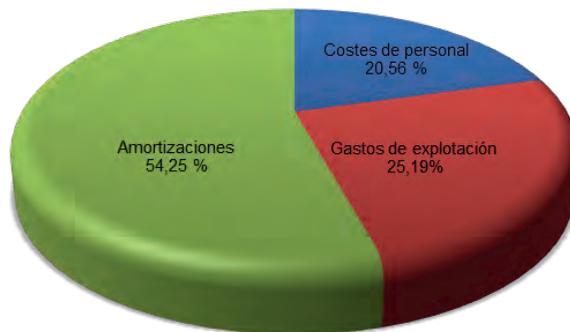
Durante el primer trimestre de 2017 se realizó la renovación de algunos de los servidores más antiguos (4) de la granja de virtualización, responsables del servicio de Cloud.

La potencia de cálculo es de 135 TeraFlops, contando actualmente con 3896 cores de proceso genérico y 1800 cores para coprocesamiento.

datos económicos

Gastos de SCAYLE, ejercicio 2017: **1.520.400,48 €**

La principal partida de gastos de la SCAYLE en 2017 continúa siendo la de amortizaciones, debido a la contabilización de la depreciación de los equipos de la Red Regional de Ciencia y Tecnología de Castilla y León, así como del resto de inversiones financiadas con cargo a FEDER. Los gastos de explotación incluyen los costes de subcontratas y de los principales suministros como electricidad y comunicaciones, son la segunda partida en importancia. Los costes de personal suponen el resto de gastos, siendo la de menor importe de las tres.



Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2017

Ingresos de SCAYLE, ejercicio 2017: **1.520.400,48 €**

Los principales ingresos proceden, al igual que en años anteriores, de las aportaciones de la Junta de Castilla y León, Consejería de Fomento y Medio Ambiente y Consejería de Educación, para financiar tanto los gastos de explotación como las inversiones, cofinanciadas estas últimas a través de fondos FEDER, representando más de un 80 % de los ingresos. La prestación de servicios a empresas y los ingresos procedentes de la participación en proyectos suponen el resto de ingresos de la SCAYLE.



Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2017

protocolos y convenios de colaboración

Convenio entre la Administración General de la Comunidad de Castilla y León, la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León y la Universidad de Burgos para el alojamiento de un punto de presencia de la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León.

La Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León es una red autonómica de fibra óptica de alta velocidad que interconecta entre sí las diferentes universidades e instalaciones científico-tecnológicas de la Comunidad, y a estas a su vez con el resto de centros de investigación españoles e internacionales a través de red troncal RedIRIS-NOVA. Gestionada por Red.es, en los términos descritos en el citado convenio.

El despliegue y operación de la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León requiere la instalación de puntos de presencia en cada ciudad a la que haya de llegar la red, y la ubicación idónea de los mismos son los campus universitarios públicos.

Las universidades públicas alojan puntos de presencia de RedIRIS Nova y cuentan con instalaciones que cumplen los requerimientos técnicos para alojar puntos de presencia.

En este sentido, la Universidad de Burgos será usuaria de esta infraestructura (punto de presencia) y se beneficiará del aprovechamiento de la misma que pondrá a disposición de los investigadores.

Objeto del convenio.

El nodo de RedCAYLE está compuesto por un conjunto de equipos avanzados de comunicaciones donde se conectan los enlaces que lo unen con el resto de la red. El espacio donde se alojan debe estar adecuadamente acondicionado y cumplir los requisitos de servicios de RedCAYLE.

Convenio entre la Administración General de la Comunidad de Castilla y León, la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León y la Universidad de León para el alojamiento de un punto de presencia de la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León.

La Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León es una red autonómica de fibra óptica de alta velocidad que interconecta entre sí las diferentes universidades e instalaciones científico-tecnológicas de la Comunidad, y a estas a su vez con el resto de centros de investigación españoles e internacionales a través de red troncal RedIRIS-NOVA. Gestionada por Red.es, en los términos descritos en el citado convenio.

El despliegue y operación de la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León requiere la instalación de puntos de presencia en cada ciudad a la que haya de llegar la red, y la ubicación idónea de los mismos son los campus universitarios públicos.

Las universidades públicas alojan puntos de presencia de RedIRIS Nova y cuentan con instalaciones que cumplen los requerimientos técnicos para alojar puntos de presencia.

