

Supercomputación Castilla y León

Anuario · Informe de actividad

2024

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 · 2024
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

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

índice de contenidos

Presentación Presidencia Patronato	pág.4
Presentación Dirección General	pág.5
Composición del Patronato	pág.6
Consejo Asesor	pág.6
SCAYLE	
Misión y objetivos	pág.7
Cartera de servicios	pág.8
Sistemas	pág.9
Supercomputación	pág.10
RedCAYLE	pág.11
Proyectos I+D+i	
Beneficiario	pág.13
Colaborador	pág.17
Publicaciones científicas	pág.37
Formación	
Cursos	pág.40
Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE	pág.42
Datos de SCAYLE	
Datos económicos	pág.43
Estadísticas de uso	pág.44
Actividades de promoción, difusión y comunicación	pág.45
Visitas a SCAYLE	pág.45

presentación

Presidencia

Patronato

Es un orgullo para la Junta de Castilla y León compartir, en este anuario 2024 del Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), los avances alcanzados gracias a una firme apuesta institucional por la tecnología al servicio de la sociedad. Desde el Gobierno autonómico hemos asumido el compromiso de impulsar el desarrollo científico y tecnológico con una visión clara: convertir a Castilla y León en un territorio de referencia en innovación, competitividad y transformación digital.

En esta legislatura, la Junta superará los 20 millones de euros de inversión directa en SCAYLE, un esfuerzo que refleja nuestra convicción de que el acceso a tecnologías punteras debe ser una herramienta al alcance de investigadores, empresas y administraciones públicas, con un impacto tangible en la vida de las personas.

SCAYLE es una de las tres Infraestructuras Científicas y Técnicas Singulares (ICTS) de Castilla y León, junto con el Centro de Láseres Pulsados Ultraintensos de Salamanca y el Centro Nacional de Investigación sobre la Evolución Humana de Burgos. Es, además, la única de ellas participada íntegramente por entidades de la Comunidad, lo que la convierte en un símbolo del talento, la excelencia y la capacidad de liderazgo que aquí desarrollamos.

Durante este año 2024, uno de los hitos más relevantes ha sido la renovación del superordenador Caléndula, con una inversión de 6,2 millones de euros, gracias a la cual se ha multiplicado por diez su potencia de cálculo, alcanzando los 7.000 Teraflops. Esto ha posicionado a Caléndula como el segundo supercomputador más potente de España, solo por detrás del MareNostrum. Este avance no es solo una mejora técnica, sino una verdadera revolución en capacidad científica, con aplicaciones que abarcan desde el desarrollo de fármacos y vacunas hasta la predicción de incendios o el análisis genético.

Además, SCAYLE forma parte activa de la Red Española de Supercomputación, aportando millones de horas de cálculo a los proyectos científicos más destacados del país, y ha afianzado nuevas colaboraciones estratégicas, como la recientemente firmada con la Unidad Militar de Emergencias en el marco del proyecto 'Atlantis'.

En paralelo, hemos iniciado la construcción de la nueva sede de SCAYLE, una infraestructura de 1.500 m² concebida bajo criterios de eficiencia, sostenibilidad y funcionalidad, que verá la luz en este 2025. Este nuevo espacio, situado junto al Centro Integrado de Formación Profesional Tecnológico Industrial de León, dotará a SCAYLE de las instalaciones necesarias para responder al crecimiento de sus servicios y para seguir liderando desde Castilla y León los desafíos de la digitalización y la ciencia de datos.

La nueva sede está diseñada como un edificio moderno y funcional dividido en dos prismas conectados: uno destinado a espacios administrativos y de formación, y otro al área técnica y de computación, vertebrados por un área polivalente que servirá como punto de encuentro y espacio de divulgación.

Todo este impulso no sería posible sin el equipo humano que hace realidad la misión de SCAYLE, ni sin el trabajo conjunto con la Universidad de León y otros actores del sistema científico-tecnológico de nuestra comunidad. También ha sido clave el apoyo de los Fondos Next Generation EU, que nos han permitido dar un salto cualitativo en nuestras infraestructuras de I+D+i.

Como ha subrayado el presidente Mañueco, "ponemos lo mejor de la tecnología al servicio de las personas". Y esa es precisamente la razón de ser de SCAYLE: transformar el conocimiento en soluciones reales para nuestra sociedad.

Gracias a su labor, hoy en Castilla y León no solo estamos a la vanguardia tecnológica, sino que somos referentes nacionales e internacionales en supercomputación, en inteligencia artificial, y en la aplicación práctica del conocimiento científico.

Miramos al futuro con determinación y confianza. Porque creemos en una Castilla y León innovadora, conectada y líder. Y porque sabemos que SCAYLE es, y seguirá siendo, una palanca fundamental para lograrlo.



D. José Luis Sanz Merino.

Presidente del Patronato del

Centro de Supercomputación de Castilla y León.

Consejero de Movilidad y Transformación Digital.

Junta de Castilla y León.

presentación

Dirección General

Es un verdadero honor dirigirme a todos vosotros en este anuario 2024 del Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), un año que quedará marcado como un momento de transformación y crecimiento para nuestro centro.

Desde marzo de 2024, he tenido el privilegio de asumir la Dirección General de SCAYLE, haciendo un paréntesis en mi trayectoria académica para liderar este apasionante reto. Asumir esta responsabilidad representa para mí un compromiso firme con el impulso de la supercomputación, la innovación científica y el desarrollo tecnológico de nuestra comunidad.

Durante este 2024, hemos vivido hitos de gran trascendencia para nuestra comunidad y para el ecosistema científico y tecnológico de nuestro país. La parada programada de Caléndula para la renovación de sus equipos ha sido uno de los principales acontecimientos, permitiéndonos convertirnos en el segundo centro de supercomputación de España en capacidad de cálculo. Este salto cualitativo nos posiciona como un nodo estratégico en la infraestructura nacional y europea de investigación avanzada.

A ello se suma el incremento de nuestra capacidad de almacenamiento, esencial para acompañar la creciente demanda de proyectos en inteligencia artificial, modelado computacional y simulación de datos masivos.

En 2024 también hemos reforzado nuestro compromiso con la colaboración, estableciendo nuevas alianzas estratégicas con entidades de referencia como la Unidad Militar de Emergencias (UME), el Instituto Nacional de Ciberseguridad (INCIBE), la red CLARIAH-ES en el ámbito de las Humanidades Digitales y el Instituto Geográfico Nacional (IGN).

Un paso fundamental para el futuro de SCAYLE ha sido también el arranque de las obras de nuestra nueva sede, un edificio concebido bajo criterios de sostenibilidad y eficiencia energética, dotado de tecnologías avanzadas como la recuperación de calor residual y la instalación de placas solares. Este nuevo espacio nos permitirá reducir nuestro impacto ambiental y nos posicionará como referente en tecnología verde y supercomputación eficiente.

Finalmente, hemos iniciado con gran ilusión una nueva línea estratégica: BioScayle. Con la adquisición de dos secuenciadores de última generación, abrimos una nueva etapa en bioinformática y análisis genómico, alineándonos con las necesidades de la medicina personalizada, la investigación biomédica y la agrobiotecnología.

Estos logros se enmarcan en la hoja de ruta definida en nuestro Plan Estratégico 2025-2028, que guiará nuestro crecimiento en los próximos años. Dicho plan contempla la ampliación de nuestra capacidad de cálculo, el fortalecimiento de RedCAYLE para mejorar la conectividad en ciencia y educación, la creación de áreas especializadas en computación cuántica y ciberseguridad, y el despliegue de una red de comunicaciones cuánticas en Castilla y León. Además, apostamos por la formación continua, el impulso al talento local y la reducción de nuestra huella de carbono, todo ello con el compromiso de hacer de SCAYLE un motor de innovación sostenible y de impacto social.

Todo esto no sería posible sin el esfuerzo, la pasión y el compromiso de todo el equipo de SCAYLE, ni sin la confianza depositada por nuestros usuarios, colaboradores e instituciones. Quiero agradecer de manera especial a la Consejería de Movilidad y Transformación Digital, la Consejería de Educación y la Consejería de Sanidad de la Junta de Castilla y León, y a la Universidad de León, por su firme apuesta y apoyo constante, que han sido fundamentales para impulsar estos avances.

Gracias por ser parte de este viaje. El futuro de la supercomputación en Castilla y León es más brillante que nunca.



D.ª Hilde Pérez García.
Directora General de SCAYLE.

composición del patronato

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

Presidente

D. José Luis Sanz Merino.

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

Vicepresidente

Dña. Nuria González Álvarez.

Rectora Magnífica de la Universidad de León.

Vocales

Dña. Blanca Ares González.

Directora de Universidades e Investigación. 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. Santiago Gutiérrez Martín.

Vicerrector de Investigación y Transferencia. Universidad de León.

D. Ramón Ángel Fernández Díaz.

Vicerrector de Gestión de Infraestructuras, Sostenibilidad y Transformación Digital. Universidad de León.

D. Francisco Pérez Laorden.

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

Secretario

Dña. 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

Dña. Nuria González Álvarez.

Rectora Magnífica de la Universidad de León. Vicepresidenta del Patronato de la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León.

Vocales

D. José Miguel García Pérez.

Rector Magnífico de la Universidad de Burgos.

D. Juan Manuel Corchado Rodríguez.

Rector Magnífico de la Universidad de Salamanca.

D. Antonio Largo Cabrerizo.

Rector Magnífico de la Universidad de Valladolid.

Secretario

Dña. 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 garantizan 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.

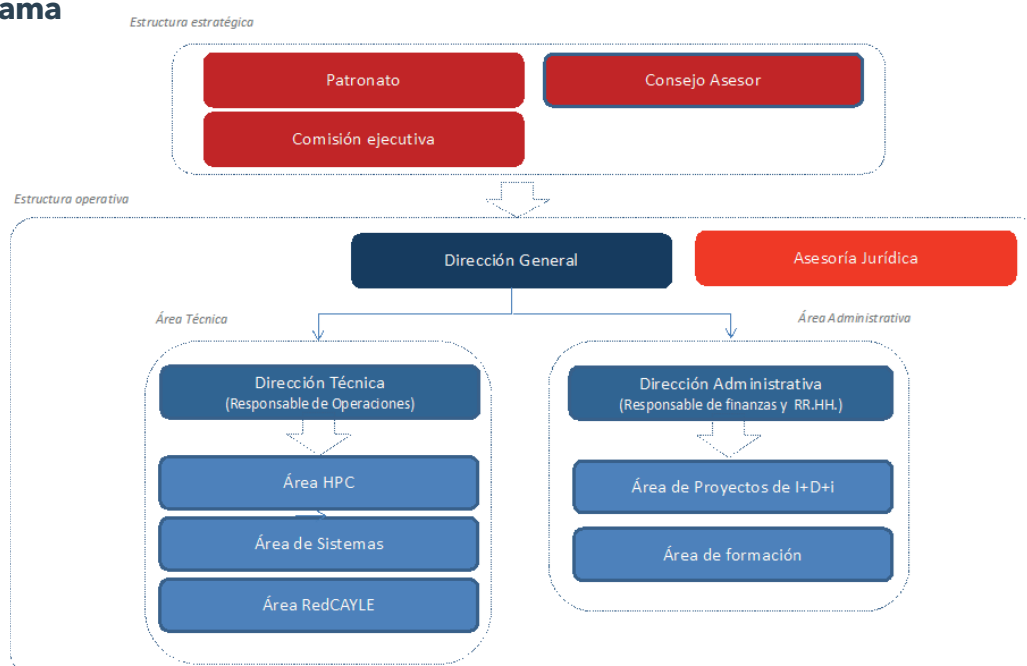
Misión

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



cartera de servicios

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 Computing

El servicio de nube o cloud privada complementa tanto los servicios de cloud computing orientados a la investigación como los dirigidos a la administración regional.

A través de este servicio, se ofrecen recursos de centro de datos virtual para el alojamiento de máquinas virtuales, sobre una infraestructura empresarial robusta, tanto a nivel de hardware como de software.

SCAYLE está capacitado para prestar servicios de cloud computing a la Junta de Castilla y León en calidad de medio propio instrumental y servicio técnico de la misma, sin incurrir en conflictos de competencia. Se proporciona un entorno virtual completo (servidores, redes, etc.) capaz de dar respuesta a las necesidades de los centros usuarios, pudiendo incluso sustituir a centros de proceso de datos de menor tamaño o complementar demandas puntuales de centros de mayor capacidad.

Almacenamiento de datos de alta capacidad y larga duración (OpenCAYLE)

En 2025, el crecimiento exponencial de los datos –impulsado por la inteligencia artificial generativa, el aprendizaje automático y el procesamiento de datos en tiempo real– ha consolidado la necesidad de infraestructuras de almacenamiento de gran capacidad, escalables y sostenibles. Esta demanda abarca desde el análisis de grandes volúmenes de datos hasta el entrenamiento y despliegue de modelos avanzados de IA.

Además, las actuales regulaciones europeas en materia de ciencia abierta y gobernanza de datos exigen la conservación, trazabilidad y libre acceso a los datos generados en proyectos financiados con fondos públicos, reforzando la importancia de sistemas robustos y duraderos de almacenamiento.

En este contexto, el servicio OpenCAYLE se ha ampliado y adaptado para proporcionar almacenamiento fiable y de larga duración para información de cualquier volumen, con políticas flexibles de retención y acceso.

El sistema permite la publicación directa de objetos mediante URLs accesibles vía Internet, facilitando la interoperabilidad y reutilización de datos en entornos colaborativos. Aunque está optimizado para albergar datasets científicos, también se utiliza como plataforma eficiente para copias de seguridad o respaldo institucional.

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

Servicios de consultoría en tecnologías de cadena de bloques.

Durante el año 2023 se ha adaptado el servicio para su uso específico en el registro de secretos industriales, invenciones y microcredenciales.

Se ofrece a las administraciones y universidades de la región.

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 - Carlos Redondo Gil.

La sala original (CPD1-C.R.G.) fue diseñada para alojar equipamiento IT de alto consumo y alta densidad, por lo que a partir de ahora solamente alojará los equipos que forman el supercomputador (Caléndula). Además, está siendo adaptada eléctricamente para poder alojar la nueva versión del mismo, que tendrá un consumo eléctrico mayor.



CPD1 - Carlos Redondo Gil. © SCAYLE.

CPD2.

La nueva sala (CPD2) ha sido diseñada como centro de datos estándar y a nivel de climatización usa una tecnología diferente. No admite tan altos consumos y altas cargas térmicas como en la sala CPD1.

Se han movido a la sala CPD2 todos los servicios de almacenamiento de datos, comunicaciones (incluido RedCAYLE), y Cloud Computing.

Actualmente la ocupación de ambas salas está alrededor del 50% de los espacios en rack.



CPD 2. © SCAYLE.

Supercomputación

Actualización tecnológica

Cálculo científico

En 2023, el Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE) llevó a cabo una de las mayores renovaciones tecnológicas de su historia, con una inversión superior a seis millones de euros destinada a multiplicar por diez la capacidad de cálculo de su superordenador Caléndula. La renovación incluyó la adquisición de 235 nuevos servidores de altas prestaciones, equipados con procesadores Intel y AMD de última generación, grandes capacidades de memoria RAM y 140 tarjetas gráficas NVIDIA H100 para potenciar trabajos de inteligencia artificial y computación avanzada.

En 2024 se han afrontado los trabajos de retirada del equipamiento de cálculo anterior. Una vez retirado el material, se afrontaron múltiples trabajos de adecuación de la infraestructura eléctrica del centro de datos para garantizar el suministro de energía al nuevo superordenador que prácticamente duplica su consumo respecto a la anterior versión.

El siguiente paso, consistió en la instalación y paso a producción de los nuevos equipos de cálculo, despliegue de las nuevas de redes de comunicaciones que les interconectan, sistemas de gestión y monitorización y puesta a punto de múltiples sistemas complementarios necesarios para el funcionamiento del sistema.

Finalmente, se ha trabajado en la migración de los datos de los usuarios desde los anteriores sistemas de almacenamiento a los nuevos. Se han migrado varios cientos de TB de datos que nuestros usuarios tenían almacenados y que era necesario transferir a un nuevo sistema de almacenamiento con las capacidades suficientes para dar respuesta a los, cada vez más altos, requerimientos de los trabajos ejecutados por investigadores y empresas. En este punto de la reactivación de nuestros usuarios, es necesario destacar el trabajo que se ha realizado por el personal técnico de SCAYLE para reinstalar la gran lista de programas que nuestros usuarios necesitan tener a su disposición para realizar su trabajo. Con la instalación de cientos de diferentes programas, de forma óptima para conseguir el mayor rendimiento de los nuevos equipos, se finalizó el proceso de puesta en marcha de la nueva infraestructura.

