

MEMORIA ANUAL 2008

INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS (BIFI)

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA



UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

V MEMORIA ANUAL: AÑO 2008

INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS (BIFI)

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

ÍNDICE

1. PRINCIPALES ACTUACIONES	3
2. FUNCIONAMIENTO INSTITUCIONAL	4
3. ORGANIGRAMA DE INVESTIGACIÓN	5
4. CONGRESOS ORGANIZADOS POR EL BIFI EN 2008.....	5
5. EL LABORATORIO DE COMPUTACIÓN Y SUPERCOMPUTACIÓN.....	6
6. EL LABORATORIO DE BIOLOGÍA MOLECULAR	10
7. NUEVO EDIFICIO	11
8. AYUDAS OBTENIDAS	11
9. PERSONAL. CONTRATACIÓN INVESTIGADORES.....	12
10. COLOQUIOS Y SEMINARIOS BIFI.....	12
11. CONVENIOS Y RELACIONES CON OTROS CENTROS DE INVESTIGACIÓN	13
12. INVESTIGACIÓN. GRUPOS CONSOLIDADOS DGA.....	13
13. INVESTIGACIÓN. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN	14
14. PUBLICACIONES CIENTÍFICAS	14
15. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN	14
16. TESIS DOCTORALES LEÍDAS EN 2008	20
17. OTRAS ACTUACIONES	21
ANEXO I	22
ANEXO II.....	35

1. PRINCIPALES ACTUACIONES.

A lo largo del año 2008 ha proseguido el proceso de **consolidación** del BIFI como Instituto de Investigación tanto en el aspecto institucional como de funcionamiento, lo que se pone de manifiesto en los siguientes datos.

- Se han celebrado dos **Consejos del Instituto** a lo largo del 2008, el **ordinario** de 7 de febrero a las 19.30h, en el que se aprobaron las actuaciones realizadas y los proyectos más importantes a llevar a cabo en a lo largo de 2008, y el **extraordinario** de elección de director de 27 de junio a las 12.30h, en el que se reeligió a José Félix Sáenz como director, no habiéndose presentado ningún otro candidato al cargo. Tras este Consejo el Director amplió Equipo de Gobierno con un criterio de continuidad. El **Equipo de Gobierno** ha realizado ocho reuniones formales a lo largo del año, Los días 26 y 27 de marzo se llevó a cabo la **evaluación** externa del BIFI que periódicamente se realiza a iniciativa del GA, evaluación positiva que realizó algunas recomendaciones que estamos en vías de cumplimentar.



- Realizamos la **III Conferencia Internacional del BIFI 2008** el 6, 7 y 8 de febrero en la ciudad de Zaragoza, con asistencia de más de 80 investigadores procedentes de Universidades y Centros de Investigación tanto españolas como de otros países.

- Asimismo realizamos la **VI Reunión Aragonesa de Estabilidad y Plegamiento de Proteínas** en San Sebastián, el 8-9 Mayo de 2008. Colaboramos en la organización del **16th International Symposium on Flavins and Flavoproteins** celebrado en el Palacio de Congresos, Jaca del 8 al 13 de junio de 2008, y en **V Encuentro de Neurociencias** Avances en Neurociencias: Moléculas y Sistemas, Patologías y Aplicaciones Clínicas de Zaragoza (Jueves, 11 de Diciembre de 2008), Facultad de Veterinaria. Estamos organizando la IV Conferencia Nacional del BIFI en febrero de 2009.

- A la espera de poder ocupar el **nuevo edificio** de Institutos en el ACTUR a lo largo de 2009, hemos precisado nuestras propuestas de distribución del espacio del BIFI. Mientras tanto seguimos utilizando los **locales** del edificio Cervantes en Corona de Aragón, en los que hemos aumentado la superficie utilizada. En particular hemos aumentado la capacidad de computación y la seguridad del Cluster, y mejorado nuestra infraestructura de investigación experimental mediante la incorporación de nuevos aparatos al laboratorio de Biología Molecular.

- Participamos con nuestra presencia en el **Pabellón de la Ciencia** de la Feria de muestras de Zaragoza del 7 al 13 de octubre, mediante un "stand" de nuestra actividad en Proteínas y una sala en la que se mostraba al público la simulación en tres dimensiones del comportamiento del plasma en un reactor de fusión, también mostrábamos el funcionamiento de Ibercivis. Participamos asimismo en el día del **Software Libre** el 18 de octubre en la Plaza del Pilar de Zaragoza, explicando Ibercivis y el Miror de Suse del BIFI.

- En **infraestructuras de investigación** estamos pendientes de la instalación del **difractómetro de rayos X** en los laboratorios del nuevo edificio. Hemos solicitado **nuevas inversiones** con evaluación positiva, de cuya confirmación estamos pendientes: Tres de computación, los proyectos Aragrid, computador CECAM y Janus II y cuatro de Biología molecular Robot de Cristalografía, Biacore para preparación de muestras, Calorímetro de titulación isoterma y Sistema de análisis de fluorescencia.

- El 27 de febrero de 2008 presentamos en Trento (Italia) el superordenador **JANUS**, un ordenador dedicado desarrollado en el BIFI en colaboración con la Universidad de Roma, Complutense de Madrid y Universidad de Extremadura; financiado en gran medida por el Proyecto de Infraestructuras de Investigación (FEDER-GA), y fabricado en Italia por la empresa Eurotech, con la que se ha firmado un contrato de derechos de comercialización. El Janus uno de los ordenadores más potentes del mundo para sus aplicaciones se presentó en Zaragoza el 27 de mayo de 2008 en la sede de Ibercaja con la presencia de la Consejera de Ciencia, del Rector y del Presidente de Ibercaja.

- El 13 de febrero de 2008, con la presencia del Presidente del GA Marcelino Iglesias se inauguró el superordenador **"Caesaraugusta"** nodo de la **"Red Española de Supercomputación"**, instalación calificada de "Singular" por el Ministerio. Está situada en la Facultad de Ciencias de Zaragoza, con asistencia de la DG de investigación del MEC y representantes del BSC (Barcelona Supercomputer Center) que gestiona la RES. Se firmó el Convenio entre BSC, Gobierno de Aragón y Universidad de Zaragoza que permite su instalación y funcionamiento y se han contratado dos técnicos cofinanciados por el GA para su gestión. En estos momentos tenemos ya una propuesta de **ampliación** (duplicación de su capacidad), que requiere una ampliación de

las instalaciones de la Facultad de Ciencias en cuya tramitación estamos trabajando.