En este sentido, la Universidad de León será usuaria de esta infraestructura (punto de presencia) y se beneficiará del aprovechamiento de la misma que pondrá a disposición de los investigadores.

Objeto del convenio.

El nodo de RedCAYLE está compuesto por un conjunto de equipos avanzados de comunicaciones donde se conectan los enlaces que lo unen con el resto de la red. El espacio donde se alojan debe estar adecuadamente acondicionado y cumplir los requisitos de servicios de RedCAYLE.

Acuerdo entre la Universidad de León y la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León para la cesión de espacios

Objeto del Acuerdo.

El presente Acuerdo tiene por objeto la cesión por parte de la Universidad de León a la Fundación del uso de los locales e instalaciones y especificados en el Anexo I que acompaña al presente Acuerdo. Estos espacios suponen una cantidad estimada de 656,8m² de un total de 4.350m² del edificio CRAITIC.

Convenio entre la Universidad de León y la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León para la Colaboración en Materia de Docencia Reglada, Formación, Investigación y Desarrollo Científico-Tecnológico.

Universidad de León es una institución de derecho público, dotada de personalidad jurídica y autonomía, de conformidad con lo establecido en el artículo 2 de la ley Orgánica 6/2001, de universidades, y artículo 1 de los Estatutos de la Universidad, aprobados por Acuerdo de la Junta de Castilla y León nº 243/2003, de 23 de octubre (B.O.E. y L. nº 210, de 29 de octubre). Entre sus funciones generales, la Universidad de León tiene la correspondiente a la preparación para el ejercicio de actividades profesionales que exijan la aplicación de conocimientos y métodos científicos, V la difusión, la valorización y la transferencia del conocimiento al servicio de la cultura, de la calidad de la vida y del desarrollo económico (artículo 1.2.b) y el de la Ley Orgánica 6/2001, de Universidades).

Objeto del Convenio

Es objeto del presente convenio establecer el marco adecuado que agilice los proyectos de colaboración entre la Fundación y la Universidad de León en la docencia reglada, formación, investigación y desarrollo científico-tecnológico en los campos que son propios de los fines de la Fundación, así como de otros que en el futuro puedan ser considerados de interés para ambas entidades.

En concreto, las actuaciones inicialmente previstas son las siguientes:

- La colaboración en tareas docentes y de formación, tanto reglada como no oficial, de estudiantes de Grado, Postgrado y Doctorado de la Universidad de León.
- la colaboración en la impartición de cursos y seminarios de especialización dirigidos al Personal Docente e Investigador, al Personal Investigador en Formación y a otros colectivos de la Universidad de León.
- La cooperación en la impartición de cursos y seminarios de formación o especialización dirigidos a otros colectivos que no pertenezcan a la Universidad de León.
- El apoyo mutuo al desarrollo de proyectos de investigación, desarrollo e innovación dirigidos y/o ejecutados por el Personal Docente e Investigador de la Universidad de León y/o Personal Investigador de la Fundación.
- La colaboración mutua en proyectos de mejora de la gestión informática y/o en las tareas computacionales de los distintos Servicios de la Universidad de León, en particular acciones dirigidas a la implantación de la administración electrónica en las Universidades Públicas de Castilla y León.
- Colaboración mutua en el desarrollo de proyectos estratégicos relacionados con la Redes de Comunicaciones de Alta Capacidad y en particular con la Red Académica Española y la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León (Red de Conexión).
- Apoyo mutuo en proyectos de eficiencia energética y mantenimiento y optimización de uso de recursos de sus respectivos centros de proceso de datos.
- Dinamización y colaboración conjunta en proyectos de e-Ciencia.