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 16 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 105 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.

Como consecuencia de la renovación de la infraestructura de cálculo científico y de diversos sistemas que han impactado en la operatividad del superordenador, SCAYLE no ha aportado tiempo de uso de infraestructura a la RES durante los distintos periodos de convocatoria del año 2024.



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

RedCAYLE

RedCAYLE es la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León. RedCAYLE proporciona servicio de conectividad a Internet 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 sitos en las 9 capitales de provincia, Béjar y Ponferrada.

RedCAYLE cuenta actualmente con capacidad para operar con circuitos ópticos de 100G, 10G y 1G en todos sus nodos distribuidos por la comunidad. Para la prestación de sus servicios de comunicaciones de alta capacidad, esta red dispone de una red de fibra óptica de más de 1400 Km., distribuida por todo el territorio de la comunidad.

RedCAYLE 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.

RedCAYLE se interconecta a la red nacional de investigación, RedIris, a través de su dos Puntos de Presencia situado en el propio RedCAYLE. De igual modo, es RedIris la que proporciona el tránsito a la red de investigación GEANT, que dar conectividad a todas las redes de investigación nacionales (NREN, *National Research Network*).



RedIris: Puntos de Presencia Nacionales.

RedCAYLE como red de comunicaciones avanzadas de la comunidad académica y científica proporciona servicios de Internet a:

Ávila:

- Campus Ávila.
- Universidad Católica de Ávila.

Béjar: Campus de Béjar.

Burgos:

- Universidad de Burgos.
- UI1, Universidad Isabel I de Castilla.
- HUBU, Hospital Universitario de Burgos.
- CENIEH, Centro Nacional de Investigación en la Evolución Humana.

León:

- Universidad de León.
- INCIBE, Instituto Nacional de Ciberseguridad.
- SCAYLE, Supercomputación de Castilla y León.

- Junta de Castilla y León - Escuelas conectadas.
- HULE, Hospital Universitario de León.
- Academia Básica del Aire de León.

Palencia: Campus de Palencia.

Ponferrada:

- Campus de Ponferrada.
- INTECCA - UNED.

Salamanca:

- Universidad de Salamanca.
- FPCUSAL, Fundación Parque Científico de la Universidad de Salamanca.
- CLPU, Centro Láseres Pulsados.
- Universidad Pontificia de Salamanca.

Segovia:

- Campus de Segovia.
- Academia de Artillería San Francisco.
- Academia de Artillería Polígono Baterías.

Soria:

- Campus de Soria,
- CEDER, Centro de Desarrollo de Energías Renovables.

Valladolid:

- Universidad de Valladolid.
- Junta de Castilla y León - Escuelas Conectadas.
- GRS, Gerencia Regional de Salud.
- CETETE, Centro Tecnológico de Cereales de Castilla y León.
- CIDAUT, Fundación para la investigación en Transporte y Energía.
- Fundación CARTIF.
- ITACYL, Instituto Tecnológico de Castilla y León.
- Academia de Caballería General Shelly.
- Academia de Caballería Teniente Galiana.

Zamora: Campus de Zamora.



Entidades que cursan tráfico en RedCAYLE.



Unión Europea
Fondo Europeo de
Desarrollo Regional
"Una manera de hacer Europa"



Referencia 14-3R-C001

Equipamiento

Equipamiento Óptico

El equipamiento óptico opera sobre la huella de fibra óptica de RedCAYLE, con cobertura regional de más de 1.400 km de fibra óptica que cumplen la normativa ITU G.652.D.

Estos enlaces de fibra óptica se iluminan y gestionan con una planta de equipos de transmisión óptica formada por los siguientes equipos:

- 9 NODOS ADVA TROADM : combina la transmisión DWDM con la flexibilidad de terminar los servicios de forma reconfigurable, soportando múltiples tipos de servicios.
- 9 NODOS ILA de ADVA. Los ILA son los puntos de amplificación intermedia son requeridos en los tramos que superan los 90Km.

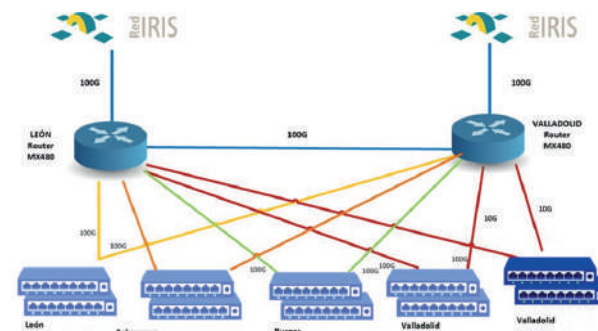


Distribución geográfica de los Nodos Ópticos. Fuente: Área Técnica SCAYLE. © SCAYLE.

Equipamiento IP

El equipamiento IP en RedCAYLE proporciona el acceso a Internet y en concreto la interconexión con la Red Nacional RedIRIS. Este escenario se compone de los siguientes equipamientos de Red:

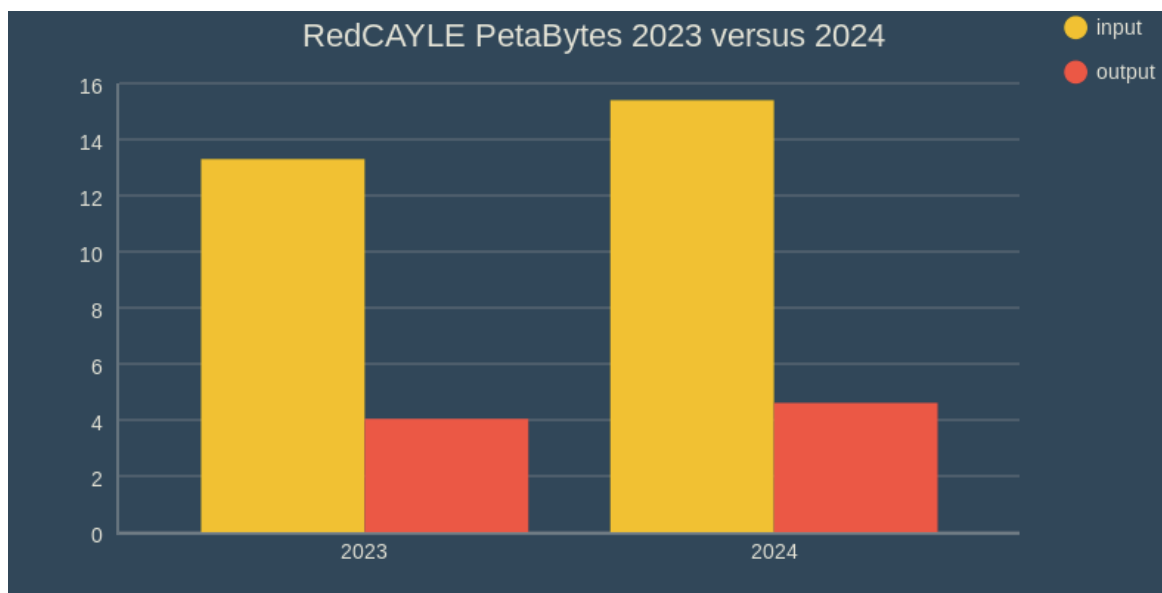
- 2 Routers ubicados en León y Valladolid que proporcionan la salida a Internet en alta disponibilidad.
- 8 parejas de Switches que agregan a todos los clientes de las distintas ubicaciones restantes.



Infraestructura IP en RedCAYLE 1. Fuente: Área Técnica SCAYLE. © SCAYLE.

Consumo de tráfico actual

La evolución del tráfico entrante y saliente en los últimos dos años es la que se muestra en el siguiente gráfico, siguiendo una línea ascendente en la demanda de tráfico:

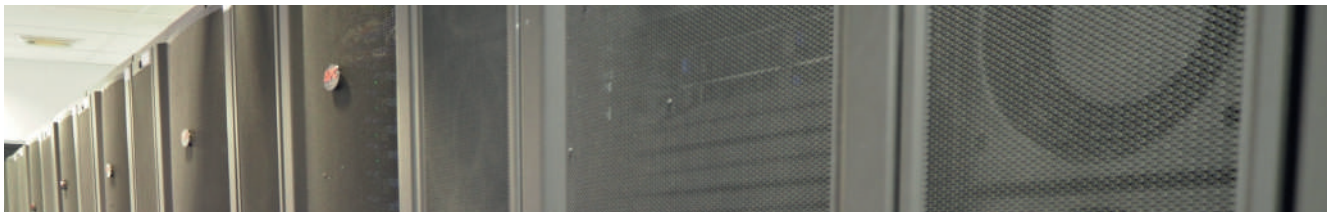


Tráfico acumulado en RedCAYLE en los últimos años. Fuente: Área Técnica SCAYLE. © SCAYLE.

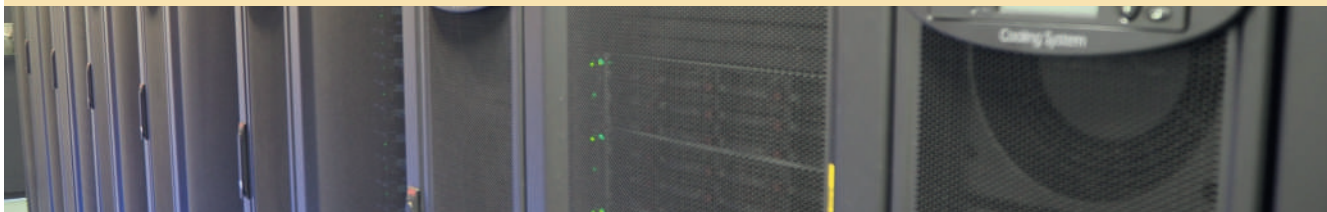
Actualización Tecnológica

RedCAYLE llevó a cabo a finales del 2023 una renovación tecnológica a través de Contrato SCAYLE 04-2022 de Suministro de Equipamiento Óptico con un precio de adjudicación de 2.572.140 €.

A principios de 2024 se llevó a cabo la ejecución técnica de los equipos IP de RedCAYLE, asociada a Licitación específica SDA 24/2022 con un precio de adjudicación de 1.070.668,7€ . Con esta adquisición se migraron todos los SWITCHES de agregación de clientes a una gama superior con soporte 100G. También se reemplazaron las controladoras de los Routers de León y Valladolid para un mayor rendimiento de los mismos y se añadieron tarjetas con soporte para puertos 100G.



Beneficiarios



CIBERIA, Digitalización y resiliencia transfronteriza mediante el fomento de una zona CENCYL

Objetivo del proyecto

El objetivo es facilitar la transición digital de las empresas y organizaciones de administración pública ofreciendo un espacio transfronterizo ciberseguro y ciberresiliente. Este objetivo se articulará en 4 pilares fundamentales: diagnóstico del estado actual, capacitación de las organizaciones, asesoramiento en ciberseguridad, y validación de soluciones digitales ciberseguras. La promoción de la economía digital cibersegura y ciberresiliente a través del proyecto CIBERIA permitirá el dinamismo de la región CENCYL creando nuevas oportunidades de empleo y nuevos modelos de negocio capaces de atraer personas y riqueza.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de Salamanca, www.usal.es

Comunidade Intermunicipal das Beiras e Serra da Estrela - CIMBSE, <https://cimbse.pt>

Fundación Cidaut, www.cidaut.es

Fundación Instituto Internacional de Investigación en Inteligencia Artificial y Ciencias de la Computación - AIR Institute, <https://air-institute.com>

Fundación Parque Científico Universidad de Salamanca, <https://pcs.usal.es>

Instituto Politécnico da Guarda, <https://politecnicoguarda.pt>

Supercomputación Castilla y León - SCAYLE, www.scayle.es

Secure Networks, Consultadora Informática, www.securenetworks.pt/

Universidade da Beira Interior - UBI, www.ubi.pt

Universidad de León, www.unileon.es

Ejecución: 2023 a 2026.

Financiación del proyecto

FEDER en el marco del programa Interreg VI A España Portugal POCTEP 2021 2027.

Funciones de SCAYLE

Auditorías en ciberseguridad a organismos de administración pública y PYMES. Mapeo de necesidades existentes en términos de ciberseguridad. Apoyo a organismos de administración pública y PYMES en el cumplimiento del Reglamento (UE) 2019/881. Jornadas científico-técnicas en torno a la ciberseguridad. Cursos de formación en ciberseguridad y recualificación de activos para organismos de administración pública y PYMES. Security awareness: Podcasts y píldoras breves en ciberseguridad para sensibilización y concienciación de ciudadanos. Guía de buenas prácticas dirigida a organismos de administración pública local y PYMES. Acciones de capacitación para la adquisición y uso de sistemas y equipamiento de ciberseguridad. Asesoramiento en la contratación y adquisición de servicios de ciberseguridad.

Interreg 
Espana - Portugal
Referencia 0192_CIBERIA_3_E

 **CIBERIA**

CINDIRELLA, Cifrado y Notario Digital Resistentes a Los Ataques cuánticos y soporte QKD

Objetivo del proyecto

Los objetivos del proyecto son el establecimiento de un centro de distribución cuántica de claves sobre fibra óptica y el desarrollo de un sistema criptográfico en cloud sustentado en servicios de computación de altas prestaciones, resistente a ataques con computadores cuánticos.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2026.

Financiación del proyecto

INCIBE y la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial mediante fondos PRTR.

Funciones de SCAYLE

Ejecutar el proyecto en su totalidad.



Referencia CPP002/22- R02_CINDIRELLAQKD



HOT, Plataforma de orquestación de Honeynets

Objetivo del proyecto

La plataforma de despliegue y monitorización de honeynets pretende abordar la problemática asociada con la gestión de redes de señuelos honeynets desde su despliegue y configuración hasta su seguimiento en entornos de producción.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2026.

Financiación del proyecto

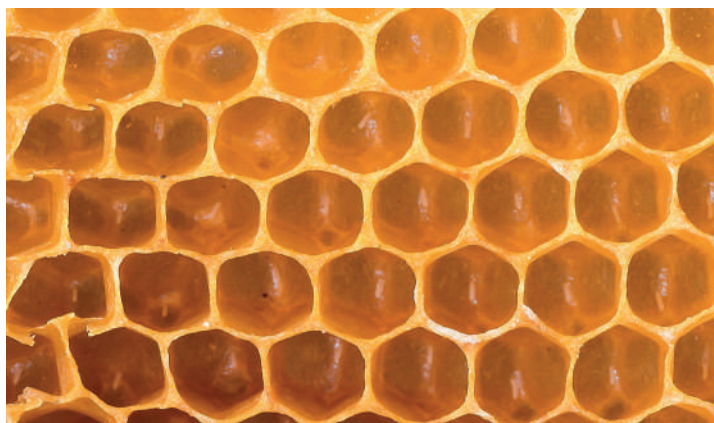
INCIBE y la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial mediante fondos PRTR.

Funciones de SCAYLE

Ejecutar el proyecto en su totalidad.



Referencia CPP002/22- R13_HOT



Honeynets.

DIGIS3, Digitalización Inteligente, Sostenible y coheSiva

Objetivo del proyecto

El objetivo general es asegurar la transformación digital inteligente, sostenible y cohesiva de las pymes y de las entidades de la Administración Pública de la región con un alcance territorial urbano y rural enfocado en la cohesión, a través del acompañamiento integral a los usuarios, facilitando su acceso a conocimiento técnico especializado y a entornos de experimentación, en un servicio de ventanilla única cuyo núcleo central de conocimiento y capacitación se vertebrará en torno a la Inteligencia Artificial y la supercomputación, teniendo presente la ciberseguridad como capa necesaria en cualquier proceso de digitalización.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Air-Institute, <https://air-institute.com>

Instituto de Competitividad Empresarial de Castilla y León (ICE), <https://portalclienteade.jcyl.es/adpc>

DIHBU, Centro de Innovación Digital experto en Industria 4.0, www.dihbu40.es

DIH-LEAF, Centro de Innovación Digital, www.dih-leaf.eu

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

Universidad de León, www.unileon.es

Ejecución: 2022 a 2025.

Financiación del proyecto

Unión Europea (PRTR) y el Ministerio de Industria, Comercio y Turismo y la Fundación EOI.



Referencia 101083898

Funciones de SCAYLE

SCAYLE desempeña varias funciones clave para apoyar la digitalización inteligente y sostenible de las PYMEs y organismos públicos en Castilla y León:

- Formaciones avanzadas en HPC (Computación de Alto Rendimiento) y básicas, para que las empresas puedan adquirir las habilidades necesarias para aprovechar al máximo las tecnologías digitales.
- Servicios de "test before invest" (pruebas antes de invertir), poniendo el conocimiento de técnicos expertos a disposición de las empresas tanto en la nube como en HPC. Esto permite a las empresas evaluar el potencial de estas tecnologías antes de realizar una inversión significativa.
- Servicios para la búsqueda de financiación, brindando orientación básica a las PYMEs sobre las líneas de financiamiento del CDTI como miembros de la Red PIDi (Red de Puntos de Información sobre I+D+i) y ofreciendo asesoramiento especializado en procesos de Compra Pública de Innovación (CPI).