- En junio de 2008 se ha puesto en marcha el **proyecto “Ibercivis”**, heredero del proyecto “Zivis” de 2007, superordenador ciudadano de ámbito estatal para cálculos científicos y que se desarrolla con la colaboración del CIEMAT, Politécnica de Valencia, CSIC y BIFI a quien corresponde la dirección del proyecto. El superordenador lo presentó en el CSIC en Madrid el nuevo Secretario de Estado de Investigación Carlos Martínez el 20 de junio de 2008, y ha recibido patrocinio de la DGA, Ibercaja, DPZ y Ayuntamiento de Zaragoza, en la actualidad funciona a pleno rendimiento como infraestructura de computación en distintas aplicaciones científicas.

- Hemos continuado en 2008 con la participación en dos proyectos de investigación europeos ambos relacionados con la **tecnología GRID** y hemos propuesto dos nuevos proyectos de tecnología GRID, el **Aragrid** de creación de una red de computación GRID en Aragón, dentro del proyecto de Infraestructuras Científicas apoyado con fondos FEDER, y el **Piregrid** proyecto europeo presentado a “Interreg IV” dentro del Programa de Cooperación Transfronteriza España – Francia, que ha sido aprobado el 12 de diciembre de 2008, como “favorable with conditions”, lo que implica que hay que introducir algunas modificaciones antes de junio de 2009.

- Hemos participado en numerosos proyectos y **grupos de investigación** tanto estatales como autonómicos; tres Grupos de excelencia de Investigación y un grupo consolidado de investigación, reconocidos por el Gobierno de Aragón forman parte del BIFI.

- Se ha mantenido el **apoyo institucional** al funcionamiento del Instituto, del GA, de Ibercaja tanto a Ibercivis como al funcionamiento global del BIFI a través del convenio de colaboración y otras ayudas de distintas instituciones públicas y privadas a proyectos específicos. Todo ello nos ha permitido la realización del Congreso Internacional, la contratación de investigadores, técnicos y becarios, así como la inversión en las nuevas infraestructuras de los laboratorios antes señalados.

- En 2008 se ha incorporado al BIFI como **investigador ARAID** Adrián Velázquez y hemos obtenido un puesto de investigador de ARAID para trabajar en cristalización de proteínas, que se seleccionará e incorporará en 2009. También se han incorporado como investigadores contratados por la Universidad de Zaragoza, procedentes del programa Ramón y Cajal José Alberto Carrodegua en Biología Molecular y Pierpaolo Bruscolini en Biofísica. Como técnicos en Computación para la gestión de nuestros recursos hemos contratado con cofinanciación del GA tres **técnicos ingenieros informáticos**, para uno de los cuales hemos obtenido también apoyo en la convocatoria estatal. He-

mos contratado asimismo becarios ligados a proyectos, algunos de ellos con empresas.

- Se han seguido realizando los **Coloquios y Seminarios BIFI**, algunos de los cuales forman parte de un programa de doctorado con calificación de excelencia, con la presencia de investigadores españoles y de todo el mundo, que han mantenido el contacto y la colaboración externa.



- Numerosos **artículos científicos** llevan la referencia del BIFI y hemos tenido presencia en varios Congresos nacionales e internacionales, en particular en los organizados por el Instituto.

2. FUNCIONAMIENTO INSTITUCIONAL.

En el Consejo ordinario celebrado el 7 de febrero de 2008 a las 19.30 h. en el Sala del Edificio Cervantes, se aprobó la gestión del Equipo de Gobierno y en el Consejo extraordinario del 27 de junio se eligió de nuevo a José Félix Sáenz como Director, en septiembre se conformó el nuevo Equipo de Gobierno, cuya composición no está totalmente cerrada.

Se han incorporado al nuevo equipo María Fillat, Olga Abian, Víctor Gopar, Guillermo Losilla y Fermín Serrano y han dejado de pertenecer Javier Sancho y Víctor Martín Mayor por dimisión. Siguen en el Equipo: Alfonso Tarancón, José Luís Alonso, Adrián Velázquez, Milagros Medina, Mario Floría, Fernando Falo, Pierpaolo Bruscolini y Yamir Moreno.

El nuevo Equipo de Gobierno ha decidido dotarse de una nueva Estructura de Investigación, con la creación de un **Comité de Investigación** cuya composición y funciones está sometida a discusión y elaborar un **Plan Estratégico del Instituto** de cuya

coordinación se responsabiliza Fernando Falo con la colaboración de Fermín Serrano.

3. ORGANIGRAMA DE INVESTIGACIÓN.

Estructura de investigación

La coordinación de la investigación la han llevado a cabo los directores científicos: Ernesto Freire y Enzo Marinari. En el futuro el órgano responsable de coordinar la investigación del BIFI será el **Comité de Investigación** cuya estructura y funciones están por determinar y en el que previsiblemente se integrarán los directores científicos junto con otros investigadores del Instituto. La investigación del BIFI se estructura en ocho líneas de investigación con sus correspondientes responsables, dos de los cuales tienen a su cargo los dos laboratorios de Computación y Biología Molecular.

Líneas de investigación

Se han establecido a propuesta de los directores científicos, cada una de ellas con un coordinador. La división en Líneas no debe entenderse como criterio separador, sino que en ellas debe primar el criterio de cooperación entre los grupos y la interdisciplinariedad de la investigación.

- **Materiales complejos y Fusión nuclear** (Complex Materials and Nuclear Fusion). Coordinador Víctor Martín-Mayor.
- **Redes Complejas y Sociedad** (Complex Networks and Human Society). Coordinador Yamir Moreno.
- **Física de Sistemas Biológicos** (Physics of Biological Systems). Coordinador PierPaolo Bruscolini.
- **Transporte cuántico y Computación cuántica** (Quantum Transport and Quantum Computing) Coordinador Víctor Gopar
- **Estabilidad y plegamiento de proteínas** (Protein stability and protein folding). Coordinador Javier Sancho.
- **Interacción proteína-ligando** (Protein-ligand interaction, docking and screening). Coordinador Adrián Velázquez.
- **Interacción proteína-proteína y transferencia de electrones** (Protein-protein interaction and electron transfer) Coordinadora Milagros Medina.
- **Interacción DNA-proteína y regulación genética** (Protein-DNA interaction and genetic regulation) Coordinadora María Fillat.

