

Supercomputación Castilla y León

Anuario · Informe de actividad

2023

Supercomputación Castilla y León

Anuario · Informe de actividad

2023



universidad
de León



Junta de
Castilla y León

Caja España - Obra social
Premio Medio Ambiente Caja España 2009



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



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



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



Anuario · Informe de actividad · 2023
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.18
Publicaciones científicas	pág.36
Formación	
Cursos	pág.37
Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE	pág.40
Datos de SCAYLE	
Datos económicos	pág.41
Estadísticas de uso	pág.42
Actividades de promoción, difusión y comunicación	pág.43
Visitas a SCAYLE	pág.43

El año 2023 ha sido un período de avances significativos para la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), marcado por inversiones estratégicas y logros destacados. Quiero comenzar expresando mi reconocimiento a todos los profesionales y colaboradores que han contribuido al éxito de SCAYLE durante este año.

En esta legislatura se están acometiendo las mayores inversiones que se han realizado en esta infraestructura a lo largo de su historia por un valor superior a los 20 millones de euros. Gracias a estas inversiones en nuevos proyectos de ampliación, innovación y modernización se conseguirá multiplicar por 10 su capacidad de cálculo intensivo; multiplicar por 10 la capacidad de la Red de Ciencia y Tecnología de Castilla y León; contar con una nueva sede y acometer la revolución que supone la computación y comunicación cuántica.

Uno de los hitos más importantes de 2023 fue la culminación del proyecto de expansión de la capacidad de cálculo de SCAYLE. La adquisición e instalación de un nuevo clúster de GPUs, con tecnología de vanguardia, representa una inversión récord en la historia del centro. Este nuevo equipamiento no solo aumentará significativamente la capacidad de procesamiento, sino que también garantizará la disponibilidad de recursos de alto rendimiento para los investigadores y empresas de Castilla y León.

Además, durante este año se han realizado importantes mejoras en las infraestructuras de red de SCAYLE. La modernización de la infraestructura óptica de la red autónoma RedCAYLE ha permitido multiplicar la velocidad de los enlaces, mejorando así la conectividad y el acceso a recursos digitales para universidades, centros de investigación y la comunidad educativa en general.

La inversión en seguridad y almacenamiento de datos también ha sido prioritaria en 2023. Se han implementado nuevas medidas y tecnologías para fortalecer la protección de la infraestructura informática y garantizar la integridad y disponibilidad de los datos almacenados en los sistemas de SCAYLE.

Asimismo, el centro ha continuado su compromiso con la planificación a largo plazo, con la adjudicación de proyectos clave para el futuro del centro. Entre ellos, destaca la iniciativa de construcción de una sede propia para SCAYLE, que proporcionará las instalaciones necesarias para albergar infraestructuras futuras y facilitar la realización de proyectos ambiciosos en áreas como la computación cuántica y la bioinformática.

El año 2023 ha sido testimonio del compromiso continuo con la excelencia en la investigación, la innovación y la transformación digital en Castilla y León. Las inversiones realizadas y los logros alcanzados no solo fortalecen la posición del centro a nivel autonómico, sino que también contribuyen al avance de la ciencia y la tecnología a nivel nacional e internacional.

Quisiera aprovechar este momento para expresar un sincero agradecimiento al director general saliente, Vicente Matellán, quien ha desempeñado un papel fundamental en el desarrollo y la dirección de SCAYLE durante su mandato. Su dedicación ha sido fundamental para el crecimiento y el éxito de nuestro centro de supercomputación. Su contribución dejará una huella duradera en nuestra organización y le deseamos todo lo mejor en su regreso a la universidad. También quiero dar la bienvenida a la nueva directora general, Hilde Pérez, quien recoge el testigo llena de energía e ilusión, que a buen seguro servirá para impulsar el desarrollo de SCAYLE y que se verá reflejado en el nuevo plan estratégico de SCAYLE que liderará. Mis mejores deseos para ella, cuyos éxitos serán también los de la Fundación.



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

Creo que el año 2023 ha sido el más relevante para la Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE) desde su creación. Las inversiones ejecutadas y adjudicadas durante el año han sido las más importantes de toda su historia, y han coincidido con un notable incremento en el número de proyectos conseguidos. Por ello, quiero comenzar estos párrafos de resumen del año con mi felicitación a todos los que durante el año han trabajado en, por y para SCAYLE.

Lo más destacado en mi opinión del año 2023 fue la llegada a final de año de los camiones que traían a León el nuevo supercomputador, no es una errata, varios camiones, lo que da idea de la relevancia del nuevo equipamiento. Los más de 6 millones en que se adjudicó constituyen la mayor inversión en la historia de SCAYLE, lo que permitirá multiplicar por 10 la capacidad de cálculo cuando se ponga en marcha durante 2024. Esta nueva versión de Caléndula incorpora las GPUs más avanzadas y demandadas del mundo. Una gran herramienta para los investigadores de Castilla y León.

Durante el verano del 2023 se completó también el despliegue de los nuevos equipos ópticos de la red regional de i+D+i, RedCAYLE. Una inversión de casi 3 millones de euros que permitió multiplicar por 10 también la velocidad de los enlaces de la red. Esta capacidad permitirá mejorar sus servicios digitales a todas las entidades conectadas: universidades públicas y privadas de Castilla y León, centros tecnológicos, instituciones científicas y a la red educativa que proporciona acceso a Internet a todos los colegios de Castilla y León.

No menos importante fue la inversión en 2023 para mejorar la capacidad de almacenamiento de datos, redes y ciberseguridad, con una inversión superior también a los 3 millones de euros ejecutados durante el año, que ha permitido aumentar la capacidad del servicio OpenCAYLE de almacenamiento de datos masivos de los investigadores, mejorar la ciberseguridad y renovar gran parte del equipamiento de los centros de datos.

Todas estas inversiones se habían planificado con anterioridad, lo que había supuesto construir un segundo CPD, reforzar las infraestructuras eléctricas con un nuevo transformador y paneles solares, de forma que todas estas nuevas infraestructuras adquiridas durante 2023 se han podido desplegar con eficiencia.

Pero el mundo de la supercomputación, del análisis masivo de datos, de la inteligencia artificial, no se para. En pocos años será necesario volver a actualizar las infraestructuras informáticas. SCAYLE ha seguido planificando ese futuro y las infraestructuras que lo hagan posibles. Para ello, también se licitó y adjudicó en 2023 la construcción de una sede propia para SCAYLE. El proyecto y dirección de obra se había realizado el año anterior y las obras de construcción se adjudicaron por más de 3 millones de euros. Esas obras comenzarán en 2024 y si todo va según lo previsto, en 2026 SCAYLE tendrá casa propia. Esta nueva sede permitirá que la siguiente generación de Caléndula tenga las infraestructuras preparadas, y también permitirá abordar proyectos importantes que se impulsan desde SCAYLE como la computación cuántica o la bioinformática.

Los más de 15 millones de euros de inversión durante el año 2023 dan idea de la relevancia del año y del compromiso de la consejería de Movilidad y Transformación Digital de la Junta de Castilla y León, que ha apostado una parte relevante de los fondos europeos de los que disponía para impulsar el centro.

Estas infraestructuras permiten que los investigadores de Castilla y León desarrollen proyectos punteros en todas las ramas de la ciencia, desde la genómica a la física de partículas, y también ayuda a la mejora de la competitividad de las empresas y las administraciones públicas. Es una herramienta de apoyo a todos los centros de I+D+i de la comunidad autónoma.

Me gustaría resaltar que SCAYLE es además de herramienta para otras instituciones, un catalizador en sí mismo para la innovación. Por ejemplo, es el principal impulsor del desarrollo de las tecnologías cuánticas en Castilla y León. Así, con el apoyo de la Consejería de Educación y del Ministerio de Ciencia e Innovación, SCAYLE coordina el Plan de Comunicaciones Cuánticas en Castilla y León (Q-CAYLE). SCAYLE participa también en el proyecto "Quantum Spain", financiado por la Secretaría de Estado de Digitalización e Inteligencia Artificial (SEDIA) del Ministerio de Asuntos Económicos y Transformación Digital, el proyecto tractor en el caso de la computación cuántica en España.

Acabando el repaso del año por lo más personal, en otoño comunicué a la presidenta del Patronato de la Fundación mi decisión de dimitir del puesto de Director General de SCAYLE que había asumido en 2017. Motivos personales y el convencimiento de que mi labor de recuperación e impulso de SCAYLE estaba cumplida, me llevaron a tomar esa decisión, que se formalizó en diciembre. Agradezco enormemente los intentos de disuadirme, pero sobre todo la comprensión con que está decisión fue recibida por el patronato y las palabras y gestos de reconocimiento por el trabajo realizado. En cualquier caso, no me he ido muy lejos, he vuelto a mi puesto en la Universidad de León, desde donde espero poder seguir colaborando con SCAYLE.

