

# Supercomputación Castilla y León

Anuario · Informe de actividad

# 2022

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 Intrastructure**



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



El Mundo Diario de Castilla y León  
Premios Innovadores 2019  
**Premio Iberaval al Mejor Proyecto TIC**



**Anuario · Informe de actividad · 2022**  
**Supercomputación de Castilla y León, SCAYLE**  
Depósito Legal LE-244-2016

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](http://www.scayle.es)

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

# índice de contenidos

<b>Presentación Presidencia Patronato</b>	pág.4
<b>Presentación Dirección General</b>	pág.5
<b>Composición del Patronato</b>	pág.6
<b>Consejo Asesor</b>	pág.6
<b>SCAYLE</b>	
Misión y objetivos	pág.7
Cartera de servicios	pág.8
Sistemas	pág.9
Supercomputación	pág.10
RedCAYLE	pág.11
<b>Proyectos I+D+i</b>	
Beneficiario	pág.13
Colaborador	pág.15
Publicaciones científicas	pág.31
<b>Formación</b>	
Cursos	pág.33
Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE	pág.35
<b>Datos de SCAYLE</b>	
Datos económicos	pág.36
Protocolos y convenios de colaboración	pág.36
Estadísticas de uso	pág.37
Actividades de promoción, difusión y comunicación	pág.38
Visitas a SCAYLE	pág.38

# presentación **Presidencia Patronato**

El año 2022 ha sido un año intenso para la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE) cuyo patronato tengo el honor de presidir. La financiación de la Junta de Castilla y León ha permitido inaugurar un nuevo centro de datos, que permitirá ampliar la capacidad del centro. También se han renovado durante este año otras infraestructuras críticas, como el centro de transformación, y se ha instalado un sistema básico de paneles solares, en línea con la vocación por la eficiencia energética del centro. Todo ello para adecuar las infraestructuras para las inversiones previstas para el próximo año.

El contexto socioeconómico actual presenta un cambio de paradigma en los modelos productivos. La eclosión de la Inteligencia Artificial como herramienta de uso general, la emergencia de la computación cuántica y la urgencia por asegurar la ciberseguridad de nuestras comunicaciones, columna vertebral de nuestra economía; coloca a SCAYLE como una herramienta clave en la estrategia regional de transformación digital.

La supercomputación se ha convertido en una herramienta competitiva fundamental. Entrenar sistemas de inteligencia artificial requiere de potencias de cálculo que no están al alcance de PYMES o investigadores. Poner a disposición del tejido productivo de Castilla y León y de sus investigadores infraestructuras de cálculo intensivo modernas es una de las misiones fundamentales de SCAYLE.

El crecimiento de la demanda de almacenamiento de datos por parte de investigadores e instituciones ha sido muy fuerte durante el año 2022. Los datos se han convertido también en una materia prima fundamental, tanto para entrenar los sistemas de inteligencia artificial anteriormente mencionados, como para su explotación directa. Este año se ha doblado la capacidad de almacenamiento de OpenCAYLE, el sistema de almacenamiento masivo de datos de Castilla y León, que aun así deberá seguir incrementándose para satisfacer la enorme demanda.

Igualmente, la Red Regional (RedCAYLE) que gestiona SCAYLE se ha consolidado como una herramienta fundamental para la cohesión y la transformación digital de Castilla y León. RedCAYLE permite el acceso a una red óptica de alta velocidad a todas las universidades, centros de investigación, tecnológicos, hospitales y a todos los colegios de la comunidad autónoma. El arranque del plan complementario de comunicaciones cuánticas permitirá en el futuro próximo proporcionar una infraestructura de prueba de estas tecnologías que serán las que permitan garantizar la seguridad de las redes.

Además del impacto en la sociedad castellanoleonesa, SCAYLE forma parte activa del ecosistema español de I+D+i a través de la Red Española de Supercomputación. Y también del europeo, con la participación en organizaciones como EOSC o en la participación en proyectos europeos en colaboración con empresas y grupos de investigación.

Por último, quiero dejar constancia en este anuario de la profesionalidad y disposición de todos los trabajadores y colaboradores del centro, que con su dedicación han permitido seguir prestando servicios de calidad a los ciudadanos de Castilla y León, de España y de la Unión Europea.



**D.ª María González Corral**  
Presidente del Patronato de la Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León.  
Consejera de Movilidad y Transformación Digital.  
Junta de Castilla y León.

# presentación

## **Dirección General**

El año 2022 ha sido un año de crecimiento para la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), tanto en los aspectos de infraestructuras, como de desarrollo de proyectos y del personal asociado a los mismos.

En lo relativo a las infraestructuras, durante el 2022 se ha puesto en marcha el segundo Centro de Procesamiento de Datos (CPD) de SCAYLE. El CPD inicial, instalado con la creación del centro en 2009, había alcanzado tasas de ocupación tan elevadas que hacían necesaria la creación de un CPD adicional. El CPD existente, dedicado en memoria de D. Carlos Redondo Gil, sigue siendo una infraestructura eficiente a pesar de los años transcurridos desde su diseño y seguirá prestando servicio. De hecho, el CPD Carlos Redondo Gil será el que albergue en exclusiva los servicios de cálculo científico, habiéndose diseñado el nuevo para los servicios de cloud privada para la administración pública, almacenamiento masivo de datos (OpenCAYLE) y los equipos de la red regional (RedCAYLE).

Igualmente, en diciembre de 2022 se ha puesto en marcha el nuevo centro de transformación eléctrica para el edificio CRAI-TIC de la universidad de León. Este segundo transformador era un punto único de fallo de la infraestructura, que se solventa manteniendo el existente como back-up del nuevo. En este mismo proyecto se ha instalado un conjunto de paneles solares en el tejado del edificio que, aunque de momento no suponen una aportación significativa, continúan mostrando el compromiso de SCAYLE con la eficiencia energética.

Durante el año también se ha aumentado la capacidad del servicio de almacenamiento de OpenCAYLE, doblando su capacidad, así como de los servicios de cálculo, especialmente incorporando máquinas con aceleradoras gráficas de última generación. Estas capacidades se mejorarán aún más cuando culmine la ejecución de los proyectos iniciados en 2022 de actualización financiados con los fondos europeos NextGeneration.

RedCAYLE se ha consolidado como un servicio fundamental para la comunidad autónoma, canalizando el tráfico hacia internet de todos los centros educativos, los centros tecnológicos y de investigación. Durante 2022, con el fin de la pandemia, se ha recuperado la reunión anual con los centros asociados, que se ha convertido en una cita imprescindible para la comunidad de los servicios TIC de Castilla y León. Se han iniciado los trámites para una renovación de la infraestructura óptica, con una inversión próxima a los 3 millones de euros, que permitirá multiplicar por 10 la capacidad de la red durante 2023.

El desarrollo de proyectos ha seguido incrementando su peso relativo en las actividades de SCAYLE. En particular los relacionados con las tecnologías cuánticas, que han continuado su consolidación. Ha comenzado la ejecución del Plan Complementario de Comunicaciones Cuánticas en Castilla y León, Q-CAYLE, un proyecto cofinanciado por el Ministerio de Ciencia e Innovación y la Comunidad Autónoma de Castilla y León que supondrá la instalación en SCAYLE de un demostrador de intercambio cuántico de claves. También han comenzado en 2022 los trabajos para la instalación de un conjunto de emuladores de computación cuántica dentro del proyecto Quantum-Spain, subvencionado por la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial a través de la Red Española de Supercomputación (RES).

El deseado final de las restricciones impuestas por la pandemia de Covid ha permitido reanudar las actividades de divulgación presencial con la reanudación de los cursos presenciales, pero sobre todo de las visitas de centros escolares al centro. Igualmente ha aumentado la presencia de SCAYLE en diversos eventos nacionales e internacionales.



**Vicente Matellán Olivera**  
Director General de SCAYLE

# composición del patronato

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

## Presidente

### D.ª María González Corral.

Consejera de Movilidad y Transformación Digital. Junta de Castilla y León.

## Vicepresidente

### D. Juan Francisco García Marín.

Rector Magnífico de la Universidad de León.

## Vocales

### D. Alfonso Arroyo González.

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

### D. Carlos Martín Tobalina.

Comisionado para la Ciencia y la Tecnología. Junta de Castilla y León.

### D. Antonio Ibáñez Pascual.

Director General de Telecomunicaciones y Administración Digital. Consejería de Movilidad y Transformación Digital. Junta de Castilla y León.

### D. Juan Manuel Gil González.

Director General de Salud Digital. Gerencia Regional de Salud. Consejería de Sanidad. Junta de Castilla y León.

### D. Carlos G. Polanco de la Puente.

Vicerrector de Investigación. Universidad de León.

### D. Ramón Ángel Fernández Díaz.

Vicerrector de Gestión de Infraestructuras y Sostenibilidad. Universidad de León.

### D. José Manuel Alija Pérez.

Director del Servicio de Informática y Comunicaciones. Universidad de León.

## Secretario

### D.ª Susana Morán Fernández.

Coordinadora de Servicios de la Dirección General de Telecomunicaciones y Administración Digital. Consejería de Movilidad y Transformación Digital. Junta de Castilla y León.

## Vicesecretario

### D. Pablo Carlos Vicente Villafáfila.

Jefe del Servicio de Medios Audiovisuales y Régimen Jurídico de la Dirección General de Telecomunicaciones y Administración Digital. Consejería de Movilidad y Transformación Digital. Junta de Castilla y León.

consejo  
asesor

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. Antonio Largo Cabrerizo.

Rector Magnífico de la Universidad de Valladolid.

## Secretario

### D.ª Susana Morán Fernández.

Coordinadora de Servicios de la Dirección General de Telecomunicaciones y Administración Digital. Consejería de Movilidad y Transformación Digital. Junta de Castilla y León.



## misión y objetivos

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.

### Valores

- **Liderazgo:** Contribuyendo de forma eficiente al desarrollo de la ciencia y a la transferencia de la tecnología, alineado con la Estrategia Regional de Investigación Científica, Desarrollo Tecnológico e Innovación de Castilla y León.
- **Compromiso social:** plasmado en la contribución al desarrollo tecnológico de la Comunidad de Castilla y León mejorando la competitividad de las empresas existentes y constituyendo una herramienta de atracción y retención de talento.
- **Colaboración:** fomento de las redes de colaboración que garanticen el uso eficiente de recursos tecnológicos compartidos y el diseño de modelos colaborativos en el desarrollo de proyectos.
- **Sostenibilidad:** Compromiso con el medio ambiente basado en modelos de gestión de las infraestructuras tecnológicas con criterios de máxima eficiencia energética.
- **Transparencia:** Explicando de forma continua y detallada los objetivos y las acciones desarrolladas.
- **Calidad:** Orientación al servicio a los usuarios, con el desarrollo de planes de mejora continua y garantía de calidad.

- **Profesionalidad** gracias a un personal competente, con rigor profesional y comprometido con el servicio, procurando la estabilidad y desarrollo profesional de los trabajadores.

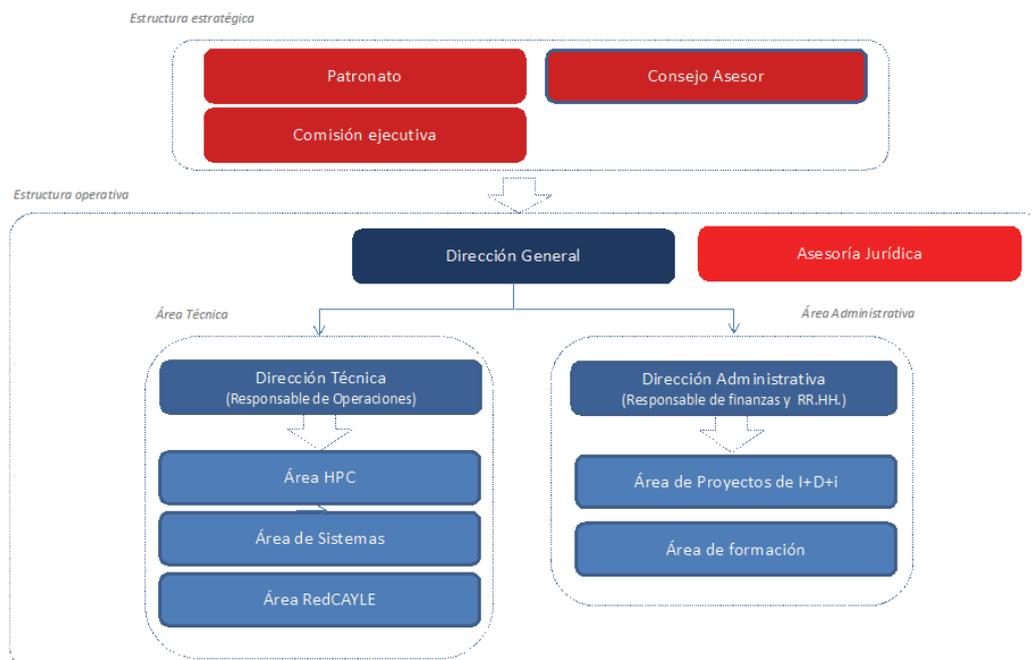
### Misión

Proporcionar servicios e infraestructuras avanzadas en el ámbito de las tecnologías de la información y las comunicaciones a los organismos públicos de investigación, las 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.

### Visión

Convertirse en la referencia en el uso de la informática de altas prestaciones (*High Performance Computing- Supercomputación*), las redes de comunicaciones avanzadas y los servicios basados en tecnologías informáticas y de telecomunicaciones en la mejora de la calidad y la eficiencia en el ecosistema de investigación regional y en los sistemas públicos de tratamiento de la información y del tejido empresarial.

### Organigrama



## Supercomputación

La vocación fundamental del Centro es la prestación de servicios de cálculo intensivo, tanto en programas que demandan proceso paralelo masivo 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 o los cada vez más numerosos procesos de Inteligencia Artificial que demandan un acceso a tarjetas GPU de última generación. 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).

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.

Hoy en día, para poder hacer frente a los complejos cálculos científicos o técnicos con los que los investigadores trabajan, se hace imprescindible el uso de equipos informáticos extremadamente potentes: los superordenadores.

Aplicaciones como las usadas en la predicción meteorológica, o las utilizadas en la modelización del comportamiento de los fluidos como pueden ser al aire o el agua en el diseño de coches o barcos, son aplicaciones tradicionalmente empleadas en supercomputación y que ya son conocidas por el usuario de a pie. Pero hay otros usos de los superordenadores aún muy desconocidos en la sociedad, un claro ejemplo de ello es el crecimiento del uso de la supercomputación en todas las investigaciones relacionadas con las ciencias de la vida, los estudios en genética o el desarrollo de nuevos fármacos, que demandan grandes potencias de cálculo, son un claro ejemplo de la necesidad del empleo de este tipo de infraestructuras tecnológicas para lograr un avance en la investigación, y que en un futuro no muy lejano se convertirá en una herramienta de trabajo habitual y necesaria.

Otro uso de la supercomputación en rápido crecimiento es la ejecución de trabajos que hacen uso de técnicas y métodos de la Inteligencia Artificial. Así términos como Machine Learning (ML) y Deep Learning (DL) (un subcampo dentro de Machine Learning) se han incorporado al lenguaje habitual entre el personal que mantiene y administra supercomputadores.

Estas nuevas técnicas también han obligado a la incorporación de hardware específico, especialmente diseñado para llevar a cabo las tareas necesarias, como son las GPUs (Graphics Processing Units). En sus últimas versiones, estas tarjetas gráficas integran la electrónica para trabajar de forma óptima con algunas de las estructuras de datos usadas en ML y DL.

## Cloud privada 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 (Datacenters-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, ofreciendo 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.

## Almacenamiento masivo de datos(OpenCAYLE)

Servicio de almacenamiento de información de cualquier volumen y política de retención, aunque su diseño ha sido pensado como almacenamiento de larga duración para volúmenes de datos grandes (PBytes). Puede ser usado indistintamente para almacenamiento de sets de datos procedentes de la investigación o como sistema de backup de información de cualquier otro tipo.

Permite la publicación directa de los objetos (protocolo S3) como recursos URI en Internet.

El servicio OpenCayle se enmarca en la estrategia europea de Ciencia Abierta, en particular con la European Science cloud (EOSC) para la promoción del acceso y la reutilización de datos científicos, en particular los generados con los fondos públicos de investigación.

Como servicio de backup, permite disponer a los centros usuarios de un almacenamiento de bajo coste y, al estar ubicado fuera de sus instalaciones, el cumplimiento de aquellas normas en las que sea requisito legal el alojar una copia de los datos en una ubicación remota.

OpenCayle supone la entrada de SCAYLE en los servicios de almacenamiento de datos de la Red Española de Supercomputación (RES).

## Red Regional de Ciencia y Tecnología (RedCAYLE)

El primer propósito de la red es la prestación de servicios de conectividad y telecomunicaciones:

- Servicios de Operación de Red.
- Gestión de las incidencias de la red, el Control de las métricas.
- Gestión de los equipos de la red regional.
- Control del inventario y versiones.

Además, RedCAYLE permite desplegar servicios avanzados de comunicación para la comunidad autónoma y proyecto piloto como los de intercambio cuántico de claves.

## Otros servicios tecnológicos

Durante el último año, SCAYLE ha puesto en marcha otros servicios en el ámbito de las TIC como prototipo o demostrador. Cabe destacar:

### Blockchain

En el ámbito de las tecnologías de cadena de bloques, se ha desarrollado y puesto en marcha un servicio basado en blockchain para las administraciones y universidades de la región.

Actualmente puede ser utilizado para el registro en diferentes cadenas de bloques (blockchains) públicas y permissionadas de evidencias en el registro de secretos industriales, invenciones y micro-credenciales. El servicio comenzó como desarrollo para un prototipo demostrador del uso de la tecnología blockchain, pero actualmente ya es un servicio completo y usable que continuará desarrollándose durante el siguiente año.

### Servidores de hora

Se ofrece servicio NTP de sincronización de hora a través de tres servidores independientes accesibles públicamente desde Internet. Está basado en receptores GPS que toman hora de los relojes atómicos de los satélites de geoposicionamiento con un error inferior a una milésima de segundo.

### Emulación cuántica

Un servicio novedoso es la puesta a disposición de todos nuestros usuarios diferentes software de emulación cuántica con la finalidad de poder llevar a cabo todas las pruebas necesarias hasta optimizar el código desarrollado y así, posteriormente, ejecutar sus cálculos en un ordenador cuántico real. Tenemos varios ya disponibles entre los que destacan Qiskit, por ser uno de los más conocidos y utilizados o PennyLane, especialmente pensado para *Quantum Machine Learning*. A mayores también disponemos de IntelQS, Qibo, Qulacs, QuEST o ProjectQ.

## CPD1.

### Clúster de computación

El superordenador Caléndula, construido como un clúster de computación paralela, está formado por unos 400 nodos; servidores de diferentes generaciones con una potencia pico de 0.8PFlops. Todos los nodos están equipados con comunicaciones ethernet (hasta 25Gbs) e infiniband (hasta HDR 200Gbps) y disponen de múltiples procesadores de arquitectura X64 funcionando con sistema operativo Linux y el gestor de trabajos Slurm. El 10% de los nodos equipan coprocesadores de tipo GPU. Como sistema de almacenamiento dedicado al soporte de cálculo, se dispone de 650TB Lustre.