• **Computación y Supercomputación** (Computing and Super-Computing). Coordinador Guillermo Losilla.

• **Laboratorios de Biología Molecular y Cristalografía de Proteínas** (Molecular Biology and Crystallography). Coordinadora Olga Abián.

4. CONGRESOS ORGANIZADOS POR EL BIFI EN 2008.

Congreso Internacional BIFI 2008

El 6, 7 y 8 de febrero realizamos la III Conferencia Internacional del BIFI 2008 “Large Scale Simulations of Complex Systems, Condensed Matter and Fusion Plasma”, en la ciudad de Zaragoza, con asistencia de más de 80 investigadores procedentes de Universidades y Centros de Investigación tanto españolas como de otros países.

Los conferenciantes invitados fueron:

Carlos Alejandre (ITER Deputy Director-General, Cadarache)
Título: ITER: a large scale complex fusion project. Status and overview.

Benjamin Carreras (Bacv solutions Inc, Oak Ridge)
Título: Title: Self-organization and plasma confinement.

Andrea Cavagna (Università di Roma I)
Título: Three dimensional reconstruction of starlings in flight: an experimental investigation of collective behavior.

Wolfhard Janke (Universität Leipzig)
Título: Modeling and simulation of biological macromolecules.

Frank Jensen (University of Southern Denmark, Odense)
Título: Large scale computation in biological chemistry.

Volker Naulin (Risø National Laboratory • Technical University of Denmark)
Título: The plasma edge: simulating complex behavior.

Juergen Nuehrenberg (Max Planck Institut für Plasmaphysik, Greifswald)
Título: The computational stellarator.

Peter Young (University of California, Santa Cruz)
Título: Title: Phase transitions in spin glasses.

El BIFI organizó también la **VI Reunión Aragonesa de Estabilidad y Plegamiento de Proteínas** en San Sebastián, el 8 y 9 Mayo de 2008, cuyo objeto fue discutir trabajos de investigación relacionados con la estabilidad y plegamiento de proteínas. Los estudios sobre interacciones proteína-proteína, proteína-ligando así como los basados en simulaciones de dinámica molecular y docking.

Colaboramos en la organización del **16th International Symposium on Flavins and Flavoproteins** celebrado en el Palacio de Congresos, Jaca del 8 al 13 de junio de 2008 y con muy amplia participación internacional, y en **V Encuentro de Neurociencias Avances en Neurociencias: Moléculas Y Sistemas, Patologías Y Aplicaciones Clínicas** de Zaragoza, celebrado el jueves, 11 de Diciembre de 2008 en la Facultad de Veterinaria. Estamos organizando la **IV Conferencia Nacional** del BIFI a celebrar en Zaragoza del 5 al 7 de febrero de 2009.

5. EL LABORATORIO DE COMPUTACIÓN Y SUPERCOMPUTACIÓN.

Una parte importante de los recursos computacionales del BIFI se concentra en el **Laboratorio de Supercomputación** sito en la primera planta del Edificio Cervantes.

Cluster del BIFI Terminus

Terminus es un cluster de ordenadores bajo GNU/Linux sito en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI. En estos momentos Terminus cuenta con 580 procesadores, de los que el 94% son

de arquitectura de doble precisión ("em64t" = 64-bit). Además se cuenta con 20 TeraBytes para espacio de almacenamiento (4TB "online" + 16TB "offline") y la red que interconexiona los nodos usa tecnologías Gigabit Ethernet e Infiniband.

En total se cuenta con una potencia de cálculo cercana a 6 Tera-FLOPs, lo que lo sigue situando entre los superordenadores más potentes de España.

Un total de 100 investigadores poseen cuenta en el cluster, de los cuales el 60% se pueden considerar usuarios "activos" (corrieron al menos una hora de CPU en el último año).

Recursos GRID

El BIFI ha participado durante 2008 en tres proyectos de investigación del Sexto y Séptimo Programa Marco de la Unión Europea relacionados con el desarrollo de las tecnologías grid. En todos ellos el Instituto aporta infraestructura computacional, alojada también en nuestro Laboratorio de Supercomputación. En concreto:

- EGEE-II: 25 CPUs y 0'5TBytes de almacenamiento
- int.eu.grid: 25 CPUs, 2TBytes de almacenamiento y red Gigabit Ethernet interconexión

En Mayo de 2008 arrancó el proyecto EGEE-III, continuación de EGEE-II y financiado por el Séptimo Programa Marco por la UE, en el que el BIFI sigue aportando la infraestructura existente en EGEE-II.

En breve está previsto utilizar la infraestructura antes aportada al proyecto int.eu.grid para establecer un nodo del BIFI en la futura NGI (National Grid Initiative) española que se está promoviendo desde la Red Española de e-Ciencia.

Tenemos dos nuevos proyectos Grid Aragid en Infraestructuras y Piregrig aceptado en Intereg IV.

EGEE-II y EGEE-III

EGEE ("Enabling Grids for E-sciencE") es un proyecto coordinado por el CERN y financiado por la Unión Europea que pretende el desarrollo de una infraestructura Grid para uso científico disponible las 24 horas al día.

Actualmente EGEE es la mayor infraestructura Grid a nivel mundial; ya ha conectado más de 250 centros de investigación de 50 países, englobando



un total de 46000 CPUs y cerca de 40 PetaBytes (40 millones de GigaBytes) de espacio de almacenamiento.

El BIFI participa en el proyecto migrando aplicaciones de fusión al Grid y coordinando la Organización Virtual FUSION que agrupa a los usuarios que corren aplicaciones de fusión de plasma en el GRID. Actualmente existen 42 usuarios registrados en la VO FUSION.

EGEE-II terminó en Abril de 2008 para seguidamente dar paso a EGEE-III, financiado por el Séptimo Programa Marco de la UE y en el que el BIFI también participa.

Int.eu.grid

Int.eu.grid ("Interactive European Grid") es un proyecto de dos años (Mayo 2006 – Abril 2008) coordinado por el IFCA (Instituto de Física de Cantabria) y financiado dentro del VI Programa Marco de la Unión Europea que pretende el despliegue de una infraestructura grid estable orientada a aplicaciones paralelas interactivas.