En los años que he tenido el honor de dirigir el día a día de la Fundación, creo que entre todos (patronato, trabajadores, investigadores...) hemos logrado consolidarla como una pieza clave del ecosistema innovador de Castilla y León. SCAYLE ha conseguido ocupar una posición relevante a nivel nacional e internacional en el ámbito de la informática de altas prestaciones y de las comunicaciones avanzadas, y sobre todo ha consolidado una cartera de proyectos que refuerzan a SCAYLE como una de las herramientas más importantes para catalizar la innovación en la comunidad autónoma de Castilla y León y en León en particular.

No tengo duda, el último año de SCAYLE ha sido exitoso, pero el futuro de SCAYLE es espectacular.



Vicente Matellán Olivera.
Director General de SCAYLE.

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

Presidente

D^a María González Corral.

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

Vicepresidente

D. Juan Francisco García Marín.

Rector Magnífico de la Universidad de León.

Vocales

Dña. Blanca Ares González.

Directora de Universidades e Investigación. Junta de Castilla y León.

D. Alfonso Arroyo González.

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

D. Carlos Martín Tobalina.

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

D. Antonio Ibáñez Pascual.

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

D. Juan Manuel Gil González.

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

D. Carlos G. Polanco de la Puente.

Vicerrector de Investigación. Universidad de León.

D. Ramón Ángel Fernández Díaz.

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

D. José Manuel Alija Pérez.

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

Secretario

D^a. Susana Morán Fernández.

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

Vicesecretario

D. Pablo Carlos Vicente Villafáfila.

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

consejo
asesor

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

Presidente

D. Juan Francisco García Marín.

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

Vocales

D. Manuel Pérez Mateos.

Rector Magnífico de la Universidad de Burgos.

D. Ricardo Rivero Ortega.

Rector Magnífico de la Universidad de Salamanca.

D. Antonio Largo Cabrerizo.

Rector Magnífico de la Universidad de Valladolid.

Secretario

D^a. Susana Morán Fernández.

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



misión y objetivos

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

Valores

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

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

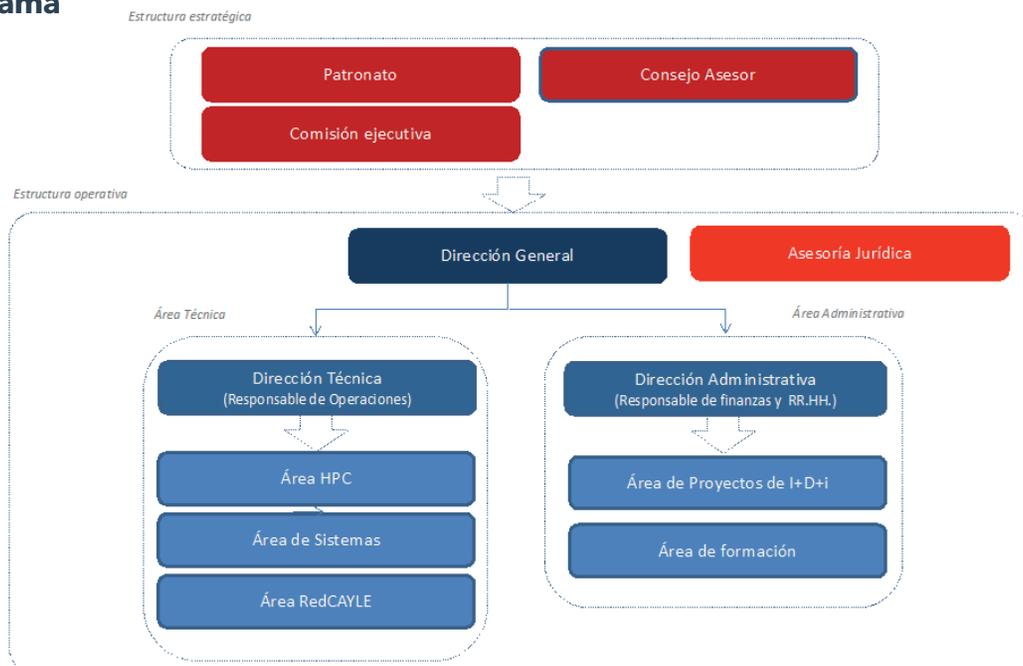
Misión

Proporcionar servicios e infraestructuras avanzadas en el ámbito de las tecnologías de la información y las comunicaciones a los organismos públicos de investigación, las empresas e Instituciones, impulsando la cooperación científica y el uso de infraestructuras comunes, actuando como centro de servicios de computación y comunicaciones avanzadas en Castilla y León y promoviendo el desarrollo de la ciencia y la transferencia de tecnología.

Visión

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

Organigrama



Supercomputación

La vocación fundamental del Centro es la prestación de servicios de cálculo intensivo, tanto en programas que demandan proceso paralelo masivo como en aquellos que necesitan gran capacidad en ejecuciones secuenciales o para los que requieran en su ejecución disponer de alta capacidad de memoria RAM o los cada vez más numerosos procesos de Inteligencia Artificial que demandan un acceso a tarjetas GPU de última generación. Pero la orientación de SCAYLE no es sólo poner las infraestructuras a disposición de los usuarios para ejecución de programas en el clásico esquema FIFO (*First In-First Out*).

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

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

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

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

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

Cloud privada

El servicio de nube o *Cloud* privada complementa tanto los servicios de *Cloud Computing* para investigación como a la administración regional.

Se ofrecen servicios de centro de datos virtual donde alojar máquinas virtuales sobre una plataforma de categoría empresarial tanto a nivel de *software* como *hardware*.

SCAYLE puede llevar a cabo la prestación de servicios de *Cloud Computing* a la Junta de Castilla y León actuando como medio propio instrumental y servicio técnico de la misma, no incurriendo en conflictos de competencia, ofreciendo un entorno virtual completo (servidores, redes, etc.) que puede complementar la demanda de los centros usuarios y reemplazar centros de proceso de datos de pequeña entidad o complementar picos de demanda de centros de datos más mayores.

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

En los últimos tiempos el concepto *Big-Data* se ha ampliado debido a la irrupción de la inteligencia artificial, demandando mayores capacidades de almacenamiento tanto para el análisis de datos como para el entrenamiento de grandes modelos de inteligencia artificial.

Las nuevas directivas europeas en materia de investigación traen, además, la exigencia de preservar y ofrecer públicamente toda aquella información obtenida o generada en proyectos de investigación ejecutados con financiación pública.

Todo lo anterior ha impactado en el mantenimiento y ampliación de este servicio de almacenamiento de información de "cualquier volumen" y política de retención.

Permite el almacenamiento y publicación directa de objetos como recursos URI en Internet.

Aunque su diseño ha sido pensado para el almacenamiento de, principalmente, *datasets* científicos, también es útil como sistema de *backup* o respaldo.

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 y CPD2.

El año 2023 ha visto una reorganización de los espacios técnicos en SCAYLE. La puesta en producción el año anterior de una nueva sala fría del centro de datos (CPD2) ha venido a complementar la ya muy saturada sala original (CPD1 - C.R.G.).

CPD1 - Carlos Redondo Gil

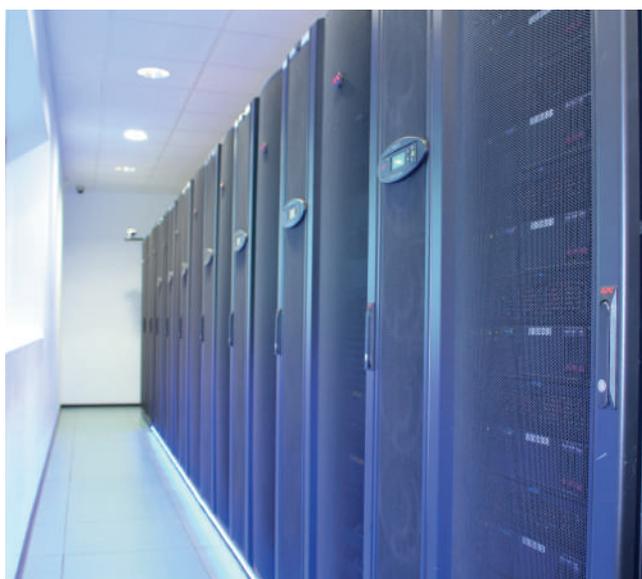
La sala original (CPD1-C.R.G.) fue diseñada para alojar equipamiento IT de alto consumo y alta densidad, por lo que a partir de ahora solamente alojará los equipos que forman el supercomputador (Caléndula). Además, está siendo adaptada eléctricamente para poder alojar la nueva versión del mismo, que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

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.



CPD1 - Carlos Redondo Gil. © SCAYLE.



CPD 2. © SCAYLE.

Actualización Tecnológica**Enfriadoras de agua para el sistema de climatización**

Durante el año 2023 se sustituyeron las dos máquinas enfriadoras de agua (Vertiv Superchiller) que llevaban dando servicio de climatización al *datacenter* desde el año 2009.

Ambas han sido sustituidas por dos nuevas unidades Schneider TSAF de 300kW de potencia nominal (230kW efectivos) y ubicadas en el patio exterior donde se encuentra el resto de infraestructura industrial exterior.