EuroCC2, Centro Nacional de Competencia

Objetivo del proyecto

Cuyo principal objetivo es la prestación de servicios de Supercomputación, Big Data e Inteligencia Artificial adaptados a las necesidades de la industria (especialmente pymes), el mundo académico y la administración pública. Tratando con ello, de cerrar las brechas existentes en habilidades y conocimientos de HPC mediante la promoción de la cooperación y la adopción de HPC en Europa.

Tras EuroCC, en el que se creó un Centro Nacional de Competencias (NCC), en su continuación, EuroCC2 mantienen sus objetivos de impulsar el conocimiento en el campo de la computación de alto rendimiento (HPC) en Europa y así promover las oportunidades asociadas a su empleo.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: BSC-CNS, Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación, www.bsc.es

BIFI, Instituto de Biocomputación y Sistemas Complejos, <https://bifi.es/biophysics/>

CESGA, Centro de Supercomputación de Galicia, www.cesga.es

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

UC, Universidad de Cantabria, www.unican.es

Financiación del proyecto

European High Performance Computing Joint Undertaking.

Ejecución: 2022 a 2025.

Funciones de SCAYLE

El objetivo de SCAYLE 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.



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

Universidad de Valladolid, www.uva.es

Universidad de Burgos, www.ubu.es

Universidad de Salamanca, 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.



universidad
de León



Junta de
Castilla y León



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

CESGA, Centro de Supercomputación de Galicia, www.cesga.es

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

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.



Quantum
SPAIN

España | digital



VICPRESIDENCIA
PRIMERA DEL GOBIERNO
MINISTERIO
DE ASUNTOS ECONÓMICOS
Y TRANSFORMACIÓN DIGITAL

SECRETARÍA DE ESTADO
DE DIGITALIZACIÓN E
INTELIGENCIA ARTIFICIAL



Plan de Recuperación,
Transformación
y Resiliencia



Financiado por
la Unión Europea
NextGenerationEU





Colaborador



Sistema integral de **predicción meteorológica** para la **gestión de incendios forestales**: simulación numérica, sensores remotos e inteligencia artificial

Objetivo del proyecto

Los objetivos generales (O) de este proyecto son:

- (O1) Proporcionar herramientas que permitan abordar de forma multidisciplinar la prevención, seguimiento y extinción de incendios forestales.
- (O2) Reducir el impacto socioeconómico y ambiental de los incendios forestales.
- (O3) Preservar los recursos forestales y la biodiversidad, esenciales para la captación de carbono.
- (O4) Mejorar la eficiencia en el desarrollo de productos y servicios relacionados con la información meteorológica necesaria para dar soporte a la gestión de incendios forestales.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupo de Física de la Atmósfera de la Universidad de León, www.unileon.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2024 a 2028.

Funciones de SCAYLE

Se realiza soporte de HPC para simulaciones de modelos atmosféricos de alta resolución.

Financiación del proyecto

ORDEN EDU/841/2024, de 27 de agosto, por la que se resuelve la convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación en ciencia aplicada a iniciar en el año 2024, cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional. Junta de Castilla y León.



Referencia: LE035P24



Cofinanciado por
la Unión Europea

Fuels-C, An integrated platform of novel cost and energy-efficient conversion technologies producing liquid and gaseous bioFUELS from sustainable biogenic residues validated for direct use in fuel Cells

El principal objetivo de Fuels-C es producir nuevos biocombustibles avanzados sostenibles a partir de residuos orgánicos de bajo coste y CO₂ biogénico mediante un conjunto de tecnologías de conversión optimizadas de alta eficiencia y enfoques avanzados de modelización, reduciendo así la dependencia de los combustibles fósiles en la UE. Fuels-C pretende maximizar la utilización de carbono orgánico para la producción de biocombustibles para su uso directo en pilas de combustible en aplicaciones de transporte con la máxima eficiencia de conversión utilizando energía renovable.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Acondicionamiento Tarrasense Associacion, LEITAT.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA), Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek (VITO), Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Universitat de Girona (UdG), Centro Tecnológico LEITAT), Fomento Agrícola Castellonense S.A. (FACSA), BioEnergy Resources (BER), Universidad de Burgos, MAGCIR y MAGCIRIT, ISLE Utilities, Fuel & Energy Business, Intelligence (FE-BI)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto: European Union's Horizon Europe research and innovation programme under grant agreement No 101147442.

Ejecución: 2024 a 2027.

Funciones de SCAYLE

- Modelado de procesos interfaciales relevantes dentro de las tecnologías de conversión, con el objetivo de optimizar las reacciones químicas y bioquímicas implicadas en la producción de biofuels, por medio de simulaciones de dinámica molecular clásica y de cálculos basados en la teoría de la función de densidad.
- Simulaciones del proceso integrado de conversión utilizando datos industriales reales proporcionados por otros socios del proyecto para mejorar la eficiencia de los procesos y evaluar la integración de las tecnologías en un entorno industrial, mediante técnicas de dinámica computacional de fluidos.



Fuels-C

HORIZON-CL5-2023-D3-02-07 - FUELS-C- GA 101147442

SUNRISE, Safe and Sustainable by Design: Integrated Approaches for Impact Assessment of Advanced Materials

Objetivo del proyecto

El proyecto SUNRISE desarrollará un enfoque global de evaluación integrada del impacto, basado en el concepto de ciclo de vida y diseñado para apoyar la toma de decisiones sobre seguridad y sostenibilidad desde el diseño (SSbD) a lo largo de las cadenas de suministro de materiales avanzados y sus productos. Este enfoque será de tres niveles, cada uno de los cuales corresponderá a una metodología integrada de evaluación del impacto sanitario, medioambiental, social y económico (con el apoyo de una caja de herramientas) dirigida a un grupo diferente de usuarios en distintas fases del proceso de innovación y que requerirá un nivel diferente de datos y conocimientos.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: UNIVERSITA CA' FOSCARI VENEZIA, Italia

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto: UNION EUROPEA (HORIZON-CL4-2023-RESILIENCE-01-SUNRISE-GA 101137324).

Ejecución: 2024 a 2027.

Funciones de SCAYLE

Modelización de materiales: uso de software para cálculo computacional de sistemas desde un punto de vista cuántico y desde un punto de vista clásico.



**Funded by
the European Union**

SUNRISE has received funding from the European Union's Horizon Europe Research and Innovation Programme under Grant Agreement No. 101137324.

Referencia HORIZON-CL4-2023-RESILIENCE-01-SUNRISE-GA 101137324

Scattering de solitones topológicos excitados

Objetivo del proyecto

Los solitones topológicos son soluciones tipo partícula que surgen de forma natural cuando teorías de campos de carácter no lineal son estudiadas. Juegan un papel fundamental en diversas áreas tales como en el estudio de superconductores o en el de estructuras cosmológicas complejas como las cuerdas cósmicas. Pueden ser encontrados en gran cantidad de teorías definidas tanto en una como en varias dimensiones espaciales. Entre la gran variedad de soluciones que podemos encontrar, las configuraciones tipo kink pueden aparecer cuando se analizan teorías de campo escalares definidas en $1 + 1$ dimensiones.

El objetivo principal de este proyecto se centra en el estudio de las colisiones kink/antikink cuando éstos son excitados mediante uno o más de sus modos internos, los cuales pueden ser obtenidos cuando el operador de pequeñas perturbaciones asociado es considerado. Para llevar a cabo los procesos de scattering, es necesario discretizar las ecuaciones de campo asociadas para, posteriormente, resolverlas de forma numérica y así poder estudiar los patrones de colisión y cómo estos cambian cuando incrementamos la amplitud del modo interno. Todo este trabajo permite comprender cómo la energía es redistribuida entre los modos internos y el modo traslacional. Los modelos bajo análisis usualmente dependen de un parámetro que permite cambiar el valor de la frecuencia asociada a los modos internos de vibración. Esto permite también entender cómo los patrones de colisión se modifican según los modos cambian, pudiendo incluso analizar fenómenos de colisión en valores de dicho parámetro en los cuales aparecen resonancias entre frecuencias.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de Valladolid, www.uva.es

Universidad de Salamanca, www.usal.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2024 a 2025.

Financiación del proyecto

Proyecto Q-CAYLE. Proyecto PID2020-113406GB-I001. Proyecto RED2022-134301-T.



Funciones de SCAYLE

El estudio asociado a las colisiones kink/antikink requiere de la resolución numérica de las ecuaciones de campo asociadas a la teoría, con las cuales se llevan a cabo las correspondientes simulaciones. Para realizar esta tarea, es necesario llevar a cabo un gran número de simulaciones en las cuales se han de obtener datos del número de colisiones, amplitudes de los modos internos después del proceso de scattering, velocidades del par kink/antikink, radiación emitida en el proceso etc.

Realizar dichas simulaciones en un ordenador doméstico requeriría de tiempos de computación excesivamente largos. Como consecuencia de ello y debido a la gran potencia que posee, el superordenador de SCAYLE juega un papel fundamental en esta investigación, permitiendo extraer una gran cantidad de resultados en un corto periodo de tiempo.

Diodo Gunn planar, de alta potencia y alta frecuencia basado en Nitruro de Galio (GaN)

Con el objetivo de conseguir un uso generalizado de las tecnologías de terahercios (THz), el grupo de investigación Research Group on High-Frequency Nanoelectronic Devices (<https://nanoelec.usal.es/>) viene trabajando en los últimos años en la simulación, diseño, fabricación y, posteriormente, la caracterización de un emisor de estado sólido funcionando a frecuencias en el rango de subterahercios (~ 200 GHz-300 GHz) aprovechando las propiedades del GaN dopado a través del uso de una geometría planar en el que el transporte de los portadores se realiza por canales estrechos (y con forma en V o similar) que permitan focalizar el campo eléctrico y gestionar adecuadamente el calentamiento, junto con la incorporación de un aspecto novedoso en la fabricación del dispositivo, un tercer terminal en la parte inferior del mismo (de tipo Schottky, o por medio de una estructura MOS, aislado con un dieléctrico) que permite la supresión del proceso de avalancha atribuido a mecanismos de ionización por impacto. El objetivo de este proyecto era rediseñar, redefinir y optimizar un oscilador Gunn planar de alta potencia y alta frecuencia a través de la simulación Monte Carlo utilizando los recursos de SCAYLE.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: GIR Nanodispositivos Electrónicos de Alta Frecuencia (NANOEEC) de la Universidad de Salamanca, www.usal.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Financiación del proyecto

Fundación General de la Universidad de Salamanca (PLAN TCUE 2024-2027).

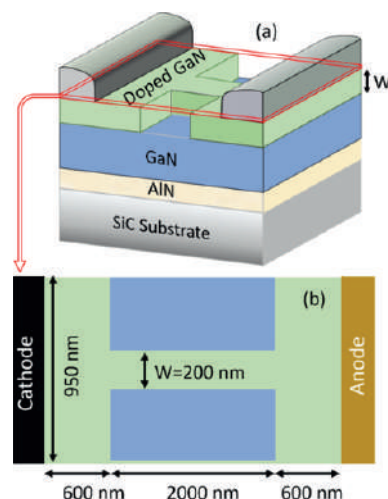
Funciones de SCAYLE

Se realizan simulaciones Monte Carlo que requieren altos recursos de computación que son proporcionados por SCAYLE a través de la subcontratación de servicios.



PC_TCUE23-24_011

Ejecución: 2024.



(a) Estructura tridimensional del dispositivo objeto de estudio. (b) Estructura 2D simulada.

EcoSpin, Aplicación del Modelo de Vidrio de Espín en la Caracterización de Ecosistemas

Objetivo del proyecto

En el marco del proyecto EuroCC, se abre la convocatoria para el acceso de empresas y administraciones públicas españolas a recursos de computación de altas prestaciones (HPC, por sus siglas en inglés). El uso de estos recursos estará destinado a la realización de actividades de I+D+i, tales como pruebas de concepto, ensayos de escalabilidad, proyectos piloto o evaluación de aplicaciones informáticas, entre otras.

De esta manera, COMPUCUANTICA S.L. pretende aprovechar la capacidad computacional de Caléndula para aplicar el modelo de vidrio de espín (MVE) en el contexto de la ecología y medioambiente. Este enfoque pretende aprovechar el potencial del MVE para configurar la dinámica, la estabilidad y la resiliencia de ecosistemas. Tanto el MVE como su analogía de sistema medioambiental poseen una complejidad (gran número de variables e interacciones, múltiples especies, relaciones de depredación, competencia, mutualismo, etc.) que necesita de una solución computacional de alto rendimiento como la que ofrece SCAYLE.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: COMPUCUANTICA S.L.

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2024.

Financiación del proyecto

El proyecto europeo EuroCC se encuentra financiado por la Empresa Conjunta Europea de Computación de Alto Rendimiento (JU) (European High-Performance Computing Joint Undertaking-EuroHPC-JU) en virtud del acuerdo de subvención n.º 951732. La JU recibe apoyo del programa de investigación e innovación Horizonte 2020 de la Unión Europea y sus países asociados.



Grant Agreement No 951 740

Funciones de SCAYLE

La utilización de Caléndula para resolver algoritmos asociados al MVE está plenamente justificada por la complejidad intrínseca de estos sistemas y los desafíos computacionales que presentan. El MVE involucra sistemas que interactúan de manera compleja y no lineal, y que poseen un gran número de grados de libertad. Explorar el espacio energético para encontrar configuraciones de equilibrio o estados de mínima energía requiere un poder computacional significativo, especialmente a medida que el tamaño del sistema aumenta.

Caléndula permitirá realizar simulaciones de alta resolución que se encuentran fuera del alcance de ejecución en equipos tradicionales, proporcionando resultados más precisos y estadísticamente significativos. A partir de su arquitectura paralela, permitirá dividir tareas computacionalmente intensas como las simulaciones Monte Carlo y permitir una exploración más rápida del espacio de estados. Esto reduce significativamente el tiempo requerido para obtener resultados, haciéndolos viables en plazos razonables.

WeatherMap.site, Plataforma meteorológica con modelos de alta resolución

Objetivo del proyecto

Ejecución de los modelos meteorológicos mesoescalares no hidrostáticos de alta resolución (WRF-ARW), generados por el Grupo de Física de la Atmósfera de la Universidad de León para proporcionar información contrastada a Weather Map Site, una aplicación diseñada para identificar el impacto de la meteorología en cualquier tipo de actividad profesional.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Vexiza, vexiza.com

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

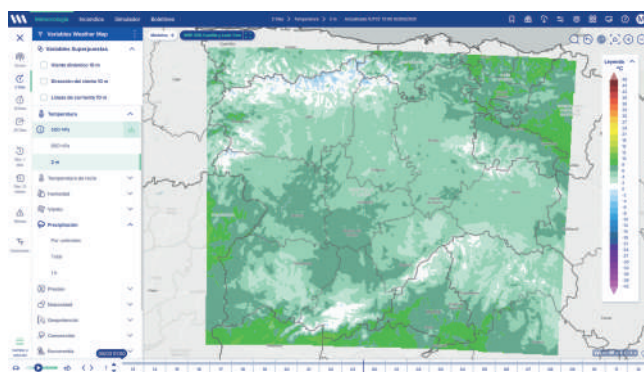
Ejecución: 2024.

Financiación del proyecto

Privada.

Funciones de SCAYLE

Aporta capacidad de cómputo para poder obtener simulaciones a nivel nacional con 3 km de resolución espacial, y en Extremadura y Castilla y León a 1 km de resolución espacial.



Simulación de alta resolución (1 km) en la que se visualiza la temperatura a 2m prevista para Cyl.



AgroMetaPond, Delineación de metacomunidades en humedales de paisajes agrícolas y ganaderos. Aplicación de herramientas moleculares para el estudio de la conectividad funcional

Objetivo del proyecto

El objetivo principal del proyecto es estudiar la organización metacomunitaria de invertebrados acuáticos y anfibios en humedales situados en paisajes agroganaderos de la Cuenca del Duero. Se aplicarán métodos moleculares para delimitar la extensión espacial de algunas de estas metacomunidades entre grupos de organismos con diferentes síndromes de dispersión (en este caso, anfibios y macroinvertebrados). A partir de estos resultados, propondremos medidas para la elaboración de políticas, la conservación y la gestión de estos ecosistemas vulnerables.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de León, www.unileon.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

Convocatoria 2022 - "Proyectos de Generación de Conocimiento".