### Almacenamiento de datos

Sistema formado por 15 servidores de propósito general equipados con discos de tecnología tanto rotacional como flash para disponer de un gran repositorio de datos. Actualmente tiene una capacidad cercana a los 2PB para su uso en los diferentes sistemas de SCAYLE. Disponen de tecnología de red 100Gbe y 400Gbe.

### Comunicaciones

Internamente, los equipos de SCAYLE se comunican principalmente por redes de comunicaciones de tipo ethernet, con velocidades que van desde 1gbs hasta los 400gbs.

SCAYLE se conecta a Internet por dos vías. Por un lado RedCayle provee conectividad a 10gbs para tráfico de investigación y educativo. Por otro lado, se dispone de una línea de comunicación de 100mbs para tráfico potencialmente comercial.

Las comunicaciones, de cualquier tipo, se proveen mediante switches y routers convencionales de diferentes fabricantes en una topología tradicional en estrella con algunas zonas en malladas para aumentar la tolerancia a errores.

Además, determinados usuarios y proyectos que exigen niveles de conectividad y seguridad especiales, y se conectan a SCAYLE mediante enlaces de fibra dedicados y desplegados desde sus instalaciones.

## CPD2.

El año 2022 ha sido el de la puesta en producción de la ampliación del centro de datos de SCAYLE, culminado con la construcción de una segunda sala IT y aladaña a la ya existente. El proyecto técnico ha sido desarrollado de forma que se puede hablar de un segundo centro de datos o datacenter completo.

Esta sala consiste en un espacio de 75 metros cuadrados en la planta 0 del Edificio CRAIT-TIC de la Universidad de León con las siguientes características:

- Potencia eléctrica máxima: 90kw.
- Climatización basada en 4 unidades perimetrales de doble batería (agua/gas), y FC en esquema de disponibilidad N+1.
- 22 armarios de 42U de altura dispuestos en dos filas paralelas en un esquema de pasillo frío.
- Suministros eléctrico desde UPS en dos ramas independientes (una por UPS) en cada armario + respaldo de grupo electrógeno.
- Eficiencia energética: Tecnología de Free-Cooling directo.
- Cerramiento de protección al fuego tipo RF120.
- Control de acceso biométrico y CCTV.
- Pasillo de visitantes que permite el acceso a la sala pero no entrar en contacto con los equipos de TI.
- Suelo técnico para altas cargas.

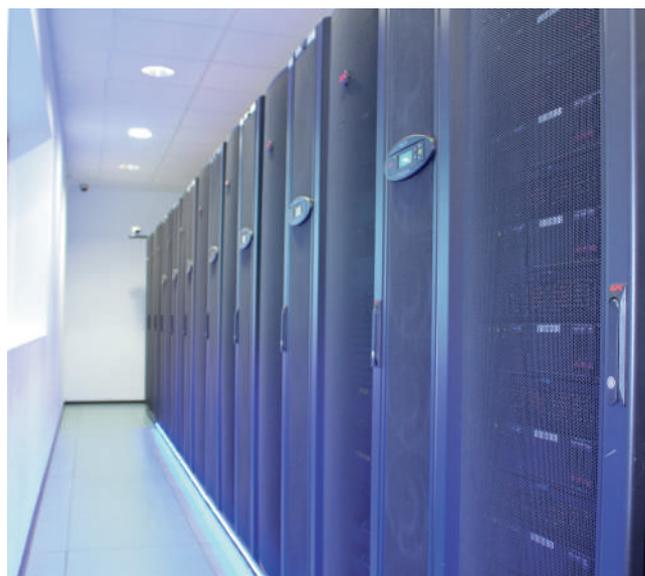
El crecimiento en el número de servicios ofrecidos en SCAYLE había llevado al datacenter existente a una ocupación casi completa y no

### RedCayle

Se dispone de múltiples equipos para el soporte del anillo regional de fibra que da soporte a la conectividad de todos los centros de investigación, Universidades y colegios de Castilla y León. Incluye equipos de conmutación óptica y de intercambio IP con Internet mediante routers de alta capacidad.

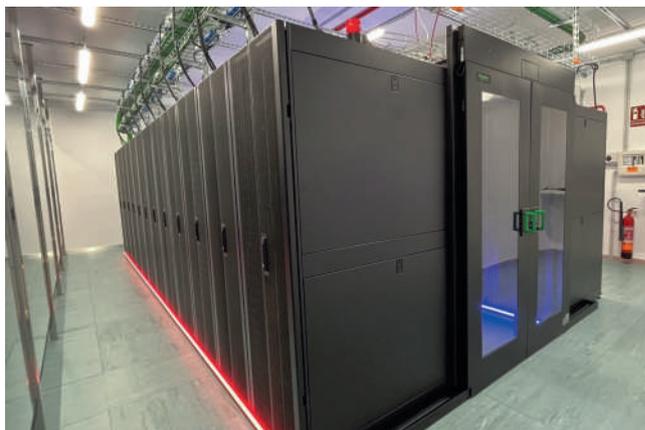
### Granja de virtualización

Conjunto de 30 servidores de propósito general funcionando como entorno de virtualización bajo VMWare VSphere. Dispone de un total de 12TB de RAM, aproximadamente 400 cores de proceso, 350TB de disco en cabina de diferentes tecnologías y comunicaciones ethernet 10Gbe.



CPD1. Racks, fila delantera. © SCAYLE.

permitiendo el crecimiento de los mismos. Además, el datacenter existente está diseñado para alojar alta densidad de equipos, en particular el supercomputador. La nueva sala ha sido construida con la doble intención de ser usada para el respaldo de la ya existente y también para el alojamiento de todos aquellos equipos IT de menor potencia eléctrica. En particular aquellos que no proporcionan directamente servicios de cálculo intensivo. Esto debe suponer una mejor aprovechamiento de la capacidad de cada sala y también una mejora de la eficiencia energética. Los servicios alojados en SCAYLE podrán seguir creciendo durante la siguiente década gracias a un nuevo datacenter.



CPD 2. Racks, fila delantera. © SCAYLE.

# Supercomputación

## Actualización tecnológica

### Cálculo científico

A lo largo del año 2022, se han pasado a producción 18 servidores cada uno con 2 procesadores Intel Xeon Platinum 8358 (Ice Lake), con 32 cores cada uno (64 cores totales por equipo) y una frecuencia de funcionamiento de 2.6 GHz y 256GB de memoria RAM. Estos equipos suman un total de 1.152 cores. También cuentan con una conexión Infiniband HDR 100 Gbps y cada uno de estos servidores tiene instalada una tarjeta GPU NVidia Tesla A100 40GB convirtiéndolos en equipos especialmente diseñados para tareas de cálculo intensivo como son el Machine Learning / Deep Learning.

### Centro de Transformación y planta fotovoltaica

Durante el último trimestre del año 2022 se acometieron obras para la mejora en la disponibilidad y eficiencia energética del suministros eléctrico, vital este para la operación de SCAYLE.

Respecto a la disponibilidad, el centro de transformación del edificio ha sido equipado con un segundo transformador de media tensión que ya funciona en un esquema de alta disponibilidad con el existente. En caso de avería de uno de ellos, el otro será capaz de proporcionar energía a la instalación. También permite realizar tareas de mantenimiento sobre un transformador sin afectar al suministro.

La eficiencia energética de SCAYLE ha sido mejorada con la instalación en la cubierta del edificio de una planta solar de 10kw de potencia pico cuya producción energética es usada en modalidad de autoconsumo.

## ICTS distribuida, "Red Española de Supercomputación"

En 2015 SCAYLE-Supercomputación Castilla y León se incorporó como miembro de la Red Española de Supercomputación RES. La RES está reconocida por el Ministerio de Economía, Industria y Competitividad como una Infraestructura Científica y Técnica Singular distribuida-ICTS distribuida. El 19 de noviembre de 2018, el Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación (CPCTI) aprobó el nuevo mapa de ICTS, en el que ya se incorporó la RES como ICTS distribuida con los nuevos nodos entre los que está SCAYLE. A su vez, la ICTS distribuida "Red Española de Supercomputación-RES" ha quedado integrada en la nueva Red de ICTS "Red de e-Ciencia".

La RES es una red que interconecta 14 instituciones y 17 superordenadores distribuidos por todo el territorio nacional y que colaboran juntos para proporcionar recursos de supercomputación en los diferentes proyectos de investigación a los que estén vinculados.

Dentro de la RES, SCAYLE, a través del superordenador Caléndula, dedica parte de su sistema de cálculo para proporcionar horas de cómputo a los investigadores que participan en las convocatorias de la RES, y soporte técnico por parte del personal de SCAYLE para optimizar al máximo los cálculos que realizan.

Desde la incorporación de SCAYLE a la RES en el año 2015, en las distintas convocatorias públicas se han asignado más de 95 millones de horas de CPU a los diferentes proyectos asignados y usado el sistema de cálculo más de 100 grupos investigadores de múltiples centros y organismos de investigación.

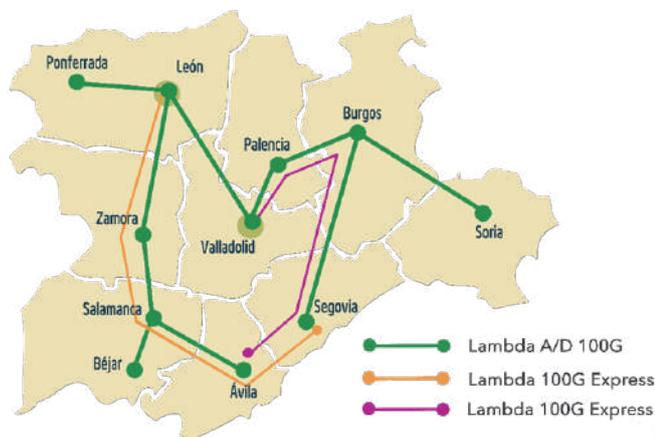
Entre los proyectos asignados a Caléndula podemos mencionar investigaciones sobre nuevas técnicas de radioterapia, cálculos sobre tectónica de placas, investigación sobre nuevos materiales o el análisis de datos provenientes de diferentes instrumentos de observación del Universo.



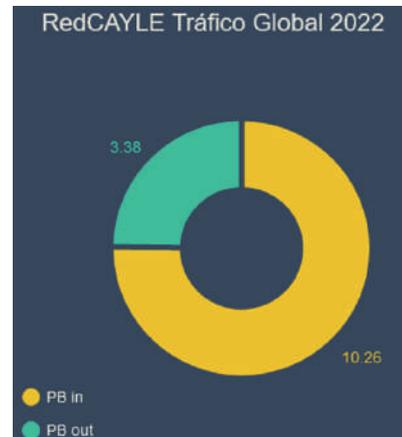
Mapa de Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares (ICTS). © RES.

RedCAYLE es la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León. RedCAYLE ofrece a todas las entidades susceptibles de conectarse a las redes académicas europeas en cualquiera de los 11 puntos de presencia distribuidos por toda la comunidad. Estos puntos de presencia se encuentran alojados en los campus de las universidades públicas de Castilla y León sitios en las 9 capitales de provincia, Bejar y Ponferrada.

RedCAYLE cuenta con una capacidad de 200G y está operativa desde finales de 2015, siendo designado SCAYLE como gestor de la misma. Las labores técnicas de la operativa diaria de la red son atendidas con personal altamente cualificado, lo que permite una gestión óptima de la misma a lo largo de los años que lleva en funcionamiento.



Capacidad Óptica de RedCAYLE 200G. © SCAYLE.



Distribución del tráfico global Entrante/Saliente de RedCAYLE. Ha alcanzado una suma de 10.26 TB de tráfico entrante y 3.38 TB de tráfico saliente. © SCAYLE.



RedCAYLE debe estar en continua mejora en cuanto al catálogo de servicios que se ofrecen a parte de la conectividad a Internet. De modo que, durante 2022 se ha mejorado la velocidad de conexión de algunas entidades y se ha diseñado la ampliación de la red para duplicar la velocidad de todas las entidades que así lo requieran en el próximo año 2023.

En noviembre se publicó el Contrato de suministro de equipamiento óptico para la red de ciencia y tecnología de Castilla y León, para la adquisición y puesta en marcha del equipamiento óptico y todos los elementos asociados (incluyendo sistemas de gestión con todos sus componentes) para la renovación de la infraestructura óptica de la actual RedCAYLE, para que soporte capacidades de al menos 100Gbps por canal y flexibilidad en la gestión del espectro óptico.

En la actualidad están conectadas a RedCAYLE las siguientes instituciones:

**Universidades públicas:**

- Universidad de León.
- Universidad de León Campus de Ponferrada.
- Universidad de Salamanca.
- Universidad de Salamanca-Campus de Zamora.
- Universidad de Salamanca-Campus de Ávila.
- Universidad de Salamanca-Campus de Béjar.
- Universidad de Valladolid.
- Universidad de Valladolid-Campus de Palencia.
- Universidad de Valladolid-Campus de Segovia.
- Universidad de Valladolid-Campus de Soria.
- Universidad de Burgos.

**Universidades privadas:**

- Universidad Isabel I.
- Universidad Católica de Ávila.
- Universidad Pontificia de Salamanca.

**Instituciones públicas:**

- Junta de Castilla y León (Colegios Públicos).

**Centros Tecnológicos:**

- INCIBE, Instituto Nacional de Ciberseguridad.
- INTECCA, Centro Tecnológico para el diseño y desarrollo de una Plataforma de Telecomunicación para los Centros y Aulas de la UNED.
- ITAcYL, Instituto Tecnológico Agrario de León
- CEDER, Centro de Desarrollo de Energías Renovables.
- SCAYLE, Centro de Supercomputación de Castilla y León.

CARTIF, Centro tecnológico horizontal, privado y sin ánimo de lucro.

CIDAUT, Fundación para la Investigación y Desarrollo en Transporte y Energía.

CETECE, Centro Tecnológico de Cereales de Castilla y León.

**Salud y Hospitales Universitarios:**

SACYL, Servicio público de salud de Castilla y León.

HUBU, Hospital Universitario de Burgos.

Hospital Universitario de León.

**Centros de Investigación:**

CENIETH, Centro Nacional de Investigación de La Evolución Humana.

CLPU, Centro de Láseres Pulsado.

**Parques Científicos:**

FPCUSAL, Fundación Parque Científico de Salamanca.



Entidades que cursan tráfico en RedCAYLE.

Beneficiarios

Colaborador

Publicaciones científicas



## Beneficiarios

## Q-CAYLE, Comunicaciones Cuánticas Seguras en Castilla y León

### Objetivo del proyecto

Impulsar la investigación, innovación y transferencia en el ámbito de las comunicaciones cuánticas en Castilla y León aprovechando las infraestructuras de SCAYLE, sus 1.300 km de fibra oscura, que opera como gestor de la red regional de I+D+i RedCAYLE, las de cálculo como parte de la ICTS Red Española de Supercomputación, y la experiencia del "Grupo Interuniversitario de Tecnologías Cuánticas" (GITC), resultado de la colaboración de dos Unidades de Investigación Consolidadas de las Universidades de Burgos, Salamanca y Valladolid: la UIC "Fotónica, Información Cuántica y Radiación y Dispersión de Ondas" y la UIC "Física Matemática".

### Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

Universidad de Burgos, [www.ubu.es](http://www.ubu.es)

Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)

**Ejecución:** 2022 a 2025.

### Financiación del proyecto

Cofinanciado por la Unión Europea, el Ministerio de Ciencia e Innovación y la Junta de Castilla y León, en el marco del Mecanismo de Recuperación y Resiliencia financiado por los fondos Next Generación de la Unión Europea y dentro del Plan Complementario de I+D+I de Comunicaciones Cuánticas.

### Funciones de SCAYLE

SCAYLE es la entidad coordinadora de Plan Complementario de Comunicación Cuántica en Castilla y León realizando las tareas propias de la coordinación.



NOS  
IMPULSA



# Quantum Spain

## Objetivo del proyecto

Tiene como objetivo impulsar y financiar una infraestructura competitiva y completa de computación cuántica en España. El proyecto dotará al presente ecosistema cuántico nacional de las herramientas necesarias para desarrollar un sólido tejido científico y tecnológico en torno a la computación cuántica y sus aplicaciones en Inteligencia Artificial.

Quantum Spain es una iniciativa impulsada por el Ministerio de Economía a través de la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial y financiada con los Fondos de Recuperación.

Las líneas de trabajo establecidas son:

- Construcción de un computador cuántico basado en la tecnología de circuitos superconductores
- Proveer acceso al computador cuántico y a High Performance Computing para tecnologías cuánticas
- Desarrollar e investigar nuevos algoritmos cuánticos y sus aplicaciones en IA
- Programas de formación en computación cuántica transversal.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** BSC-CNS, Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación, [www.bsc.es](http://www.bsc.es)

CESGA, Centro de Supercomputación de Galicia, [www.cesga.es](http://www.cesga.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

## Financiación del proyecto

Ministerio de Economía y Transformación Digital del Gobierno de España a través de la convocatoria del proyecto



QUANTUM ENIA - Proyecto Quantum Spain, y de la Unión Europea a través del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia - NextGenerationEU en el marco de la Agenda España Digital 2026.

**Ejecución:** 2022 a 2025.

## Funciones de SCAYLE

Se va a simular el comportamiento de un ordenador cuántico mediante el despliegue de un software de emulación beneficiándose de los recursos hardware clásicos de computación de altas prestaciones (HPC) con un papel clave para los usuarios.

# VRSciT Virtual Reality Science Tour

## Objetivo del proyecto

Este proyecto permitirá a los grupos destinatarios, no sólo adquirir y consolidar competencias a nivel de educación de adultos, sino también mejorar sus competencias en materia de ciudadanía europea, interculturalidad, empleo y desarrollo comunitario, haciendo hincapié en la promoción del aprendizaje, la alfabetización digital, el debate y el intercambio de conocimientos científicos y tecnológicos.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Centro Ciência Viva de Bragança (CCVB), [www.braganca.cienciaviva.pt](http://www.braganca.cienciaviva.pt)

Pixel (Italia), [www.pixel-online.net](http://www.pixel-online.net)

University of Teramo (Italia), [www.unite.it](http://www.unite.it)

VšĮ "eMundus" (Lituania), [www.emundus.lt](http://www.emundus.lt)

Museum Lithuanian Education History (Lituania), [www.lsim.limis.lt/en](http://www.lsim.limis.lt/en)

Polytechnic Institute of Bragança (Portugal), [www.portal3.ipb.pt](http://www.portal3.ipb.pt)

Universidad de León (España), [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 al 2023

## Financiación del proyecto

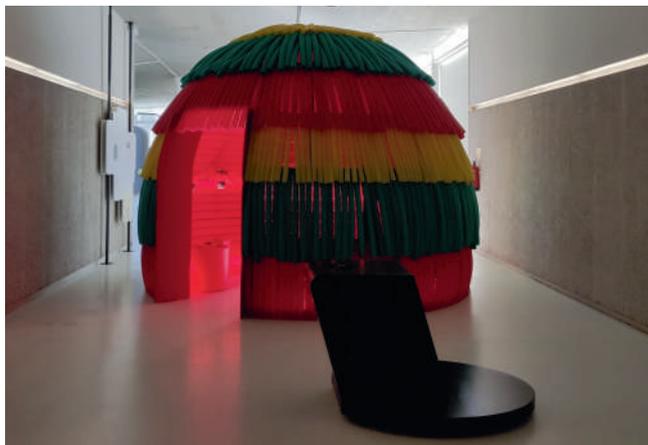
Erasmus+ Programme.