Las nuevas unidades disponen, al igual que las antiguas, de batería de *free-cooling*. Como novedad incorporan compresores con tecnología "*inverter*", que aumentan notablemente la eficiencia al poder ajustar la potencia de generación de frío a la demanda real de la infraestructura.

Red de datacenter

La puesta en marcha de una nueva sala de datacenter (CPD2) y la necesidad de dar servicios de red a los equipos de IT reubicados en la misma, así como la llegada del 100gb en la conectividad a Internet, ha implicado la renovación casi total de los equipos de red de SCAYLE con velocidades de hasta 400gb en los enlaces de mayor capacidad.

También se han puesto en marcha nuevos cortafuegos de última generación y mejoras en las herramientas de gestión de la seguridad.

Almacenamiento de datos

La inversión recibida en el año 2023 para los sistema de IT generales ha tenido uno de sus focos importantes en dar respuesta a la alta demanda en servicios de almacenamiento de datos para nuestros usuarios y proyectos.

La licitación principal (SCAYLE05/2022) ha supuesto la renovación completa de los sistemas de almacenamiento que además han visto ampliada enormemente su capacidad. El año 2023 se cierra con una capacidad total de almacenamiento mayor de 10PB en disco de diferentes tecnologías y una capacidad similar en tecnología de cintas. Además, ha supuesto la incorporación de un nuevo robot para gestión y lectura/escritura de cintas.

Esta inversión impacta directamente sobre los servicios de computación, *Cloud Computing* y *OpenCAYLE*.

Servidores de propósito general

Además de los servidores que forman el supercomputador, SCAYLE precisa de un conjunto, no menor, de otros servidores para soportar el resto de servicios, incluidos los de la propia gestión interna.

Todos ellos han sido renovados con un conjunto de 25 nuevos equipos servidor de propósito general.

Actualización tecnológica

Cálculo científico

Durante el año 2023 se realizó el proceso de redacción del pliego y de adjudicación, de una importante renovación tecnológica del sistema de cálculo de altas prestaciones de SCAYLE. El proceso de adjudicación finalizó el día 10 de noviembre de 2023 con la adjudicación definitiva a la empresa LENOVO SPAIN S.L.

La oferta presentada incluía 192 servidores con dos procesadores Intel Xeon Platinum 8462Y+ 32C a 2.8GHz y 1024 GB de memoria RAM, además de 8 equipos de similares características pero equipados con el doble de memoria 2048 GB. Asimismo, se ofrecieron 35 máquinas con dos procesadores AMD EPYC 9374F 32C a una frecuencia de 3.85GHz y con 2304 GB de memoria RAM. Estas máquinas llevan instaladas 4 tarjetas NVIDIA H100 SXM5 80G para trabajos intensivos relacionados con la Inteligencia Artificial haciendo un total del 140 tarjetas GPUs.

En la renovación del sistema de cálculo también se incluía el despliegue de una nueva red de baja latencia de tecnología Infiniband NDR 400Gbps para interconexión de todos los equipos anteriores.

Tras las obras necesarias en el centro de datos de SCAYLE para la instalación de todo este nuevo equipamiento, la instalación comenzará en el segundo trimestre de 2024 y su paso a producción se realizará a lo largo del segundo semestre de 2024.

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

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

ICTS distribuida, "Red Española de Supercomputación"

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

La RES es una red que interconecta 14 instituciones y 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.



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

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 sites 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.

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:

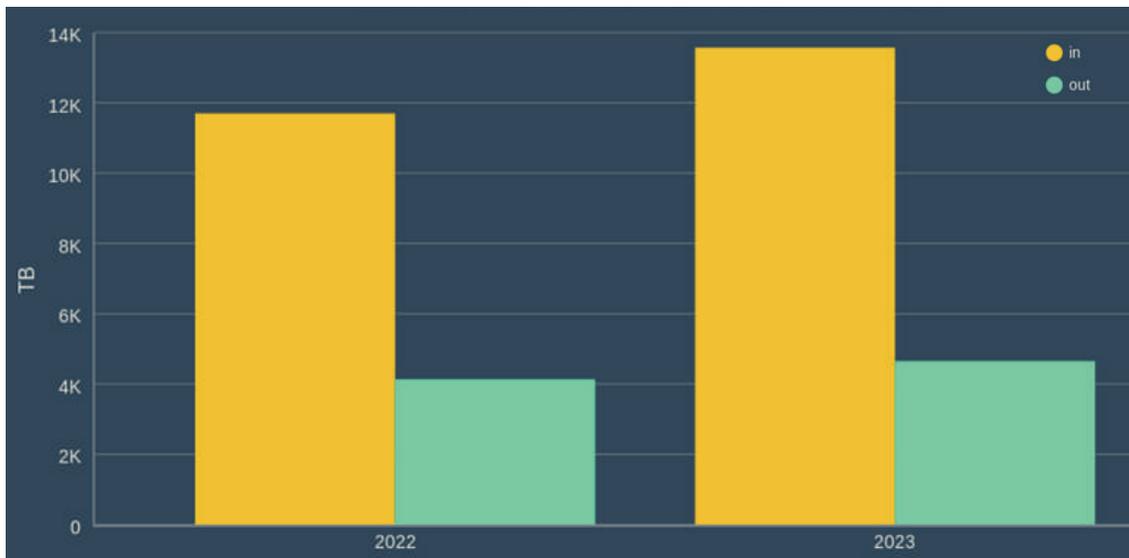
- 9 NODOS ADVA TROADM : combina la transmisión DWDM con la flexibilidad de terminar los servicios de forma reconfigurable, soportando múltiples tipos de servicios.
- 9 NODOS ILA de ADVA. Los ILA son los puntos de amplificación intermedia son requeridos en los tramos que superan los 90Km.



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

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

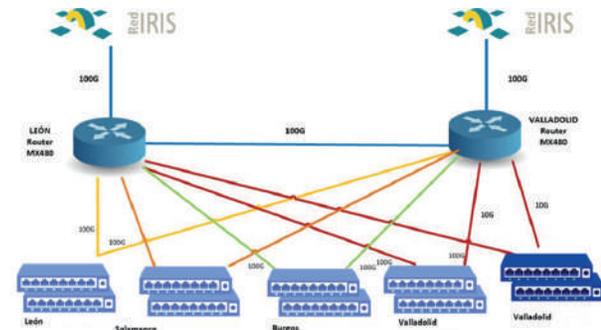
RedCAYLE llevó a cabo a finales del 2023 una renovación tecnología a través de Contrato SCAYLE 04-2022 de Suministro de Equipamiento Óptico con un precio de adjudicación de 2.572.140 €.

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.

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.



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, Consultoría 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.



España - Portugal

Referencia 0192_CIBERIA_3_E



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.



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.



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 vertebra 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.jcy.l.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.



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 Generation 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.



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

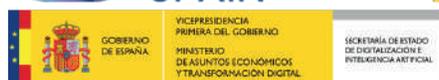
SCAYLE, Supercomputación Castilla y León (España), www.scayle.es

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.



VRSciT, Virtual Reality Science Tour

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Centro Ciência Viva de Bragança (CCVB), www.braganca.cienciaviva.pt

Pixel (Italia), www.pixel-online.net

University of Teramo (Italia), www.unite.it

VšĮ "eMundus" (Lituania), www.emundus.lt

Museum Lithuanian Education History (Lituania), www.lsim.limis.lt/en

Polytechnic Institute of Bragança (Portugal), www.portal3.ipb.pt

Universidad de León (España), www.unileon.es

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

Ejecución: 2021 al 2023.

Financiación del proyecto

Erasmus+ Programme.



