



Nuevo desafío en I+D de Knet

KNET COMUNICACIONES JUNTO A LOS DEPARTAMENTOS DE QUÍMICA Y MATEMÁTICA Y COMPUTACIÓN DE LA UNIVERSIDAD DE LA RIOJA SE HAN UNIDO PARA LLEVAR A CABO UN PROYECTO DE GRAN IMPORTANCIA LLAMADO RIOJASCIENCE@HOME

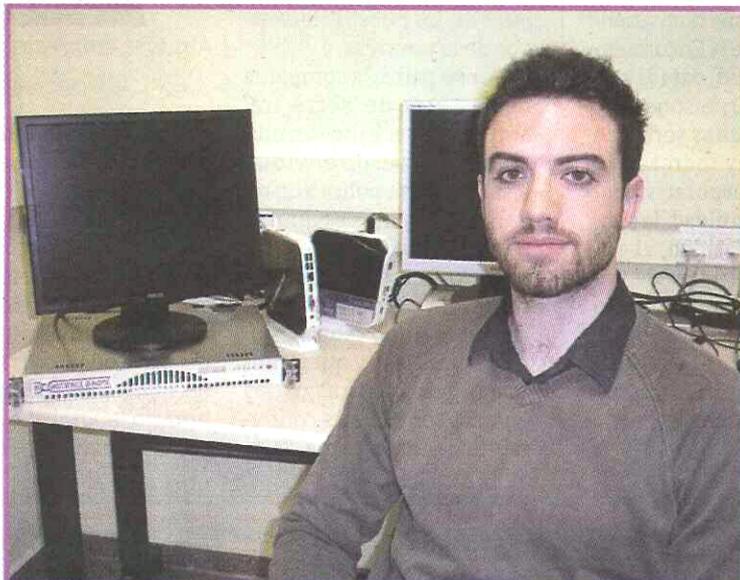
RiojaScience@home es un ambicioso proyecto basado en el desarrollo de la arquitectura para la implementación de programas basados en el cálculo distribuido (Cloud Computing) utilizando las GPUS (Graphics Processing Units) de usuarios remotos. Consiste en describir el mecanismo de ruptura de la proteína NS3, responsable de la transmisión del virus de la Hepatitis C, y su finalidad última es desarrollar una cura contra dicho virus.

Dentro del departamento de Matemática e Informática de la UR dirige el proyecto el grupo de Investigación en Programación y Cálculo Simbólico (<https://es.us.unirioja.es>), integrado por los investigadores Dr. Eloy J. Mata, Dr. Francisco J. García y Dr. José M. Sota. Este grupo está especializado en cálculo científico enfocado a la aplicación de métodos matemáticos en Ingeniería del Software.

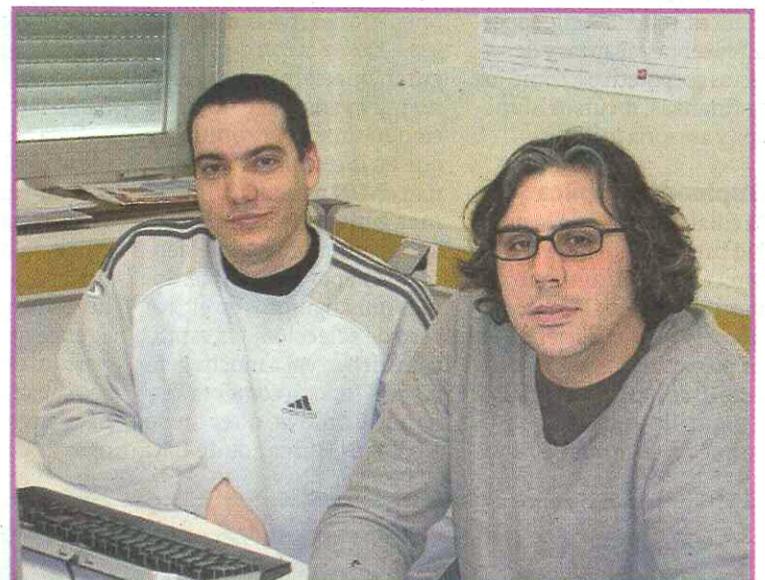
En el Departamento de Química de la UR, el área de Cinética y Dinámica de Reacciones Químicas (<http://www.unirioja.es/laserdyn>), integrada por los investigadores Dr. Rodrigo Martínez y Dr. José Ángel Martínez, es la que se encarga de la dirección del RiojaScience@home, principalmente en lo referente a la investigación de la simulación de dinámica molecular y QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) de sistemas enzimáticos, que resulta de sumo interés para la Biomedicina.

Desarrollando la integración entre BOINC y el software de simulación de dinámica molecular está Félix Lanas Mangado, quien recientemente ha finalizado la carrera de Ingeniería Técnica en Informática de Gestión.