Funciones de SCAYLE

Análisis bioinformático de secuencias para estudio de genética de poblaciones de invertebrados acuáticos y eDNA.



Referencia PID2022-140081OB-I00



Laguna en el paisaje agrario de León. Isla de biodiversidad y amortiguación de escorrentía agrícola.

ARN virus en el manejo de decaimientos forestales ocasionados por el cambio global

Objetivo del proyecto

El objetivo principal del proyecto es ampliar el conocimiento sobre la diversidad de virus ARN presentes en los ecosistemas forestales y explorar sus potenciales aplicaciones en el manejo de los decaimientos forestales relacionados con el cambio global.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de Valladolid, www.uva.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

Proyecto I+D+i, Convocatoria 2023 de apoyo a proyectos de investigación en ciencia aplicada cofinanciadas con el fondo europeo de desarrollo regional. Junta de Castilla y León - Consejería de Educación.

Programa de estrategia de investigación e innovación para una especialización inteligente (RIS3) de Castilla y León 2021-2027.

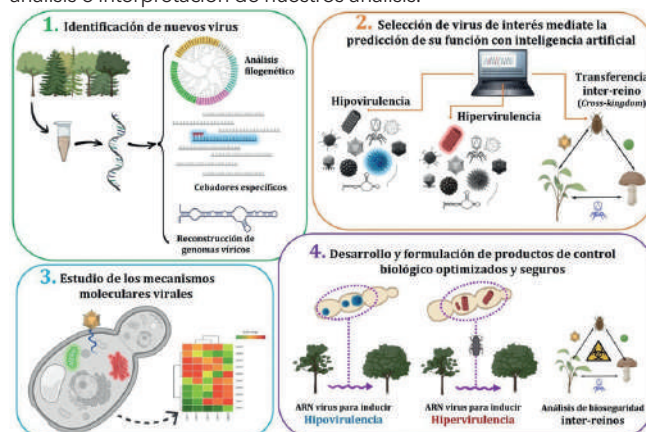
Cofinanciado por la Unión Europea.



Referencia VA178P23

Funciones de SCAYLE

El procesamiento de datos derivados de la secuenciación masiva de ARN demanda un alto rendimiento computacional. En este contexto, la supercomputadora Caléndula se convierte en una herramienta esencial para gestionar de manera rápida y eficiente los millones de secuencias genéticas generadas. Además, contar con el soporte técnico brindado por SCAYLE es de gran ayuda para un correcto análisis e interpretación de nuestros análisis.



Esquema de los procesos de obtención y análisis de nuevos virus para su uso como control biológico de decaimiento forestal.

Astrofísica de estrellas de neutrones: simulando plasma ultradenso y caliente

Objetivo del proyecto

El objetivo es el cálculo de las propiedades termodinámicas de plasmas astrofísicos ultradensos y su enfriamiento anómalo través de la simulación computacional. Esto es de interés para estudiar las propiedades de presión y densidad de energía, así como coeficientes de transporte. También es posible visualizar el ordenamiento de fases de la materia a medida que van disipando calor y enfriándose.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: GIR Astrofísica nuclear de la Universidad de León, www.unileon.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

Proyecto de la Junta SA101P24 y SA091P24 publicados en resolución por la ORDEN EDU/841/2024, de 27 de agosto, por la que se resuelve la convocatoria de subvenciones del programa de apoyo a proyectos de investigación en ciencia aplicada a iniciar en el año 2024, cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional.

Proyecto PID2022-137887NB-100 financiado por Orden de 30 de diciembre de 2022 por la que se aprueba la convocatoria 2022 de ayudas a «Proyectos de Generación de Conocimiento» y a actuaciones para la formación de personal investigador predoctoral asociadas a dichos proyectos.



Referencia PID2022-137887NB-100

Funciones de SCAYLE

Los recursos de SCAYLE han permitido acceso a máquinas con un número de hilos de computación medio-alto y así poder simular sistemas con números de partículas muy alto. Esto es necesario para poder estudiar las propiedades de sistemas realistas físicos.

De este modo, se consigue reducir el tiempo de ejecución respecto a otros sistemas computacionales tradicionales y no eficientes.

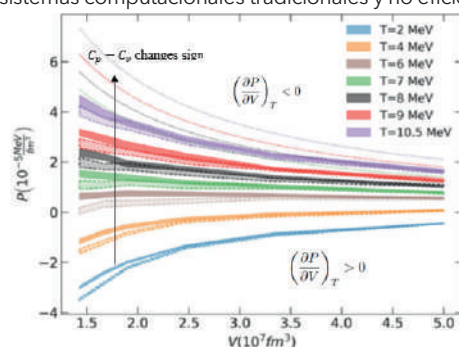


Figura tomada del artículo Barba-González, Albertus and Pérez-García, MNRAS 528, 3498-3508 (2024) donde se muestra presión frente a volumen a diferentes temperaturas para las muestras de plasma simuladas en la colectividad NVT. La relación de Mayer, $C_p - C_v$ cambia de signo a medida que el sistema ultradenso sufre un cambio de fase de líquido a gas.

NADESforNATURE, Design and Validation of Natural Deep Eutectic Solvents as a safety and sustainable alternative to classical solvent for extraction of target vegetable molecules and reformulation of natural bioactive products

Objetivo del proyecto

El objetivo del proyecto NADESforNATURE es el desarrollo de disolventes eutécticos profundos a partir de productos naturales (NATural Deep Eutectic Solvents) destinados a la extracción de múltiples biocompuestos de interés de fuentes vegetales, empleando técnicas computacionales y experimentales para su diseño, testeo y ajuste, y el apoyo de una PyME externa (Soria Natural S.A) a nivel de suministros y orientación en el campo. Por un lado, se busca el diseño de mezclas eutécticas capaces de extraer biocompuestos de especial interés en nutrición, medicina y farmacología; por otro, se busca conocer la idoneidad de los propios compuestos naturales como componentes de los NADES, a fin de aumentar su aprovechamiento y carácter renovable. Diversas técnicas computacionales permitirán probar numerosas combinaciones de componentes y evaluar tanto el rol de componente del DES como en el de especie a extraer; los esfuerzos experimentales se enfocarán en la preparación y caracterización de los DES más prometedores, comprobando no sólo su carácter extractivo sino también su impacto medioambiental y riesgos toxicológicos, así como su potencial escalado a un nivel más industrial.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: UBU-ICRAM: ICCRAM (International Research Center in Critical Raw Materials for Advanced Industrial Technologies)

Soria Natural S. A. www.sorianatural.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto: Convocatoria 2009/00005/002/131 CONVOCATORIA PARA LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL INVESTIGADOR POSTDOCTORAL

ADSCRITO AL PROYECTO "Design and Validation of Natural Deep Eutectic Solvents as a safety and sustainable alternative to classical solvent for extraction of target vegetable molecules and reformulation of natural bioactive products (NADESforNATURE)".

Funciones de SCAYLE

Modelización y predicción de propiedades de NADES, fundamentalmente con métodos de elevada demanda computacional como dinámica molecular o modelizado cuántico a gran escala.



Referencia BU047P23

SAFARI, Safe and sustainable by design GRAPHENE/MXENES HYBRIDS

Objetivo del proyecto

El proyecto SAFARI tiene como objetivo desarrollar nuevos materiales 2D mediante procesos sostenibles y seguros. El proyecto se centra en la creación de formulaciones híbridas de MXenos y grafeno (Gr), que se sabe que poseen propiedades únicas y deseables, como la estabilidad térmica y la conductividad eléctrica. El objetivo del proyecto es desarrollar materiales sostenibles y seguros que puedan utilizarse en una amplia gama de aplicaciones como biosensores, tinta conductora y blindaje de interferencias electromagnéticas (EMI). El proyecto SAFARI comienza con la preparación de compuestos precursores conocidos como fases MAX. Luego, estos compuestos se utilizan para producir dos tipos de MXenos (Ti3C2 y Cr2C) que se funcionalizan aún más para mejorar sus propiedades y aumentar su afinidad con el grafeno. Los materiales híbridos 2D resultantes se crean utilizando dos métodos diferentes y se examinan minuciosamente sus propiedades estructurales, morfológicas y funcionales. Una de las principales fortalezas del proyecto SAFARI es que está alineado con los principios de seguridad y sostenibilidad desde el diseño (SSbD). Por tanto, se llevará a cabo una evaluación de los perfiles toxicológicos y ecotoxicológicos de los nuevos materiales mediante una serie de pruebas y ensayos. En conclusión, el proyecto SAFARI representa un importante paso adelante en el desarrollo de híbridos 2D con MXenos/Grafeno para su uso en una amplia gama de aplicaciones.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Poznanski Instytut Technologiczny

SIEC BADAWCZA ŁUKASIEWICZ - POZNANSKI INSTYTUT TECHNOLOGICZNY (PIT), Polonia; CREATIVE NANO PC (CNANO), Grecia; UNIVERSIDAD DE BURGOS (UBU), España; INSTITUTO TECNOLÓGICO DEL EMBALAJE, TRANSPORTE Y LOGÍSTICA (ITENE), España; INSTITUTO DE SOLDADURA E QUALIDADE (ISQ), Portugal; ASOCIACION DE INVESTIGACION METALURGICA DEL NOROESTE (AIMEN), España; TEKNOLOGISK INSTITUT (DTI), Dinamarca; ISRAEL AEROSPACE INDUSTRIES LTD. (IAI), Israel; THINKWORKS BV (TW), Países Bajos; AXIA INNOVATION GmbH (AXIA), Alemania; METROHM DROPSSENS SL (METRO), España.

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León., www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto: HORIZON-CL4-2023-DIGITAL-EMERGING-01-32 - Sustainable safe-by-design 2D materials technology (RIA).

Funciones de SCAYLE

Modelización y predicción de propiedades de MXenos y materiales híbridos, cálculos que a menudo requieren considerable potencia de cálculo y memoria debido a su complejidad.



Referencia 101135965

WhyNotDry, Toward consolidation of germplasm and cell reversible drying through knowledge transfer

Objetivo del proyecto

El impacto ambiental de los métodos convencionales de biobanco es innegable. La congelación en nitrógeno líquido (NL) supone un alto costo, tanto económico como ecológico, ya que requiere instalaciones especializadas y contribuye significativamente a la huella de CO2. Con el apoyo de las Acciones MSC, el proyecto WhyNotDry busca revolucionar el biobanco mediante la exploración del secado reversible en células y germoplasma, con el objetivo de sustituir la congelación en NL por una alternativa innovadora, rentable y respetuosa con el medio ambiente. Este proyecto multidisciplinario involucra una red internacional de científicos comprometidos con desbloquear el potencial del biobanco en seco para un futuro sostenible en las ciencias de la vida. La iniciativa no solo transforma los métodos de preservación, sino que también fomenta la colaboración interdisciplinaria, prometiendo un cambio de paradigma 'verde' en la comunidad científica.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Università Degli Studi di Teramo (Italia), www.unite.it/UniTE/

Biotalentum Tudasfejlesztő KFT (Hungría)

AVANTEA SRL (Italia)

Universidad de Burgos, www.ubu.es

Chulalongkorn University (Tailandia)

National Agriculture and Food Research Organization (Japón).

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León., www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2027.

Financiación del proyecto

UNION EUROPEA (HORIZON-TMA-MSCA-SE - WHYNOTDRY- GA 101131087). Funciones de SCAYLE

Modelización de materiales: uso de software para cálculo computacional de sistemas desde un punto de vista cuántico y desde un punto de vista clásico.

Funciones de SCAYLE

El procesamiento de datos derivados de la secuenciación masiva de ARN demanda un alto rendimiento computacional. En este contexto, la supercomputadora Caléndula se convierte en una herramienta esencial para gestionar de manera rápida y eficiente los millones de secuencias genéticas generadas. Además, contar con el soporte técnico brindado por SCAYLE es de gran ayuda para un correcto análisis e interpretación de nuestros análisis.



Referencia: Grant agreement ID: 101131087

Astrofísica de estrellas de neutrones en la era multimensajero

Objetivo del proyecto

El objetivo es el cálculo de las propiedades termodinámicas de sistemas de iones en materia ultradensa a través de la simulación computacional. Usando grandes números de partículas se calculan las fases gas-líquido-sólido a medida que se enfría la corteza de las estrellas de neutrones.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupo de Astrofísica Nuclear de la Universidad de Salamanca, www.usal.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2026.

Financiación del proyecto

Concesión de ayudas públicas del Programa Estatal de Generación de Conocimiento y Fortalecimiento Científico y Tecnológico del Sistema de I+D+i y del Programa Estatal 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.

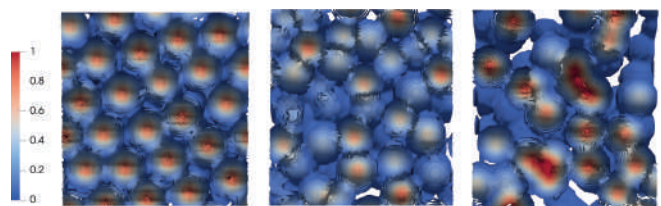


Referencia PID2022-137887NB-I00

Funciones de SCAYLE

Tener máquinas con un número de hilos de computación medio-alto es muy útil para reducir el tiempo de ejecución. Es ahí donde SCAYLE ha sido útil para la investigación.

Los recursos de SCAYLE se han utilizado para dos estudios publicados en revistas científicas, sobre corteza cristalizada de estrellas de neutrones y sobre propiedades termodinámicas y cambios de fase de corteza de proto-estrellas de neutrones y material caliente de supernovas.



Isosuperficies de densidad para un plasma con un solo componente que interactúa con una interacción Coulombiana apantallada, para densidades e ión característicos de la frontera entre corteza interior y exterior de una estrella de neutrones. De izquierda a derecha, se muestran la fase cristalizada, en estado sólido y ordenado correspondiente a una temperatura $T = 0.122$ MeV; la fase líquida en la que el orden previo se ha perdido, con temperatura $T = 0.25$ MeV y, por último; la fase gaseosa en la que el desorden es claro, y regiones más grandes de alta y baja densidad están presentes en la muestra debido a superposición de los iones.

MICROPHYSICS-S, A new microphysics of precipitation for numerical weather and climate models. Solid Phase

Objetivo del proyecto

- *Proporcionar una mejora sustancial en la predicción de precipitaciones mediante una nueva parametrización que integre observaciones específicas de la física de las nubes.*
- *Mejorar la representación de los procesos microfísicos de precipitación en los modelos, lo que contribuirá a disminuir la incertidumbre en la predicción de eventos climáticos adversos.*
- *Mejorar una de las herramientas básicas para la toma de decisiones en agricultura, energías renovables y transporte, como los Pronósticos Numéricos del Tiempo (NWP), los Modelos Climáticos Globales (GCMs) y los Modelos del Sistema Terrestre (ESMs).*
- *Contribuir al desarrollo de proyecciones climáticas en España mediante una mejora clave para los modelos climáticos.*

Objetivos específicos del proyecto:

- *Procesar los datos obtenidos en campañas experimentales realizadas en el marco de diferentes proyectos de ULE.*
- *Estudiar y modelar los procesos microfísicos en fase sólida, incorporando datos empíricos obtenidos de observaciones.*
- *Programación de los nuevos códigos e implementación en modelos numéricos meteorológicos y climáticos.*
- *Validar el rendimiento de la nueva microfísica una vez aplicada a modelos meteorológicos para la predicción de eventos adversos..*

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupo de Física de la Atmósfera de la Universidad de León, www.unileon.es

Universidad de Castilla-La Mancha, www.uclm.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2026.



Referencia PID2022-138298OB-C21

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

Ejecución de modelos de predicción numérica meteorológica y modelos numéricos del clima.