Co-funded by the
Erasmus+ Programme
of the European Union



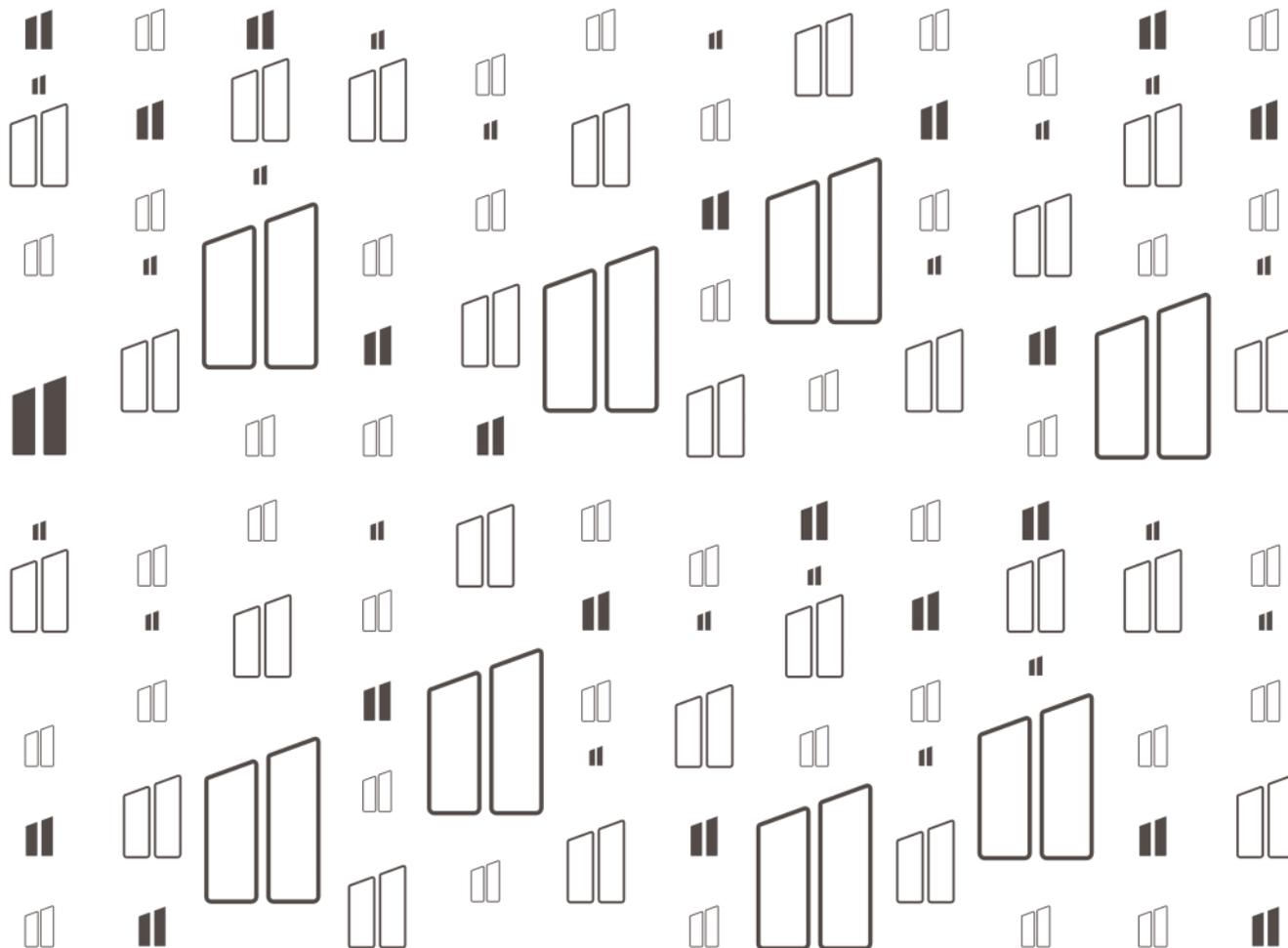
Referencia 2020-1-PT01-KA204-078597

Funciones de SCAYLE

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



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





Colaborador



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.

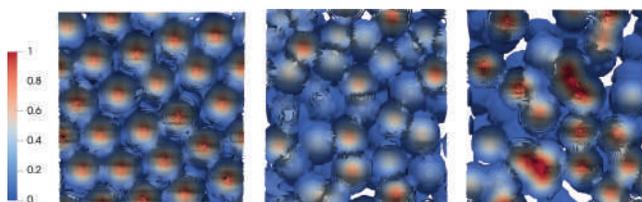
Financiación del proyecto

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.

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.



Referencia PID2022-137887NB-I00

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.

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 PRTRC17.11.

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.



Financiado por la Unión Europea
NextGenerationEU



MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN



Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia

NOS IMPULSA



Piloto para empresa de energías renovables

Objetivo del proyecto

El proyecto tiene como objetivo fundamental mejorar la capacidad de predicción de la producción energética de un parque eólico utilizando variables climatológicas. Este enfoque se centra en aplicar técnicas avanzadas de análisis de datos y algoritmos de aprendizaje automático, tanto supervisados como no supervisados, para establecer modelos predictivos que permitan una estimación precisa y fiable de la generación de energía. Al hacerlo, se busca optimizar la eficiencia operativa del parque eólico, contribuir a una planificación energética más efectiva y promover la integración sostenible de la energía eólica en el sistema de suministro de energía.

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Vexiza, <https://vexiza.com>

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

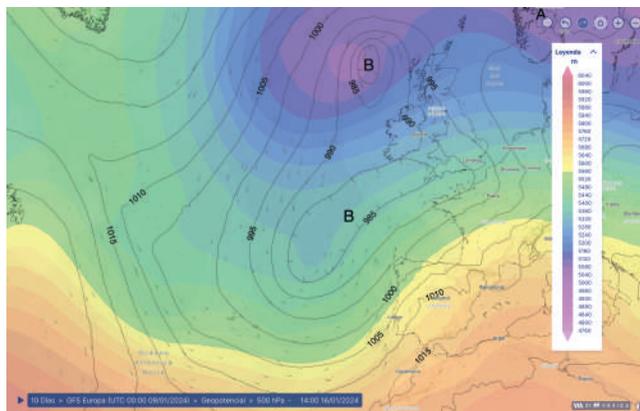
Ejecución: 2023.

Financiación del proyecto

Financiación privada.

Funciones de SCAYLE

Entrenamiento de modelos supervisados (clasificación y regresión) y no supervisados (SOM - Self Organizing Maps).



Distribución del geopotencial a 500hpa (color) del día 16/01/2024 junto con el mapa isobárico y el viento en superficie proporcionados por el modelo GFS (Fuente: WeatherMap).



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 procesado 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 procesado 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 Lorand (Hungria), 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^{32} .



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.unioviedo.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-ISCI), 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.

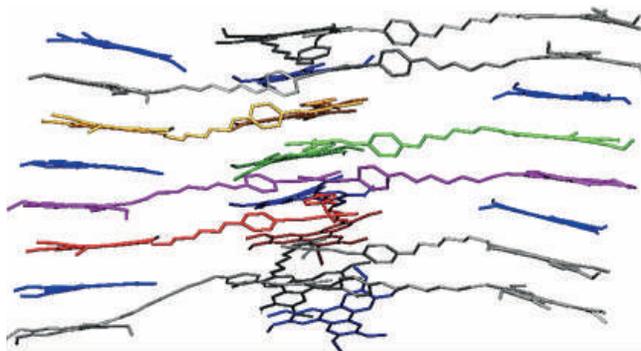
Financiación del proyecto

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](http://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

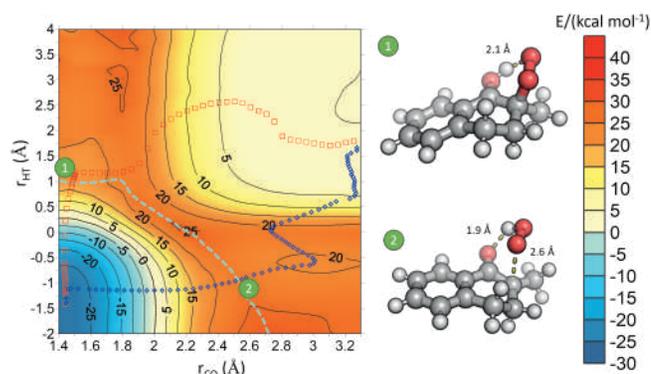
Ejecución: 2021 a 2024.

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

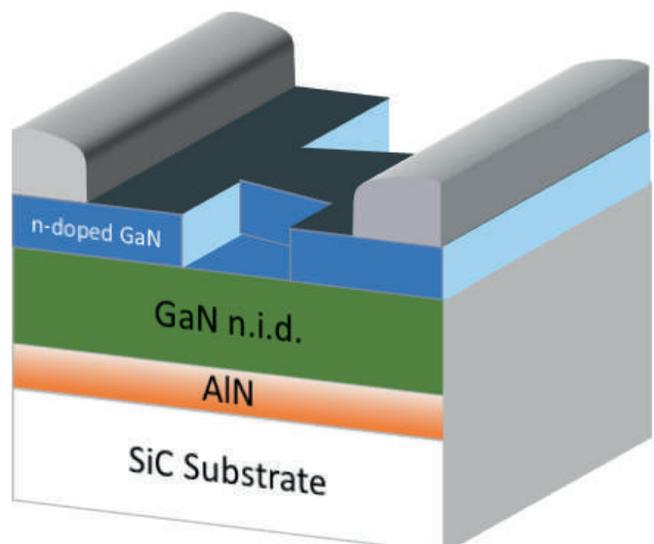
Ejecución: 2021 a 2024.

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.



Estructura tridimensional del dispositivo objeto de simulación.



Referencia PID2020-1 1 5842RB-I00

SUPERA, Sanidad vegetal sostenible mediante RNAi medioambiental para reducir el impacto de las enfermedades en la agricultura y los bosques

Objetivo del proyecto

El objetivo general de SUPERA es utilizar tecnologías de ARN de interferencia (RNAi) ambiental para desarrollar soluciones innovadoras que ayuden en el control de enfermedades de las plantas causadas por patógenos fúngicos (*Fusarium sp.*) y oomicetos (*Phytophthora sp.*).