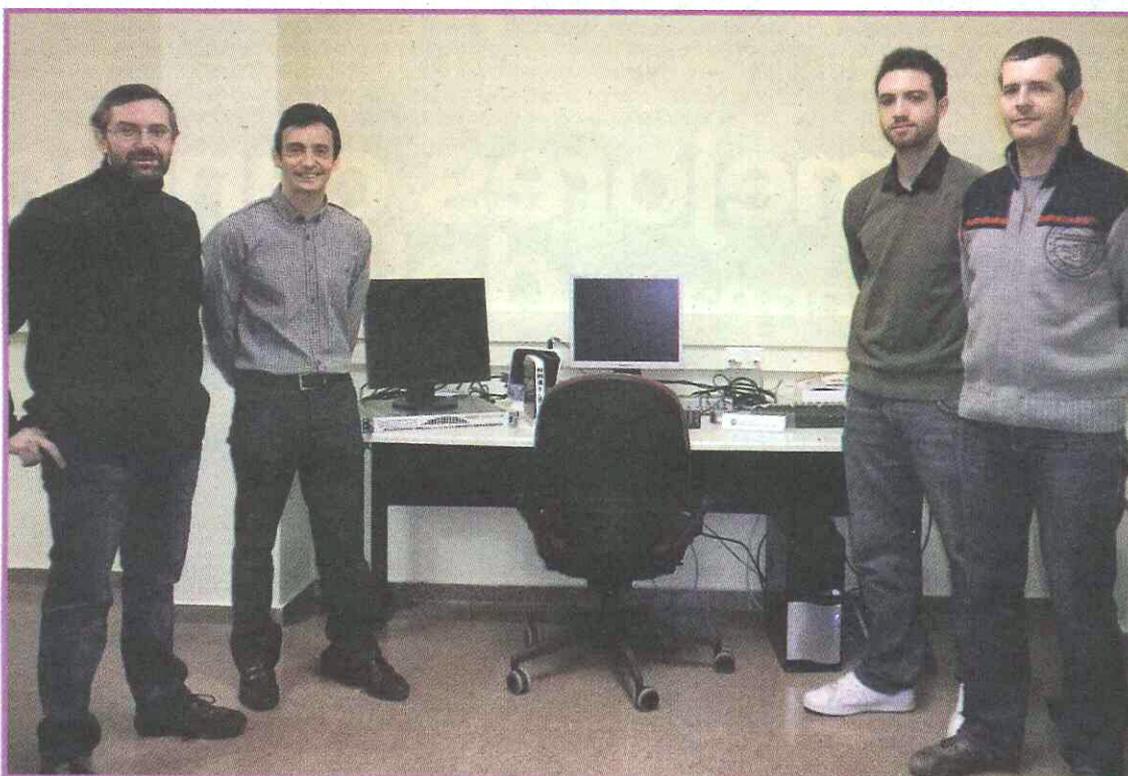
KNET ha integrado este proyecto a sus desafíos de I+D. A cargo de su dirección Mario Ezquerro, que forma parte del área de Sistemas de Computación, apoyado por el equipo de ingenieros de Knet de los departamentos de Ingeniería de Software y de Ingeniería de Redes. La finalidad de Knet formando parte del proyecto RiojaScience@home es acercar la posibilidad a todos los riojanos



Félix Lanas Mangado



Rodrigo Martínez y José Ángel Martínez (Dpto. de Química de la UR).



DE IZQUIERDA A DERECHA: Mario Ezquerro (KNET Comunicaciones), Eloy J. Mata (Departamento de Matemática e Informática de la UR), Félix Lanas Mangado y José Manuel Sota Eguizabal.

de participar en un desafío de I+D, que tendrá resultados que se revertirán en la sociedad en forma de cura de la Hepatitis C.

La participación de KNET consta de dos fases. En la primera KNET aporta sus conocimientos sobre servidores e Internet y un

laboratorio, el cual simula la red de un operador estándar de Internet. Así, previo a su puesta en marcha, se evalúa cómo interactúa el sistema y se le somete a pruebas de stress y de laboratorio. Una vez que el proyecto esté en funcionamiento comienza la

segunda fase, en la que KNET aportará su red como operador, además de supervisar su funcionamiento y mantenimiento.

La participación riojana se sintetiza en lo que hemos llamado 'Computación Voluntaria', es aquí donde entran todos los riojanos

que estén dispuestos a ceder el tiempo libre de su GPU. Para poder participar y colaborar en el proyecto debemos instalar en nuestro ordenador un programa basado en la tecnología BOINC, una infraestructura de computación distribuida.

Una vez descargado el programa, en aquellos momentos que el ordenador esté encendido pero no esté siendo utilizado, éste se activará como salvapantallas para realizar los cálculos de plegamiento de la proteína NS3. De esta manera, los ciclos en los que la GPU no sea usada, formarán parte de un proyecto riojano de gran envergadura, aprovechando la potencia de cálculo de las tarjetas de vídeo de los ordenadores.

El ordenador central envía a un ordenador voluntario un dato sobre la proteína a sintetizar, una vez que éste es resuelto mediante un algoritmo el resultado es devuelto a la central y un nuevo dato es enviado. El ciclo puede ser interrumpido en cualquier momento ya que la información queda almacenada y cuando se vuelve a poner en funcionamiento el programa retoma la actividad donde quedó la última vez. La unión del trabajo de procesamiento de todos los ordenadores voluntarios creará el equivalente a un supercomputador, de no ser por esta unión, sería muy costoso y el proyecto imposible de realizar.