El BIFI participa en el proyecto "gridificando" una aplicación visual interactiva para el diseño y simulación de reactores de fusión nuclear.

En breve está previsto utilizar la infraestructura antes aportada al proyecto int.eu.grid para establecer un nodo del BIFI en la futura NGI (National Grid Initiative) española que se está promoviendo desde la Red Española de e-Ciencia.

Otros

El Laboratorio de Supercomputación también alberga equipos destinados a otros servicios generales como la web, backups, servidores de almacenamiento masivo, impresión, DHCP, SVN, CVS, NTP, DNS-caché...

De entre ellos destaca por su éxito el mirror de la distribución GNU/Linux "OpenSUSE", único mirror completo de España y cuya instalación fue financiada en 2005 a través de un convenio de colaboración con el Ayuntamiento de Zaragoza para la promoción del software libre.

A finales de 2007 se llegó a un acuerdo con el Ayuntamiento para financiar la renovación del hardware que alberga el "mirror".

Sala CAESARAUGUSTA

A finales de 2007 se puso en marcha el superordenador CAESARAUGUSTA, nodo en Aragón de la Red Española de Supercomputación.

El hardware que forma Caesaraugusta está almacenado en 5 bastidores ("racks") con la siguiente composición:

- 3 racks de computación
 - 252 blades IBM JS20 con tarjeta Myrinet
 - 504 procesadores PowerPC 970FX 2.2 GHz (2 procesadores/blade)
 - 1TB memoria RAM (4GB/blade)
- 1 rack de gestión
 - switch CISCO 6503 Gigabit Ethernet (CISCO 6503)
 - 5 IBM P510 conectados por fibra a sistema almacenamiento 10TB en RAID 5 (2 FastT + 2 Exp100)
- 1 rack de networking
 - switch Myrinet CLOS256



Aunque el sistema lleva funcionando en producción desde Noviembre de 2007, la inauguración oficial se produjo el 13 de Febrero de 2008, contando entre otros con la presencia de Marcelino Iglesias, presidente del Gobierno de Aragón.

Durante 2008 en CAESARAUGUSTA se han computado 3.600.000 horas de CPU; 2.305.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité de Acceso de la Red Española de Supercomputación (al que corresponde asignar el 80% de uso del sistema) y 1.295.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité local (20% de tiempo restante).

Red Española de Supercomputación

A finales de 2006 la Universidad de Zaragoza pasó a formar parte de la Red Española de Supercomputación (RES), albergando uno de los siete superordenadores distribuidos por la geografía nacional con núcleo en Mare Nostrum (BSC-CNS) y conectados a través de redes de alta velocidad, que busca dar respuesta a las crecientes necesidades de computación de la investigación en España. El nodo de Zaragoza, gestionado por el BIFI, cuenta con 512 procesadores, 24 TeraBytes de almacenamiento y red de interconexión Myrinet (más detalles en la página anterior).

Actualmente, el nodo de Zaragoza en la RES ya no se encuentra en la lista del prestigioso top500 (<http://www.top500.org>), donde llegó a estar en la posición 417 del mundo, pero sigue estando entre los superordenadores más potentes de España.



A lo largo de 2008 se han realizado varias reuniones (presenciales y por videoconferencia) de coordinación con el resto de integrantes de la Red Española de Supercomputación, así como visitas guiadas a CAESARAUGUSTA para grupos interesados.

En los próximos meses se van a ir desplegando servicios entre los nodos de la RES que permitirán un funcionamiento operativo coordinado. Esto probablemente requerirá ampliar notablemente la conexión de Aragón a RedIRIS, dado el gran aumento en el consumo de ancho de banda que se espera.

Sala de visualización 3D

El BIFI ha desarrollado su propio sistema de visualización 3D estéreo para poder visualizar resultados de sus diferentes tipos de simulaciones. Aunque es posible trasladarlo a otros lugares (eventos, exposiciones...), el sistema reside habitualmente en la Sala de Visualización 3D, situada en la segunda planta del Edificio Cervantes.

El montaje incluye dos proyectores y una pantalla polarizada donde, usando retroproyección, las imágenes se muestran. También es necesario el uso de unas gafas especiales con cristales con polarización circular, para que el efecto 3D pueda ser observado.

Actualmente, las aplicaciones más interesantes son en el campo de la fusión y de la bioquímica. En el caso de la fusión, el BIFI ha desarrollado sus propios algoritmos de simulación en colaboración con el CIEMAT y las aplicaciones gráficas que los representan desde cero, contando con la colaboración interdisciplinar de físicos e ingenieros informáticos.

Durante este año se está trabajando en la actualización del sistema, dotándolo tanto de nuevo hardware como de nuevas funcionalidades software. Entre estos, lo más destacable es el trabajo de desarrollo en un sistema de posicionamiento 3d, que mediante 12 cámaras infrarrojas, permite la detección del observador y obtener un efecto de "CAVE" en el que la escena se mueve conforme a éste. Asimismo, se provee la detección de otros posicionadores, con múltiples grados de libertad para aplicaciones que requieren una mayor interactividad. La versatilidad de este sistema de detección de movimiento hace que se pueda adaptar a las diferentes aplicaciones de visualización de diferentes campos de la física en general, la fusión y la bioquímica, principalmente.

IBERCIVIS

Ibercivis fue presentado al público día 20 de Junio de 2008 por el Secretario de Estado de Comunicación, D. Carlos Martínez, en la Sede del CSIC en Madrid. Desde entonces, se ha consolidado como la iniciativa nacional de computación voluntaria aglutinando cuatro aspectos principales: Plataforma de cálculo para aplicaciones distribuidas, Investigación de excelencia realizada en estos recursos de computación, Desarrollo de nuevas herramientas informáticas en Software Libre y Herramienta para la difusión de la Ciencia entre la Ciudadanía.

En total se tienen 26.000 cores conectados y unos 7000 ciudadanos, gestionando diariamente unos 5000 personas y unos 1800 ciudadanos. Con esto, la media diaria es de unas 50.000 horas de CPU, con lo que se puede obtener que el "cluster diario equivalente" es de unas 2.000 CPUs activas todo el día.