Participantes del proyecto

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

Universidad de Valladolid, www.uva.es

Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Salamanca (IRNASA-CSIC), www.irnasa.csic.es

Centro Tecnológico CARTIF, www.cartif.es

Idai Nature (Rovensa), www.idainature.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: 2021 a 2024.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación y por la Unión Europea a través de los fondos Next Generation (NextGenerationEU/ PRTR).

Funciones de SCAYLE

En este proyecto se utiliza Caléndula para diseñar las secuencias de dsRNA y comprobar que no tengan efecto *off-target* en otros organismos, así como para los análisis de RNAseq que requieren de su gran capacidad de computación.



Estructuras de los patógenos de plantas del género *Fusarium* spp.



Referencia PLEC2021-008076

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

Objetivo del proyecto

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

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

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

Participantes del proyecto

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

Universidad de Salamanca, www.usal.es

Ejecución: 2021 a 2023.

Financiación del proyecto

Tesis doctoral.

Funciones de SCAYLE

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

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

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Dpto. de Fundamentos del Análisis Económico, Universidad de Valladolid, www.uva.es

Supercomputación Castilla y León, www.scayle.es

Ejecución: 2021 a 2023.

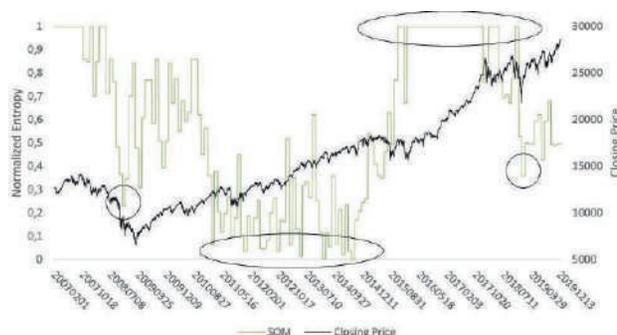
Funciones de SCAYLE

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

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

Financiación del proyecto

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



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



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

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

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

Universidad de León, www.unileon.es

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

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

Ejecución: 2021 a 2023.

Financiación del proyecto

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

Funciones de SCAYLE

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



Hidrógeno 21K

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

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

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

lang=en. JM Sport KAWASAKI, <https://es-es.facebook.com/jmsportleon>. Leomovil, www.leomovil.net. Abril2001, www.abril2001.es. J Calo Carbueros Metálicos, www.carbueros.com. Intdea, <https://intdea.com>. León noticias, www.leonoticias.com. Diario de León, www.diariodeleon.es. Asepeyo, www.asepeyo.es. Aspy, www.aspyprevencion.com

Ejecución: 2021 a 2023.

Financiación del proyecto

Financiación por patrocinio.

Funciones de SCAYLE

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



Referencia AE-482

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

Gesta Medio Ambiental SL, www.gesta.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 SI, www.qilimanjaro.tech

University of Glasgow, www.gla.ac.uk

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

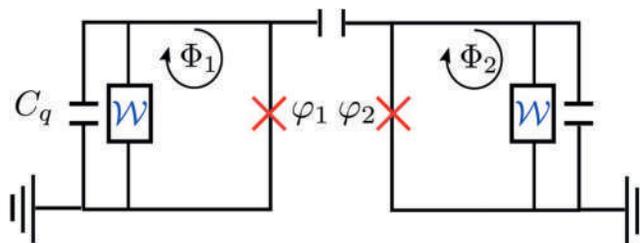
Ejecución: 2020 a 2024.

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.



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.



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 Biotecnología 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.



Astrofísica de estrellas de neutrones: retos actuales y futuros

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

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

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

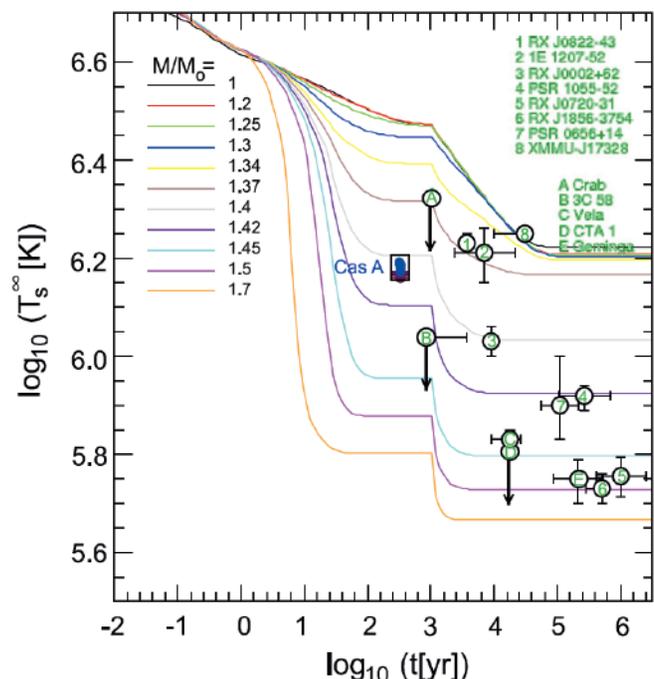
Ejecución: 2020 a 2023.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Funciones de SCAYLE

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



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



Referencia PID2019-107778GB-I00

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

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: C. Albertus, D. Barba, MA Pérez (IP), Universidad de Salalamanca, www.usal.es

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

Ejecución: 2020 a 2023.

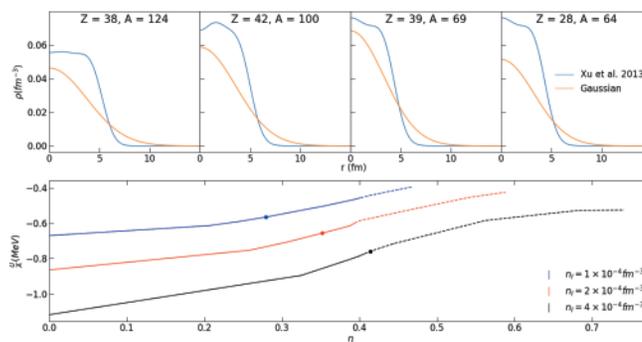
Financiación del proyecto

Junta de Castilla y León.

Funciones de SCAYLE

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

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



Esta figura muestra en el panel superior algunos de los núcleos que se usan, gaussianos, en el sistema multicomponente de la corteza de estrellas de neutrones y cómo varía la energía por barión, U/A , en función del tamaño del núcleo, eta , para diferentes densidades, n_1 .

 Junta de Castilla y León
Referencia SA096P20

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

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Universidad de Burgos, www.ubu.es

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

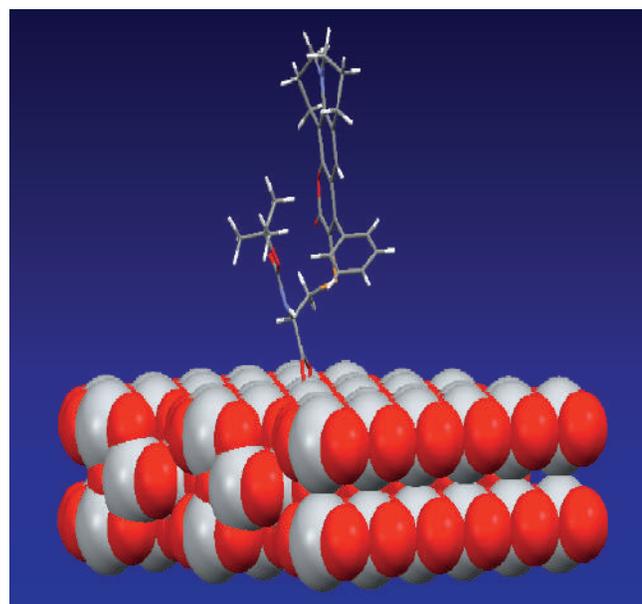
Ejecución: 2020 a 2023.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN).

Funciones de SCAYLE

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



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



Referencia PID2019-111215RB-I00

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

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Grupo de Patología Forestal de la Universidad de Valladolid, www.uva.es

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

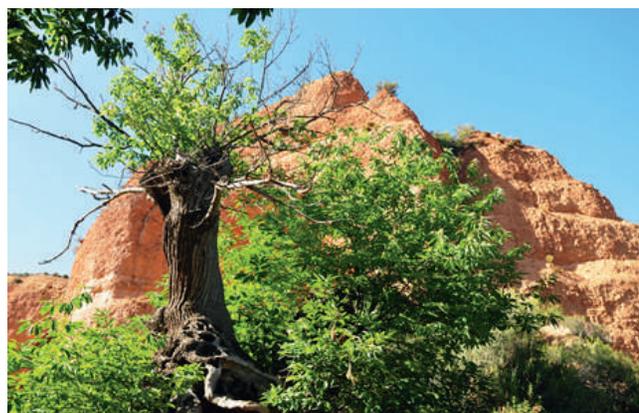
Ejecución: 2020 a 2023.

Financiación del proyecto

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

Funciones de SCAYLE

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



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



Referencia VA208P20

eVTOL PAMAU

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Capgemini Engineering, www.capgemini-engineering.com

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

Ejecución: 2020 a 2023.