Referencia 2020-1-PT01-KA204-078597

## Funciones de SCAYLE

Se incluyen visitas virtuales a museos, a zonas de herencia cultural o de tecnología con alto contenido vinculado a la educación de adultos. En este sentido se incluye la visita virtual a SCAYLE apoyada por videos explicativos en 360 grados, objetos 3D de las partes más destacadas de la infraestructura e información detalla de sus características.



Instalación del Spot de realidad virtual instalado en Centro Ciência Viva de Bragança (Portugal).

# EuroCC\_Spain\_RES, Centro Nacional de Competencia

## Objetivo del proyecto

Con financiación de la Empresa Común Europea de Computación de Alto Rendimiento (EuroHPC) se ha creado un Euro Competence Center en HPC, que es una red europea de 31 centros nacionales de competencia en supercomputación. El objetivo de los EuroCC nacionales (NCC) es reducir las brechas de capacidades existentes en HPC al tiempo que se promueve la cooperación y la implementación de las mejores prácticas en toda Europa y proporcionar una amplia cartera de servicios de supercomputación adaptada a las necesidades nacionales respectivas de la industria (especialmente a las PYME), el mundo académico y las administraciones públicas. Desarrollando todas las actividades necesarias a nivel nacional en España el NCC será EuroCC\_Spain\_RES, que será coordinado por el Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS).

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** BSC-CNB, Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación, [www.bsc.es](http://www.bsc.es)

IAC, Instituto de Astrofísica de Canarias, [www.iac.es](http://www.iac.es)

UNICAN, Universidad de Cantabria, [www.unican.es](http://www.unican.es)

BIFI, Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos, [www.bifi.es](http://www.bifi.es)

CESGA, Centro de Supercomputación de Galicia, [www.cesga.es](http://www.cesga.es)

CSUC, Consorcio de Servicios Universitarios de Cataluña, [www.csuc.cat](http://www.csuc.cat)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

CENITS, CémitS - COMPUTAEX, [www.cenits.es](http://www.cenits.es)

**Ejecución:** 2020 a 2022.

## Financiación del proyecto

Horizon 2020 research and innovation programme.

## Funciones de SCAYLE

El objetivo de SCAYLE en el EuroCC\_Spain\_RES es garantizar un diálogo continuo con las partes interesadas clave (Pymes, industria, academia, comunidad de I + D y responsables políticos) con el fin de fomentar el conocimiento relacionado con HPC / Big data / AI y facilitar la sostenibilidad del proyecto, contribuyendo con la industria y las Pymes para el desarrollo de futuras investigaciones y políticas. Además, esta tarea generará una implementación gradual de un plan de difusión y comunicación. También incluirá presencia en las redes sociales en las principales plataformas sociales (LinkedIn, Twitter).



# Open IACS, Open LOD platform based on HPC capabilities for Integrated Administration of Common Agriculture Policy

## Objetivo del proyecto

El objetivo general de la acción es fomentar el uso y la reutilización de los datos en el contexto de la Política Agrícola Común (PAC) europea, y mejorar su accesibilidad y facilidad de uso por parte de los agricultores, los responsables políticos y terceros como las PYME.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad Carlos III de Madrid, España, [www.uc3m.es](http://www.uc3m.es)

TRAGSA, Empresa de transformación Agraria S.A., España, [www.tragsa.es](http://www.tragsa.es)

CREA Consiglio per la ricerca in agricoltura e l'analisi dell'economia agraria, Italia, [www.crea.gov.it](http://www.crea.gov.it)

ISPRA Istituto Superiore per la Protezione e la Ricerca Ambientale, Italia, [www.isprambiente.gov.it](http://www.isprambiente.gov.it)

OPEKEPE Payment and control agency for guidance and guarantee community aid, Grecia, <https://opekepe.gr>

AGEA - AEGNIZIA per le Erogazioni in Agricoltura, Italia, [www.agea.gov.it](http://www.agea.gov.it)

ENEA Agenzia Nazionale per le Nuove Tecnologie, l'Energia e lo Sviluppo Economico Sostenibile, Italia, [www.enea.it](http://www.enea.it)

Instytut Chemii Bioorganicznej Polskiej Akademii Nauk, Polonia, [www.ibch.poznan.pl](http://www.ibch.poznan.pl)

National Paying Agency under the Ministry of Agriculture, Lituania, [www.nma.lt](http://www.nma.lt)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2019 a 2022.

## Financiación del proyecto

Connecting Europe Facility (CEF): TELECOM. INEA.

## Funciones de SCAYLE

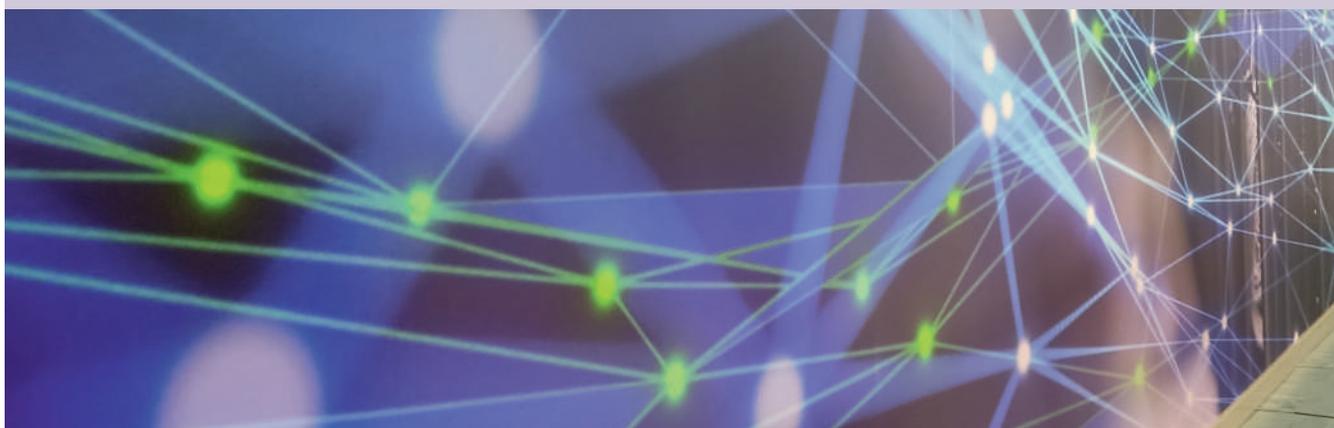
El consorcio está formado 3 centros de computación de alto rendimiento, que son: SCAYLE (España), ENEA (Italia) y PSNC (Polonia), 4 organismos administrativos y agencias de pago de la PAC y entidades de innovación agrícola AGEA (Italia), OPEKEPE (Grecia), TRAGSA (España) y NPA (Lituania) y 3 centros de investigación UC3M (España), CREA (Italia) e ISPRA (Italia).

Al igual que el resto de centros HPC presentes en consorcio, la tarea a desarrollar por parte de SCAYLE será: Implementar la infraestructura agroambiental común para la gestión de las políticas del SIGC mediante medios para aumentar las capacidades de los HPC. Este objetivo específico se divide en los siguientes.





## Colaborador



# Photo Data Tour Analytics, Plataforma pionera en el mercado de Smartdata que permite descifrar el comportamiento en redes sociales de los viajeros y ciudadanos en el destino

### Objetivo del proyecto

La plataforma Photo Data Tour Analytics permite transformar millones de datos generados a partir del contenido visual (imágenes) y las experiencias compartidas (comentarios) que muestran el comportamiento turístico de los viajeros en redes sociales, mediante la implementación de algoritmos de Inteligencia Artificial, en información útil y valiosa. Se trata de una iniciativa pionera, un cuadro de mando dinámico, de fácil uso e interpretación por parte de cualquier gestor, que sitúa al viajero en el foco, convirtiendo los datos en conocimiento turístico.

Esta proyección de su visita permite desvelar rincones de interés y actividades que inspiren a gestores y empresas a implementar y adaptar nuevos servicios turísticos.

Gracias a esta plataforma web especializada en turismo, diferentes stakeholders pueden modernizar su toma de decisiones adecuándolas a las necesidades de cada gestor turístico, mediante el análisis de datos acumulados desde hace más de diez años. Le permite generar informes a medida sobre el perfil de los turistas desde una nueva perspectiva: su propia visión del destino, aquellos lugares que le llaman tanto la atención como para destacarlos a través de sus fotografías, pudiendo observar concretamente qué, cuándo, dónde y de qué manera lo viven y lo que opinan al respecto, es decir, viendo el destino con sus propios ojos y sus propias palabras.

Además, Photo Data Tour Analytics permite también al visitante personalizar su propio viaje a través de las experiencias compartidas tanto por otros turistas, como por la particular visión de los propios ciudadanos, pudiendo disfrutar de un viaje único adaptado a cada perfil de viajero.

### Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Grupo de investigación MKTING Research, Área de Comercialización e Investigación de Mercados, Departamento de Dirección y Economía de la Empresa de la Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2022 a 2024.

### Financiación del proyecto

POC, Financiado a través de la Fundación General de la Universidad de León y de la Empresa (FGULEM).

### Funciones de SCAYLE

SCAYLE ha permitido procesar y analizar la información a través de técnicas de *machine learning* y *deep learning*.



# SELF-AIR, Supporting Extensive Livestock Farming with the use of Autonomous Intelligent Robots

## Objetivo del proyecto

*Diseñar y desarrollar una plataforma basada en el uso de robots autónomos para realizar labores de pastoreo que interactúen satisfactoriamente con el rebaño.*

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Grupo de Robótica de la Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Universidad Rey Juan Carlos, [www.urjc.es](http://www.urjc.es)

University of Eötvös Lorand (Hungria), [www.elte.hu](http://www.elte.hu)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2022 a 2024.

## Financiación del proyecto

Convocatoria 2021. Proyectos Estratégicos Orientados a la Transición Ecológica y a la Transición Digital. Ministerio de Ciencia e innovación.

## Funciones de SCAYLE

Utilizan SCAYLE para alojar los *datasets* generados y entrenamiento de modelos de *deep learning*.



Proyecto TED2021-132356B-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por la Unión Europea "NextGenerationEU"/PRTR



Uso de robots cuadrúpedos en ganadería extensiva para realizar labores de pastoreo.

# Caracterización de firmas epigenéticas en cáncer y desarrollo

## Objetivo del proyecto

*Describir modificaciones en los patrones de la cromatina durante la hematopoyesis y la leucemogénesis.*

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Centro de Investigación en Nanomateriales y Nanotecnología (CINN-CSIC), <https://cinn.es/>

Instituto Universitario de Oncología del Principado de Asturias (IUOPA), [www.unioviedo.es/IUOPA/](http://www.unioviedo.es/IUOPA/)

Instituto de Investigación Sanitaria del Principado de Asturias (ISPA-FINBA), [www.ispasturias.es/](http://www.ispasturias.es/)

Centro de Investigación Biomédica en Red de Enfermedades Raras (CIBERER-ISCI), [www.ciberer.es](http://www.ciberer.es)

Asociación Española Contra el Cáncer (AECC), [www.contraelcancer.es](http://www.contraelcancer.es)

Universidad de Oviedo, [www.uniovi.es](http://www.uniovi.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 a 2024.

## Financiación del proyecto

Proyectos de investigación en salud 2021-Instituto de Salud Carlos III

## Funciones de SCAYLE

Soporte computacional para el procesamiento de datos masivos de secuenciación de nueva generación, mediante la aplicación de novedosos pipelines bioinformáticos para la realización de análisis multi-ómicos.

Referencia PI18/01517 y PI21/01067

# DETECTTHIA, Automatización en la DETECCIÓN Temprana y monitorización de Tumores cutáneos no-melanoma mediante imagen Hiperespectral e Inteligencia Artificial

## Objetivo del proyecto

El objetivo del proyecto es el desarrollo de una herramienta que, a partir de una imagen hiperespectral de la zona afectada, realice la detección de la existencia de tumor cutáneo no melanoma, permitiendo la identificación de su tipología y la evolución del mismo.

Para avanzar en este objetivo general se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Diseñar una plataforma robotizada que permita el acoplamiento de un sensor hiperespectral y su calibración.
- Identificar patrones espectrales asociados a los distintos tipos de cáncer cutáneo no melanoma (CCNM) y utilización de los mismos para el diseño de una base de datos prospectiva de referencia en CCNM.
- Desarrollar diferentes algoritmos basados en la integración de imagen hiperespectral e inteligencia artificial que ayuden al diagnóstico precoz de CCNM, así como a mejorar el pronóstico de su evolución.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)  
 Instituto de Investigación Biomédica de Salamanca, <https://ibsal.es>  
 GMV Innovating Solutions SL. <https://www.gmv.com>  
 SCAYLE, Supercomputación Castilla y León., [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 a 2024.

## Financiación del proyecto

Programa de apoyo a proyectos de investigación cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. Junta de Castilla y León.

## Funciones de SCAYLE

El presente proyecto requiere del tratamiento de un gran número de imágenes hiperespectrales, lo que supone un alto volumen de datos. Además, se requiere el desarrollo y uso de diferentes algoritmos de machine learning y deep learning, cuyo coste computacional es sumamente alto. El uso de Caléndula permitirá reducir de forma drástica el tiempo de procesamiento de los datos, así como llevar a cabo procesos que serían difícilmente abarcables con otros medios.



# Fases ergódicas y no-ergódicas en sistemas cuánticos de muchos cuerpos

## Objetivo del proyecto

El proyecto persigue el estudio de fases ergódicas y no-ergódicas en sistemas cuánticos de muchos cuerpos, a través del análisis de propiedades espectrales y estructurales de los estados del sistema, y mediante simulaciones dinámicas. Los tres objetivos fundamentales son los siguientes.

-Caracterización de caos cuántico en sistemas de bosones con interacción: Diagrama de fases del sistema y estudio de observables que puedan medirse experimentalmente.

-Resolver el papel de la (in)distinguibilidad de los bosones en la aparición de la fase ergódica: Efectos cuánticos de interferencia de muchas partículas.

-Análisis de la fase ergódica en modelos efectivos de grafos aleatorios, que simulan la estructura de un espacio de Fock de muchas partículas.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Grupo de Sistemas Cuánticos, Departamento de Física Fundamental, Universidad de Salamanca. <https://diarium.usal.es/argon/>

Quantum Optics and Statistics, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Germany. <https://quantum.uni-freiburg.de/>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León., [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 a 2024.

## Financiación del proyecto

Programa Estatal de I+D+i Orientado a los Retos de la Sociedad. Modalidad de proyectos de «Generación de Conocimiento» y «Retos Investigación», de la convocatoria 2020 de Proyectos de I+D+i.

Ministerio de Ciencia e Innovación. Agencia Estatal de Investigación. MCIN/AEI (10.13039/501100011033).

## Funciones de SCAYLE

El estudio de sistemas cuánticos de muchos cuerpos requiere de simulaciones numéricas muy exigentes, dado que el espacio de configuración de los sistemas considerados crece exponencialmente con el número de partículas. Las instalaciones de computación del alto rendimiento de SCAYLE, que soportan el uso de software de última generación y un cálculo masivo en paralelo, nos permiten calcular numéricamente ---de manera exacta--- el espectro y los estados cuánticos estacionarios en espacios de Hilbert con dimensiones hasta  $2.6 \times 10^6$ , y de simular la dinámica a tiempos largos de estados fuera del equilibrio en espacios de Hilbert de dimensión  $5 \times 10^8$ .



Referencia PID2020-114830GB-I00

# MMQP, New Developments in Mathematical Modeling of Quantum Phenomena

## Objetivo del proyecto

El objetivo principal del proyecto es obtener, desde distintas perspectivas, un rango amplio de resultados matemáticos, centrándose en la comprensión de ecuaciones diferenciales relevantes, tanto lineales como no lineales. Estas ecuaciones dependientes del tiempo son ampliamente conocidas y aparecen en la Mecánica Cuántica relativista y no relativista (Schrödinger, Dirac, Weyl), así como en Teorías Cuánticas de Campos, donde la presencia de soluciones especiales (defectos topológicos) permite considerar una gran variedad de aplicaciones tanto teóricas como experimentales. Las técnicas matemáticas empleadas para estos propósitos pueden clasificarse en tres grupos específicos: supersimetría, sistemas integrables y supercomputación.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** GIR de Física Matemática de la Universidades de Salamanca y Valladolid, que a su vez forman parte de la UIC de Física Matemática de Castilla y León (UIC011 Math-Phys-CyL) desde 2015.

Instituto Universitario de Física Fundamental y Matemáticas (IUFFyM) de la Universidad de Salamanca, <http://campus.usal.es/~mpg/>

UIC Física Matemática de Castilla y León, <http://mathphys.uva.es/mathphys-cyl/>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 a 2024.



Referencia PID2020-113406GB-I00 MTM

## Financiación del proyecto

Convocatoria de «Proyectos de I+D+i» de los Programas Estatales de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico del Sistema de I+D+i y de I+D+i Orientada a los Retos de la Sociedad, en el marco del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2020.

## Funciones de SCAYLE

La física estadística es una disciplina que analiza la dinámica de los sistemas complejos, caracterizados por un elevado número de grados de libertad. Debido a esto, los desarrollos analíticos son costosos, y es habitual abordar el estudio de este tipo de sistemas, que aparecen naturalmente en el seno de la física de la materia condensada, a través de simulaciones numéricas. Debido al gran tamaño de los sistemas y a la necesidad de repetir cada proceso numerosas veces para poder extraer conclusiones estadísticas, no es factible realizar dichas simulaciones en ordenadores personales: se requiere el uso de un superordenador para poder llevarlas a cabo en tiempos razonables.

# Análisis de la experiencia del turista en el destino turístico a través de imágenes de Redes Sociales y técnicas Big Data

## Objetivo del proyecto

La presente investigación aborda la generación de conocimiento mediante el desarrollo de modelos de comprensión de la experiencia turística en el Destino Turístico (DT) y con los Puntos de Interés (PIs), resolviendo dos grandes preguntas de investigación:

- ¿Hasta qué punto las fotos explican la experiencia del turista?
- ¿Las fotos explican mejor esta experiencia que otros métodos?

En este sentido, esta tesis doctoral se plantea como reto analizar el grado de atracción de destinos y recursos turísticos específicos a través del análisis de la experiencia turística formada a partir de elementos como las percepciones, motivaciones y preferencias de los turistas que comparten en las plataformas sociales, como fotografías, metadatos y textos, y apoyándose en las técnicas Big Data como el Deep Learning y las redes neuronales.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)

**Ejecución:** 2021 a 2023.

## Financiación del proyecto

Tesis doctoral.