Con un tiempo total de CPU, calculado a partir de número de workunits validadas de 12.579.708.187 segundos, o lo que es lo mismo, casi 370 años de CPU, esta infraestructura se ha utilizado por varios grupos investigadores obteniendo los siguientes resultados hasta el momento:

- Simulación de Plasmas en ITER (LNF-CIEMAT y BIFI): se ha conseguido simular las trayectorias completas de más de 200.000 partículas en ITER
- Docking de Proteínas y diseño de fármacos (Centro de Biología Molecular Severo Ochoa, UCM-CSIC): se han cribado alrededor de 2.5 millones de moléculas
- Transiciones de Fase con Dilución (Departamentos de Física Teórica de la UCM y de Física de la UNEX): se siguen hasta recopilando todos los resultados necesarios
- Boundary Element Method for AXial-symmetry electromagnetism (CSIC): se están ejecutando las primeras simulaciones de esta aplicación de control de luz a escalas nanométricas

También se están portando las nuevas aplicaciones a ejecutar en Ibercivis: Plegamiento de proteínas (CSIC), Conducción sistemas nanoscópicos (U.Buenos Aires), Redes neuronales (UNEX), Materiales porosos (CSIC).

Se ha realizado desarrollos de Software Libre para mejorar la accesibilidad de los tradicionales sistemas BOINC creando un shell de acceso a Ibercivis y facilitando la ejecución de tareas muy largas en Ibercivis.

Entre las actividades de difusión desarrolladas destacan los eventos públicos realizados en Zaragoza (Pabellón de la Ciencia, Día del Software Libre y Palacio de Sástago) así como iniciativas online (web, blogs y foros) y la creación de Unidades Didácticas para los institutos de educación secundaria sobre docking, fusión y computación y ciudadanía.

Ibercivis está liderado y coordinado por el BIFI y participan el CIEMAT, el CETA, el CSIC, la UPV y RedIRIS como organizadores. Cuenta con el patrocinio de Ibercaja, de los Ayuntamientos de



COMPUTADOR CIUDADANO NACIONAL

<http://www.ibercivis.es>

Madrid y Zaragoza, de la Diputación Provincial de Zaragoza y de Diputación General de Aragón

Portugal ha manifestado su interés en participar activamente en Ibercivis, para lo cual se han mantenido varias reuniones bilaterales en el Ministerio de Ciencia e Innovación. El acuerdo suscrito permitirá incorporar al país vecino al proyecto de computación Voluntaria antes de junio de 2009.

JANUS

La máquina Janus fue presentada en Italia (Trento) este año 2008 y en Zaragoza el día 27 de Mayo de 2008. Ahora se ubica en las instalaciones del BIFI en Zaragoza, y es plenamente operativa, habiendo ya producido importantes resultados científicos publicados en revistas de gran prestigio. Janus, en los primeros problemas que ha atacado, ha alcanzado velocidades de hasta 90 billones de operaciones por segundo, es decir, la potencia de 90 mil ordenadores convencionales juntos. En concreto, Janus ha comenzado estudiando materiales magnéticos, los vidrios de espin y en breve, se estudiarán otros modelos de interés como el comportamiento de moléculas al interaccionar con proteínas

La pieza básica de Janus es el Nodo de Proceso. Es un modulo de reducidas dimensiones que contiene una FPGA Virtex4 200. El Nodo de Proceso se inserta en la Placa Base, que contiene 16 Nodos mas otro Nodo adicional para las comunicaciones. A través de este Nodo de Input/Output los Nodos de Proceso comunican con el exterior a través de dos puertos Ethernet Standard a una velocidad de 1Gbit/seg cada uno. También la programación de cada nodo se realiza a través de estos puertos Ethernet.

El BIFI ha coordinado un amplio grupo en el que han participado las Universidades de Zaragoza, Universidad Complutense de Madrid y Extremadura, y en Italia, las Universidades de Ferrara y Roma.

Janus se ha financiado con Fondos FEDER de la Diputación General de Aragón), del Premio Microsoft Europa concedido a D. Giorgio Parisi (Universidad de Roma I, La Sapienza), miembro de la colaboración Janus, aportados en gran parte al proyecto y la colaboración de la Obra Social y Cultural de Ibercaja. También hay fondos de la Universidad de Zaragoza y del resto de universidades participantes.

La máquina ha sido fabricada por la empresa italiana Eurotech, que también ha apoyado económicamente el desarrollo de Janus y que ahora es la encargada de su comercialización, para que investigadores y desarrolladores de todo el mundo puedan



utilizar esta nueva máquina cerrándose así el círculo de innovación y transferencia tecnológica.

6. EL LABORATORIO DE BIOLOGÍA MOLECULAR.

Equipamiento y material

Durante el año 2008 se han incorporado al laboratorio de bioquímica y biología molecular los siguientes equipos y material de gran interés para el desarrollo de las líneas de investigación que se llevan a cabo en nuestro instituto:

1. Microscopio de fluorescencia invertido motorizado con sistema de adquisición de imágenes (**25.000€**). Este equipo se utiliza para la localización celular de diferentes proteínas.



2. Incubador de CO2 (**4.800€**). Necesario para el cultivo de células.



El Instituto BIFI ha participado en la última convocatoria de Proyectos de Infraestructura del Ministerio de Ciencia en Innovación, aún pendiente de resolución. En la correspondiente petición se han incluido los siguientes equipos:

- Calorímetro Isotérmico de Titulación ITC-200 (Microcal, GE Healthcare). La calorimetría de titulación es la única técnica que permite caracterizar completamente la interacción entre dos biomoléculas en disolución (determinación de la constante de asociación, la energía de Gibbs, la entalpía y la entropía de unión) en un único experimento. En este nuevo equipo desarrollado por Microcal es posible reducir la cantidad de muestra por experimento (hasta 7 veces menos), sin pérdida de sensibilidad y precisión respecto a modelos anteriores. Además, está completamente automatizado, de modo que se pueden realizar hasta 50 experimentos sin intervención directa del usuario.

- Espectrofotómetro de fluorescencia Cary Eclipse (Varian) y microscopio de fluorescencia. La espectroscopía de fluorescencia es una técnica esencial en el estudio del plegamiento y la estabilidad de proteínas interacciones, así como de las interacciones entre moléculas biológicas. El fluorímetro está completamente automatizado y es posible realizar medidas en estado estacionario y medidas cinéticas. Además, posee una unidad de control de temperatura Peltier, de modo que permite realizar experimentos de desnaturalización térmica. El microscopio de fluorescencia es esencial para la línea de biología celular, iniciada recientemente en el Instituto BIFI bajo la dirección de José Alberto Carrodegua, donde se trabaja con proteínas relacionadas con apoptosis y muerte celular y en diferenciación controlada de células madre.