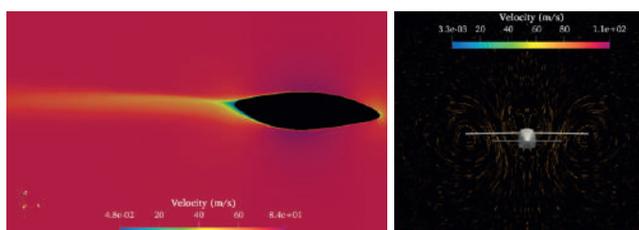
Financiación del proyecto

Financiación interna de Capgemini Engineering.

Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI).

Funciones de SCAYLE

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



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



Referencia IDI-20210508

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

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

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

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

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

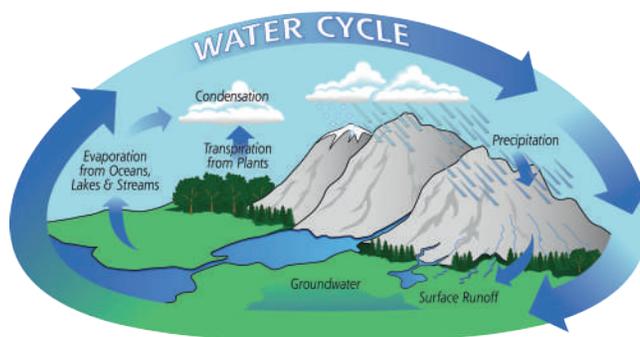
Ejecución: 2020 a 2023.

Financiación del proyecto

Ministerio de Ciencia e Innovación.

Funciones de SCAYLE

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



Credit: NASA GSFC.



Referencia PID2019-108470 RB-C22

HUMMINGBIRD, Enhanced migration measures from a multidimensional perspective

Objetivo del proyecto

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

Participantes del proyecto

Líder del proyecto: Katholieke Universiteit Leuven (KU Leuven) Belgium, www.kuleuven.be

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

www.uzh.ch, Coalizione Italiana Per Le Libertà e i Diritti Civili Onlus, Italy (CILD), <https://cild.eu>, Caritas International ASBL(CI.be), Turkey, www.turkcellteknoloji.com.tr, Belgium, www.caritasinternational.be, SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, Spain, www.scayle.es (subcontratado).

Ejecución: 2019 a 2023.

Financiación del proyecto

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

Funciones de SCAYLE

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



Referencia H2020-SC6-870661

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

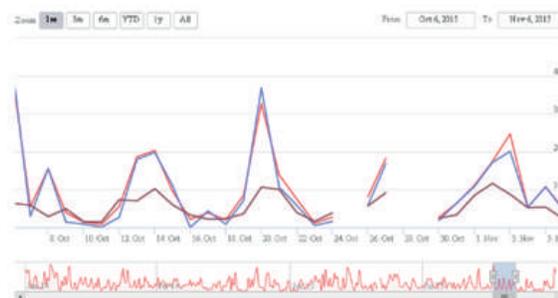
Ejecución: 2018 a 2024.

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.



Referencia RTC-2017-6635-3

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

Computation of many-body properties of Neutron Star crusts.

Grupo líder del proyecto: Universidad de Salamanca.

Integrative computational modeling pipeline to detect molecular glues.

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

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

Grupo líder del proyecto: Universidad de Salamanca.

First-principles study of ionic intercalation in the (Fe,Ni)PO₄-Na(Fe,Ni)PO₄ system as cathode material for Na-ion batteries.

Grupo líder del proyecto: CIC energiGUNE.

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

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

High pressure studies of promising AGe₂X₄ (A = Eu, Pb, Ca, Sr; X = S, Se) hosts for phosphor materials

Grupo líder del proyecto: Universitat Politècnica de València.

Modelling reactive interfaces in solid-state batteries

Grupo líder del proyecto: CIC energiGUNE.

CO dissociation on MXenes: Implications in Heterogeneous Catalysis

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

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

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

Studying Dynamic Formation of Ordered Oxygen Phases on Nanoporous Gold Using Static DFT and ab initio Molecular Dynamics Simulations.

Grupo líder del proyecto: ICREA / Universitat de Barcelona.

Structural and Electronic Properties of TiO₂/MXenes Heterostructures.

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

Global High-Resolution simulations of stellar dynamos: the effect of tidal star-planet interaction.

Grupo líder del proyecto: Institute of Space Science (CSIC).

Optical properties of cement phases - an ab initio study.

Grupo líder del proyecto: Centro de Física de Materiales.

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

Grupo líder del proyecto: IMDEA

Analysis of the TiO₂/MXene interfaces.

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

CO methanation on metal surfaces.

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

Optimization of composition and interfacial properties of halide solid electrolytes.

Grupo líder del proyecto: CIC energiGUNE.

Nurturing a Machine Learning Tool for Pourbaix Diagrams.

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

Terminated MXenes as Supports for Single Atom Catalysts.

Grupo líder del proyecto: Universitat de Barcelona.

Publicaciones científicas

Menciones a SCAYLE en publicaciones científicas

- Rozas, S., Zamora, L., Benito, C., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2023). A study on monoterpene-based natural deep eutectic solvents. *Green Chemical Engineering*, 4(1), 99-114. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.gce.2022.05.005>
- Benito, C., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2023). Liquid formulations of local anesthetics through Deep Eutectics based on monoterpenoids. *Journal of Molecular Liquids*, 369, 120852. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120852>
- Alomari, N., Al-Bodour, A., Liew, S. K., Vega, A., Aparicio, S., & Atilhan, M. (2023). Exploiting Monoterpenoids in Type V Deep Eutectic Solvents: A Combined High-Pressure Experiments and Theoretical Approach for Enhanced Carbon Dioxide and Nitrogen Absorption. *Journal of Molecular Liquids*, 391, 123267. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123267>
- Gutiérrez, A., Alomari, N., Aparicio, S., Fleming, P. D., Pekarovicova, A., Wu, Q., & Atilhan, M. (2023). Understanding of three different polyvinylpyrrolidone (PVP) based battery binders blends on graphene surfaces from first principles via DFT simulations. *Materials Chemistry and Physics*, 301, 127548. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.127548>
- Aguilar, N., Bol-Arreba, A., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2023). Theoretical Insights into Flavonol Solubilization by Deep Eutectic Solvents. *ACS Food Science & Technology*, 3(11), 1931-1947.
- Rozas, S., Gutiérrez, A., Atilhan, M., Bol, A., & Aparicio, S. (2024). Understanding the CO₂ capture potential of tetrapropylammonium-based multifunctional deep eutectic solvent via molecular simulation. *Journal of Molecular Liquids*, 393, 123416. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123416>
- Trenzado, J. L., Benito, C., Escobedo-Monge, M. A., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2023). Cineole - Decanoic acid hydrophobic natural Deep eutectic solvent for toluene absorption. *Journal of Molecular Liquids*, 384, 122036. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122036>
- Alonso-Izquierdo, A., Miguélez-Caballero, D., Nieto, L. M., & Queiroga-Nunes, J. (2023). Wobbling kinks in a two-component scalar field theory: Interaction between shape modes. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 443, 133590
- Barba-González, D., Albertus, C., & Pérez-García, M. A. (2022). Crystallization in single- and multicomponent neutron star crusts. *Phys. Rev. C*, 106(6), 65806. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.106.065806>
- González-Sánchez, L., Veselinova, A., Martín Santa Daría, A., Yurtsever, E., Biswas, R., Giri, K., Sathyamurthy, N., Lourderaj, U., Wester, R., & Gianturco, F. A. (2024). Computed Rotational Collision Rate Coefficients for Recently Detected Anionic Cyanopolynes. *The Astrophysical Journal*, 960(1), 40. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ad055e>
- Gutiérrez, A., Rozas Azcona, S., Zamora Pastor, L., Benito, C., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2023). Nature of a Tetrabutylammonium Chloride-Levulinic Acid Deep Eutectic Solvent. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(47), 20412-20426. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c02102>
- Martín Santa Daría, A., Hernández-Rodríguez, J., Ibele, L. M., & Gómez, S. (2024). Photofragmentation of cyclobutanone at 200 nm: TD-DFT vs CASSCF electron diffraction. *ArXiv E-Prints*, arXiv-2401.
- Barba-González, D., Albertus, C., & Pérez-García, M. A. (2024). Virialized equation of state for warm and dense stellar plasmas in proto-neutron stars and Supernova matter. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, stae235. <https://doi.org/10.1093/mnras/stae235>
- Trenzado, J. L., Benito, C., Atilhan, M., & Aparicio, S. (2023). Hydrophobic Deep eutectic Solvents based on cineole and organic acids. *Journal of Molecular Liquids*, 377, 121322. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121322>
- Izquierdo, A. A., Fuertes, W. G., Manton, N. S., & Guilarte, J. M. (2024). Spectral flow of vortex shape modes over the BPS 2-vortex moduli space. *Journal of High Energy Physics*, 2024(1), 20. [https://doi.org/10.1007/JHEP01\(2024\)020](https://doi.org/10.1007/JHEP01(2024)020)



FORMACIÓN

Que es la supercomputación y cómo utilizarla
Como publicar y almacenar datos en formato abierto
Workshop myQLM

Curso práctico de iniciación al uso de la SC aplicado al análisis de datos RNAseq - 6ª edición
Curso Práctico de Metagenómica y diversidad microbiana utilizando Supercomputación - 4ª edición
Curso Diseño experimental y análisis Metagenómico utilizando supercomputación - 3ª edición
Curso Práctico de Metagenómica y diversidad microbiana utilizando Supercomputación - 5ª edición
Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE

Cursos TIC

Que es la supercomputación y cómo utilizarla

Objetivos

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

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

Destinatarios

Investigadores de todas las ramas del conocimiento que manejen grandes cantidades de datos o demanden gran potencia de cálculo. El curso será introductorio y no se necesitan conocimientos previos.