- 25-01-2017 - IES San Andrés del Rabanedo. León.
- 01-02-2017 - María Auxiliadora de León.
- 24-02-2017 - IES Juan del Enzina. León.
- 10-03-2017 - Universidad de Valladolid.
- 21-03-2017 - Curso de Eficiencia Energética del ECYL. León.
- 07-04-2017 - Master de incendios Forestales de la Universidad de León.
- 11-04-2014 - Visita del FOCYL (Formación y Consultoría). León.
- 08-05-2017 - Rutas Científicas, Artísticas y Literarias. Huelva y Ceuta.
- 15-05-2017 - Rutas Científicas, Artísticas y Literarias. Granada y Salamanca.
- 18-05-2017 - Visita colegio José Agustinas de León.
- 22-05-2017 - Rutas Científicas, Artísticas y Literarias. Ávila y Murcia.
- 26-05-2017 - Alumnos Facultad. Ciencias Económicas y Empresariales
- 29-05-2017 - Rutas Científicas, Artísticas y Literarias. Soria y Ciudad Real.
- 06-06-2017 - Escuela de Ingeniería Industrial e Informática de la Universidad de León.
- 07-06-2017 - Visita Hispasat. Madrid.
- 09-06-2017 - Colegio Virgen Blanca. León.
- 29-06-17 - Centro de Formación Ocupacional. León.
- 29-06-2017, 11:30 - Campus Tecnológico de la Universidad de León.
- 29-06-2017, 13:30 - Campus Tecnológico de la Universidad de León.
- 06-07-2017- Campus Tecnológico de la Universidad de León.
- 07-07-2017 - Curso RNA-Seq, León.
- 13-07-2017 - Campus Tecnológico de la Universidad de León.
- 21-07-2017 - Empleo Castilla y León, ECYL
- 22-09-2017 - Escuela de Ingeniería Industrial e Informática de la Universidad de León.
- 13-11-2017 - Semana de la Ciencia. León.
- 15-11-2017 - Semana de la Ciencia. León.
- 16-11-2017 - Semana de la Ciencia. León.
- 17-11-2017 - Semana de la Ciencia. León.
- 23-11-2017 - CIFP Tecnológico Industrial. León.
- 24-11-2017 - Asignatura de Computación Distribuida, Máster Universitario en Ingeniería Informática de la Universidad de León.

actividades de promoción, difusión y comunicación

FLAG-ERA Joint Transnational Call 2017 - Information and Networking Day.

Organizado por: FLAG-ERA.

Fecha: 12 de enero de 2017. Madrid.

Jornada Encuentro investigadores UBU.

Organizado por: SCAYLE.

Fecha: 9 de febrero de 2017. Burgos.

Consejo Red Española de Supercomputación (RES).

Organizado por: Barcelona Supercomputing Center (BSC).

Fecha: 13 de marzo de 2017. Tenerife.

Participación en Smart Energy Congress.

Organizado por: ENERTIC.

Fecha: 15-16 de marzo de 2017. Madrid.

Jornada sobre Transformación Digital en la Administración de la Comunidad de Castilla y León.

Organizado por: Colegio Profesional de Ingenieros en Informática de Castilla y León.

Fecha: 25 de mayo de 2017. Valladolid.

Jornadas Técnicas de RedIRIS 2017.

Organizado por: RedIRIS.

Fecha: 13 al 15 de junio de 2017. Santander.

8th International Conference of Pattern Recognition Systems.

Organizado por: International Association for Pattern Recognition (IAPR), Universidad Carlos III de Madrid y la Universidad Politécnica de Madrid.

Fecha: 13 de julio de 2017. Madrid

11ª Conferencia de Usuarios de la Red Española de Supercomputación.

Organizado por: Red Española de Supercomputación.

Fecha: 28 y 29 de septiembre de 2017. Santiago de Compostela.

Taller TIC Plan Estratégico Universidad de Valladolid.

Organizado por: Universidad de Valladolid.

Fecha: 16 de octubre de 2017. Valladolid

Encuentro Internacional de Seguridad de la información-ENISE.

Organizado por: INCIBE.

Fecha: 24 y 25 octubre 2017. León

Info Day New FET Flagship.

Organizado por: La Oficina Europea (OE) del Ministerio de Economía, Industria y Competitividad (MINECO) en colaboración con la Comisión Europea (DG Connect) y la Agencia Estatal de Investigación (AEI).

Fecha: 15 de noviembre de 2017. Madrid

Exposición Fotográfica.

Organizado por: Programa Operativo FEDER.

Fecha: 15 de diciembre a 31 de enero de 2018.

León.

Desayuno Tecnológico. Supercomputación para empresas

Organizado por: Instituto de Competitividad Empresarial e Instituto de Biotecnología de León.

Fecha: 17 de noviembre de 2017. León.