## Funciones de SCAYLE

A través de SCAYLE podemos emplear GPUs para procesar las redes neuronales que analizarán las imágenes.

# Aplicación de la **Inteligencia Artificial** para la determinación de la incertidumbre bursátil a partir de **titulares de noticias**

## Objetivo del proyecto

Explorar titulares de noticias transformándolos en vectores aplicando técnicas de incrustación de palabras basadas en medidas estadísticas desarrolladas por nuestro equipo. Utilizar los vectores resultantes para determinar la incertidumbre encapsulada relativa al mercado de valores mediante la aplicación de modelos de Redes Neuronales, desarrollados por el equipo sobre la idea de falta de pertenencia a determinados clústeres.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Dpto. de Fundamentos del Análisis Económico, Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 a 2023.

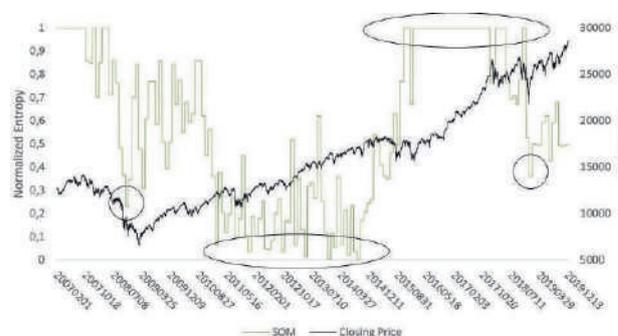
## Funciones de SCAYLE

Ejecutar scripts de inteligencia artificial para hacer PNL (procesamiento del lenguaje natural) y clasificación con modelos de predicción y agrupamiento.

SCAYLE es un activo fuerte debido a su disponibilidad y capacidad para manejar grandes cantidades de datos y ejecutarlos en paralelo evitando largos tiempos de espera, lo que reduce los tiempos en la investigación y permite avanzar rápidamente en todas sus líneas.

## Financiación del proyecto

Programa de apoyo a proyectos de investigación, cofinanciadas por FEDER 2017, de la Consejería de Educación de la Junta de Castilla y León.



Comparación entre el índice bursátil Dow Jones Index y nuestra red neuronal Self-Organizing Map aplicada a los vectores de titulares de noticias. Es posible identificar la anticipación de turbulencias en el mercado de valores y cómo nuestro modelo reflejó los eventos globales que impactaron los titulares de noticias con su contraparte volatilidad en el precio de cierre o cambio de fase. Con nuestro proyecto, los actores del mercado tienen una nueva herramienta para extraer conocimiento de datos no estructurados como texto.



# Efecto de la **melatonina** y su combinación con **Akkermansia muciniphila** sobre la composición y funcionalidad de la **microbiota intestinal** en el tratamiento de la **fibrosis hepática**

## Objetivo del proyecto

Evaluación del posible efecto sinérgico del tratamiento combinado con melatonina y *Akkermansia muciniphila* frente al desarrollo de fibrosis hepática en modelos *in vivo* e *in vitro*.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Unidad de Investigación Consolidada UIC064 - Fisiología Aplicada a la Biomedicina de Castilla y León dirigida por el Dr. Javier González Gallego.

Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Instituto Universitario de Biomedicina (IBIOMED), <http://institutobiomedicina.unileon.es/>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2021 a 2023.

## Financiación del proyecto

Programa de apoyo a proyectos de investigación cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional de la Junta de Castilla y León.

## Funciones de SCAYLE

El análisis de composición de la microbiota intestinal requiere del uso de herramientas bioinformáticas (entre ellas el software QIIME2, disponible para todos los usuarios de caléndula) que demandan una importante cantidad de recursos y en los que se generan archivos de considerable tamaño para los que se precisa de equipos de supercomputación.

# Hidrógeno 21K

## Objetivo del proyecto

El Proyecto Hidrógeno 21K, forma parte de la experiencia "RTULE ENERGIA GRAVITATORIA 21K", consiste en el diseño y construcción de un coche eléctrico propulsado por una pila de hidrógeno, realizado por los estudiantes participantes en el proyecto. Este proyecto se desarrolla en tres fases: a) diseño: por medio de cursos de extensión universitaria se formará a los participantes en el uso de software de diseño y simulación de coches de competición, utilizando el mismo software que usan empresas como: Boeing, Renault, Tesla, NASA, proporcionado por nuestro patrocinador ALTAIR. b) Fabricación: por medio de cursos de extensión universitaria y de forma activa, en nuestro laboratorio de fabricación, ubicado en el Parque Científico de León, se les enseñará y fabricarán con las tecnologías más avanzadas que disponemos: Fabricación de composites, aditiva, soldadura, metrología, uniones fijas y amovibles, pintura y acabado. C) presentación del resultado del Proyecto Hidrógeno 21K en un evento que se celebrará en la ciudad de León, en el cual se expondrán públicamente los resultados de esta experiencia.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** RACING TEAM - Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Conserjería de Educación. Junta de Castilla y León, [www.educa.jcyl.es](http://www.educa.jcyl.es). Diputación de León, [www.dipuleon.es](http://www.dipuleon.es). Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es). Cámara de Comercio de León, <https://camaraleon.com>. Escuela de Ingenierías Industrial, Informática y Aeroespacial. Universidad de León, <https://ingenierias.unileon.es/>. Dpto de Química y Física Aplicadas. Universidad de León, <https://departamentos.unileon.es/quimica-y-fisica-aplicadas/>. Laboratorio de Acústica Aplicada. Universidad de León, <http://acustica.unileon.es/>. IES Giner de los Ríos, <http://ginerdelosrios.org>. LM Wind Power, [www.lmwindpower.com](http://www.lmwindpower.com). Altair, [www.altair.com.es](http://www.altair.com.es). SKF, [www.skf.com/es](http://www.skf.com/es). Michelin, [www.michelin.es](http://www.michelin.es). Spies Hecker, [www.spieshecker.com](http://www.spieshecker.com). León pintur, <http://www.leonpintur.com>. 3M, [www.3m.com.es](http://www.3m.com.es). FlybySchool, <https://flybyschool.com>. GAMA, <http://gama.es>. MVP. Magnun Venus Products, <http://mvp-espana.com>. Delicatessen, <https://cartablancaleon.com>. ROR Operador logístico, <https://rorlogistico.com>. Aljocar, [www.aljocar.com](http://www.aljocar.com). La Flor del Orbigo, <http://www.laflordelorbigo.com>. Timoteo Briet,

[twitter.com/timoteobriet?lang=en](https://twitter.com/timoteobriet?lang=en). JM Sport KAWASAKI, <https://es-es.facebook.com/jmsportleon>. Leomovil, [www.leomovil.net](http://www.leomovil.net). Abril2001, [www.abril2001.es](http://www.abril2001.es). J Calo Carburos Metálicos, [www.carburos.com](http://www.carburos.com). Intdea, <https://intdea.com>. León noticias, [www.leonoticias.com](http://www.leonoticias.com). Diario de León, [www.diariodeleon.es](http://www.diariodeleon.es). Asepeyo, [www.asepeyo.es](http://www.asepeyo.es). Aspy, [www.aspyprevencion.com](http://www.aspyprevencion.com)

**Ejecución:** 2021 a 2023.

## Financiación del proyecto

Financiación por patrocinio.

## Funciones de SCAYLE

Análisis y simulación del sistema de refrigeración de la pila de hidrógeno y el motor eléctrico.



Código AE-482

# FARADAY V1

## Objetivo del proyecto

El Proyecto FARADAY, forma parte de la experiencia "RTULE ENERGIA GRAVITATORIA 21K", cuyo contenido se desarrolla a través de: los experimentos de Galileo Galilei y Henri Cavendish para la determinación de la energía gravitatoria y su degradación, que se realizarán en cada uno de los centros educativos participantes con explicaciones por parte de los profesores de la Universidad de León, participantes, de la ciencia de cada uno de ellos. Los alumnos serán formados en el uso del software de diseño de última generación Altair Inspire Studio y Altair Windtunnel para que: realicen diseños de coches propulsados por energía gravitatoria y simulación en túnel de viento por elementos finitos, y puedan darse cuenta de que son capaces utilizar la tecnología de diseño más avanzada. Para posteriormente realizar la fabricación de coches RTULE-Inercia2 y su montaje (por parte de los alumnos participantes), y finalizando con una competición denominada "Gravity Race" entre los centros educativos en la población de Puebla de Sanabria donde sentirán en primera persona el experimento del plano inclinado al realizar el descenso con el coche, de cada uno de los centros educativos.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** RACING TEAM - Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Conserjería de Educación. Junta de Castilla y León, [www.educa.jcyl.es](http://www.educa.jcyl.es). Diputación de León, [www.dipuleon.es](http://www.dipuleon.es). Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es). Cámara de Comercio de León, <https://camaraleon.com>. Escuela de Ingenierías Industrial, Informática y Aeroespacial. Universidad de León, <https://ingenierias.unileon.es/>. Dpto de Química y Física Aplicadas. Universidad de León, <https://departamentos.unileon.es/quimica-y-fisica-aplicadas/>. Laboratorio de Acústica Aplicada. Universidad de León, <http://acustica.unileon.es/>. IES Giner de los Ríos, <http://ginerdelosrios.org>. LM Wind Power, [www.lmwindpower.com](http://www.lmwindpower.com). Altair, [www.altair.com.es](http://www.altair.com.es). SKF, [www.skf.com/es](http://www.skf.com/es). Michelin, [www.michelin.es](http://www.michelin.es). Spies Hecker, [www.spieshecker.com](http://www.spieshecker.com). León pintur, <http://www.leonpintur.com>. 3M, [www.3m.com.es](http://www.3m.com.es). FlybySchool, <https://flybyschool.com>. GAMA, <http://gama.es>. MVP. Magnun Venus Products, <http://mvp-espana.com>. Delicatessen, <https://cartablancaleon.com>. ROR Operador logístico, <https://rorlogistico.com>. Aljocar, [www.aljocar.com](http://www.aljocar.com). La Flor del Orbigo, <http://www.laflordelorbigo.com>. Timoteo Briet,

[twitter.com/timoteobriet?lang=en](https://twitter.com/timoteobriet?lang=en). JM Sport KAWASAKI, <https://es-es.facebook.com/jmsportleon>. Leomovil, [www.leomovil.net](http://www.leomovil.net). Abril2001, [www.abril2001.es](http://www.abril2001.es). J Calo Carburos Metálicos, [www.carburos.com](http://www.carburos.com). Intdea, <https://intdea.com>. León noticias, [www.leonoticias.com](http://www.leonoticias.com). Diario de León, [www.diariodeleon.es](http://www.diariodeleon.es). Asepeyo, [www.asepeyo.es](http://www.asepeyo.es). Aspy, [www.aspyprevencion.com](http://www.aspyprevencion.com)

**Ejecución:** 2021 a 2022.

## Funciones de SCAYLE

Simulación CFD, de los mejores diseños aerodinámicos realizados por los participantes en este proyecto.

## Financiación del proyecto

Financiación por patrocinio.



Código AE-482

# Galileo, Energía Gravitatoria

## Objetivo del proyecto

El Proyecto Galileo Energía Gravitatoria, forma parte de la experiencia "RTULE ENERGIA GRAVITATORIA 21K", con la colaboración de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología - Ministerio de Ciencia e Innovación, cuyo contenido se desarrolla a través de: los experimentos de Galileo Galilei y Henri Cavendish para la determinación de la energía gravitatoria y su degradación, que se realizarán en cada uno de los centros educativos participantes con explicaciones por parte de los profesores de la Universidad de León, participantes, de la ciencia de cada uno de ellos. Los alumnos serán formados en el uso del software de diseño de última generación Altair Inspire Studio y Altair Windtunnel para que realicen diseños de coches propulsados por energía gravitatoria y simulación en túnel de viento por elementos finitos, y puedan darse cuenta de que son capaces utilizar la tecnología de diseño más avanzada. Para posteriormente realizar la fabricación de coches RTULE-Inercia2 y su montaje (por parte de los alumnos participantes), y finalizando con una competición denominada "Gravity Race" entre los centros educativos en la población de Puebla de Sanabria donde sentirán en primera persona el experimento del plano inclinado al realizar el descenso con el coche, de cada uno de los centros educativos.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** RACING TEAM - Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Conserjería de Educación. Junta de Castilla y León, [www.educa.jcyl.es](http://www.educa.jcyl.es). Diputación de León, [www.dipuleon.es](http://www.dipuleon.es). Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es). Cámara de Comercio de León, [camaraleon.com](http://camaraleon.com). Escuela de Ingenierías Industrial, Informática y Aeroespacial. Universidad de León, <https://ingenierias.unileon.es/>. Dpto de Química y Física Aplicadas. Universidad de León, <https://departamentos.unileon.es/quimica-y-fisica-aplicadas/>. Laboratorio de Acústica Aplicada. Universidad de León, <http://acustica.unileon.es/>. IES Giner de los Ríos, [ginerdelosrios.org](http://ginerdelosrios.org). LM Wind Power, [www.lmwindpower.com](http://www.lmwindpower.com). Altair, [www.altair.com.es](http://www.altair.com.es). SKF, [www.skf.com/es](http://www.skf.com/es). Michelin, [www.michelin.es](http://www.michelin.es). Spies Hecker, [www.spieshecker.com](http://www.spieshecker.com). León pintur, [www.leonpintur.com](http://www.leonpintur.com). 3M, [www.3m.com.es](http://www.3m.com.es). FlybySchool, <https://flybyschool.com>. GAMA, <http://gama.es>. MVP. Magnun Venus Products, <http://mvp-espana.com>. Delicatessen, <https://cartablancaleon.com>. ROR Operador logístico,

<https://rorlogistico.com>. Aljocar, [www.aljocar.com](http://www.aljocar.com). La Flor del Orbigo, <http://www.laflordelorbigo.com>. Timoteo Briet, [twitter.com/timoteobriet?lang=en](https://twitter.com/timoteobriet?lang=en). JM Sport KAWASAKI, <https://es-es.facebook.com/jmsportleon>. Leomovil, [www.leomovil.net](http://www.leomovil.net). Abril2001, [www.abril2001.es](http://www.abril2001.es). J Calo Carburos Metálicos, [www.carburos.com](http://www.carburos.com). Intdea, <https://intdea.com>. León noticias, [www.leonoticias.com](http://www.leonoticias.com). Diario de León, [www.diariodeleon.es](http://www.diariodeleon.es). Asepeyo, [www.asepeyo.es](http://www.asepeyo.es). Aspy, [www.aspyprevencion.com](http://www.aspyprevencion.com)

**Ejecución:** 2021 a 2022.

## Financiación del proyecto



FECYT, con la colaboración de la Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología - Ministerio de Ciencia e Innovación.

## Funciones de SCAYLE

Simulación CFD, de los mejores diseños aerodinámicos realizados por los participantes en este proyecto.

# AVAQUS, Annealing-based Variational Quantum Processors

## Objetivo del proyecto

Desarrollar un prototipo de ordenador cuántico adiabático utilizando circuitos superconductores.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Instituto de Física de Altas Energías, [www.ifae.es](http://www.ifae.es)

Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, [www.csic.es](http://www.csic.es)

Centre National de la Recherche Scientifique, [www.cnrs.fr](http://www.cnrs.fr)

Karlsruher Institut fuer Technologie, [www.kit.edu](http://www.kit.edu)

Qilimanjaro Quantum Tech Sl, [www.qilimanjaro.tech](http://www.qilimanjaro.tech)

University of Glasgow, [www.gla.ac.uk](http://www.gla.ac.uk)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

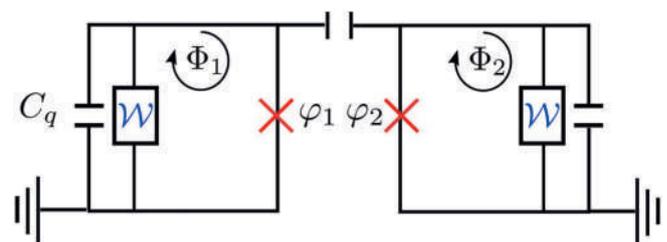
**Ejecución:** 2020 a 2024.

## Financiación del proyecto

H2020-FETOPEN-2018-2020.

## Funciones de SCAYLE

Realizar la simulación numérica de los circuitos superconductores entre dos qubits.



Dos qubits de flujo superconductores acoplados capacitivamente. Este tipo de circuitos puede servir para producir acoplos entre qubits suficientemente robustos que eviten, en cierta medida, el problema de la decoherencia. Coinjugando éstos con los acoplos inductivos, es posible implementar varias de las puertas necesarias para realizar computación cuántica universal.



Referencia: 899561

# Estudio filogenético de mamíferos y homínidos de la Sierra de Atapuerca a través de la paleoproteómica

## Objetivo del proyecto

Este proyecto de doctorado tiene como objetivo estudiar la filogenia del oso de las cavernas, mediante el análisis del proteoma del esmalte dental de diferentes especies de úrsidos, cada una de ellas característica de una etapa distinta del Pleistoceno, representados en los diferentes yacimientos de la Sierra de Atapuerca (Burgos). Para ello, se buscarán dentro del proteoma aquellas proteínas más informativas filogenéticamente hablando, que ayuden a arrojar luz sobre la base de la filogenia de los osos cavernarios, para luego comparar esta información con otras especies de úrsidos de otros puntos de Europa. Adicionalmente, gracias a las herramientas bioinformáticas, se hará el mapeo de genomas modernos y antiguos pertenecientes a algunas especies de osos para complementar el estudio molecular.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Centro Nacional de Investigación para la Evolución Humana (CENIEH), [www.cenieh.es](http://www.cenieh.es)

Centro Mixto Universidad Complutense de Madrid e Instituto de Salud Carlos III (UCM-ISCI3), <https://www.ucm.es/es-cech>

Instituto de Biología Evolutiva de Barcelona (IBE UPF-CSIC), [www.ibe.upf-csic.es](http://www.ibe.upf-csic.es)

**Ejecución:** 2020 a 2024.

## Financiación del proyecto

European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement N° 861389

## Funciones de SCAYLE

El uso de Caléndula es imprescindible para desarrollar una tesis como esta, basada en paleobiología molecular. En primer lugar, permite trabajar de forma rápida y eficiente con genomas. Proporciona todas las herramientas y softwares necesarios para completar el workflow del mapeo genético, y la posterior traducción a proteínas, que se añadirán a la base de datos para obtener mayor variabilidad y hacer un análisis de datos más eficiente. Y, en segundo lugar, la ejecución de diferentes programas paralelamente que resultan imprescindibles para realizar un análisis de datos, nos hace ahorrar mucho tiempo de análisis.