Profesorado

Jesús Lorenzana Campillo
Coordinador del área de supercomputación de SCAYLE.

Duración 2 horas.

Fecha y lugar

19 de abril de 2023. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

Contenidos

¿Qué hace y para qué sirve SCAYLE?.

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

Como publicar y almacenar datos en formato abierto

Destinatarios

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

El curso será introductorio y no se necesitan conocimientos previos.

Profesorado

José Manuel Martínez García
Coordinador de Sistemas en SCAYLE.

Duración 2 horas.

Fecha y lugar

24 de mayo de 2023. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

Contenidos

Presentación del servicio OpenCAYLE.

Arquitectura OpenCAYLE.

Caso de uso.

Objetivos

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

Destinatarios

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

Profesorado

Andrés Bravo Montes.
EVIDEN.

Duración 2 horas.

Fecha y lugar

30 de octubre de 2023. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

Contenidos

Apertura del Workshop.
Introducción a la Computación Cuántica.
Introducción a myQLM.
Desarrollo cuántico (computación universal) con myQLM.
Desarrollo cuántico (optimización combinatoria) con myQLM.
Interoperabilidad.
Revisión de la documentación de myQLM.
Preguntas y clausura del workshop.

Cursos BIO

Curso práctico de iniciación al uso de la supercomputación aplicado al análisis de datos RNAseq - 6ª edición

Destinatarios

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

Fecha y lugar

Del 11 al 14 de julio de 2023. 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.
Gastrointestinal Genetics Lab, Derio, Vizcaya.

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.

Objetivos

Proporcionar formación básica para el manejo e interpretación de datos de expresión génica global procedentes de *Next Generation Sequencing* (RNA-Seq). Para ello se pretende trabajar con datos reales de expresión génica en los que se realizará: el control de calidad, el alineamiento frente al genoma de referencia, ensamblado, cuantificación y normalización de la expresión génica, análisis de expresión diferencial y análisis de enriquecimiento funcional.

Contenidos

Introducción al entorno Linux.
NGS y RNAseq.
Control de calidad y Trimming (FAstQC, otras herramientas Trimmomatic, etcF).
Alineamiento de lecturas (Star) y visualización (IGV).
Manipulación de secuencias (SamTools).
Transcript assembly (Stringtie).
Cuantificación de lecturas (RSEM y HTSeq).
Introducción a R y Bioconductor. Toma de contacto.
Análisis de expresión diferencial de RNAseq.
Introducción a las anotaciones funcionales.
Bases de datos y ontologías para anotación funcional.
Análisis de enriquecimiento funcional.
Redes funcionales.

Curso Práctico de **Metagenómica y diversidad microbiana** utilizando **Supercomputación** - 4ª edición

Objetivos

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

Destinatarios

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

Profesorado

Cristina Esteban Blanco.

Gastrointestinal Genetics Lab, Derio, Vizcaya.

Giuseppe D'Auria.

Cátedra FISABIO-Universidad de Valencia, Valencia.

Javier Tamames de la Huerta.

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), Madrid.

Duración 40 horas.

Fecha y lugar

16 al 20 de octubre de 2023. 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 taxonómicos.

Introducción a la plataforma de análisis de metagenomas.

Como decidir que método de análisis seguir.

Ensamblaje y coensamblaje de metagenomas.

Predicción de genes y búsqueda de 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 **Diseño experimental y análisis Metagenómico** utilizando **supercomputación** - 3ª edición

Destinatarios

Dirigido a investigadores interesados en estudios genómicos, a profesionales del sector de las C. Computacionales, Biología y/o Biotecnología relacionados con el diagnóstico genético y a Alumnos Universitarios de posgrado y, en general, cualquier persona afín a la temática tanto en la dimensión de la investigación, como de la innovación y el desarrollo.

Fecha y lugar

Del 20 al 24 de noviembre de 2023. Edificio CRAI-TIC, Sede SCAYLE.

Duración 36 horas.

Profesorado

Cristina Esteban Blanco.

Postdoctoral researcher, Gastrointestinal Genetics Lab, Derio, Vizcaya.

Fernando Puente Sánchez,

Swedish University of Agricultural Sciences.

Javier Tamames de la Huerta.

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), Madrid.

Objetivos

Profundizar en métodos de análisis metagenómico de secuencias: métodos de ensamblaje híbridos, combinando diferentes tipos de

secuencias, trabajar con los resultados de binning, para poder recuperar con gran precisión genomas muy completos a partir del metagenoma. y el análisis estadístico de los resultados, usando R.

Contenidos

Introducción al entorno Linux. Construcción de pangenomas. Introducción a R.

Exploración de datos metagenómicos con SQMtools y anvi'o.

Recursos computacionales y escalado de proyectos. Optimización de recursos en un clúster de supercomputación.

Análisis multivariante.

Detección de funciones metabólicas y taxones con abundancia diferencial en conjuntos de metagenomas /metatranscriptomas.

Recuperación y análisis del gen del ARNr 16S a partir de datos metagenómicos.

Generación y análisis de redes de coabundancia.

Resolución de especie y diversidad intra-específica en análisis metagenómicos.

Comparación de estrategias para el análisis metagenómico a gran escala.

Modelado de datos metagenómicos con técnicas de machine learning.

Curso Práctico de **Metagenómica y diversidad microbiana** utilizando **Supercomputación** - 5ª edición

Objetivos

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

Destinatarios

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

Profesorado

Cristina Esteban Blanco.

Gastrointestinal Genetics Lab, Derio, Vizcaya.

Giuseppe D'Auria.

Cátedra FISABIO-Universidad de Valencia, Valencia.

Javier Tamames de la Huerta.

Centro Nacional de Biotecnología (CNB), Madrid.

Duración 40 horas.

Fecha y lugar

27 de noviembre al 1 de diciembre de 2023. 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 taxonómicos.

Introducción a la plataforma de análisis de metagenomas.

Como decidir que método de análisis seguir.

Ensamblaje y coensamblaje de metagenomas.

Predicción de genes y búsqueda de homología.

Asignación funcional y taxonómica.

Mapeo de lecturas sobre contigs para estimar abundancias.

Finalización del primer análisis metagenómico.

Binning: obtención de MAGs. Binning: Validación y refinado.

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

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

Herramientas auxiliares. Otros modos de análisis: prescindiendo del ensamblaje.

Herramientas auxiliares: Análisis de genomas.

Introducción a SQMTools para análisis estadístico de los resultados.

Otras colaboraciones en materia de formación de SCAYLE

Asignatura de Arquitecturas Avanzadas de Computadores.

Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

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

Asignatura Computación de Altas Prestaciones. Máster en Ingeniería Informática.

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

Universidad de León.

24 de octubre de 2022 al 10 de marzo 2023.

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

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

Universidad de León.

24 de febrero al 15 de julio de 2023.

Asignatura de Programación en entornos distribuidos.

Máster en Robótica e Inteligencia Artificial.

Universidad de León.

13 de abril al 31 de mayo de 2023.

Asignatura Computación de alto rendimiento.

Grado en Bioinformática.

Universidad Católica de Ávila.

10 octubre a 22 de diciembre de 2023.

Asignatura Computación de Altas Prestaciones. Máster en Ingeniería Informática.

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

Universidad de León.

10 octubre de 2023 al 20 de enero de 2024.

Asignatura de Arquitecturas Avanzadas de Computadores.

Máster Universitario en Ingeniería Informática.

Universidad de Burgos.

10 octubre de 2023 al 20 de enero de 2024.