- Robot de cristalización. Este equipo es indispensable para realizar cribados masivos dirigidos a identificar condiciones óptimas de cristalización de proteínas y complejos de proteínas con otras moléculas interactuantes. Es un equipo que facilitará el trabajo y aumentará la producción científica derivada del difractor de rayos X para determinar estructuras de proteínas adquirido en la anterior convocatoria de Proyectos de Infraestructura.

- Biacore (GE Healthcare). Este equipo está basado en la técnica de resonancia de plasmones en superficie (SPR) y permite caracterizar cinéticamente la interacción entre biomoléculas. Con este equipo es posible determinar constantes cinéticas de asociación y disociación, de modo que complementará los estudios de equilibrio de unión que se realizan con otras técnicas espectroscópicas y calorimétricas. Además, permite llevar a cabo cribados dirigidos a la identificación de compuestos bioactivos con un rendimiento significativamente mayor que en técnicas tradicionales.

Estancias personal investigador

Durante el año 2008 diferentes investigadores han realizado estancias en el Laboratorio de Bioquímica y Biofísica del Instituto BIFI:

- María Ángeles Urbaneja y Stefka Tanera. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Universidad del País Vasco 18-20 Junio 2008
- Maria João Moreno. Biological Chemistry Group, Chemistry Department, University of Coimbra. 21 Septiembre-2 Octubre 2008, 29 Noviembre-19 Diciembre 2008
- Rodrigo Lomás, Rafael Ruiz y Silvia Prado. Laboratorio de Genética Molecular, Centro de Investigación Príncipe Felipe, Agosto 2008, Valencia. 13-17 Octubre 2008, 21-25 Noviembre 2008
- Alfredo Lagunas Martínez. Departamento de Bioquímica Universidad Nacional Autónoma de México. 1 Septiembre 2008-29 Enero 2009

7. NUEVO EDIFICIO.

Las obras del nuevo edificio en el Campus del ACTUR prácticamente han terminado en 2008, en este momento estamos determinando las necesidades de amueblamiento de los laboratorios para poder cumplimentarlas en 2009 de modo que en la segunda parte del año nos podamos incorporar a las nuevas instalaciones. Esta obra ha sido financiada con fondos FEDER y del GA por la convocatoria de Infraestructura Científico-técnica del MCYT 2003-04.

8. AYUDAS OBTENIDAS.

Nos han concedido ayudas distintas instituciones públicas y privadas:

- En 2008 hemos agotado la inversión pendiente del proyecto de infraestructuras 2005-06 que nos concedió una ayuda de 1.272.666 €, mediante la fabricación y presentación del superordenador JANUS y la compra, a espera de su instalación en el nuevo edificio del Difractómetro de Rayos X con más de 600.000€ de inversión.
- El Convenio con el GA para investigación y funcionamiento ha visto incrementada su cuantía, y ha superado la evaluación externa realizada de cara a la continuidad de la financiación.
- Se ha mantenido el Convenio con Ibercaja por 100.000€ que ha sido destinado en su mayor parte a financiar las mejoras en infraestructura de los laboratorios de Biología y de Computación.
- El GA ha aportado fondos para acondicionar el SAI y la iluminación de la sala Cesaraugusta del RES, y ha firmado un convenio para asegurar el funcionamiento del Cesaraugusta por una cuantía de 39.000€ anuales en los próximos cuatro años.
- El proyecto IBERCIVIS ha recibido 40.000€ de financiación de Ibercaja, 40.000€ del GA y 18.000€ de la DPZ para su implantación y desarrollo, en este momento estamos negociando su financiación como infraestructura de investigación por parte del Ministerio de Ciencia e Innovación.



- Disponemos de unas 20 becas de investigación de ministerio, de la DGA y asociadas a proyectos para la realización de tesis doctorales, también dotamos becas puente pre y postdoctorales.

- En 2008 disponemos de apoyo para la contratación de tres técnicos en Computación, dos con fondos del GA y uno con fondos del Ministerio. Hemos solicitado técnicos para el Laboratorio de Biología Molecular, que son imprescindibles en el año 2009, pero aún no nos han concedido las ayudas.

- El Vicerrectorado de Investigación de la Universidad de Zaragoza ha concedido una subvención de 13.588 € para la adquisición de equipos destinados al Sistema de **Visualización 3D**.

9. PERSONAL. CONTRATACIÓN INVESTIGADORES.

- En 2008 Adrián Velázquez se ha incorporado como investigador **ARAID** al BIFI, con lo que que consolida así una línea de investigación en el BIFI y hemos obtenido un nuevo investigador ARAID en cristalografía de proteínas para el BIFI que se seleccionará en 2009. Olga Abián sigue en el BIFI con su contrato Miguel Servet del Instituto Carlos III para el IACS, y siguen los tres contratos Ramón y Cajal de Yami Moreno, Jesús Clemente y Víctor Gopar. También se han incorporado como **contratados doctores** investigadores de la Universidad de Zaragoza, procedentes del programa Ramón y Cajal, José Alberto Carrodegua (Biología) y Pierpaolo Bruscolini (Biofísica). Alejandro Rivero colabora en el proyecto Ibercivis. Pablo Echenique investigador del CSIC previsiblemente va a seguir trabajando en el BIFI en virtud del carácter de Unidad Asociada al Instituto Rocasolano.

- Como investigador Juan de la Cierva está en el BIFI Angelo Rosa y como investigadores del CIEMAT que trabajan en el BIFI como postdoc en fusión están Luca Rossi y Maxim Tereshchenko.

- Hemos obtenido una nueva ayuda del Ministerio para contratación de técnicos en computación que se suma a las dos del GA y a la correspondiente al convenio para la RES (también del GA), labor para la que hemos contratado a Guillermo Losilla y Arturo Giner ambos ingenieros informáticos. Rubén Vallés y Fermín Serrano han seguido colaborando con el BIFI en tecnologías GRID y computación con financiación del CIEMAT, proyectos GRID y fondos propios.

- Beatriz Antolí sigue con nosotros como auxiliar administrativo del BIFI y técnica en innovación, sostenida con fondos propios.