# RNAi4Fusarium, Tecnologías basadas en el ARNi para el control de la enfermedad del Chancro Resinoso del Pino causado por *Fusarium circinatum*

## Objetivo del proyecto

El proyecto se propone estudiar el mecanismo de silenciamiento génico mediante ARN de interferencia de *F. circinatum* y la posibilidad de silenciar genes que afecten a la patogenicidad del hongo y comprometan el desarrollo de la enfermedad en pino, así como el estudio de los distintos métodos de aplicación de esta tecnología y la búsqueda de una metodología eficaz y estable en el tiempo de aplicación de los dsRNA. De esta manera el objetivo principal del proyecto consiste en desarrollar soluciones nuevas, sostenibles y no perjudiciales para el medio ambiente para el control del Chancro Resinoso del Pino basándose en esta tecnología.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

The Natural Resources Institute of Finland (LUKE), [www.luke.fi/en](http://www.luke.fi/en)

Forestry and Agricultural Biotechnology Institute (FABI), [www.fabinet.up.ac.za](http://www.fabinet.up.ac.za)

Swedish University of Agricultural Sciences (SLU), [www.slu.se/en](http://www.slu.se/en)

Universidade de Aveiro, [www.ua.pt](http://www.ua.pt)

Centro de Sanidad Forestal de Calabazanos (CSFC), Gobierno de Castilla y León, <https://medioambiente.jcyl.es/web/es/medio-natural/centro-sanidad-forestal-calabazanos.html>

Gobierno de Cantabria, [www.cantabria.es](http://www.cantabria.es)

IDForest Biotecnología Forestal Aplicada, [www.idforest.es](http://www.idforest.es)

Biomemakers, <https://biomemakers.com>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2020 a 2024.

## Financiación del proyecto

Proyectos de I+D+i, Convocatoria 2019, Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

## Funciones de SCAYLE

Caléndula es una herramienta necesaria en este proyecto, ya que se necesita de su capacidad de computación en el desempeño de análisis de RNAseq. Los análisis RNAseq requieren del manejo de archivos de datos muy grandes, además el trabajo con especies de pino hace todavía más necesaria esta herramienta, ya que los genomas manejados en este proyecto tienen un tamaño inmenso y Caléndula hace fácil el manejo y el procesamiento de estos datos.



# Avanzando las fronteras del conocimiento en el Universo a través de la simulación y manejo eficiente de la información

## Objetivo del proyecto

Se han obtenido los efectos de iones de tamaño finito en potenciales de interacción de tipo Debye con electrones relativistas y degenerados. También están calculando a temperatura superior en estos momentos en el nodo de la RES.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** C. Albertus, D. Barba, MA Pérez (IP), Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2020 a 2023.

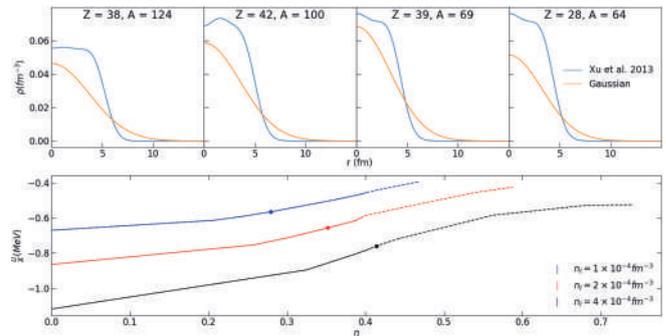
## Financiación del proyecto

Junta de Castilla y León.

## Funciones de SCAYLE

El uso de SCAYLE permite acceder a recursos computacionales con altas prestaciones multicore.

En sistemas de muchas partículas la computación es muy intensiva para poder obtener resultados en sistemas NVT fijos. Han obtenido tiempo competitivo en los nodos RES.



Esta figura muestra en el panel superior algunos de los núcleos que se usan, gaussianos, en el sistema multicomponente de la corteza de estrellas de neutrones y cómo varía la energía por barión,  $U/A$ , en función del tamaño del núcleo, etc, para diferentes densidades,  $n_i$ .



Referencia: SA096P20

# Astrofísica de estrellas de neutrones: retos actuales y futuros

## Objetivo del proyecto

En este proyecto se estudia la interacción de materia bariónica con materia oscura en el interior de objetos ultradensos. Basados en algunos modelos teóricos existentes de materia oscura, en particular de la que se autoaniquila se obtienen cambios en la temperatura medible.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** C. Albertus, D. Barba, MA Pérez (IP), Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

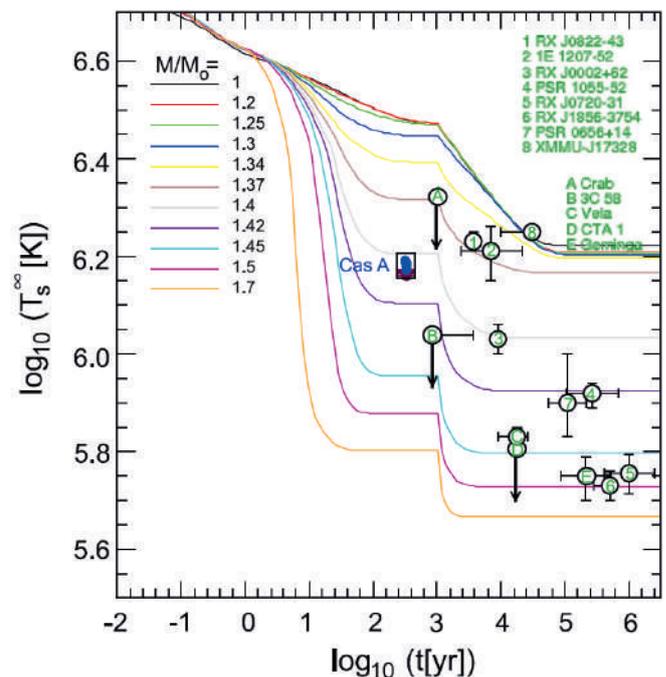
**Ejecución:** 2020 a 2023.

## Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación ( MICINN).

## Funciones de SCAYLE

Se determinan soluciones de las ecuaciones diferenciales en el interior estelar para obtener las temperaturas efectivas cuando la materia es una mezcla de bariónica y oscura.



Enfriamiento de estrellas de neutrones. Temperatura frente a tiempo para objetos con contenido de materia oscura.



Referencia: PID2019-107778GB-I00

# Desarrollo de nuevos sensores químicos para la detección rápida y selectiva de dispositivos explosivos improvisados

## Objetivo del proyecto

*Síntesis y caracterización de compuestos orgánicos u organometálicos con propiedades luminiscentes orientados hacia la detección precoz, rápida y con equipamiento ligero de dispositivos explosivos improvisados.*

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de Burgos, [www.ubu.es](http://www.ubu.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2020 a 2023.

## Financiación del proyecto

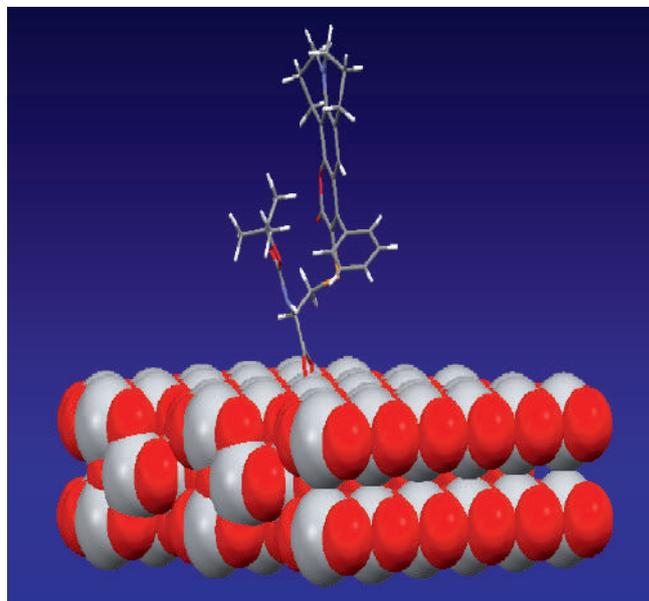
Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

## Funciones de SCAYLE

Se ha utilizado la infraestructura de SCAYLE para cálculos mecanocuánticos de los compuestos sintetizados y su interacción con modelos de explosivos. Esta parte del estudio es de gran relevancia para conocer cómo es la interacción entre las especies implicadas, así como el estudio de estados excitados que ayuden a comprender las modificaciones en las propiedades fotofísicas observadas experimentalmente.



Referencia: PID2019-111215RB-I00



Modelización de interacción de un derivado carboxilato con el plano 100 de la atanasita.  
<https://doi.org/10.1039/D1QM01041G>

# Estudio de los ARN virus en ecosistemas forestales de Castilla y León y su aplicación en la predicción de futuras pandemias

## Objetivo del proyecto

*Debido a la falta de estudios sobre el papel de los virus de especies vegetales, de insectos y de microorganismos que habitan en los ecosistemas forestales, este proyecto pretende tratar de desentrañar la posible relación entre estos virus y su posible flujo de unas especies a otras, incluso de unos reinos a otros. Para ello se identifica y estudia la diversidad genética de los virus que habitan los bosques de Castilla y León.*

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Grupo de Patología Forestal de la Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2020 a 2023.

## Financiación del proyecto

PI-2020. Subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación cofinanciadas por FEDER. 2020-2023.

## Funciones de SCAYLE

El manejo de datos de secuenciación masiva de ARN requiere de elevadas capacidades de computación. Por ello, el uso de la supercomputadora Caléndula es indispensable para el manejo rápido y eficiente de los millones de secuencias genéticas obtenidas. Además, el soporte técnico que nos brindan desde el SCAYLE en este proceso es de gran ayuda en el desempeño de nuestros análisis.



Soto de castaños en la comunidad de Castilla y León: uno de los ecosistemas de estudio del proyecto.



Referencia VA208P20

# eVTOL PAMAU

## Objetivo del proyecto

El objetivo del proyecto eVTOL PAMAU es el desarrollo de un vehículo aéreo o aerotaxi con capacidad VTOL (vertical take-off and landing) o de despegue y aterrizaje vertical, con capacidad para transportar pasajeros en entornos urbanos o interurbanos (entre áreas urbanas y rurales o entre ciudades) y que opere de manera sostenible mediante propulsión eléctrica distribuida (varios motores eléctricos). Concebido este diseño para superar las barreras tecnológicas y de seguridad que impiden el desarrollo e implementación de este tipo de aeronaves en nuestras ciudades. El Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI) aprobó la concesión de una ayuda parcialmente reembolsable con intereses que supone un porcentaje del 85% sobre el presupuesto total del proyecto. N° expediente: IDI-20210508.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Capgemini Engineering, [www.capgemini-engineering.com](http://www.capgemini-engineering.com)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

## Funciones de SCAYLE

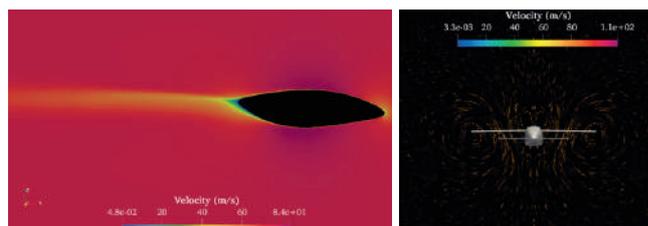
Los análisis de dinámica de fluidos computacional (CFD) nos están permitiendo agilizar todo el proceso de evaluación aerodinámica de la aeronave permitiéndonos verificar los diseños preliminares, depurar la configuración de la aeronave y optimizar los diferentes elementos sustentadores y de estabilidad y de control de vuelo. Todo ello de una forma bastante más rápida a la hora de obtener resultados que con otro tipo de recursos, gracias a las infraestructuras de la fundación SCAYLE.

## Financiación del proyecto

Financiación interna de Capgemini Engineering.

Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI).

**Ejecución:** 2020 a 2023.



Mapa de velocidades sobre el plano de simetría (izq.) y líneas de corriente coloreadas por velocidad (der.).



Código IDI-20210508

# Validation of NASA's GPM satellite precipitation estimates over Spain. Solid Phase

## Objetivo del proyecto

1. (O1) help calibrating and validating the new GPM CO satellite estimates with measurements from our previous campaigns.
2. (O2) validating the precipitation estimates from a numerical prediction model for Spain with data from the GPM constellation.
3. (O3) improving the precipitation estimates from the GPM constellation over Spain, with an emphasis in the mountains.
4. (O4) comparing the improved global estimates of GPM with the outputs from the reanalyses.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Earth and Space Sciences Research Group (Universidad de Castilla - La Mancha) y Grupo de Física de la Atmósfera, Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es).

Universidad de Castilla-La Mancha, [www.uclm.es](http://www.uclm.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

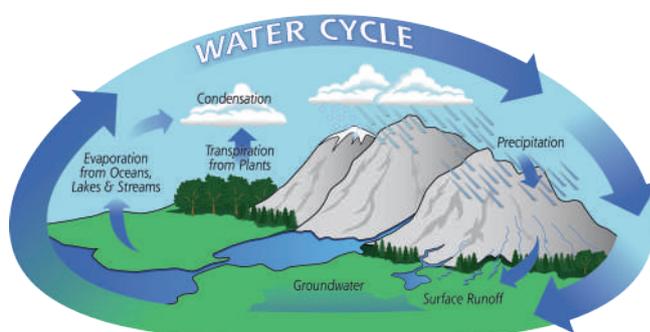
**Ejecución:** 2020 a 2023.

## Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación.

## Funciones de SCAYLE

La aportación de Caléndula a los proyectos es la disponibilidad de un sistema HPC para la realización de predicciones numéricas meteorológicas de alta resolución espacial y temporal, mediante un modelo atmosférico no hidrostático a mesoescala.



Credit: NASA GSFC.



Código PID2019-108470 RB-C22

# Desarrollo de sistemas de fabricación colaborativos en plataformas de internet industriales

## Objetivo del proyecto

El objetivo del proyecto se basa en el desarrollo de procesos de producción más inteligentes, colaborativos y digitalizados empleando técnicas de inteligencia artificial.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

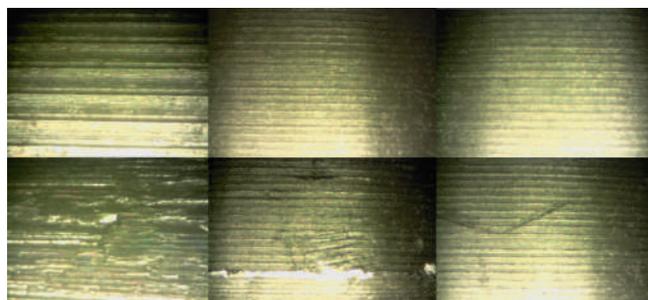
**Ejecución:** 2020 a 2022.

## Financiación del proyecto

Agencia Estatal de Investigación, dependiente del Ministerio de Ciencia e Innovación, correspondientes a la convocatoria 2019 de ayudas a proyectos de I+D+i en el marco de los programas estatales de generación de conocimiento y fortalecimiento científico y tecnológico, orientada a los retos de la sociedad.

## Funciones de SCAYLE

La aportación de Caléndula a los proyectos es la disponibilidad del uso de tarjetas GPU para cómputo y almacenamiento de datos en Opencayle.



En la imagen se muestran imágenes de distintas piezas mecanizadas donde se quiere analizar el desgaste que presentan.



Código PID2019-108277GB-C21

# PHARM, Preventing Hate Against Refugees and Migrants

## Objetivo del proyecto

Los objetivos a abordar en el proyecto son:

- Monitorización e identificación del discurso de odio contra refugiados y migrantes.
- Modelado de delitos de odio basado en las características descriptivas del discurso de odio contra refugiados y migrantes para predecir futuros episodios de delitos de odio.
- Contrarrestar el discurso de odio utilizando periodismo basado en datos e historias de persuasión narrativa de ficción a gran escala.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)

Aristotle University of Thessaloniki, [www.auth.gr/en](http://www.auth.gr/en)

Universita Degli Studi Di Milano, [www.unimi.it/it](http://www.unimi.it/it)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2020 a 2022.

## Financiación del proyecto

Comisión Europea. Call REC-RRAC-RACI-AG-2019.

## Funciones de SCAYLE

Las actividades distribuidas en 5 paquetes de trabajo coordinados incluyen:

- Implementación de un marco conceptual y metodológico común para el análisis a gran escala y la detección del discurso de odio;

- Implementación y evaluación de enfoques de aprendizaje automático para modelar y predecir delitos de odio contra refugiados y migrantes en función de las características del discurso de odio;
- Encuestar a los periodistas para comprender cómo informan y sensibilizan sobre el discurso de odio y cómo pueden ayudar a construir y difundir contra-narrativas basadas en noticias basadas en datos;
- Creación, evaluación y difusión de historias ficticias contra narrativas adaptadas a diferentes características de los ciudadanos utilizando la persuasión narrativa a gran escala.



Referencia: JUST/REC-875219

# PRIO-CONEX, Priorización para la conservación "ex situ" de poblaciones de plantas de alta vulnerabilidad al cambio climático y con incertidumbre taxonómica

## Objetivo del proyecto

El objetivo de este proyecto es desarrollar una metodología que incorpore estudios adaptativos y genómicos inter- e intrapoblacionales, como criterios para la definición de prioridades de conservación "ex situ" a nivel de población y especie. Trabajan con especies de plantas catalogadas como amenazadas y que presentan incertidumbre taxonómica o alta vulnerabilidad ante el cambio climático.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Sociedad de Ciencias Aranzadi, [www.aranzadi.eus](http://www.aranzadi.eus)

Universidad de Salamanca, [www.usal.es](http://www.usal.es)

Instituto Pirenaico de Ecología CSIC, [www.ipe.csic.es](http://www.ipe.csic.es)

Jardín Botánico de Olarizu, [www.vitoria-gasteiz.org](http://www.vitoria-gasteiz.org)

Universidad de Vigo, [www.uvigo.gal](http://www.uvigo.gal)

Royal Botanic Gardens, Kew (Reino Unido), [www.kew.org](http://www.kew.org)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2020 a 2022.

## Funciones de SCAYLE

Dado que el proyecto utiliza -entre otras- una aproximación filogenómica, concretamente la técnica HybSeq, precisamos manejar grandes cantidades de datos. Es decir, secuencias de ADN de más de 350 genes, obtenidas para unas 450 plantas individuales,

correspondientes al género rupícola endémico ibérico *Petrocoptis* (Caryophyllaceae), a fin de conocer su filogenia, historia evolutiva, niveles de diversidad y singularidad genética, etc... Es imposible analizar la ingente cantidad de datos genéticos y ambientales generados, sin la ayuda de un supercomputador.

## Financiación del proyecto

Proyectos Fundación Biodiversidad. Ministerio para la Transición Ecológica y Reto Demográfico.