Convert2Green, Converting Facilities Network for Accelerating Uptake of Climate Neutral Materials in Innovative Products

Objetivo del proyecto

El objetivo es establecer un Open Innovation Test Bed (OITB) que permita a los proveedores de materiales integrar soluciones innovadoras, circulares y climáticamente neutrales en las principales cadenas de valor europeas, incluyendo Vehículos Autónomos Limpios, Salud Inteligente, Internet Industrial de las Cosas, Industria de Bajo Carbono y Energía Limpia.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: National Technical University of Athens (NTUA), Grecia, www.ntua.gr/en/

Fraunhofer Gesellschaft zur Förderung der angewandten Wissenschaften e.V. (FHG), Alemania, www.fraunhofer.de. Technical Research Center of Finland (VTT), Finlandia, www.vttresearch.com/en. International Iberian Nanotechnology Laboratory (INL), Portugal, <https://inl.int/>. Textilforschungsinstitut Thüringen-Vogtland e.V. (TITV), Alemania, www.titv-greiz.de/de/. University of Burgos – Institute for Critical Raw Materials (ICCRAM), España, www.ubu.es/iccram. DIGNITY, Grecia. STAM Engineering, Italia, <https://www.stamtech.com/>. KETMarket GmbH, Alemania, <https://ketmarket.eu/de/>. Amires Business Innovation Management Institute z.ú. (ABIMI), República Checa, www.amires.eu/privacy-policy-abimi/. Inlecom Commercial Pathways (ICP), Irlanda, <https://inlecom.ie/>. Fiat Research Center (CRF), Italia. Biokeralty Research Institute AIE (BIO), España, <https://biokeralty.com/en/biokeralty-about-us/>. NetCompany Intrasoft (INTRA), Luxemburgo, <https://www.netcompany-intrasoft.com/>. EnfuCell Oy (ENFU), Finlandia, <https://materially.es/manufacturers/enfu/>. Stryker Trauma (SYK), Alemania, www.stryker.com. Polivouga (POLI), Portugal, www.polivouga.pt/es/

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2025.

Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto: European Union's Horizon Europe research and innovation programme under grant agreement No 101092347.

Funciones de SCAYLE

- Realización de simulaciones complejas de impacto ambiental (LCA), análisis de procesos y optimización de manufactura, así como la gestión eficiente de grandes volúmenes de datos.
- Puesta en marcha de simulaciones multi-escala para el diseño de materiales sostenibles y seguros. En el caso del caso piloto DES4PROT las instalaciones de Caléndula se utilizarán para investigar las interacciones entre proteínas de soja y disolventes naturales eutécticos mediante simulaciones de dinámica molecular clásica y cálculos de mecánica cuántica.



Referencia HORIZON-CL4-2022-RESILIENCE-01-Convert2green-GA 101092347

MACS.2, Investigación en tecnologías del ámbito de la Movilidad, Autónoma, Conectada, Segura y Sostenible

Objetivo del proyecto

Investigar y desarrollar tecnologías vinculadas con la Movilidad Autónoma; considerando la Infraestructura, la Seguridad y la Sostenibilidad, de forma integrada, contribuyendo así a la consecución de los objetivos de movilidad marcados por Europa, orientados tanto a las nuevas soluciones en vehículos como a la infraestructura. En particular, el eje 2 (SEGURIDAD) aborda la investigación y desarrollo de nuevos sistemas avanzados de ayuda a la conducción (ADAS) con parámetros que cambian radicalmente frente a los utilizados en vehículos convencionales, así como estudio de parámetros físicos y de diseño en el material rodante, y estudio de nuevos escenarios de movilidad, definiendo nuevos protocolos de ensayo adecuados a la nueva casuística.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Cidaut, Fundación para la Investigación y Desarrollo en Transporte y Energía, www.cidaut.e

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2023 a 2024.

Financiación del proyecto

Proyecto financiado por ICECyL.

Funciones de SCAYLE

El uso de Caléndula ha permitido desarrollar algoritmos basados en IA más robustos, que respondan de manera adecuada a datos más variados. Para este proyecto, y utilizando los nodos del supercomputador con tarjetas gráficas Nvidia H100 de alto

rendimiento, hemos podido entrenar modelos de IA que restauran imágenes con baja iluminación (por ejemplo, escenarios de noche) y que presentan degradaciones como ruido y "blur" (desenfoque por movimiento). El uso de varios nodos en el momento previo a la entrega de los trabajos científicos en los que recogimos estas investigaciones, permitió asegurarnos de que los resultados que presentábamos eran los mejores que podíamos proponer, y que la arquitectura neuronal de los algoritmos es apropiada para estas tareas.



Pie de foto: Investigación de herramientas de procesamiento de imagen con inteligencia artificial aplicadas a la movilidad con sistemas de transporte inteligente y/o robotizado.

Solitones topológicos excitados: estudio de su estructura interna y emisión de radiación

Objetivo del proyecto

Entre los objetivos de este proyecto se encuentran el estudio de la dinámica asociada a solitones topológicos que surgen de la resolución de ecuaciones en derivadas parciales no lineales, consiste en un análisis tanto teórico como numérico de la fenomenología asociada a la excitación de estos solitones mediante uno o más de sus modos internos. La dinámica asociada a este tipo de fenómenos es de gran complejidad debido a la no linealidad que el sistema posee, lo cual usualmente dificulta la obtención de resultados analíticos. El objetivo principal se centra en el estudio de teorías de campos de dos componentes y en dos dimensiones espaciales. Dichos modelos usualmente poseen un parámetro que, al variarse, modifican la estructura interna del solitón bajo estudio. Estas excitaciones conllevan emisión de radiación, cuya amplitud, frecuencia, y número de onda dependen del parámetro anteriormente mencionado. Entre los posibles fenómenos que pueden darse existe también la posibilidad de que la radiación emitida por el sistema sea prácticamente despreciable, lo cual abre la puerta a que la excitación localizada cerca del centro del solitón pueda vivir por tiempos indefinidamente largos. Todos los resultados analíticos que se obtengan se respaldarán mediante el uso de los datos extraídos de las simulaciones numéricas.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupos de Física Matemática de la Universidad de Valladolid, www.uva.es y Salamanca, www.usal.es

Instituto Universitario de Física Fundamental y Matemáticas de la Universidad de Salamanca, <https://iuffym.usal.es/>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Financiación del proyecto

Proyecto QCAYLE.

Proyecto PID2020-113406GB-I001.

Proyecto RED2022-134301-T.

Proyecto PRTRC17.I1.



Financiado por la
Unión Europea
NextGenerationEU



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN



Plan de Recuperación,
Transformación
y Resiliencia



Junta de
Castilla y León

Ejecución: 2023 a 2024.

Funciones de SCAYLE

El estudio de la dinámica de solitones involucra la resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales no lineales. Para llevar a cabo esta tarea es necesario diseñar algoritmos que requieren un alto coste computacional. Los modelos de teorías de campos que se estudian usualmente dependen de un parámetro, lo cual implica que, para llevar a cabo un estudio completo de la emisión de radiación por parte de un solitón excitado es necesario lanzar miles de simulaciones. SCAYLE posee la potencia que permite que estas simulaciones puedan ejecutarse en un tiempo de cómputo mucho más reducido.

ATiLA (AddiTive ImpLAnts) Estudio y desarrollo de un proceso de fabricación aditiva de alta protección basado en la deposición directa de metal por hilo mediante multi laser (LWMD) para el procesamiento de materiales de alta reactividad. Aplicación a implantes en Ti64-ELI

Objetivo del proyecto

El objetivo principal del proyecto es el desarrollo de un proceso de fabricación aditiva basado en la deposición de metal por hilo láser (LWMD) para el procesamiento de materiales altamente reactivos para la fabricación de piezas de alto requerimiento como implantes personalizados en Ti64 ELI. ATiLA partirá de los fundamentos de la fabricación aditiva por láser con alambre (WLAM) o deposición de metales por láser con alambre (LWMD) y, mediante la modelización intensiva del proceso y la simulación de la interacción del láser con el metal y los cambios microestructurales que se producen, definirá un conjunto de especificaciones de proceso que conducirán al desarrollo de un prototipo apto para producir piezas en la estricta aleación Ti64-ELI para aplicaciones en el sector sanitario.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de Salamanca, www.usal.es

AIDIMME, Instituto Tecnológico Metalmecánico, www.aidimme.es

FIHGUV, Fundación de Investigación del Hospital General, <https://fihgu.general-valencia.san.gva.es>

Meltio, <https://meltio3d.com>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2022 a 2025.

Financiación del proyecto

Proyectos en Líneas Estratégicas del plan estatal de investigación científica, técnica y de innovación 2021- 2023. Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

La Universidad de Salamanca no cuenta con los recursos suficientes para abarcar las simulaciones metafísicas que se requieren. Se necesita simular procesos complejos con transitorios y no linealidades. Los procesos de simulación abordados se basan en 3 aspectos: simulación numérica de la transferencia de calor del hilo fundido y de la distribución espacial de las Tª durante el procesos de impresión 3D, simulación con dinámica de flujo de fusión en LWMD y simulación de la contracción, las tensiones residuales y las potenciales deformaciones de las piezas impresas en 3D.



Referencia TED2021-131705B-C21

Design and synthesis of bio-based polymers from sugar-derived monomers

Objetivo del proyecto

Se definen como objetivos:

- Formar nuevos investigadores en las líneas de investigación del GIR y establecer colaboraciones científicas con otros grupos de investigación nacionales e internacionales.
- Desarrollar nuevas metodologías sintéticas en Química Orgánica y estudiar los mecanismos de reacción mediante métodos computacionales.
- Aplicar estos métodos sintéticos a la construcción estereoselectiva de sistemas cíclicos de diferente tamaño y estructura. Diseñar nuevas rutas de síntesis estereoselectiva de productos de interés biológico.

El estudio y comprensión de los mecanismos en la ciclación estereoselectiva permitirá establecer rutas sintéticas de compuestos con potencial aplicación farmacológica. Dicha ciclación facilitará enormemente poder sintetizar estructuras que ya están presentes en la naturaleza y presentan una potente actividad biológica con amplio espectro de aplicación en enfermedades. Obtener y sintetizar de modo eficiente estas estructuras quirales (sin tener que extraerlas de organismos presentes en la naturaleza) permitirá un abaratamiento significativo en los costes para desarrollar futuros fármacos.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: GIR (Síntesis Estereoselectiva con Compuestos Organometálicos del Grupo IV) de la Universidad de Valladolid, www.uva.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2022 a 2024.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e innovación.

Funciones de SCAYLE

El software libre instalado en SCAYLE: ORCA, Quantum ESPRESSO y SIESTA, son herramientas computacionales aptas para los fines del proyecto.



Referencia TED2021-131705B-C21

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

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, 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.



RETAIN, Manejo integrado del decaimiento del aliso en ecosistemas de ribera en España

Objetivo del proyecto

El objetivo principal del proyecto es identificar y caracterizar los patógenos causantes del decaimiento del aliso en España y evaluar e investigar el desarrollo de nuevas técnicas respetuosas con el medio ambiente para el control de la enfermedad.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de Valladolid, www.uva.es

Universidad de Alcalá de Henares, www.uah.es

Universidad de Extremadura, www.unex.es

Universidad de Córdoba, www.uco.es

Universidad de la Tuscia (Viterbo, Italia), www.unitus.it

Linnaeus University (Lnu, Suecia), <https://lnu.se/en>

Instituto Nacional de Investigación y Tecnología Agraria y Alimentaria (INIA-CSIC), www.inia.es

IDForest-Biotecnología Forestal Aplicada S.L., <https://idforest.es/index.html>

Biome Makers Spain S.L., biomemakers.com

Junta de Castilla y León, www.jcyl.es

Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, www.miteco.gob.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2022 a 2024.

Financiación del proyecto

Agencia estatal de investigación, Unión Europea a través de los fondos Next Generation (NextGenerationEU/ PRTR), Plan de recuperación, transformación y resiliencia, MICINN y el Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

En este proyecto se utiliza Caléndula para los análisis de RNAseq ya que se requiere una gran capacidad computacional para el procesamiento y análisis de datos. Así mismo, se utiliza para el diseño de secuencias de ARN con el fin de comprobar que sean específicas del patógeno y que no puedan afectar a otros organismos.



Referencia TED2021-130790B-C31

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 interaccione satisfactoriamente con el rebaño.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupo de Robótica de la Universidad de León, www.unileon.es

Universidad Rey Juan Carlos, www.urjc.es

University of Eötvös Loránd (Hungría), www.elte.hu

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, 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*.



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



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

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

Ejecución: 2021 a 2025.

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 2.6×10^6 , y de simular la dinámica de estados fuera del equilibrio en espacios de Hilbert con tamaños del orden de 10^9 .



Referencia PID2020-114830GB-I00

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.unioviado.es/IUOPA/

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

Centro de Investigación Biomédica en Red de Enfermedades Raras (CIBERER-ISCIII), www.ciberer.es

Asociación Española Contra el Cáncer (AECC), www.contraelcancer.es

Universidad de Oviedo, www.uniovi.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León. 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

Desarrollo de **sistemas autoorganizados** con propiedades físicas mejoradas y polímeros para aplicaciones sostenibles en catálisis y separación de gases: **de moléculas a materiales**

Objetivo del proyecto

Uno de los principales objetivos del proyecto, es el diseño racional de nuevos materiales moleculares con comportamiento de cristal líquido.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupo de Investigación Cristales Líquidos y Nuevos Materiales, perteneciente al Instituto Universitario Centro de Innovación en Química y Materiales Avanzados (CINQUIMA) de la Universidad de Valladolid, www.uval.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2021 a 2024.

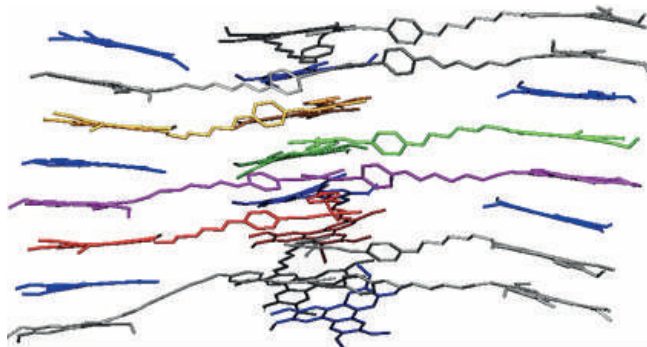
Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto. Agencia Estatal de Investigación, Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

El uso de los recursos computacionales está destinado a la caracterización a nivel molecular de nuevos materiales moleculares los cuales nos permitirán establecer relaciones estructura-propiedad, centrándonos fundamentalmente en obtener información acerca de su estructura supramolecular, y como ésta se puede utilizar para modular otras propiedades, como por ejemplo

las propiedades de absorción/emisión de luz o el transporte de carga. Todo esto se conseguirá a través de la aplicación de métodos teóricos, principalmente aquellos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) y dinámica molecular.



Modelo supramolecular de uno de los metalomesógenos de Pt estudiados.



Referencia PID2020-118547GB-I00R

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

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

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.



Referencia SA097P20

DIAGONAL, Development and scaled Implementation of sAfe by design tools and Guidelines for multicOmponent aNd hArn nanomaterials

Objetivo del proyecto

Desarrollar nuevas nanotecnologías que garanticen una seguridad a largo plazo. Utilizará la investigación tanto teórica (modelado de materiales y procesos) como experimental para entender y predecir las interacciones de los componentes de un nanomaterial y los productos obtenidos con el medio ambiente de forma que se promueva un conocimiento de los potenciales efectos adversos tanto en la salud humana como en la biota. Contribuirá a crear un espacio de confianza para las empresas, en especial las Pymes para que puedan cumplimentar los requerimientos europeos (REACH) ayudándolas a incrementar la seguridad de sus productos basados en nanomateriales a lo largo de todo el ciclo de vida. Así mismo, animará a más industrias a empezar a utilizar nanomateriales desde un enfoque que reduzca los riesgos relacionados con el negocio.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: UBU-ICCRAM: ICCRAM (International Research Center in Critical Raw Materials for Advanced Industrial Technologies), www.ubu.es/iccram

Centre National de la Recherche Scientifique, www.cnrs.fr; Instituto Tecnológico del Embalaje, Transporte y Logística (ITENE), www.itene.com; Wageningen University, www.wur.nl; Foundation for Research and Technology, Hellas (FORTH) - Institute of Chemical Engineering Sciences (ICE-HT), www.chemeng.upatras.gr; Instituto de Soldadura e Qualidade, https://portal.produtech.org; NovaMechanics Ltd, https://novamechanics.com; QSAR Lab Ltd, www.qsarlab.com; BioNanoNet Forschungsgesellschaft mbH, www.bnn.at; RINA CONSULTING, www.rina.org; Luxembourg Institute of Science and Technology, www.list.lu; Brimatech Services GmbH, www.brimatech.at; IZES gGmbH, www.izes.de; Neovili, www.neovili.com; Vireo Advisors, LLC, www.vireoadvisors.com; Phornano Holding GmbH, www.phornano.com; IRIS SRL,

www.irissrl.eu; MONOLITHOS Catalysts & Recycling, Ltd, <https://monolithos-catalysts.gr>; CREATIVE NANO PC, www.creativenano.gr; OCSiAl Europe Sarl, <https://fedil.lu>; Teknologisk Institut, www.teknologisk.dk; GRAPHENE-XT SRL, <https://platform.newskin-oitb.eu>; SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2021 a 2024.

Financiación del proyecto

H2020-H2020-NMBP-TO-IND-2020-twostage-DIAGONAL-GA-953152.