DATOS DE SCAYLE

Datos económicos

Estadísticas de uso

Actividades de promoción, difusión y comunicación

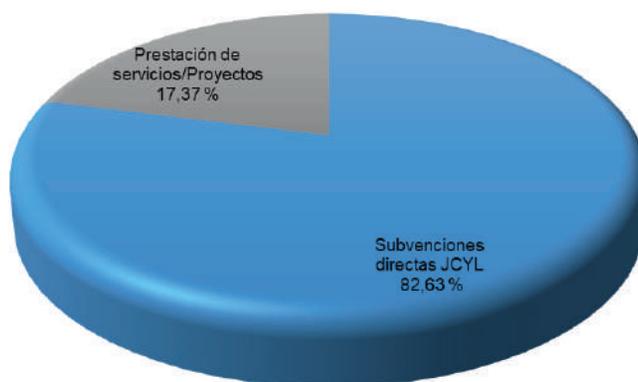
Visitas a SCAYLE

datos económicos

Gastos de SCAYLE, ejercicio 2023:

2.743.464,30 €

La principal partida de gasto de SCAYLE en 2023 ha sido la de amortizaciones, debido al incremento del volumen de inversiones ejecutadas en el ejercicio 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. Durante el ejercicio, en virtud de la actividad desarrollada, se ha incurrido en un gasto financiero.



Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2023.

Ingresos de SCAYLE, ejercicio 2023:

2.743.464,30 €

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

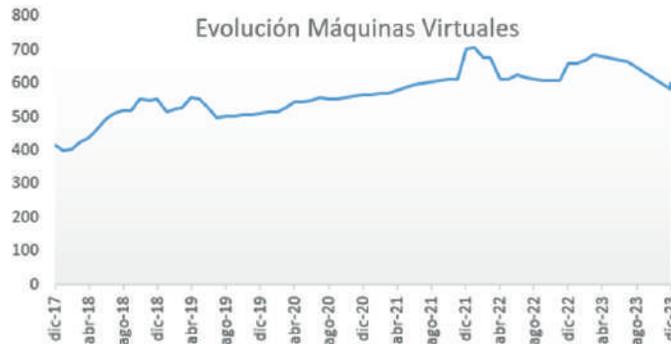


Fuente: Área Administrativo-Financiera SCAYLE, 2023.

Utilización del Sistema

Servicios Cloud

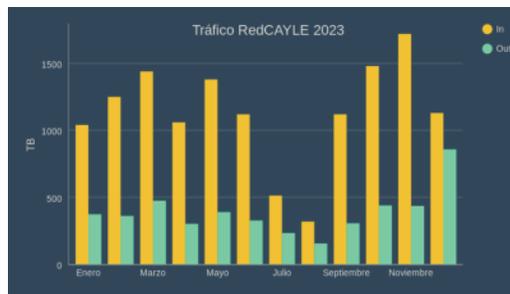
El año 2023 terminó con 599 servidores virtuales alojados:



Número total de máquinas virtuales en la plataforma. Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2023. © SCAYLE.

RedCayle

El tráfico global acumulado que se ha cursado en el año 2023 alcanza una suma de 13,57 PBytes de tráfico entrante y 4.65 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 marzo, y noviembre con 1.44 PBytes y 1.72 PBytes respectivamente.



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

OpenCayle - Servicio de almacenamiento de datos

El año 2023 terminó con alrededor de 1.5PB de datos almacenados y la capacidad del sistema se ha visto incrementada notablemente (todavía en proceso) debido a las inversiones:

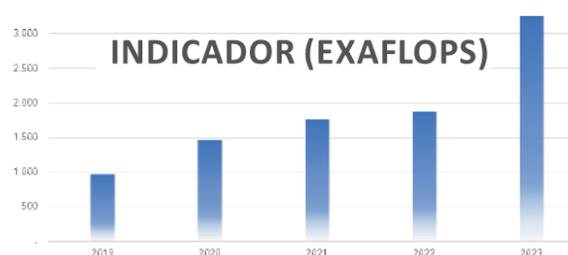


Evolución de OpenCAYLE (TB). Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2023. © SCAYLE.

Cálculo científico

Durante el año 2023 se ejecutaron en los diferentes sistemas de cálculo de SCAYLE trabajos de cálculo por un total de 28.891.447 horas en CPUs y en GPUs 60.057 horas.

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



Indicador de ExaFLOPS. Fuente: Área Técnica SCAYLE, 31/12/2023. © SCAYLE.

actividades de promoción, difusión y comunicación

- 1 de marzo de 2023 - Encuentros FUNDOS. Inteligencia Humana - Inteligencia Artificial.
- 14 de abril de 2023 - Presentación del Plan Complementario de Comunicaciones Cuánticas de Castilla y León.
- 3 de junio de 2023 - Día del Código activo.
- 12 de septiembre de 2023 - Jornada de promoción de la supercomputación para empresas.
- 24 y 25 de septiembre de 2023 - Jornada PIDI Sevilla.
- 1 de octubre de 2023 - XII Simposium Internacional 2023.
- 18 y 19 de octubre de 2023 - 17ENISE.
- 19 al 21 octubre de 2023 - Plan Complementario de Comunicaciones Cuánticas.
- 24 y 25 de octubre de 2023 - Encuentro Tecnológico Burgos Industria 4.0 2023 #3burgosi40.
- 27 de octubre de 2023 - Salamanca Tech - Quantum Technology.
- 22 de noviembre de 2023 - Jornadas Técnicas de RedCAYLE.
- 27 al 30 de noviembre de 2023 - HUB Investigación e Innovación en Salud de Castilla y León.
- 28 de noviembre de 2023 - Foro Nacional de computación cuántica.

visitas a SCAYLE

- 10-01-2023 - Máster Tecnologías aplicadas del fuego - Universidad de Lérida.
- 12-01-2023 - 2º Bachiller Colegio de La Asunción de León.
- 17-01-2023 - CEIP Ponce de León.
- 26-01-2023 - 2º Bachiller Colegio Virgen Blanca.
- 31-01-2023 - CEIP Ponce de León.
- 01-02-2023 - Dpto. de Ingeniería Eléctrica y de Sistemas y Automática de la Universidad de León.
- 09-02-2023 - 2º de Desarrollo de Aplicaciones Web del IES San Andrés de Villabalter.
- 14-02-2023 - CEIP Gumersindo Azcárate.
- 23-02-2023 - FP grado medio "Sistemas Microinformáticos y Redes" del I.E.S San Andrés.
- 28-02-2023 - CEIP Gumersindo Azcárate.
- 10-03-2023 - Máster interuniversitario Industria 4.0, Universidad de León y la Universidad de Vigo.
- 14-03-2023 - CC. Sagrado Corazón Jesuitas.
- 21-03-2023 - CEIP Camino del Norte.
- 20-03-2023 - Administración Electrónica.
- 23-03-2023 - Administración Electrónica.
- 24-03-2023 - Administración Electrónica.
- 28-03-2023 - CC. Sagrado Corazón Jesuitas.
- 29-03-2023 - CEIP Benito León.
- 10-04-2023 - Máster Universitario Europeo en Dirección de Empresas (European Master in Business Studies EMBS).
- 20-04-2023 - CEPA Faustina Álvarez García de León.
- 21-04-2023 - 4º curso del Grado en Ingeniería Informática de la Universidad de Salamanca.
- 25-04-2023 - CEIP La Biesca y Anejas.
- 28-04-2023 - Grado en Ingeniería Matemática de la Universidad Europea de Madrid.
- 04-05-2023 - FP María Auxiliadora.
- 09-05-2023 - CRA Cubillos.
- 18-05-2023 - FP María Auxiliadora.
- 23-05-2023 - CEIP Virgen Blanca.
- 25-05-2023 - Obra Socila CaixaBank.
- 26-05-2023 - Taller de Empleo del Ayuntamiento de Llanera.
- 06-06-2023 - CEIP Fray Luis de León.
- 20-06-2023 - CEIP Camino del Norte.
- 27-06-2023 - University of Washington.
- 29-06-2023 - Campus Tecnológico Ule-Play Code.
- 06-07-2023 - Campus Tecnológico Ule-Play Code.
- 11-07-2023 - Cybersecurity Summer BootCamp - INCIBE.
- 11-07-2023 - Semana internacional de verano-University of Washington-Ule.
- 12-07-2023 - Cybersecurity Summer BootCamp - INCIBE.
- 13-07-2023 - Cybersecurity Summer BootCamp - INCIBE.
- 13-07-2023 - Campus Tecnológico Ule-Play Code.
- 14-07-2023 - Curso práctico de iniciación al uso de la supercomputación aplicado al análisis de datos RNAseq-6ª Edición.
- 20-10-2023 - Curso práctico de metagenómica y diversidad microbiana utilizando supercomputación - 4ª edición.
- 13-11-2023 - Semana de la Ciencia.
- 14-11-2023 - CEIP San Isidoro.
- 15-11-2023 - Semana de la Ciencia.
- 16-11-2023 - Colegio Nuestra Señora del Carmen-4º de ESO.
- 17-11-2023 - Semana de la Ciencia.
- 24-11-2023 - Curso de Diseño experimental y análisis Metagenómico utilizando supercomputación - 3ª edición.
- 28-11-2023 - Colegio Leones San Isidoro.
- 01-12-2023 - Curso práctico de metagenómica y diversidad microbiana utilizando supercomputación - 5ª edición.
- 12-12-2023 - CEIP Anejas.
- 12-12-2023 - Academia Básica del Aire y del Espacio.
- 14-12-2023 - CEPA Faustina Álvarez García de León.