# HUMMINGBIRD, Enhanced migration measures from a multidimensional perspective

## Objetivo del proyecto

- **Objetivo 1:** Identificar incertidumbres clave y reevaluar conceptos de migración mediante revisión profunda de teorías y medidas de migración.
- **Objetivo 2:** Proyecciones basadas en el análisis de los patrones, motivaciones y modalidades de migración y la naturaleza cambiante de los flujos y factores.
- **Objetivo 3:** Ampliar el punto de vista de la UE sobre el nexo entre políticas y migración en cuanto a las posibles implicaciones futuras de las decisiones políticas de hoy y sugerir áreas para futuras iniciativas políticas.
- **Objetivo 4:** Escenario cualitativo basado en las historias de migrantes en ruta para complementar escenarios cuantitativos.
- **Objetivo 5:** Validar las tecnologías de Big Data para proporcionar evidencia dinámica y novedosa sobre diversos aspectos / factores que podrían ayudar a estimar la migración de existencias y los flujos de migración.
- **Objetivo 6:** Fusionar el conocimiento de los enfoques cuantitativos y cualitativos para proporcionar una visión holística de la migración y los procesos de migración, delinear algunos de los principales desarrollos mundiales en torno a la migración en el futuro, y extraer implicaciones de política en cuanto a la preparación para futuros futuros de migración.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Katholieke Universiteit Leuven (KU Leuven) Belgium, [www.kuleuven.be](http://www.kuleuven.be)

Universiteit Utrecht (UU), Netherlands, [www.uu.nl](http://www.uu.nl), Universidad de Salamanca (USAL), Spain, [www.usal.es](http://www.usal.es), Otto-Friedrich-Universitaet Bamberg (UNI BA), Germany, [www.uni-bamberg.de](http://www.uni-bamberg.de), Cessda Eric (CESSDA ERIC), Norway, [www.cessda.eu](http://www.cessda.eu), Malmo Universitet (MAU), Sweden, <https://mau.se>, Turkcell Teknoloji Arastirma ve Gelistirme Anonim Turkey Sirketi (TTECH), Turkey, [www.turkcellteknoloji.com.tr](http://www.turkcellteknoloji.com.tr), GMV Innovating Solutions LTD (GMV UK), United Kingdom, [www.gmv.com](http://www.gmv.com), Migration Policy Group (MPG) Belgium, [www.migpolgroup.com](http://www.migpolgroup.com), Reseau Europeen des Femmes Migrants (ENoMW), Belgium, [www.womenlobby.org](http://www.womenlobby.org), White Research SPRL (WR), Belgium, [white-research.eu](http://white-research.eu), Universita di Pisa (UNIPi), Italy, [www.unipi.it](http://www.unipi.it), Vrije Universiteit Brussel (VUB), Belgium, [www.vub.be](http://www.vub.be),

Universitat Zurich (UZH), Switzerland, [www.uzh.ch](http://www.uzh.ch), Coalizione Italiana Per Le Libertà e i Diritti Civili Onlus, Italy (CILD), <https://cild.eu>, Caritas International ASBL (CI.be), Belgium, [www.caritasinternational.be](http://www.caritasinternational.be), SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, [www.scayle.es](http://www.scayle.es) (subcontratado).

**Ejecución:** 2019 a 2023.

## Financiación del proyecto

Comisión Europea. Horizon 2020 Framework Programme. Call H2020-SC6-MIGRATION-2019.

## Funciones de SCAYLE

Desarrollo de metodologías para analizar acciones de migración utilizando datos de Twitter.



Código H2020-SC6-870661

# EPIMILKSHEEP, Análisis del papel de las marcas epigenéticas y de la variabilidad genómica en la regulación de la transcripción en tejidos de interés productivo en el ganado ovino lechero

## Objetivo del proyecto

El objetivo global del proyecto propuesto es analizar el papel de las marcas epigenéticas y las variantes genómicas en el control del perfil transcripcional (metilación de las citosinas, lncRNA y RNA-seq) de diferentes tejidos con potencial productivo en ovejas lecheras.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Grupo de Mejora Genética de la Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

**Ejecución:** 2019 a 2022.

## Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades. Convocatoria 2018 - Proyectos I+D+i "retos de investigación". Programa estatal de i+d+i orientada a los retos de la sociedad.

## Funciones de SCAYLE

El proyecto EPIMILKSHEEP generará una gran cantidad de datos utilizando las modernas tecnologías de secuenciación masiva paralela de transcriptomas (RNASeq) y de genomas completos con bisulfito (WGBS). Los complejos análisis bioinformáticos de los datos generados requerirán una gran capacidad computacional, para lo cual el procesamiento en paralelo ofrecido por el supercomputador Caléndula de SCAYLE se hace imprescindible.



Corderos lechales hijos de las ovejas estudiadas en el proyecto EPIMILKSHEEP. El segundo objetivo del proyecto analizará la posible existencia de un efecto transgeneracional de la restricción alimentaria en la edad pre-juvenil de las ovejas sobre el perfil transcripcional y epigenético de la grasa perirrenal de su descendencia



RTI2018-093535-B-I00

# Desarrollo de un motor inteligente de predictores eólicos

## Objetivo del proyecto

Este proyecto tiene por objeto el desarrollo de una solución tecnológica para la estimación, con la menor desviación posible, de la producción de energía eléctrica en parques eólicos de cara a optimizar la oferta presentada por los agentes del mercado eléctrico en los mercados diarios e intradiarios.

Para ello, el motor de predicción desarrollado predecirá y ajustará lo más posible la previsión meteorológica, y la combinará tanto con datos históricos de producción del parque como con datos relativos al funcionamiento del mercado eléctrico.

De esta manera se mejorará el rendimiento económico de los parques eólicos, perjudicado actualmente por las penalizaciones derivadas de los desvíos entre la producción real y la predicha.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** UNATEC ITC SL., [www.unatec.es](http://www.unatec.es)

Centro Nacional de Energías Renovables (CENER), [www.cener.com](http://www.cener.com)

Universidad de Salamanca (USAL), [www.usal.es](http://www.usal.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

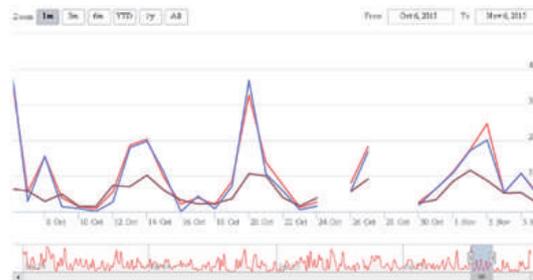
**Ejecución:** 2018 a 2024.

## Financiación del proyecto

Programa Retos Colaboración 2017 del Ministerio de Economía y Competitividad.

## Funciones de SCAYLE

El desarrollo del proyecto prevé la participación de SCAYLE a través de sus recursos de cálculo científico HPC. Su infraestructura permitirá la ejecución de las tareas operativas para la predicción numérica meteorológica mediante el modelo mesoescalar Weather Research and Forecasting WRF.



La combinación de la predicción meteorológica con el estudio estadístico de los datos históricos de la producción de un parque eólico permite predecir con una alta fiabilidad la producción de energía eléctrica en un parque eólico, apoyando la generación de una oferta para el mercado eléctrico altamente fiable.



Código RTC-2017-6635-3

# Aportaciones del aprendizaje automático a la generación de comportamientos autónomos en robots de servicio

## Objetivo del proyecto

El proyecto de tesis forma parte de un trabajo desarrollado en el Grupo de Robótica de la Universidad de León en los últimos años, en el que el objetivo es obtener un robot de servicio funcional, que permita llevar a cabo tareas de forma tanto individual, como trabajando de forma conjunta con los humanos. Dentro de este objetivo global, este trabajo de investigación se centra en el estudio de la aplicación de técnicas de aprendizaje supervisado a la generación de comportamientos autónomos en robots de servicio. El objetivo general se puede desglosar en dos objetivos más específicos. El primero de ellos, consiste en conocer el estado de la cuestión en materia de generación de comportamientos autónomos en robots de servicio, lo que nos permite saber en qué estado se encuentra este campo actualmente y los métodos que otros equipos de investigación están utilizando para resolver este complejo problema. El segundo, diseñar y desarrollar una arquitectura que lleve a cabo la generación de comportamientos autónomos haciendo uso de técnicas de aprendizaje supervisado.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Grupo de Robótica de la Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

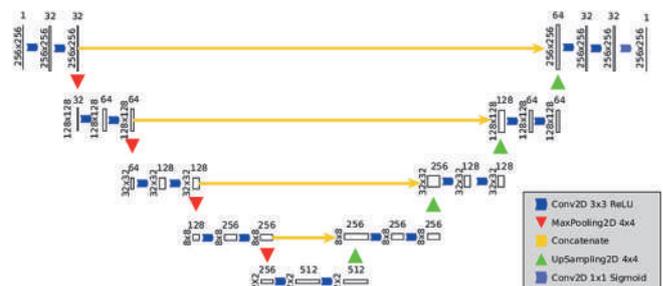
**Ejecución:** 2018 a 2023.

## Financiación del proyecto

Tesis Doctoral desarrollada con financiación propia del Grupo de Robótica de la Universidad de León.

## Funciones de SCAYLE

Es imprescindible el uso de Caléndula para llevar a cabo los entrenamientos de las redes neuronales utilizadas dentro del proyecto. El uso de Caléndula nos permite optimizar y reducir los tiempos de entrenamiento de los modelos permitiendo así que el proceso de desarrollo y prueba de los mismos se reduzca.



Arquitectura de la red neuronal convolucional utilizada por PeTra (People Tracking), herramienta desarrollada dentro de este proyecto que permite posicionar a las personas en el espacio y realizar su seguimiento.

# Evaluación del rendimiento de metodologías univariantes, multivariantes y de aprendizaje automático en el análisis de variaciones genómicas

## Objetivo del proyecto

El objetivo general de este trabajo consiste en el desarrollo de una nueva metodología basada en machine learning que sea capaz de determinar qué SNPs pertenecientes a un pathway dado son más relevantes a la hora de diferenciar en un estudio de genoma amplio entre casos de cáncer y controles. Más concretamente, el método que se propone se basa en el uso de un tipo de algoritmos evolutivos denominado algoritmos genéticos, pero que nada tiene que ver más allá de su nombre con la genética biológica, así como de las máquinas de vectores de soporte, metodología propia del machine learning muy adecuada para los problemas de clasificación.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de León, [www.unileon.es](http://www.unileon.es)

Universidad de Oviedo, [www.uniovi.es](http://www.uniovi.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

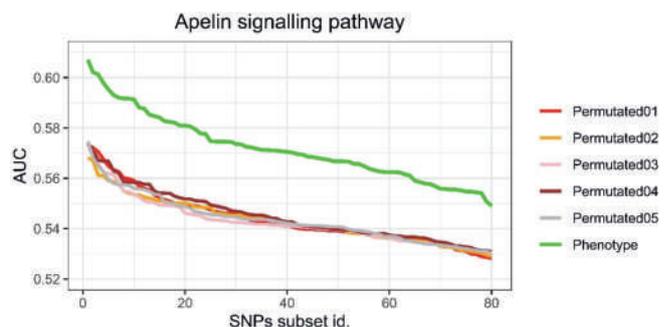
**Ejecución:** 2018 a 2022.

## Financiación del proyecto

Sin financiación.

## Funciones de SCAYLE

Se aplicaron metodologías de machine learning y optimización que requieren de cálculo intensivo.



Valores del área bajo la curva ROC de las 80 iteraciones realizadas con el pathway apelin signalling en la base de datos de casos y controles y en 5 repeticiones con las etiquetas de casos y controles permutadas.

Valores del área bajo la curva ROC de las 80 iteraciones realizadas con el pathway apelin signalling en la base de datos de casos y controles y en 5 repeticiones con las etiquetas de casos y controles permutadas.

# CO<sub>2</sub> absorbing Materials Project-RISE-CO<sub>2</sub>MPRISE

## Objetivo del proyecto

El objetivo es encontrar una solución barata, eficaz y robusta para la reducción significativa del CO<sub>2</sub> de las industrias y el transporte civil. El proyecto representa uno de los principales y fascinantes retos propuestos a la comunidad científica en los próximos 10 años, considerado como un pilar de HORIZON2020. El objetivo del proyecto CO<sub>2</sub>MPRISE es reunir a expertos en la materia de los sectores académico y no académico para desarrollar nuevas tecnologías en el campo de la captura y conversión de CO<sub>2</sub>. Este proyecto aspira a alcanzar estos ambiciosos resultados a través de una sólida base común de conocimiento derivada de un número equilibrado de comisiones de servicio que garanticen una sinergia intersectorial entre reconocidos centros de investigación, la industria y las academias. En esta línea, se planificarán formaciones, talleres y seminarios con el objetivo de impartir a cada socio de este consorcio las competencias fundamentales basadas principalmente en los aspectos técnicos, los retos sociales que implica este sector y la capacidad de mercado. También se prestará especial atención a organizar el trabajo de estrategia de todas las actividades en procesos específicos con el fin de introducir finalmente los resultados obtenidos en el mercado internacional.

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Università Degli Studi di Sassari, <https://www.uniss.it/>

Universidad de Burgos, [www.ubu.es](http://www.ubu.es)

Helmholtz-Zentrum Hereon GmbH, [www.hereon.de/index.php/en](http://www.hereon.de/index.php/en)

Monolithos Ltd., <https://monolithos-catalysts.gr/en>

Universidad de Chile, [www.uchile.cl](http://www.uchile.cl)

Comisión Nacional de Energía Atómica, [www.argentina.gob.ar/cnea](http://www.argentina.gob.ar/cnea)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

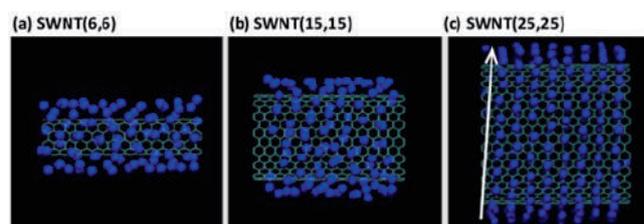
**Ejecución:** 2017 a 2022.

## Financiación del proyecto

European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Programme, under the Marie Skłodowska-Curie.

## Funciones de SCAYLE

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



Disposición de los átomos de carbono (en azul) del anión [CO<sub>3</sub>]<sup>2-</sup> (perteneciente a la sal fundida Li<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) sobre los nanotubos de carbono SWNT(6,6), SWNT(15,15) y SWNT(25,25) para las primeras capas de solvatación, realizado con simulaciones de MD.



Referencia: Grant Agreement No. 734873

# Influencia de los microorganismos asociados a plantaciones de *Juglans sp*

## Objetivo del proyecto

**Objetivo principal:**

Conocer la influencia de los microorganismos asociados al nogal, realizando análisis comparativos en diferentes edades de la masa, diferentes procedencias reproductivas (clonal o por semilla), de diferentes especies y diferentes sustratos/localizaciones.

**Objetivos secundarios:**

- Conocer hongos y bacterias asociados a suelos en plantaciones de nogal en España.
- Conocer hongos y bacterias asociados a plantas de nogal de plantaciones en España.
- Determinar la posible asociación entre hongos y bacterias de suelo y endófitos asociados a plantas de nogal.
- Estudiar las posibilidades de aislamiento y cultivo de hongos y bacterias de interés.
- Analizar las posibilidades de asociación *in vitro* de hongos y bacterias en vitroplantas de nogal (inoculación).

## Participantes del proyecto

**Líder del proyecto:** Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

INNEA Alternativas biotecnológicas

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, España, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

## Financiación del proyecto

Financiación propia de INNEA Alternativas Biotecnológicas.

## Funciones de SCAYLE

El uso de Caléndula se debe a la necesidad de realizar el análisis de los datos procedentes de la secuenciación mediante metodología NGS que requieren una gran capacidad de cálculo.

**Ejecución:** 2016 a 2022.



Explantos de *Juglans sp.* de material seleccionado de parcelas de ensayo, procedentes de micropropagación vegetal mediante cultivo *in vitro*.



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

**Survival of electronic coherences against nuclear motion in ultrafast molecular processes.**

Grupo líder del proyecto: Universidad Autónoma de Madrid.

**Modelling of the Cambridge swirling burner with the Conditional Moment Closure model in the frame of Large Eddy Simulations.**

Grupo líder del proyecto: Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS).

**Numerical simulations of shock-induced auto-ignition in compressible mixing layers.**

Grupo líder del proyecto: Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS).

**Intermediate filament networks: from biological function to biomimetic material resilience.**

Grupo líder del proyecto: Universitat Politècnica de Catalunya

**First-principles assessment of Na<sub>3</sub>Li<sub>3</sub>M<sub>2</sub>F<sub>12</sub> phases for positive electrodes in Li-ion batteries.**

Grupo líder del proyecto: CIC energiGUNE

**Bare MXene Surfaces as Supports for Single Atom Catalysts.**

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona

**Kinetic Ensembles for oligomer formation in misfolded protein disease using liquid-phase microscopy videos.**

Grupo líder del proyecto: Institute for Bioengineering of Catalonia (IBEC).

**Excitons in the time domain.**

Grupo líder del proyecto: Universidad Autónoma de Madrid (UAM).

**First-principles study of ionic intercalation in the (Fe,Ni)PO<sub>4</sub>-Na(Fe,Ni)PO<sub>4</sub> system as cathode material for Na-ion batteries.**

Grupo líder del proyecto: CIC energiGUNE.

**Computation of many-body properties of Neutron Star crusts.**

Grupo líder del proyecto: Universidad de Salamanca.

**Integrative computational modeling pipeline to detect molecular glues.**

Grupo líder del proyecto: Barcelona Supercomputing Center (BSC-CNS).

**Generation of structured x-ray lasers through the use of neural networks.**

Grupo líder del proyecto: Universidad de Salamanca.

**First-principles study of ionic intercalation in the (Fe,Ni)PO<sub>4</sub>-Na(Fe,Ni)PO<sub>4</sub> system as cathode material for Na-ion batteries.**

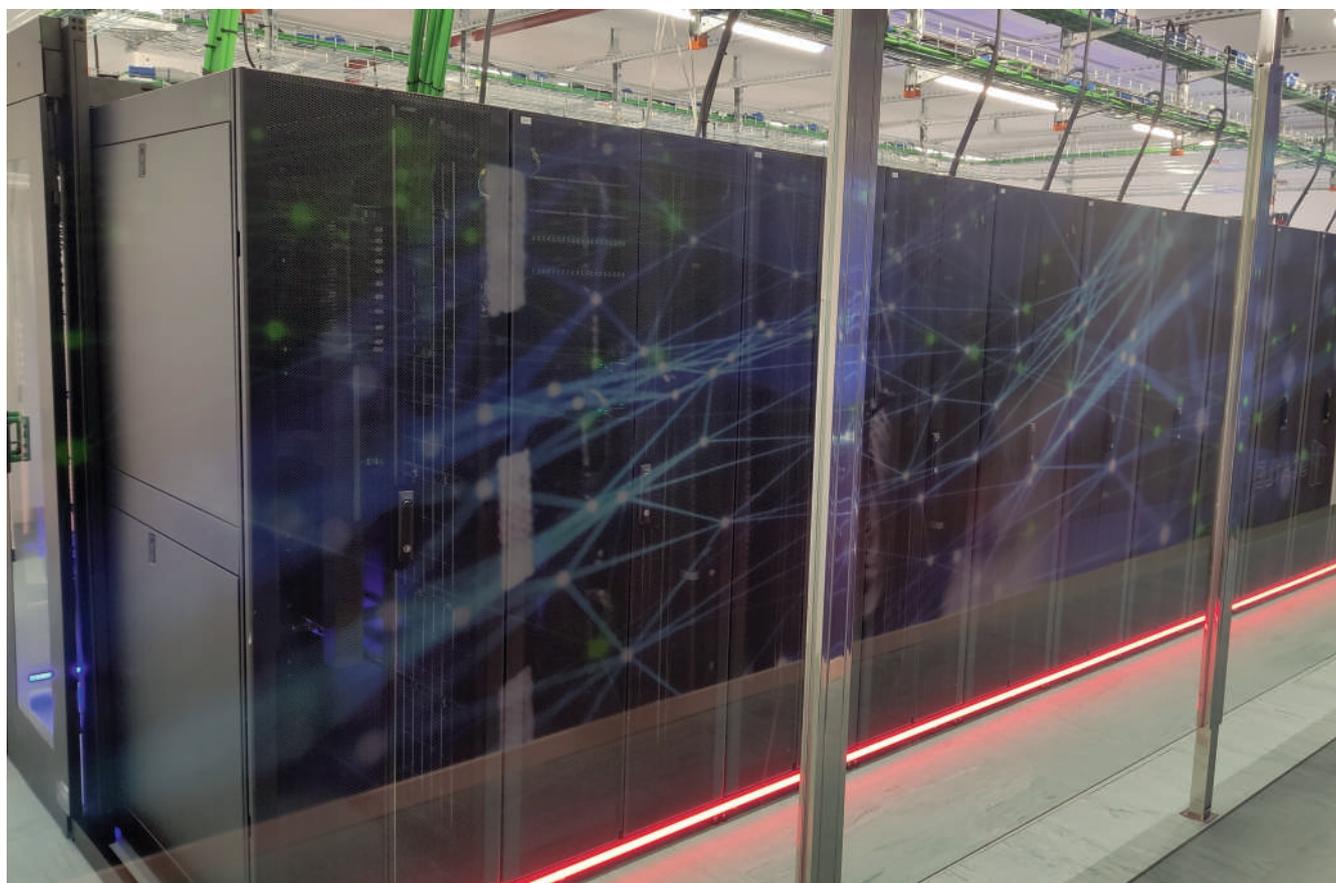
Grupo líder del proyecto: CIC energiGUNE.