Funciones de SCAYLE

Modelización de materiales: uso de software para cálculo computacional de sistemas desde un punto de vista cuántico y desde un punto de vista clásico.



DIAGONAL project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the grant agreement N° 953152.

Referencia H2020-H2020-NMBP-TO-IND-2020-twostage-DIAGONAL

INTERDYN, Adiabatic and Non-adiabatic Reaction Dynamics and Intersystem Crossing for Biological Systems

Objetivo del proyecto

La investigación propuesta en este proyecto se centra en el estudio teórico (computacional) de la dinámica de colisiones moleculares, con particular énfasis en el rol que juegan los cruces intersistema (transiciones no radiantes entre estados de diferente multiplicidad), así como en la determinación de coeficientes de velocidad para sistemas de interés astroquímico.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: GIR Dinámica Molecular de la Universidad de Salamanca, www.uval.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

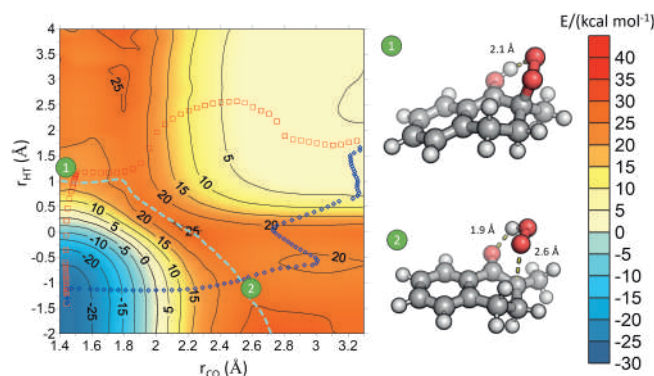
Ejecución: 2021 a 2024.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

Es claro que dada la naturaleza computacional del proyecto, el uso de Calendula es fundamental para realizar nuestros cálculos HPC, por las infraestructuras que ofrece. Las tareas de simulación/análisis de datos que conlleva este proyecto en su ejecución requieren de un sistema de cálculo avanzado, del cual dispone el Centro de Supercomputación de Castilla y León. Desde junio de 2023, nuestro GIR utiliza los recursos de SCAYLE de manera habitual para realizar cálculos de dinámica de estado excitado y simulaciones de scattering inelástico.



Caminos de reacción sobre mapas de energía potencial para una reacción de adición de oxígeno molecular prohibida por spin. Se representan las estructuras correspondientes a los dos caminos de mínima energía, las geometrías del camino CO y del OOH. Nivel de teoría de los cálculos: M062X-D3/maug-cc-pVDZ.



Referencia PID2020-113147GA-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

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.

Nanodispositivos ultrarrápidos y eficientes para comunicaciones y espectroscopía de THz basados en semiconductores de gap ancho y estrecho

Objetivo del proyecto

En este proyecto a través de la simulación Monte Carlo de dispositivos electrónicos se estudian, entre otras cosas, las oscilaciones Gunn en diodos autoconmutantes (SSDs, self-switching diodes) basados en capas de GaN dopado bajo diferentes condiciones de simulación (temperaturas, dopajes, geometrías, etc.). Uno de los objetivos buscados consiste en proporcionar las reglas idóneas para optimizar la fabricación de los dispositivos.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: GIR en Nanodispositivos Electrónicos de Alta Frecuencia de la Universidades de Salamanca, www.usal.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2021 a 2024.

Financiación del proyecto

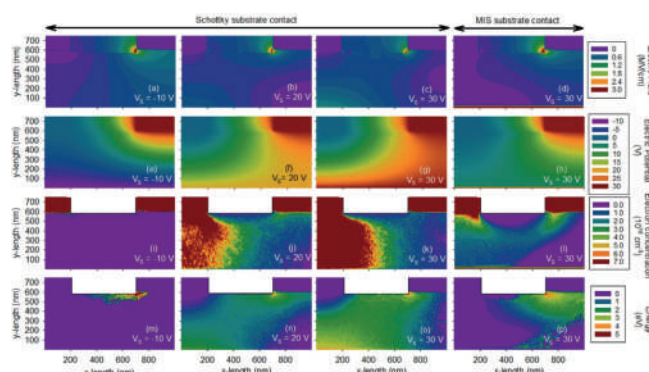
MICCIN - Agencia Estatal de Investigación.

Funciones de SCAYLE

Para los objetivos anteriormente indicados necesitamos recursos de cálculo adicionales ya que los recursos de computación propios con los que contamos son limitados.



Referencia PID2020-1 1 5842RB-I00



(a), (b), (c), (d) Mapas del módulo del campo eléctrico. (e), (f), (g) y (h) Mapas del potencial eléctrico. (i), (j), (k) y (l) Mapas de la concentración de electrones. (m), (n), (o), (p) Mapas de la energía media de los electrones. Se aplica un voltaje en el terminal de drenador de 30 V y diferentes voltajes en el terminal de sustrato: -10 V, 20 V, 30 V. Los resultados mostrados en (d), (h), (l) y (p) incluyen una capa de dieléctrico con permitividad relativa 6 entre el terminal de sustrato y el semiconductor.

Estudio evolutivo del linaje de los osos de las cavernas en la Sierra de Atapuerca a partir del paleoproteoma del esmalte dental

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

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2020 a 2025.

Financiación del proyecto

MSCA-ITN-ETN-PUSHH N°861389 y Ayuda a la Investigación Reale Foundation, de la Fundación Atapuerca.

Funciones de SCAYLE

El uso de Caléndula es imprescindible para desarrollar un proyecto de tesis como esta, basado en paleobiología molecular. En primer lugar, nos permite trabajar de forma rápida y eficiente con genomas. Proporciona todas las herramientas y programas necesarios para completar el workflow para hacer un mapeo genético, sea un genoma antiguo o moderno. También, la posterior traducción a

proteínas para añadir a la base de datos de referencia del proyecto, que ayudará a obtener una mayor variabilidad en la búsqueda de péptidos y hacer un análisis de datos más eficiente. En segundo lugar, la ejecución de diferentes programas y trabajos paralelamente resulta imprescindible para agilizar el análisis de datos de un gran número de muestras al mismo tiempo, en este caso 54 muestras cada una con un gran trabajo de análisis cada una de ellas. Por último, Caléndula es de gran ayuda ya que permite almacenar archivos de gran tamaño en su espacio personal sin la necesidad de ocupar espacio en el ordenador de trabajo, facilitando su manejo sin depender del dispositivo desde el cual te conectes.



This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 861389



Referencia: MSCA-ITN-ETN-PUSHH N°861389

WORLD, Waste Oils Recycle and Development

Objetivo del proyecto

El proyecto WORLD tiene como objetivo desarrollar un proceso verde para el reciclado de los aceites vegetales usados mediante la aplicación de un modelo de economía circular. Se propone la fabricación de biolubricantes mediante un proceso innovador, rápido y que no genera recursos a partir de dos materias primas verdes y recicladas: agua y bentonita natural. Junto con el desarrollo de este proceso de fabricación, se valorará el obtener de los aceites vegetales usados un medio para el tratamiento de los compuestos orgánicos volátiles.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: UBU-ICCRAM: ICCRAM (International Research Center in Critical Raw Materials for Advanced Industrial Technologies, www.ubu.es/iccram

olitecnico di Milano, www.polimi.it/en

Universite du Littoral, www.univ-littoral.fr

Universita degli Studi di Sassari, www.uniss.it/it

Universidad de Burgos, www.ubu.es

Gestta Medio Ambiental SL, www.gestta.com

Find Your Doctor SRL, <https://findyourdoc.org>

Universite de Sidi Bel-Abbes* Djillali Liabes University, www.univ-sba.dz

Ejecución: 2020 a 2026.

Financiación del proyecto

H2020-MSCA-RISE-2019-WORLD-GA-873005.

Funciones de SCAYLE

Modelización de materiales: uso de software para cálculo computacional de sistemas desde un punto de vista cuántico y desde un punto de vista clásico.



WORLD project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under Marie Skłodowska Curie grant agreement n° 873005.

Referencia H2020-MSCA-RISE-2019-WORLD-GA-873005

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

Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas, www.csic.es

Centre National de la Recherche Scientifique, www.cnrs.fr

Karlsruher Institut fuer Technologie, www.kit.edu

Qilimanjaro Quantum Tech SL, www.qilimanjaro.tech

University of Glasgow, www.gla.ac.uk

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, www.scayle.es

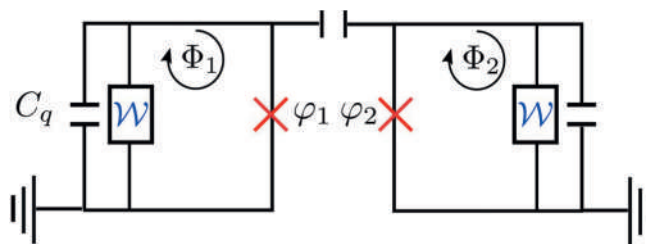
Ejecución: 2020 a 2024.

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.

AVaQUS

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

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

Instituto de Biología Evolutiva de Barcelona (IBE UPF-CSIC), www.ibe.upf-csic.es

Financiación del proyecto

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

Ejecución: 2020 a 2024.

Funciones de SCAYLE

El uso de Caléndula es imprescindible para desarrollar un proyecto de tesis como esta, basado en paleobiología molecular. En primer lugar, nos permite trabajar de forma rápida y eficiente con genomas. Proporciona todas las herramientas y programas necesarios para completar el workflow para hacer un mapeo genético, sea un genoma antiguo o moderno. También, la posterior traducción a proteínas para añadir a la base de datos de referencia del proyecto, que ayudará a obtener una mayor variabilidad en la búsqueda de péptidos y hacer un análisis de datos más eficiente. En segundo lugar, la ejecución de diferentes programas y trabajos paralelamente resulta imprescindible para agilizar el análisis de datos de un gran número de muestras al mismo tiempo, en este caso 54 muestras cada una con un gran trabajo de análisis cada una de ellas. Por último, Caléndula es de gran ayuda ya que permite almacenar archivos de gran tamaño en su espacio personal sin la necesidad de ocupar espacio en el ordenador de trabajo, facilitando su manejo sin depender del dispositivo desde el cual te conectes.



CENIEH
Centro Nacional de Investigación
Evolución Humana



PUSHH
Palaeoproteomics to Unleash
the Study of Human History



Referencia MSCA-ITN-ETN-PUSHH N°861389

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

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

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

Swedish University of Agricultural Sciences (SLU), www.slu.se/en

Universidade de Aveiro, 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

IDForest Biología Forestal Aplicada, www.idforest.es

Biomemakers, <https://biomemakers.com>

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, 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.



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

Centro Nacional de Energías Renovables (CENER), www.cener.com

Universidad de Salamanca (USAL), www.usal.es

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

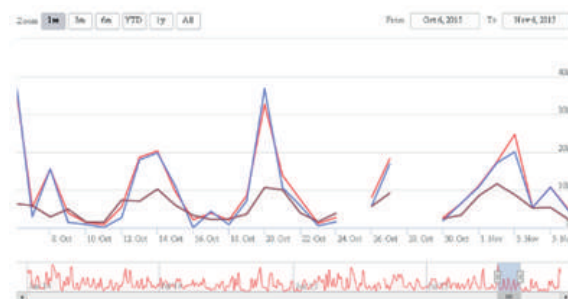
Ejecución: 2018 a 2024.

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.



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

Transition metal chalcogenides: A DFT study of their different polytypes and charge density waves.
IMDEA.

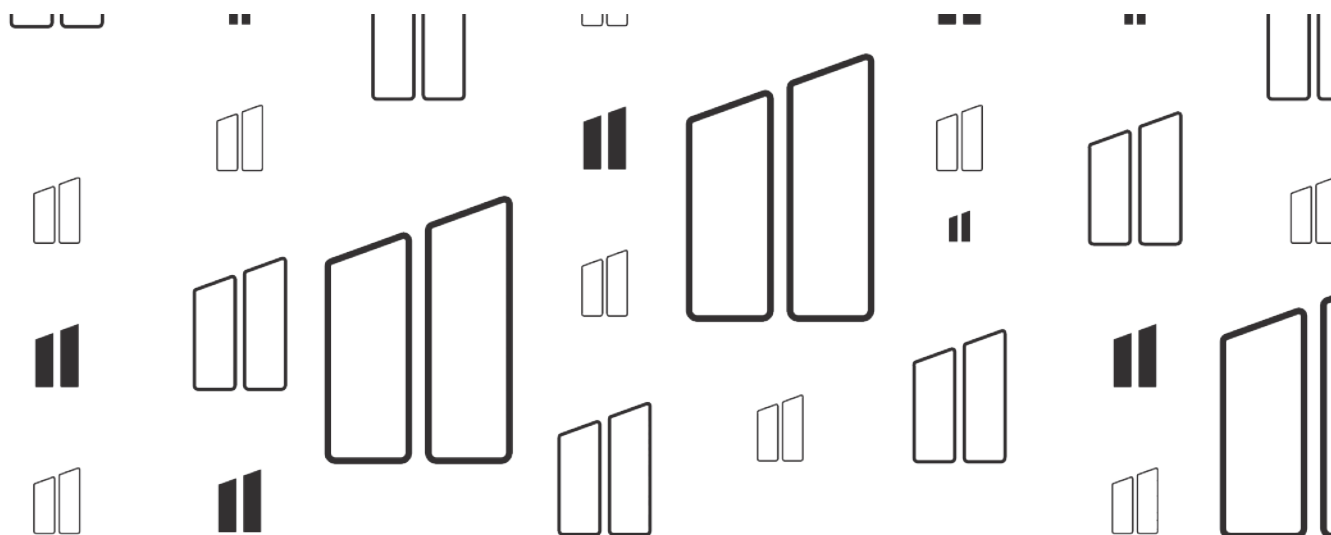
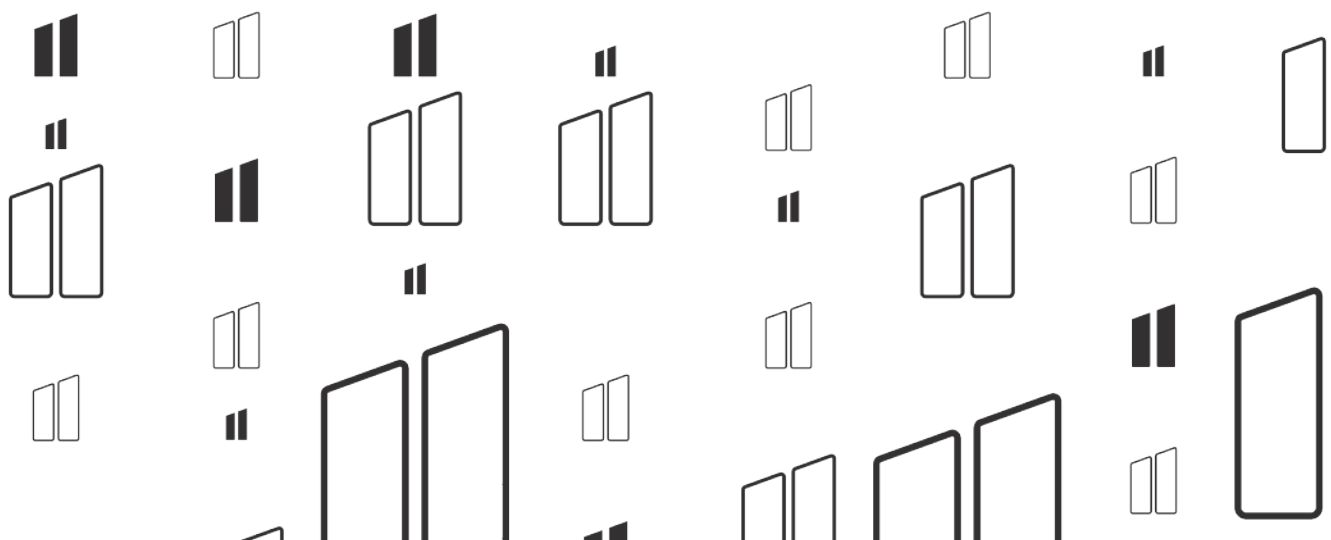
Analysis of the TiO₂/MXene interfaces.
Universitat de Barcelona.

CO methanation on metal surfaces.
Universitat de Barcelona.

Optimization of composition and interfacial properties of halide solid electrolytes.
CIC energiGUNE.

Nurturing a Machine Learning Tool for Pourbaix Diagrams.
Universitat de Barcelona.

Terminated MXenes as Supports for Single Atom Catalysts.
Universitat de Barcelona.



Publicaciones científicas

Unidad Mixta de Investigación en Ciencia y Tecnología Cuánticas (JRU-QST)

Grupos de Investigación de la Universidad de Burgos (UBU):

- Física Matemática (FISMAT-UBU)
- Simulación de Materiales (GSM)
- Inteligencia Computacional Aplicada (GICAP)
- Análisis Instrumental (GAIN)

Equipo de Investigación (externo):

- Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE)
- Instituto Tecnológico de Castilla y León (ITCL)

Coordinación:

- Nombre y apellidos del Coordinador: Ángel Ballesteros Castañeda
- Grupo de investigación: Mathematical Physics
- Departamento: Physics

Motivación y contexto:

La actual «segunda revolución cuántica» se basa en las propiedades de los estados de los sistemas cuánticos compuestos por muy pocas partículas, como la superposición y el entrelazamiento. Las tecnologías cuánticas emergentes aparecen así como consecuencia de la posibilidad real de manipulación controlada a escala atómica de estas propiedades esencialmente cuánticas de la materia y la luz.

La Ciencia y la Tecnología Cuánticas (QST) constituyen un campo esencialmente multidisciplinar de investigación, desarrollo e innovación en pleno auge, en el que podrían destacarse las siguientes áreas principales de trabajo:

- Desde un punto de vista fundamental, el estudio a través de la teoría cuántica de la información de los denominados «fenómenos y recursos cuánticos» que permiten modelizar los sistemas cuánticos y generar los algoritmos que hacen posible el desarrollo del hardware y software necesarios para las diferentes Tecnologías Cuánticas;
- El desarrollo de protocolos y sistemas de comunicación cuántica y redes que puedan garantizar una mayor seguridad en la transmisión de datos. En particular, la consecución de memorias y repetidores cuánticos que permitan la implantación extensiva de estos nuevos sistemas de comunicación seguros;
- El desarrollo de algoritmos y ordenadores cuánticos capaces de resolver problemas que superan las capacidades de los ordenadores clásicos actuales (en particular, la búsqueda de algoritmos cuánticos ventajosos para problemas de Inteligencia Artificial). Estos algoritmos también pueden implementarse en ordenadores clásicos (simuladores cuánticos);
- El desarrollo de nuevos sensores cuánticos (gravímetros, magnetómetros, etc.) y procedimientos de metrología basados en la sensibilidad sin precedentes que permite la manipulación y el control de los estados cuánticos.

La Unión Europea ha considerado estratégica la investigación en ciencia y tecnología cuánticas para las próximas dos décadas. En respuesta al «Manifiesto Cuántico» firmado en 2016 por industrias, institutos de investigación e investigadores, ha puesto en marcha el proyecto emblemático «Quantum Technologies» (QT) que, con un presupuesto de 1.000 millones de euros y una duración de 10 años, pretende situar a Europa a la vanguardia de la segunda revolución cuántica. Esta decidida apuesta europea por la investigación en QST ha sido asumida recientemente por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades de España, que ha considerado en primer lugar las Comunicaciones Cuánticas como una de las ocho áreas prioritarias de su Plan Complementario de I+D+i en el marco del Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. Además, el Ministerio ha impulsado el proyecto Quantum Spain, que abordará la creación de un ecosistema de computación cuántica para la Inteligencia Artificial (IA) basado en un modelo de cooperación público-privada con el objetivo de convertir a España en el nodo cuántico del sur de Europa. Por otra parte, la UNESCO ha proclamado 2025 Año Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuánticas. Esta iniciativa mundial de un año de duración "se observará mediante iniciativas a todos los niveles destinadas a sensibilizar al público sobre la importancia de la ciencia cuántica y sus aplicaciones".

Alcance

En este contexto, la «Joint Research Unit in Quantum Science and Technology» (JRU-QST) es una estructura singular de investigación de la UBU creada para apoyar y potenciar las actividades de investigación, desarrollo, innovación, transferencia de conocimiento y formación que diferentes GIRs de la UBU quieran llevar a cabo en el campo de la Ciencia y Tecnología Cuántica.

Esta iniciativa surge inicialmente, por un lado, de la participación de los grupos de Física Matemática y Simulación de Materiales en el Plan Complementario de Comunicaciones Cuánticas de Castilla y León 2021-2025, financiado con fondos PRTR por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades y por la Junta de Castilla y León, y gestionado a nivel regional por la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE). Por otro lado, de la colaboración existente entre el grupo de Inteligencia Computacional Aplicada y el Instituto Tecnológico de Castilla y León (ITCL) para la creación del Laboratorio de Computación Cuántica (LaCoCu) de la UBU. Por último, el grupo de Análisis Instrumental también contribuirá en la investigación relacionada con los sensores cuánticos.

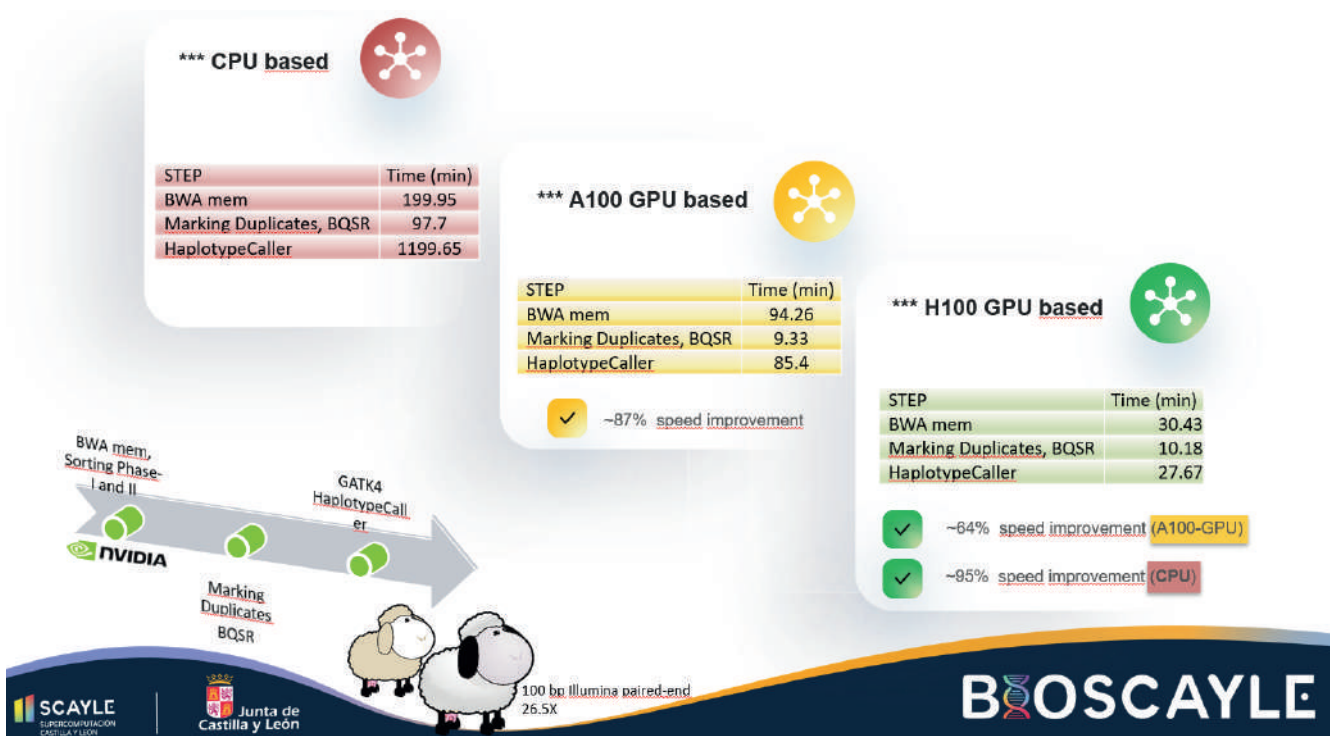
El objetivo fundamental de la creación de la JRU-QST es dar una respuesta estratégica a la UBU que le permita posicionarse nacional e internacionalmente en investigación, desarrollo e innovación en el campo de la Ciencia y Tecnología Cuántica. La creación de la JRU-QST permitirá intensificar y visibilizar la actividad desarrollada por los grupos de investigación de la UBU en el campo de la Ciencia y Tecnología Cuántica, potenciando sus sinergias, atrayendo talento, compartiendo sus recursos e infraestructuras y fomentando también la colaboración con entidades externas, como SCAYLE e ITCL. Asimismo, la creación de la JRU-QST permitirá alcanzar la masa crítica necesaria para facilitar el acceso a fuentes de financiación regionales, nacionales y europeas. Por último, la JRU-QST pretende contribuir a mejorar el conocimiento de la Ciencia y Tecnología Cuánticas por parte de la sociedad en general, incluyendo sus implicaciones sociales, éticas y medioambientales.

High-Performance Bioinformatics in SCAYLE: Leveraging GPU Acceleration for Advanced Genomic Analysis

Autores: Cristina Esteban Blanco; Jesús Lorenzana Campillo; Santiago Merino Bajo; Aroa Suárez Vega; Beatriz Gutiérrez Gil; Juan José Arranz; Hilde Pérez García.

1er Congreso Sociedad Española de Bioinformática y Biología Computacional, celebrada en Valencia los días 16 al 18 de octubre de 2024.

Se pretende demostrar la capacidad de SCAYLE para gestionar tareas bioinformáticas y poner de relieve las notables ventajas de rendimiento que ofrece frente a los métodos convencionales basados en la CPU utilizando NVIDIA Clara Parabricks. El objetivo final es demostrar el potencial de la aceleración en la GPU a los investigadores para que puedan utilizar las instalaciones de SCAYLE para avanzar en el campo de la biología computacional procesando los datos con mayor rapidez y eficacia.



Pruebas del software adaptado de nvidia para hacer llamadas de variantes en una muestra de oveja.

Menciones a SCAYLE en publicaciones científicas

- García-Sánchez, S., Perez, S., Íñiguez-de-la-Torre, I., García-Vasallo, B., Huo, L. I. L. I., Lingaparthi, R., ... & Mateos, J. (2024). Avoiding avalanche breakdown in planar GaN Gunn diodes by means of a substrate contact. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 58(1), 015112. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6463/ad809f>
- García-Sánchez, S., Íñiguez-de-la-Torre, I., Pérez, S., González, T., & Mateos, J. (2024). Monte Carlo Study of Gunn Oscillations in Geometrically Shaped Planar Gunn Diodes Based on Doped GaN: Influence of Geometry, Intervalley Energy, and Temperature. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 71(10), 5901-5907. <https://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=10633244>
- García-Sánchez, S., Íñiguez-de-la-Torre, I., González, T., & Mateos, J. (2024). Hybrid AI-Thermal Model Trained via Monte Carlo Simulations to Study Self-Heating Effects. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 71(10), 5888-5894. <https://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=10634316&tag=1>
- Calvo-Olivera, C., Guerrero-Higueras, Á.M., Lorenzana, J., García-Ortega, E. Real-Time Evaluation of the Uncertainty in Weather Forecasts Through Machine Learning-Based Models. *Water Resour Manage* 38, 2455-2470 (2024). DOI: 10.1007/s11269-024-03779-y
- Silvia Cobos; Gregorio García; César L. Folcia; Josu Ortega; Jesús Etxebarria; Gabriel López-Peña; Dirk H. Ortgies; Emma Martín Rodríguez; Silverio Coco Columnar liquid crystalline triphenylene-bis(dithiolene)nickel complexes. Soft photothermal materials. *Journal of Materials Chemistry C* 2024 | Journal article DOI: 10.1039/D4TC01338G
- Estela de Domingo; Manuel Bardají; Gregorio García; Silverio Coco Color modulation in organometallic dyes. Purple-colored acyclic carbenes derived from 2-isocyanoazulene gold(I) complexes *Dyes and Pigments* 2024-07 | Journal article DOI: 10.1016/j.dyepig.2024.112149
- Estela de Domingo; Gregorio García; César L. Folcia; Josu Ortega; Jesús Etxebarria; Silverio Coco Modulating Organic/Inorganic Segregation in Columnar Mesophases. *Crystal Growth & Design* 2023-09-06 | Journal article DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00660
- Sara Rozas, Alberto Gutiérrez, Mert Atilhan, Alfredo Bol, Santiago Aparicio. Understanding the CO₂ capture potential of tetrapropylammonium-based multifunctional deep eutectic solvent via molecular simulation (*Journal of Molecular Liquids*). DOI: 10.1016/j.molliq.2023.123416
- Sonia Martel-Martín, Maria Enrica Di Pietro, Alberto Gutiérrez, Nuria Aguilar, Alfredo Bol-Arreba, Santiago Aparicio, Fatima Matroodi, Barbara Rossi, Andrea Mele. A paradigm for natural eutectic solvents based on fatty acids: Molecular interactions and toxicological considerations (*Journal of Molecular Liquids*).
- Nuria Aguilar, Cristina Benito, Sonia Martel-Martín, Alberto Gutiérrez, Sara Rozas, Pedro A. Marcos, Alfredo Bol-Arreba, Mert Atilhan, Santiago Aparicio. Insights into Carvone: Fatty Acid Hydrophobic NADES for Alkane Solubilization (*Energy & Fuels*). DOI: 10.1021/acs.energyfuels.4c03623
- Sara Rozas, Fabiana C. Gennari, Mert Atilhan, Alfredo Bol, Santiago Aparicio. Theoretical investigation of carbon dioxide adsorption on MgH₂ with a cobalt catalyst (*Industrial Chemical Materials*). DOI: 10.1039/D3IM00096F
- Nuria Aguilar, Sara Rozas, Elisabeth Escamilla, Carlos Rumbo, Sonia Martel, Rocío Barros, Pedro Angel Marcos, Alfredo Bol, Santiago Aparicio. Theoretical multiscale study on the properties, aqueous solution behavior and biological impact of zinc oxide nanoparticles (*Surfaces and Interfaces*). DOI: 10.1016/j.surfin.2024.103965
- Nuria Aguilar, Ana María Moral, Alfredo Bol, Mert Atilhan, Santiago Aparicio. In silico study of therapeutic deep eutectic solvent for tetracaine liquid delivery (*Journal of Molecular Liquids*). DOI: 10.1016/j.molliq.2024.124652
- P. A. Marcos, N. Aguilar, S. Rozas, S. Martel, A. Bol, S. Aparicio. Manganese-rhodium nanoparticles: Adsorption on titanium oxide surfaces and catalyst for syngas reactions (*Journal of Chemical Physics*). DOI: 10.1063/5.0215450
- Rafael Alcalde, Nuria Aguilar, María A. Escobedo-Monge, Jose.L. Trenzado, Mert Atilhan, Alfredo Bol, Santiago Aparicio. On the properties of water in betaine - based Deep Eutectic Solvents (*Journal of Molecular Liquids*). DOI: 10.1016/j.molliq.2024.124871
- Sara Rozas, Pedro A. Marcos, Alfredo Bol, Mert Atilhan, Santiago Aparicio. In silico study on helicenenes in hydrophobic natural deep eutectic solvent (*Flat Chem*). DOI: 10.1016/j.flatc.2024.100769
- Sergio de-la-Huerta-Sainz, María Antonieta Escobedo-Monge, Pedro A. Marcos, José Antonio Esteban-Ollo, Laura Montejo-Gil, María Conde Rioll, Mert Atilhan, Alfredo Bol, Santiago Aparicio. Nature's Tool Kit: Designing Biocompatible and Affordable NADES for Sustainable Extraction of Plant Bioactives (*Sustainable Chemistry One World*). DOI: 10.1016/j.scowo.2024.100043
- María Antonieta Escobedo-Monge, Sergio de-la-Huerta-Sainz, Pedro A. Marcos, José Antonio Esteban - Ollo, Laura Montejo-Gil, María Conde-Rioll, Mert Atilhan, Alfredo Bol, Santiago Aparicio. Rational Design of Eco-Friendly Deep Eutectic Solvent Systems for the Recovery of High-Value Phytosterol Compounds. DOI: On review process
- Daniel Feijoo, Juan C. Benito, Alvaro Garcia, Marcos V. Conde. DarkIR: Robust Low-Light Image Restoration. <https://arxiv.org/pdf/2412.13443>
- Juan C. Benito, Daniel Feijoo, Alvaro Garcia, Marcos V. Conde. FLOL: Fast Baselines for Real-World Low-Light Enhancement. <https://arxiv.org/pdf/2501.09718>
- M. Pino and J. E. Roman. Correlated volumes for extended wave functions on a random-regular graph. *Phys. Rev. B* 109, 184204 (2024) <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.184204>
- O. Dueñas, D. Peña, A. Rodríguez. Propagation of two-particle correlations across the chaotic phase for interacting bosons. arxiv.org/abs/2410.10571 (2024) <https://doi.org/10.48550/arXiv.2410.10571>
- MSc thesis, I. B. Paniagua. Chaotic phase for hard-core bosons. Universidad de Salamanca (2024).
- BSc thesis, P. M. Clavero. Chaotic Phase of the Bose-Hubbard Hamiltonian in an external static field. Universidad de Salamanca (2024).