**Stacking and Partial Oxidation Effects on the Reverse Water Gas Shift Reaction by MXenes.**

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

**CO dissociation on MXenes: Implications in Heterogeneous Catalysis.**

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.



CPD 2

## Publicaciones científicas

### Orquestador de Despliegue de Infraestructura en la Nube (ODIN)

Authors: Fernández González, David<sup>1</sup>; Curbera Rodríguez, Jose Leopoldo<sup>1</sup>, Guerrero Higuera, Ángel Manuel<sup>1\*</sup>; Matellán Olivera, Vicente<sup>2</sup>; Rodríguez Lera, Franciasco J.<sup>1</sup>; Campazas Vega, Adrián<sup>1</sup> y Crespo Martínez, Ignacio Samuel<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Grupo de Robótica, Universidad de León. Escuela de Ingenierías Industrial, Mecánica y Aeroespacial. Universidad de León.

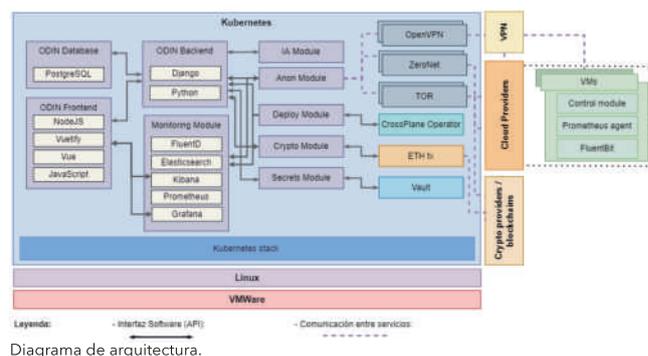
<sup>2</sup> Supercomputación Castilla y León. Universidad de León.

\* Autor Principal y responsable del trabajo.

#### Abstract:

El Orquestador de Despliegue de Infraestructura en la Nube (ODIN), es una plataforma basada en Inteligencia Artificial (IA) que permite desplegar automáticamente infraestructuras informáticas en proveedores en la nube asegurando el máximo anonimato. El prototipo lo está desarrollando un equipo de investigadores de la Universidad de León y está dirigido y financiado por la Subdirección General de Planificación, Tecnología e Innovación de la Dirección General de Armamento y Material (DGAM/PLATIN), siendo el Mando Conjunto de Ciberespacio (MCCE) quien ostenta la Dirección Técnica. Todo el proceso de despliegue será gestionado de manera

automática por un algoritmo basado en IA con el objetivo de asegurar el máximo anonimato, dificultando todo lo posible conocer las variables "quien soy", "donde estoy" y "qué hago". Además, el prototipo dispondrá de una consola de mando y control, accesible vía web, con una interfaz hombre-máquina todas las funciones de control, supervisión, monitorización, configuración, parametrización y visualización.



### Evaluation of the reliability index of IP addresses in reputation lists

Authors: Alberto Miranda-García<sup>1</sup>, Ignacio Samuel Crespo-Martínez<sup>1</sup>, Ángel Manuel Guerrero-Higuera<sup>1</sup>, and Vicente Matellán-Olivera<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> University of León, León, Spain.

#### Abstract:

Abstract IP address reputation lists are a collection of IP addresses that have been associated with malicious practices. Therefore, it is essential to evaluate the addresses reliability in this list to avoid false positives, regardless of the metrics that have been classified as malicious. Reliability is defined as the probability that such IP addresses are a significant threat due to their appearance on different reputation lists. Generating an evaluation index to evaluate the reliability of the elements in a global way allows us to evaluate IP addresses. Thus, a defined metric will be used based on appearances in external reputation lists, the dates they were added and last seen, and other variables such as severity and repetition in the list itself. The proposed system presents an IP address evaluation module composed of a series of asynchronous processes to evaluate the reliability of the elements.

### Revisión sistemática de técnicas de aprendizaje automático para la detección de Amenazas Persistentes Avanzadas (APT) utilizando flujos de red en formato NetFlow

Authors: Christian Vega González<sup>1</sup>, Adrián Campazas Vega<sup>2</sup>, Ignacio Samuel Crespo Martínez<sup>2</sup>, Ángel Manuel Guerrero-Higuera<sup>2</sup> y Vicente Matellán Olivera<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Instituto Nacional de Ciberseguridad.

<sup>2</sup> Universidad de León.

#### Abstract:

Las amenazas persistentes avanzadas son uno de los problemas de seguridad más complejos y preocupantes que afectan a un gran número de empresas y entidades públicas. Este tipo de amenazas emplean multitud de técnicas para atacar a objetivos de alto valor y gran parte de estas técnicas generan tráfico malicioso. Debido al notable incremento de los ataques por APT, los investigadores han desarrollado herramientas encargadas de detectar este tipo de tráfico malicioso mediante el uso de modelos de aprendizaje automático entrenados con paquetes de red. Sin embargo, existen infraestructuras de red que manejan una gran cantidad de tráfico, siendo imposible el análisis de todos los paquetes gestionados por la red. Estas infraestructuras hacen uso de protocolos ligeros basados en flujos, siendo NetFlow uno de los más utilizados. El objetivo de este trabajo es llevar a cabo una revisión de la literatura para conocer qué algoritmos de clasificación y conjuntos de datos ofrecen mejores resultados en la detección de tráfico malicioso, similares a los producidos por una APT, utilizando flujos en formato NetFlow. Los resultados obtenidos muestran que el conjunto de datos más utilizado es CIC-IDS-2017. Asimismo, los algoritmos que mayor exactitud ofrecen son regresiones logísticas, árboles de decisión y Naive Bayes.

## Menciones a SCAYLE en publicaciones científicas

### ***Asymmetric kink scattering in a two-component scalar field theory model.***

Authors: A. Alonso-Izquierdo.  
Journal: Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, Volume 75, August 2019, Pages 200-219.  
DOI: 10.1016/j.cnsns.2019.04.001.

### ***Asymmetric scattering between kinks and wobblers.***

Authors: A. Alonso-Izquierdo, L. M. Nieto, J. Queiroga-Nunes.  
Journal: Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, Volume 107, April 2022, 106183.  
DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.106183

### ***A theoretical study on CO<sub>2</sub> at Li<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub> and Li<sub>3</sub>NaSiO<sub>4</sub> surfaces.***

Authors: •Gutiérrez, A., Tamayo-Ramos, J. A., Martel, S., Barros, R., Bol, A., Gennari, F. C., Larochette, P. A., Atilhan, M. & Aparicio, S.  
Journal: Physical Chemistry Chemical Physics, 24, 13678-13689.  
DOI: 10.1039/D2CP00346E

### ***A theoretical study of CO<sub>2</sub> capture by highly hydrophobic type III deep eutectic solvents.***

Authors: Gutiérrez, A., Rozas, S., Hernando, P., Alcalde, R., Atilhan, M. & Aparicio, S.  
Journal: Molecular Liquids, 366, 120285.  
DOI: 10.1016/j.molliq.2022.120285.

### ***Crystallization in single- and multicomponent neutron star crusts.***

Authors: D. Barba-González, C. Albertus, and M. A. Pérez-García.  
Journal: Physical Review C 106, 065806 (2022).  
DOI: 10.1103/PhysRevC.106.065806.

### ***High-pressure carbon dioxide solubility in terpene based deep eutectic solvents.***

Authors: Al-Bodour, A., Alomari, N., Gutiérrez, A., Aparicio, S. & Atilhan, M.  
Journal: Journal of Environmental Chemical Engineering, 10(5), 108237.  
DOI: 10.1016/j.jece.2022.108237.

### ***Insights on novel type V deep eutectic solvents based on levulinic acid.***

Authors: Gutiérrez, A., Zamora, L., Benito, C., Atilhan, M. & Aparicio, S.  
Journal: The Journal of Chemical Physics, 156(9), 094504.  
DOI: 10.1063/5.0080470.

### ***Kink scattering in a generalized Wess-Zumino model.***

Authors: A. Alonso-Izquierdo, M.A. Gonzalez Leon, J. Martin Vaquero, M. de la Torre Mayado.  
Journal: Commun Nonlinear Sci Numer Simulat 103 (2021) 106011.  
DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.106011

### ***Kink dynamics in the MSTB Model.***

Authors: A. Alonso-Izquierdo.  
Journal: Physica Scripta, Volume 94, Number 8.  
DOI: 10.1088/1402-4896/ab1184.

### ***Multi-Species Transcriptome Assemblies of Cultivated and Wild Lentils (*Lens sp.*) Provide a First Glimpse at the Lentil Pangenome.***

Authors: Juan J. Gutierrez-Gonzalez, Pedro García, Carlos Polanco, Ana Isabel González, Francisca Vaquero, Francisco Javier Vences, Marcelino Pérez de la Vega and Luis E. Sáenz de Miera.  
Journal: Agronomy 2022, 12, 1619.  
DOI: 10.3390/agronomy12071619.

### ***Nanostructuring and macroscopic behavior of type V deep eutectic solvents based on monoterpenoids.***

Authors: Zamora, L., Benito, C., Gutiérrez, A., Alcalde, R., Alomari, N., Al Bodour, A., Atilhan, M. & Aparicio, S. .  
Journal: Physical Chemistry Chemical Physics, 24, 512-531.  
DOI: 10.1039/D1CP04509A.

### ***Tuning the properties of ionic liquids by mixing with organic solvents: The case of 1-butyl-3-methylimidazolium glutamate with alkanols.***

Authors: Ghazipour, H., Gutiérrez, A., Alavianmehr, M. M., Hosseini, S. M. & Aparicio, S.  
Journal: Journal of Molecular Liquids, 347, 117953.  
DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117953.

### ***Use of computer vision to inspect automatically machined workpieces.***

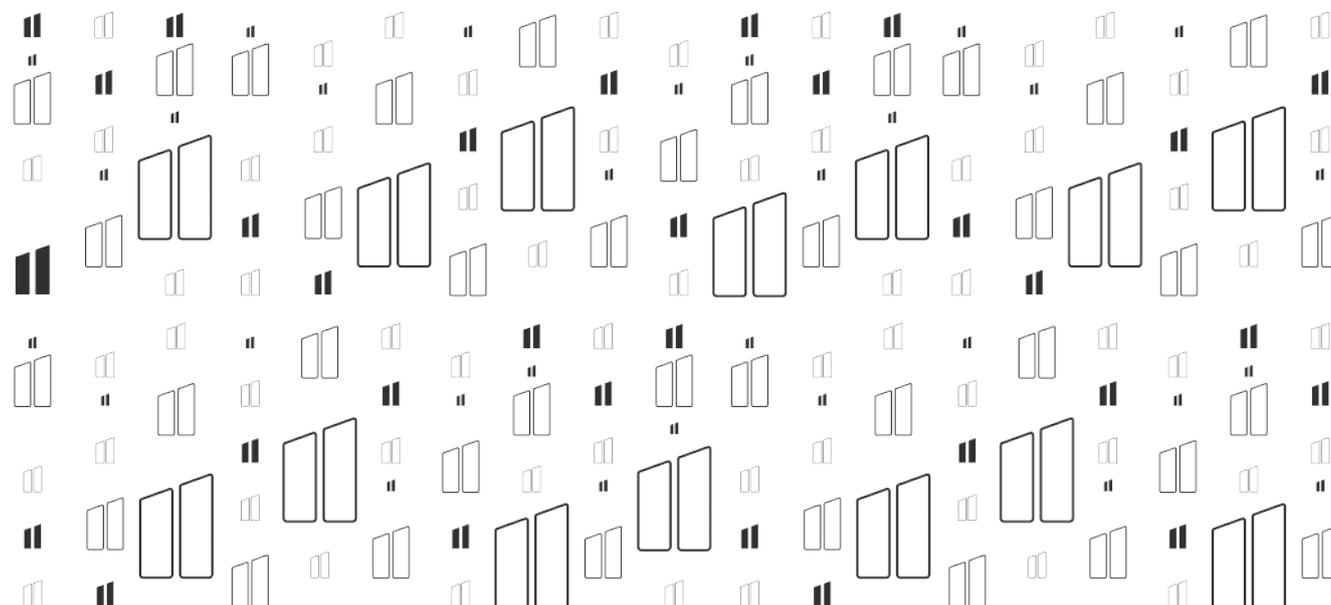
Authors: del Castillo, V. R. and Sánchez-González, L.  
Journal: Computational Intelligence Based Solutions for Vision Systems, 2022, pp. 2-1.  
DOI: 10.1088/978-0-7503-4821-8ch2

### ***Vision-Based Module for Herding with a Sheepdog Robot. Sensors (Basel).***

Authors: Riego Del Castillo V, Sánchez-González L, Campazas-Vega A, Strisciuglio N. .  
2022 Jul 16;22(14):5321..  
PMID: 35891009; PMCID: PMC9317257.  
DOI: 10.3390/s22145321.

### ***Wobbling kinks in a two-component scalar field theory: Interaction between shape modes.***

Authors: A. Alonso-Izquierdo, D. Miguélez-Caballero, L.M. Nieto and J. Queiroga-Nunes.  
Journal: Physica D 443 (2023) 133590.  
DOI: 10.1016/j.physd.2022.133590



*Que es la supercomputación y cómo utilizarla*

*Introducción al uso de OpenCAYLE*

*Curso práctico de iniciación al uso de la supercomputación aplicado al análisis de datos RNAseq*

*Seminario de Computación Cuántica*

*Curso Práctico de Metagenómica y diversidad microbiana utilizando Supercomputación*

*Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE*

## Que es la supercomputación y cómo utilizarla

### Objetivos

El objetivo del curso es presentar a los investigadores en general, y en particular a aquellos cuyos proyectos requieran potencias de cálculo muy elevadas, la infraestructura de la que dispone Supercomputación Castilla y León - SCAYLE y el acceso a la misma. Se dará a conocer las posibilidades que la supercomputación puede ofrecer al emplear las herramientas proporcionadas por una infraestructura como Caléndula, el superordenador de SCAYLE.

Además, SCAYLE presentará las actividades que realiza, así como las ventajas que tiene para los investigadores poder utilizar una infraestructura de estas características, favoreciendo una investigación de calidad. Se indicarán los servicios que desde SCAYLE se ofrecen y se hará una demostración del uso de Caléndula.

### Destinatarios

Investigadores de todas las ramas del conocimiento que manejen grandes cantidades de datos o demanden gran potencia de cálculo.

El curso será introductorio y no se necesitan conocimientos previos.

### Profesorado

**Jesús Lorenzana Campillo**

Coordinador del área de supercomputación de SCAYLE.

**Duración** 2 horas.

### Fecha y lugar

23 de febrero de 2022. Edificio CRAI-TIC, Aula Formación SCAYLE de la 1ª planta, Campus de Vegazana, Universidad de León..

### Contenidos

*¿Qué hace y para qué sirve SCAYLE? (1)*

*Características de Caléndula, el superordenador de SCAYLE. Introducción al sistema de cálculo. Ejemplo de uso del cálculo científico de SCAYLE.*

## Introducción al uso de OpenCAYLE

### Destinatarios

Investigadores de todas las ramas del conocimiento que manejen datos y tengan necesidad o interés, bien en su preservación, o en su publicación en abierto en cumplimiento de las normativas nacionales y europeas de publicación de acuerdo a los principios FAIR (Findable, Accesible, Interoperable and Reusable) de ciencia abierta.

El curso será introductorio y no se necesitan conocimientos previos.

### Profesorado

**José Manuel Martínez García**

Coordinador de Sistemas en SCAYLE

**Duración** 2 horas.

### Fecha y lugar

5 de mayo de 2022. Edificio CRAI-TIC, Aula Formación SCAYLE de la 1ª planta, Campus de Vegazana, Universidad de León.

### Contenidos

*Presentación del servicio OpenCAYLE.*

*Arquitectura OpenCAYLE.*

*Caso de uso.*

# Curso práctico de iniciación al uso de la supercomputación aplicado al análisis de datos RNAseq - 5ª edición

## Destinatarios

El curso 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 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.

## Fecha y lugar

Del 11 al 15 de julio de 2022. Edificio CRAI-TIC, Aula Formación SCAYLE de la 1ª planta, Campus de Vegazana, Universidad de León.

**Duración** 36 horas.

## Profesorado

### Aroa Suárez Vega.

Departamento de Producción Animal, Universidad de León.

### Beatriz Gutiérrez Gil.

Departamento de Producción Animal, Universidad de León.

### Cristina Esteban Blanco.

Gastrointestinal Genetics Lab, Derio, Vizcaya.

### Héctor Marina García.

Departamento de Producción Animal, Universidad de León.

### Juan José Arranz Santos.

Departamento de Producción Animal, Universidad de León.

### Juan José Gutiérrez González.

Departamento de Biología Molecular, Universidad de León.

## Objetivos

Proporcionar formación básica para el manejo e interpretación de datos de expresión génica global procedentes de Next Generation Sequencing (RNA-Seq). Para ello 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.