Curso práctico de iniciación al uso de la supercomputación aplicado al análisis de datos RNAseq - 7ª edición

Curso Práctico de Metagenómica y diversidad microbiana utilizando Supercomputación - 6ª edición

Curso integral práctico: desde la extracción del DNA y secuenciación, hasta el análisis metagenómico empleado Supercomputación

Workshop Qubits, tus primeros pasos hacia el Quantum Computing

Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE

Cursos BIO

Curso **práctico** de iniciación al uso de la **supercomputación** aplicado al análisis de datos **RNAseq** - 7ª edición

Objetivos

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

Fecha y lugar

Del 8 al 12 de julio de 2024. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

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.

Supercomputación Castilla y León (SCAYLE), León, España.

Juan José Arranz Santos.

Departamento de Producción Animal, Universidad de León.

Pablo Augusto de Souza Fonseca.

Departamento de Producción Animal, Facultad de Veterinaria de León, España.

Contenidos

Introducción al entorno Linux.

NGS y RNAseq.

Control de calidad y Trimming.

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.

Curso Práctico de **Metagenómica** y diversidad microbiana utilizando **Supercomputación** - 6ª 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.

Profesorado

Cristina Esteban Blanco.

Supercomputación Castilla y León (SCAYLE), León, España.

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

30 de septiembre al 4 de octubre de 2024. Sede SCAYLE.

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 taxonomicos.

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 homologías.

Asignación funcional y taxonómica.

Mapeo de lecturas sobre contigs para estimar abundancias.

Finalización del primer análisis metagenómico.

Binning: obtención de MAGs. 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.

Curso integral práctico: desde la extracción del DNA y secuenciación, hasta el análisis metagenómico empleado Supercomputación

Fecha y lugar

Del 28 al 30 de octubre de 2024. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

Duración 22,5 horas.

Profesorado

Cristina Esteban Blanco.

Supercomputación Castilla y León (SCAYLE), León, España.

Fernando Puente Sánchez,

Swedish University of Agricultural Sciences.

Javier Tamames de la Huerta.

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), Madrid.

Objetivos

El curso proporciona la formación necesaria para la secuenciación y el análisis de datos procedentes de técnicas de secuenciación por nanoporos utilizando la tecnología Oxford Nanopore, enfocándose particularmente en su aplicación al estudio metagenómico de muestras de diversos ambientes.

Se informará de como extraer ADN de una muestra y como realizar la secuenciación en un equipo ONT. Los participantes aprenderán a emplear la supercomputación en la recopilación, ensamblado y análisis de fragmentos de ADN secuenciados, llegando al análisis completo de muestra aportada, incluyendo la determinación de los

taxones y genes presentes, y su abundancia. Asimismo, se proporcionará conocimiento sobre las técnicas estadísticas más adecuadas para la comparación de los datos resultantes del análisis..

Contenidos

Introducción a técnicas de extracción de ADN, fundamentos de metagenómica, y conceptos de barcoding.

Clases Prácticas: Revisión del instrumental. Extracción de ADN; cuantificación con Qubit.

Introducción a la secuenciación por nanoporos. Kit específico y carga de la Flowcell.

Teoría de Secuenciación y basecalling: Fundamentos de la secuenciación con Oxford Nanopore, comparación entre long reads y tecnologías Illumina. Paralelización y utilización de GPUs.

Práctica de Carga de Flowcell: Ejecución práctica de la carga de flowcell por parte de los alumnos.

Introducción a Caléndula.

Introducción al Análisis Bioinformático: Fundamentos del análisis de datos metagenómicos.

Análisis Inicial de Datos: Técnicas y herramientas básicas para el análisis de datos secuenciados.

Análisis Metagenómico: Fundamentos y métodos para el análisis de metagenomas.

Introducción al análisis estadístico de datos ómicos.

Clases Prácticas: Análisis de los datos resultantes de la secuenciación.

Cursos TIC

Workshop Qubits, tus primeros pasos hacia el Quantum Computing

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.

Profesorado

Carmen Calvo Olivera.

Técnico de Quantum Spain en SCAYLE.

Santiago Merino Bajo

Técnico de Quantum Spain en SCAYLE.

Duración 7 horas.

Fecha y lugar

27 de noviembre de 2024. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

Contenidos

Introducción al mundo cuántico.

Evolución de lo clásico a lo cuántico y conceptos básicos.

Y esto, ¿para qué se usa?

Un QComputer.

Un QComputer, ¿qué es y cómo funciona?

SCAYLE y su papel en el mundo cuántico. (Proyecto QuantumSpain)

Visita guiada por el CPD.

Primeros pasos hacia el Quantum Computing.

Emuladores cuánticos. Emulador en SCAYLE.

Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE

Asignatura de Arquitecturas Avanzadas de Computadores.

Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

28 de agosto de 2023 al 1 de marzo de 2024.

Asignatura Computación de Altas Prestaciones. Máster en Ingeniería Informática.

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

Universidad de León.

26 de septiembre de 2023 al 5 de febrero de 2024.

Asignatura de Arquitecturas Avanzadas de Computadores.

Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

27 agosto de 2024 al 5 de febrero de 2025.

Diploma de especialización de Bioinformática y Genómica Computacional

Universidad de Salamanca y CSIC

1 octubre de 2024 al 30 de junio de 2025

Asignatura Computación de Altas Prestaciones. Máster en Ingeniería Informática.

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

Universidad de León.

16 octubre de 2024 al 5 de febrero de 2025.

Asignatura de Arquitecturas Paralelas del Grado (on-line).

Máster en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

27 de agosto de 2024 al 5 de febrero de 2025.

Asignatura de Arquitecturas Paralelas del Grado en Ingeniería Informática (presencial).

Máster en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

27 de agosto de 2024 al 5 de febrero de 2025.

Asignatura de Linux y Linux de Gestión.

Máster en en Química Teórica y Modelización Computacional.

Universidad de Salamanca.

10 de septiembre de 2024 al 13 de junio de 2025.

Asignatura de Laboratorio de Química Teórica Avanzada.

Máster en en Química Teórica y Modelización Computacional.

Universidad de Salamanca.

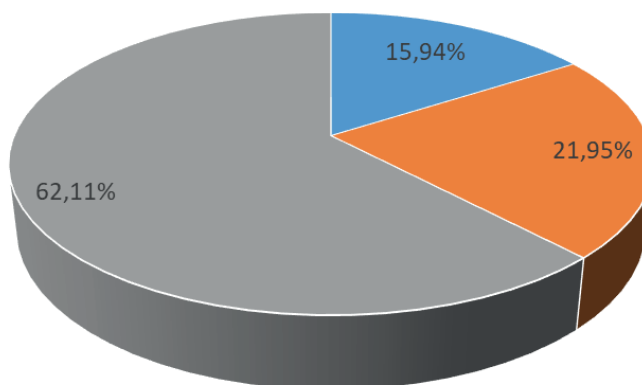
10 de septiembre de 2024 al 13 de junio de 2025.

datos económicos

Gastos de SCAYLE, ejercicio 2024:

5.614.841,41 €

La principal partida de gasto de SCAYLE en 2024 ha sido la de amortizaciones, debido al incremento del volumen de inversiones ejecutadas en ejercicios anteriores correspondientes a los fondos REACT-EU. 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.

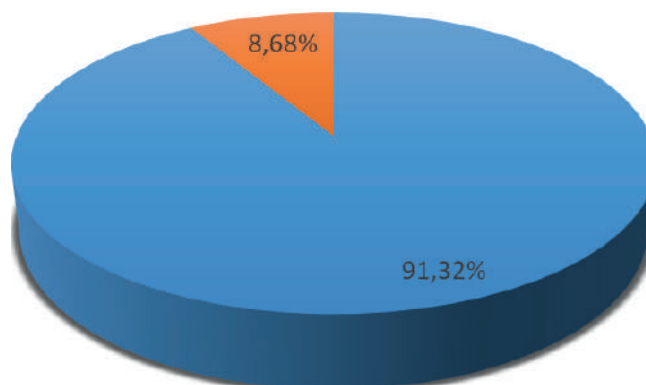


Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2024.

Ingresos de SCAYLE, ejercicio 2024:

5.614.841,41 €

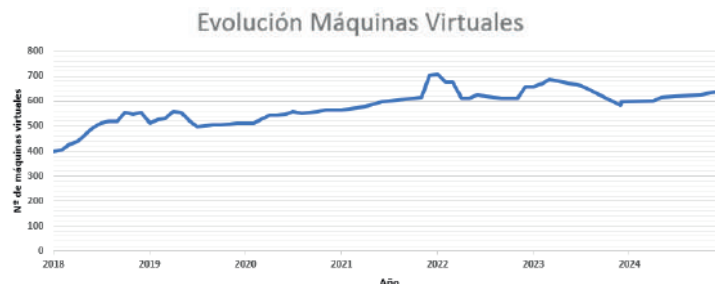
Los principales ingresos proceden de las aportaciones de la Junta de Castilla y León, Consejería de Movilidad y Transformación Digital, Consejería de Educación y Gerencia Regional de Salud, a través de aportaciones al Centro para financiar tanto los gastos de explotación como las inversiones, así como de aportaciones de Planes Complementarios para el desarrollo de proyectos de comunicación cuántica. 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, 2024.

estadísticas de uso**Utilización del Sistema****Servicios Cloud**

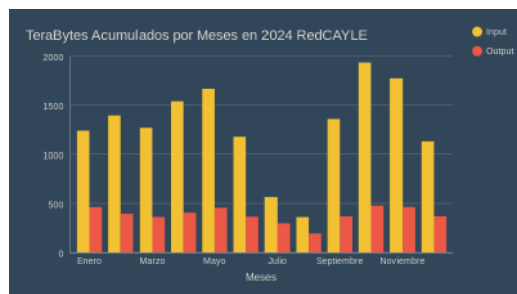
El año 2024 terminó con 641 servidores virtuales alojados:



Número total de máquinas virtuales en la plataforma. Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2024. © SCAYLE.

RedCayle

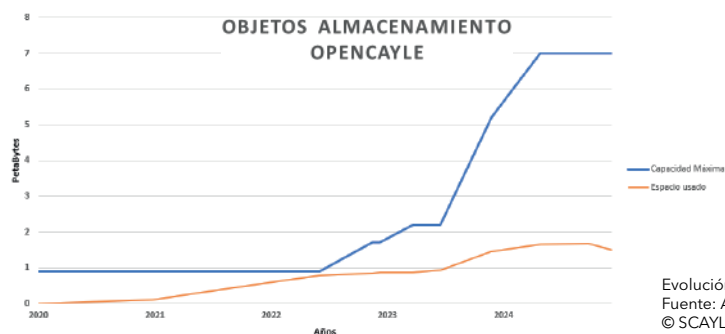
El tráfico global acumulado que se ha cursado en el año 2024 alcanza una suma de 15,4 PBytes de tráfico entrante y 4,6 PBytes de tráfico saliente. Este mismo tráfico distribuido a lo largo de los meses se presenta en la siguiente gráfica, donde se pueden apreciar que los meses con una alta acumulación de tráfico entrante son Octubre, y Noviembre con 1,9 PBytes y 1,8 PBytes respectivamente.



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

OpenCayle - Servicio de almacenamiento de datos

El año 2024 terminó con alrededor de 1.5PB de datos almacenados y la capacidad del sistema se ha visto incrementada notablemente debido a las inversiones:



Evolución de OpenCAYLE (TB).
Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2024.
© SCAYLE.

Cálculo científico

Durante el año 2024 y debido a los meses de parada técnica debida a la renovación tecnológica acometida, el número de horas usadas ha sido inferior al del año 2023. En total, se han utilizado 12.374.177 horas en CPUs y 13.332 en GPUs.

En cuanto a la evolución gráfica de los últimos años, utilizando como indicador los exaFLOPs totales, queda como sigue, con un total de 2.203:



Indicador de ExaFLOPs.
Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2024.
© SCAYLE.

actividades de promoción, difusión y comunicación

30 enero al 2 febrero de 2024 - **XIV Seminario de Invierno CAPAP-H que se configura como un Digital Innovation Hub.**

9 febrero de 2024 - **Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia.**

20 al 22 febrero de 2024 - **Expociencia 2024.**

6 marzo de 2024 - **Jornada Industria 4.0.**

9 al 11 de abril de 2024 - **Advanced Factories.**

28 mayo al 3 junio de 2024 - **Jornadas técnicas RedIRIS 2024.**

6 y 7 junio de 2024 - **Jornadas ASTICNET24: Conferencias magistrales en el sector tecnológico.**

17 al 19 junio de 2024 - **XXXIV Jornadas de Paralelismo (SARTECO).**

8 julio de 2024 - **Inauguración nuevo CPD Caléndula.**

18 y 19 septiembre de 2024 - **18th RES Conferencia de Usuarios.**

9 al 11 de octubre de 2024 - **CISIS 2024 - Salamanca.**

27 de octubre de 2024 - **Proyecto "Emprende Experience León".**

16 al 18 de octubre de 2024 - **Sociedad Española de Bioinformática y Biología Computacional (SEBiBC).**

22 y 23 octubre de 2024 - **17ENISE.**

21 noviembre de 2024 - **V Jornadas Técnicas de REDCAYLE.**

29 noviembre de 2024 - **Jornada: Avances de SCAYLE y Seguridad en el puesto de trabajo de la Universidad de León.**

12 diciembre de 2024 - **Mujer y ODS: El papel del liderazgo femenino ante los grandes retos globales.**

visitas a SCAYLE

08-ene Máster Tecnologías aplicadas a Emergencias. Universidad de Lérica, Vigo y León.

09-ene CC Sagrado Corazón Jesuitas de León.

18-ene La Asunciónalumnos de 2ºBACH.

23-ene CEIP Adiles.

06-feb CRA Hospital de Órbigo.

08-feb IES San Andres del CFGS de ASIR.

15-feb Schneider Electric y Electroson DC.

19-feb Asignatura de Informática Aplicada, Facultad de Veterinaria. Universidad de León.

20-feb CRA Villaquilambre.

23-feb CEIP Antonio Justel.

29-feb Universidad Europea Miguel de Cervantes de Valladolid.

29-feb Proy. DIGIS3.

05-mar CRA Babia.

19-mar CEIP Adiles.

21-mar CEFP TuniverS Formación de Gijón.

21-mar Derecho Constitucional. Universidad de León.

02-abr Cruz Roja Juventud.

16-abr CC La Anunciata.

18-abr FP María Auxiliadora.

30-abr CC La Anunciata.

06-may Máster en Dirección de Empresas. Universidad de León.

08-may CIFP Tecnológico Industrial.

09-may FP María Auxiliadora.

09-may Dpto.Ingeniería Mecánica, Informática y Aeroespacial. Universidad de León.

14-may CRA Tres Ríos.

21-may CEIP Padre Manjón en Armunia.

23-may Educación de Adultos del ayuntamiento de Valdefresno.

30-may CIFP Tecnológico Industrial.

11-jun CEIP La Palomera.

11-jun Administración Electrónica-EuroCC.

14-jun Administración Electrónica.

12-jul Curso práctico de iniciación al uso de la supercomputación aplicado al análisis de datos RNAseq - 7ª edición.

17-jul Cybersecurity Summer BootCamp.

18-jul Cybersecurity Summer BootCamp.

28-ago Universidad de Washington.

03-sep Unidad Militar de Emergencias.

02-oct Workshop: Almacenamiento de grandes volúmenes de datos en cinta y técnicas de HSM.

04-oct Curso práctico de metagenómica y diversidad microbiana utilizando supercomputación 6ª Edición.

15-oct CRA Santa Marina del Rey.

24-oct IES Ribera de Castilla, Valladolid.

29-oct CEIP Quevedo.

30-oct Curso integral práctico: desde la extracción del DNA y secuenciación, hasta el análisis metagenómico empleado supercomputación.

07-nov IES Juana I de Castilla, Tordesillas.

07-nov Don Bosco Villamuriel, Palencia.

12-nov CRA Hospital de Órbigo.

13-nov IES Antonio Tovar, Valladolid.

14-nov HORSE, empresa del grupo Renault.

26-nov CEIP Cervantes.

27-nov Workshop: Qubits, tus primeros pasos hacia el Quantum Computing.

05-dic CC La Asunción.

12-dic Academia Básica del Aire y el Espacio.

19-dic CC Nuestra Señora del Carmen.