## Contenidos

*Introducción al entorno Linux.*

*NGS y RNAseq.*

*Control de calidad y Trimming (FAstQC, otras herramientas Trimmomatic, etcF.).*

*Alineamiento de lecturas (Star) y visualización (IGV).*

*Manipulación de secuencias (SamTools).*

*Transcript assembly (Stringtie).*

*Cuantificación de lecturas (RSEM y HTSeq).*

*Introducción a R y Bioconductor. Toma de contacto.*

*Análisis de expresión diferencial de RNAseq.*

*Introducción a las anotaciones funcionales.*

*Bases de datos y ontologías para anotación funcional.*

*Análisis de enriquecimiento funcional.*

*Redes funcionales.*

## Seminario de Computación Cuántica

## Objetivos

El objetivo del seminario es proporcionar una introducción a la computación cuántica tanto desde el punto de vista teórico como práctico con ejemplos básicos. Durante el seminario se hará una introducción desarrollando el recorrido histórico de la computación cuántica así como conceptos clave para su comprensión. Desde el punto de vista práctico se desarrollará un "Hola mundo" en entornos de programación.

## Destinatarios

Investigadores de todas las ramas del conocimiento que estén interesados en la adaptación de su trabajo a la Computación Cuántica, con atención a los aspectos más prácticos y a los entornos de desarrollo más habituales en la actualidad. El curso tendrá un carácter introductorio a la computación cuántica.

## Profesorado

### Carmen Calvo Olivera.

Técnico en HPC en SCAYLE.

**Duración** 2 horas.

## Fecha y lugar

19 de julio de 2022. Edificio CRAI-TIC, Aula Formación SCAYLE de la 1ª planta, Campus de Vegazana, Universidad de León.

## Contenidos

*Introducción.*

*Evolución histórica QC*

*Conceptos previos*

*¿Qué es un ordenador cuántico?*

*Unidad de información cuántica*

*¿Cómo funciona la computación cuántica?*

*Aplicaciones*

*Entornos operativo y ejemplo.*

# Curso Práctico de **Metagenómica** y **diversidad microbiana** utilizando **Supercomputación** - 3ª edición

## 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.**

Gastrointestinal Genetics Lab, Derio, Vizcaya.

### **Giuseppe D'Auria.**

Cátedra FISABIO-Universidad de Valencia, Valencia.

### **Javier Tamames de la Huerta.**

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), Madrid.

**Duración** 40 horas.

## Fecha y lugar

17 al 21 de octubre de 2022. Edificio CRAI-TIC, Aula Formación SCAYLE de la 1ª planta, Campus de Vegazana, Universidad de León..

## Contenidos

*Introducción al entorno Linux.*

*Control de calidad de las secuencias.*

*Introducción a la metataxonomía.*

*Metataxonomía y secuenciación de segunda y tercera generación.*

*Estimación de abundancia.*

*Análisis de datos de taxonómicos.*

*Introducción a la plataforma de análisis de metagenomas.*

*Como decidir que método de análisis seguir.*

*Ensamblaje y coensamblaje de metagenomas.*

*Predicción de genes y búsqueda de homología.*

*Asignación funcional y taxonómica.*

*Mapeo de lecturas sobre contigs para estimar abundancias.*

*Finalización del primer análisis metagenómico.*

*Binning: obtención de MAGs (Metagenomic Associated Genomes, genomas individuales).*

*Binning: Validación y refinado.*

*Completando el análisis: predicción por homología y uso de otras bases de datos.*

*Metatranscriptómica: Combinar series de DNA y RNA. Uso del modo merge para obtener expresión de genes ausentes en el metagenoma.*

*Herramientas auxiliares.*

*Otros modos de análisis: prescindiendo del ensamblaje.*

*Herramientas auxiliares: Análisis de genomas.*

*Introducción a SQMTools para análisis estadístico de los resultados.*

## Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE

### **Asignatura de Análisis de Datos a gran escala. Máster en Robótica y Sistemas Inteligentes.**

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

4 de octubre de 2021 al 22 de febrero 2022.

### **Asignatura Computación de Altas Prestaciones. Máster en Ingeniería Informática.**

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

4 de octubre de 2021 al 22 de febrero 2022.

### **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.

15 de febrero al 5 de julio 2022.

### **Asignatura Computación de Altas Prestaciones. Máster en Ingeniería Informática.**

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

24 de octubre de 2022 al 10 de marzo 2023.

### **Asignatura Arquitecturas Avanzadas de Computadores.**

Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

12 de octubre de 2022 al 28 de febrero de 2023.

Datos económicos

Protocolos y convenios de colaboración

Estadísticas de uso

Actividades de promoción, difusión y comunicación

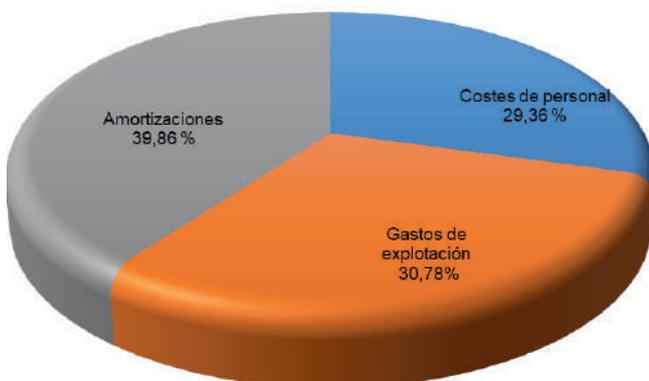
Visitas a SCAYLE

## datos económicos

Gastos de SCAYLE, ejercicio 2022:

**1.904.124,65 €**

La principal partida de gasto de SCAYLE en 2022 ha sido la de amortizaciones, debido al incremento del volumen de inversiones ejecutadas en los últimos años. Los gastos relacionados con servicios externos son la segunda partida en importancia y entre los mismos destacan los costes del servicio de soporte de RedCayle, así como los gastos operativos (consumo eléctrico, alquileres y subcontratación). Los gastos de personal, que se han ido incrementando en los últimos años debido al personal que se ha ido incorporando con cargo a proyectos, suponen la tercera partida en importancia.

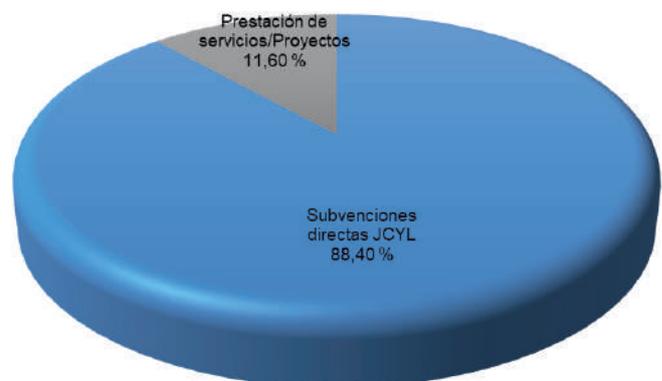


Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2022.

Ingresos de SCAYLE, ejercicio 2022:

**1.904.124,65 €**

Los principales ingresos proceden de las aportaciones de la Junta de Castilla y León, Consejería de Movilidad y Transformación Digital, Consejería de Educación y Gerencia Regional de Salud, a través de aportaciones al Centro para financiar tanto los gastos de explotación como las inversiones. Igualmente se computan como resultados la imputación de la subvención para inversiones aportada por el Ministerio de Economía y Competitividad. La otra partida de ingresos son aquellos derivados de la prestación de servicios y ejecución de proyectos tecnológicos, mereciendo especial mención los proyectos de I+D+i, cuyo incremento está siendo notable en los últimos años.



Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2022.

## protocolos y convenios de colaboración

*Convenio entre el Instituto para la Competitividad Empresarial de Castilla y León (ICE), Fundación Instituto Internacional de Investigación en Inteligencia Artificial y Ciencias de la Computación (AIR INSTITUTE), Asociación Digital Innovation Hub Industry 4.0, Digital Innovation Hub on Livestock, Environment, Agriculture & Forest (DIH-LEAF), Universidad de León y Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE) para establecer un marco de cooperación que permita el funcionamiento que sustente la iniciativa Digitalización Inteligente, Sostenible y CoheSiva (SMART SUSTAINABLE & COHESIVE DIGITALIZATION - DIGIS).*

*Acuerdo de Consorcio entre la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León y las Universidades de Burgos, Salamanca y Valladolid para el desarrollo del Programa Comunicaciones Cuánticas en Castilla y León. Q-Cayle.*

*Convenio entre la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León y el Consorcio de Bibliotecas Universitarias de Castilla y León para el desarrollo de acciones conjuntas dirigidas al desarrollo y la mejora de servicios de almacenamiento masivo de datos, difusión y formación.*

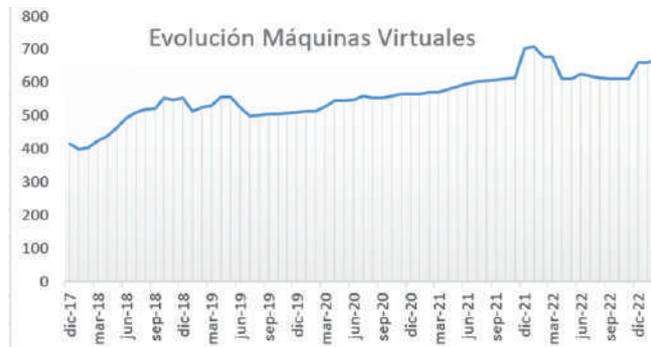
*Acuerdo revisado por Letrado, denominado "Convenio entre la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León y la Fundación Centro Tecnológico de la Información y la Comunicación para el desarrollo de acciones conjuntas dirigidas a la investigación e innovación en computación cuántica, blockchain y otras tecnologías avanzadas de computación.*

*Convenio de colaboración entre la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León y la Fundación Instituto Tecnológico de Castilla y León para el desarrollo de acciones conjuntas dirigidas al desarrollo de los servicios basados en computación cuántica, inteligencia artificial y almacenamiento masivo de datos en Castilla y León.*

## Utilización del Sistema

### Servicios Cloud

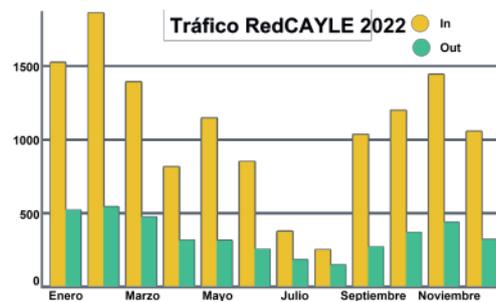
Se encuentran desplegados 613 servidores virtuales en la nube:



Número total de máquinas virtuales en la plataforma. Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2022. © SCAYLE.

### RedCayle

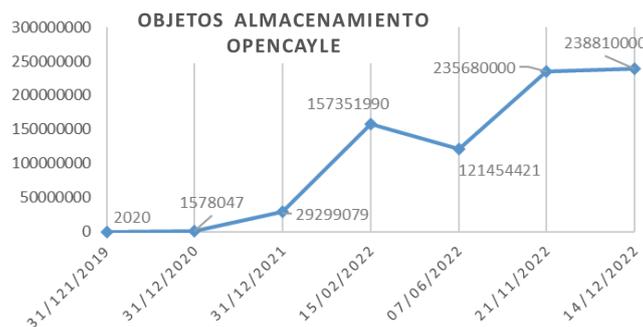
En el tráfico global acumulado que se ha cursado en el año 2022, se puede apreciar que los meses con una alta acumulación de tráfico entrante son enero, febrero y marzo.



Distribución del tráfico global de RedCAYLE por meses. © SCAYLE.

### OpenCayle

La capacidad de almacenamiento de datos de OpenCAYLE ha aumentado desde 1 PetaByte hasta 1.7 PetaBytes, como puede apreciarse en la siguiente gráfica:



Evolución de OpenCAYLE (TB). Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2022. © SCAYLE.

### Cálculo científico

Durante el año 2022 se ejecutaron en los diferentes sistemas de cálculo de SCAYLE trabajos de cálculo por un total de 17.107.945 horas en CPUs y en GPUs 29.406 horas.

La evolución gráfica de los últimos años para el indicador de ExaFLOPS efectivamente usados es la la que aparece a continuación:



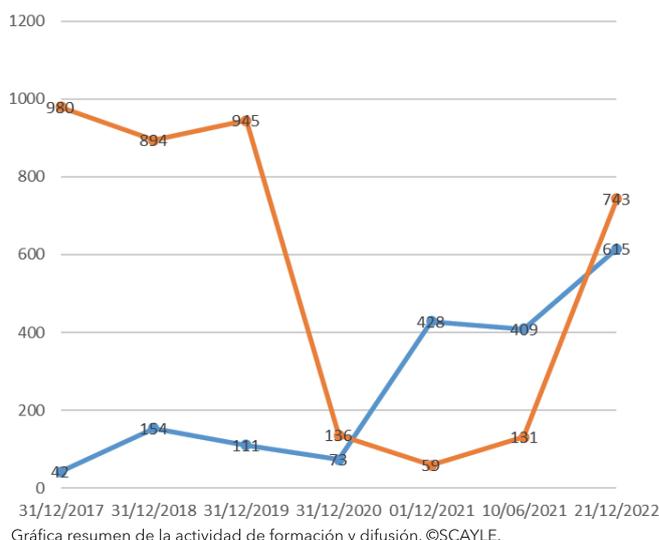
## actividades de **promoción, difusión y comunicación**

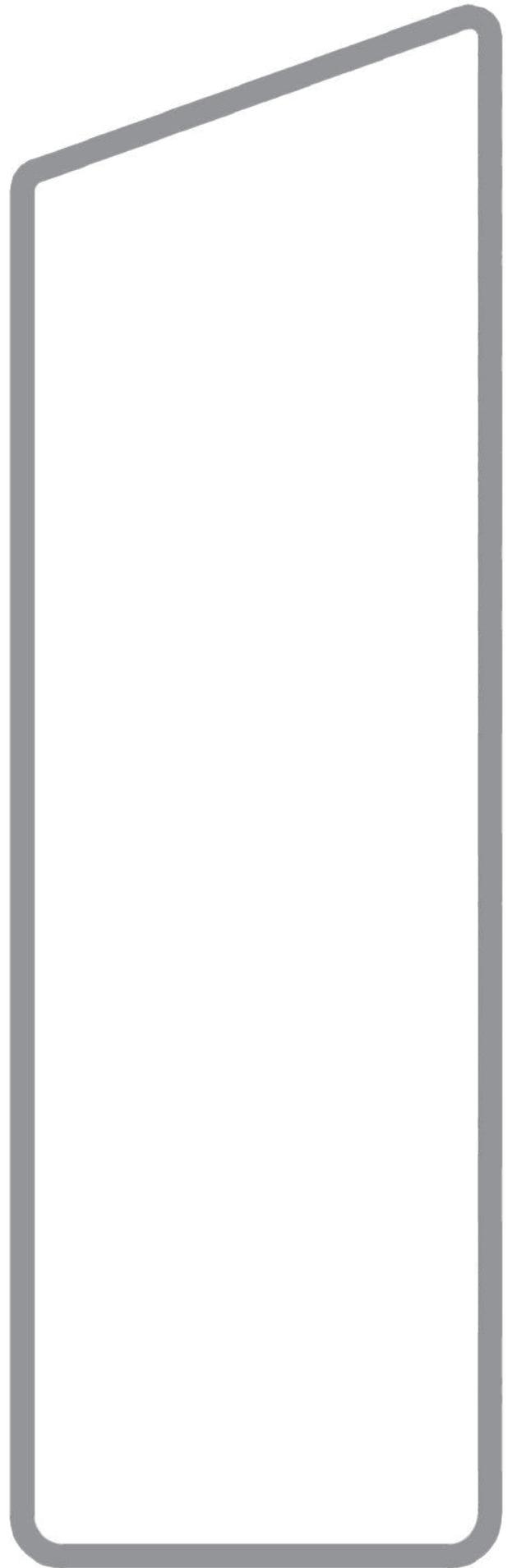
2022-02-16 y 17	<b>Transfiere (Málaga).</b>	2022-05-17	<b>BUCLE_ Introducción al uso de OpenCAYLE (Valladolid).</b>
2022-02-17	<b>Almacenar datos en formato abierto (León).</b>	2022-06-07	<b>Almacenamiento de datos y publicación en formato abierto (León).</b>
2022-01-21	<b>STEM Talent Girl. Universidad de León (León).</b>	2022-09-07	<b>Jornadas de ICTS (Sevilla).</b>
2022-03-01	<b>Ecosistemacuántico:computacióny comunicaciones (León).</b>	2022-10-19 y 20	<b>16ENISE (León).</b>
2022-04-21	<b>Supercomputación¿Cómoutilizarlaen entornos empresariales? - Cámara de comercio (León).</b>	2022-11-10	<b>III Jornadas Técnicas de REDCAYLE (León).</b>
2022-04-26	<b>HPC, un activo público, un activo para las empresas. Experiencias Prácticas: SCayLe e ICIQ (León).</b>	2022-12-14 y 15	<b>KQD Days (Madrid).</b>

## visitas a SCAYLE

2022-03-23 - Universidad de León-Máster EMBS	2022-11-14 - Semana de la Ciencia
2022-05-09 - 1º del Ciclo Formativo de Grado Superior de Desarrollo de Aplicaciones Web y Multiplataforma, CEFP TuniverS Formación	2022-11-16 - Semana de la Ciencia
2022-05-13 - CIFP Virgen del Buen Suceso de La Robla, Grados medios y superiores	2022-11-17 - Semana de la Ciencia
2022-05-23 - IES Germán Sánchez Rupérez (Salamanca) Grado Medio Sistemas Microinformáticos y Redes y de Gestión Administrativa.	2022-11-18 - Semana de la Ciencia
2022-05-26 - Ciclo Formativo de Sistemas Microinformáticos y Redes, Valladolid	2022-11-2 - Visita CC Divina Pastora-Programa Niñas Investigadoras
2022-05-31 - ECYL-ServiCAD	2022-11-29 - Máster en Ingeniería Informática-Asig. Computación de Altas Prestaciones
2022-06-15 - 3º de ESO el área de Control y Robótica-IES Eras de Renueva	2022-12-01 - CIFP Ciudad de León
2022-06-29 - Administración abierta-Proyecto Erasmus+ ILEDA	2022-12-13 - Visita CC Divina Pastora-Programa Niñas Investigadoras
2022-06-30 - Campus Tecnológico de la Ule	2022-12-15 - Academia Básica del Aire
2022-07-07 - Campus Tecnológico de la Ule	2022-12-20 - CEIP Ponce de León-Programa Niñas Investigadoras
2022-07-07 - Campus Tecnológico de la Ule	
2022-07-12 - Summer Boot Camp	
2022-07-13 - Summer Boot Camp	
2022-07-15 - Curso RNA-seq	
2022-09-22 - Máster en Dirección Estratégica de Tecnologías de la Información	
2022-10-11 - Visita CEIP Ponce de León-Programa Niñas Investigadoras	
2022-10-20 - Grado de Ingeniería Matemática de la UFV de Madrid	
2022-11-02 - Visita CC La Inmaculada-Programa Niñas Investigadoras	
2022-11-03 - FP María Auxiliadora	
2022-11-08 - Visita CC Virgen Blanca-Programa Niñas Investigadoras	

ACERCAMIENTO A SCAYLE







NOS  
IMPULSA



20  
26