- Disponemos de unas 24 becas de investigación de distintas procedencias, dos de ellas sostenidas con fondos propios, y tres becas de iniciación a la investigación que colaboran en distintos proyectos.

10. COLOQUIOS Y SEMINARIOS BIFI.

A lo largo de 2008 se han celebrado 11 Coloquios y Seminarios con participación de los correspondientes científicos ponentes.

Interacción del regulador maestro E2 con su ADN diana en 73 tipos del virus del papiloma humano
Ignacio Enrique Sánchez Fundación Instituto Leloir and IIBBA-Conicet, Buenos Aires, Argentina.
4 February 2008

CyanoBIKE, a web based biology-specific environment for comparative genomics and integration of cyanobacterial knowledge
Arnaud Taton. Virginia Commonwealth University Richmond, Virginia, USA
12 March 2008

Using Complexity Theory to Understand the Innovation Process: from Stylized facts to stylized models
Gerald Silverberg. Maastrich University.
24 April 2008

Una mecánica estadística inusual en el borde del caos
Alberto Robledo. Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México
8 May 2008

Generalized Statistical Complexity Measure: A new tool for Dynamical Systems
Osvaldo A. Rosso. Doctor en Física (PhD in Physics) - National University of La Plata, La Plata, Argentina,
12 June 2008

Función y estabilidad de la Nucleoplasmina, un chaperón de histonas
María Ángeles Urbaneja Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Universidad del País Vasco
20 June 2008

Transport in thin ferromagnetic films
Prof. Muttalib. University of Florida
8 July 2008

The challenge of predicting optical properties of biomolecules: what can we learn from time-dependent density-functional theory?

Alberto Castro Institut fuer Theoretische Physik, Freie Universitaet Berlin.

9 July 2008

Quantitative Modeling of Passive Permeation through the Blood Brain Barrier

Maria João Moreno. Biological Chemistry Group, Chemistry Department, University of Coimbra

1 October 2008

Sistema de multivideoconferencias basado en web

Carlos Matesanz Rodríguez. Ingeniero informático del departamento de I+D de la Fundación Andaluza de servicios sociales

28 October 2008

Elastic properties and defects of lipid bilayers

Michel Mareschal professor in the Department of Physics at the Université Libre de Bruxelles,

9 December 2008

11. CONVENIOS Y RELACIONES CON OTROS CENTROS DE INVESTIGACIÓN.

El convenio de colaboración con el **CIEMAT** se desarrolla con fuerza y ha dado lugar a la presentación de varios proyectos, en los que el BIFI realiza la simulación del comportamiento del plasma en un reactor de fusión, para lo que es necesario utilizar una gran capacidad de computación y las tecnologías GRID a las que estamos asociados. Todo ello dentro del proyecto ITER de energía de fusión nuclear.

Desde 2007 el BIFI ya es unidad asociada del CSIC mediante nuestra relación con el Instituto **Rocasolano** con el que las relaciones científicas son numerosas y muy fructíferas, se plantea la posibilidad de que trabaje en el BIFI el investigador del CSIC Pablo Echenique en el marco de esta asociación.

Sigue adelante nuestro Convenio de colaboración con **Ibercaja**, en 2008 orientado a la financiación de infraestructura de investigación de los laboratorios de Biología Molecular y Computación.

Participamos en el nodo de Bioinformática y modelado de proteínas del **Instituto Nacional de Bioinformática**.

En febrero de 2008 se firmó el convenio mediante el que El BIFI es Nodo de la **Red Española de Supercomputación** entre el

BSC, el Gobierno de Aragón y la Universidad de Zaragoza y que financia el funcionamiento del ordenador Coesaraugusta con un coste de 39.000€ anuales.

También participamos en los proyectos europeos **EGEE** ("Enabling Grids for E-sciencE") y en **Interactive European Grid** (int.eu.grid), lo que nos ha convertido en nodo español del GRID europeo y mundial. Encabezamos la iniciativa **Piregrid** aceptada en Intereg IV en la que participan más de ocho entidades de ambos lados del Pirineo.

El superordenador ciudadano **Ibercivis** que funciona a pleno rendimiento en distintas aplicaciones científicas se ha desarrollado en colaboración con el CIEMAT, el Ceta (Ciemat), el CSIC y la Politécnica de Valencia y ha sido objeto de tres convenios firmados por la Universidad de Zaragoza en 2008: con el GA por 40.000€, con Ibercaja por otros 40.000€ y con la Diputación Provincial de Zaragoza por 18.000€.

Con la empresa italiana Eurotec que ha fabricado el superordenador **Janus** se ha firmado un contrato de comercialización que establece las condiciones en que puede explotarlo comercialmente. Son beneficiarios de este contrato investigadores de las universidades de Roma, Complutense de Madrid, Extremadura y Zaragoza.

12. INVESTIGACIÓN. GRUPOS CONSOLIDADOS DGA.

Los miembros del BIFI participan mayoritariamente en cuatro grupos de Investigación de la DGA tres de ellos de excelencia y uno consolidado. Uno de ellos ha alcanzado la condición de excelencia este año y el consolidado era emergente el año pasado.

Título: Grupo de excelencia de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (E24/3).

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Investigador principal: Alfonso Tarancón (BIFI-UZ)

Entidades participantes: BIFI (Universidad de Zaragoza)

Título: Grupo de excelencia: Física Estadística y No Lineal.

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.

Investigador principal: L. Mario Floría

Título: Grupo de Excelencia: Biología Estructural y Funcional (B18)

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Investigador principal: Carlos Gómez-Moreno

Título: Grupo consolidado Bioflora B39

Entidad financiadora: Gobierno de Aragón –

Entidades participantes: Universidad de Zaragoza, Instituto Pirenaico de Ecología (CSIC).

Investigador responsable: P. CATALÁN

13. INVESTIGACIÓN. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN.

La relación de proyectos de investigación se encuentra en el Anexo 2 a esta memoria.

14. PUBLICACIONES CIENTÍFICAS.

La relación de publicaciones se encuentra en el Anexo 1 a esta memoria. Hay que resaltar la diversidad y calidad de las publicaciones, y el hecho de que la mayoría de las mismas tengan carácter multidisciplinar.

15. LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN.

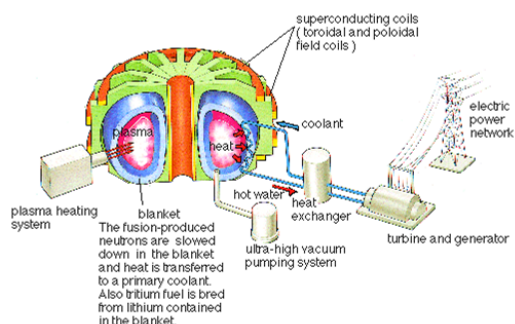
Explicitaremos en este apartado brevemente los aspectos que son objeto de atención en cada área.

Materiales complejos y Física Fundamental (Complex Materials and Fundamental Physics)

Coordinador Víctor Martín-Mayor.

Plasmas de fusión nuclear

Desde el punto de vista científico, el peso mayoritario de la investigación en España se desarrolla por el Laboratorio Nacional de Fusión (CIEMAT, Madrid). con el que el BIFI ha firmado un Convenio de colaboración.



El BIFI investiga en el campo de la simulación del Plasma dentro del reactor, debido a su experiencia en Simulaciones Numéricas y a disponer de uno de los Centros de Supercomputación mayores del País. Fruto de esta colaboración es un código de seguimiento de órbitas mediante la ecuación de Langevin que se está aplicando a la simulación del reactor TJII del CIEMAT. Otra línea de trabajo concierne al desarrollo de modelos estocásticos para la descripción matemática del transporte de naturaleza turbulenta en plasmas confinados magnéticamente. En la actualidad, se están realizando dos tesis doctorales codirigidas por investigadores del BIFI y del Laboratorio Nacional de Fusión.

Vidrios de espín

El superordenador dedicado Janus es ya una realidad y funciona de forma ininterrumpida desde inicios de 2008. Esto ha permitido atacar problemas científicos que hasta ahora eran inabordables para la comunidad científica internacional. Se han realizado estudios del modelo de Edwards-Anderson para dilucidar su estructura en la fase de baja temperatura.

Si en simulaciones anteriores, en la literatura se habían llegado a estadísticas del orden de 108, nosotros hemos alcanzado hasta 1012. Los resultados están siendo publicados con gran impacto en las revistas más relevantes.

Se dispone ya de tarjetas funcionantes, cuya explotación científica se ha iniciado mediante la simulación de modelos de vidrios de espín tipo Ising y Potts. Las estimaciones realizadas de tiempos característicos permiten ya asegurar que SSUE permitirá alcanzar los regímenes dinámicos apetecidos, proporcionando así una herramienta única en el mundo para el estudio de estos sistemas. Este proyecto ha permitido la profundización de la colaboración con el Centro de Excelencia italiano SMS, cuyo líder, el Prof. Giorgio Parisi ha sido galardonado recientemente con el premio Microsoft 2008. El Prof. Parisi dedicará una parte sustancial del premio a la adquisición de ordenadores Janus.

Por otro lado, el estudio de estos sistemas realizado en el cluster del BIFI, apoyado en nuevos métodos de Montecarlo ha consistido un gran éxito (que ha merecido un artículo en Phys. Rev. Lett.). Se prolongará en el primer trimestre de 2008 en la Red Española de Supercomputación, tanto en el superordenador Marenostrum (Barcelona Supercomputing Center) donde hemos obtenido un total de 750000 horas de cálculo, como en el nodo Caesar Augusta en la Universidad de Zaragoza.

La teoría de juegos y la conducta humana

Se ha estudiado el efecto de considerar distintas escalas de tiempo en teorías de juegos evolutivas, mostrándose que en el caso en que la selección natural actúa rápidamente el comportamiento asintótico puede variar respecto al caso estándar, lo que tiene relevancia de cara a explicar las observaciones de los

economistas experimentales. Por otro lado, se ha analizado la evolución de un dilema social clásico, el dilema del prisionero, en redes sociales reales y se ha encontrado una dependencia clave de la estructura de comunidades de las redes sociales, lo que tiene implicaciones para la emergencia de cooperación en sociedades humanas y para el diseño de redes para aplicaciones específicas.

Efectos del desorden en sistemas magnéticos y electrónicos

Hemos estudiado la ausencia de autopromedio en modelos diluidos vectoriales en el punto crítico encontrando discrepancias con algunos trabajos analíticos. También hemos estudiado la transición de fase del antiferromagneto diluido en presencia de un campo magnético constante encontrando que una transición de fase de primer orden. Hemos llevado a cabo un estudio detallado de los efectos del desorden en transiciones de primer orden, en el que hemos clarificado completamente la naturaleza del diagrama de fase (estas investigaciones aparecieron en Phys. Rev. Lett.). Además hemos estudiado la dinámica fuera del equilibrio en vidrios de spin tanto en ausencia como en presencia de campos magnéticos. Finalmente hemos estudiado reacciones químicas donde las partículas siguen leyes subdifusivas.

Transporte cuántico y computación cuántica. (Quantum Transport and Quantum Computing)

Coordinador Victor Gopar

En cuanto al transporte cuántico en sistemas electrónicos de dimensiones de escala mesoscópica y nanoscópica, estudiamos el rol de las interacciones electrónicas en mecanismos de transporte electrónico inducido por campos alternos en bombas cuánticas de quantum dots y analizamos las propiedades del transporte directo en un anillo mesoscópico desordenado atravesado por un flujo magnético dependiente del tiempo. También estudiamos el comportamiento de la resistencia a cuatro terminales de un modelo de nanotubos de carbono basado en un cable de Tomonaga Luttinger en presencia de una impureza.

Por otro lado, hemos desarrollado un formalismo matemático utilizando la matriz de dispersión para el estudio del transporte en sistemas donde pueden presentarse pérdidas o ganancias. La generalidad de las ideas de este formalismo es tal que puede aplicarse al estudio del transporte en sistemas macroscópicos, por ejemplo cavidades caóticas de microondas y resonadores acústicos.

Relacionado con el campo de la Computación Cuántica, hemos investigado las propiedades estadísticas del entrelazamiento de electrones en puntos cuánticos. Cabe mencionar la producción de “entanglement” o entrelazamiento es fundamental para el procesamiento de la información cuántica.

También sobre el tema de la Computación Cuántica, se ha continuado con el estudio de la Mecánica Cuántica a nivel de la Geometría Diferencial y sus aplicaciones al estudio de sistemas en dimensión finita (qubits). De este modo se han estudiado los mecanismos de reducción geométrica en el marco de la Mecánica Cuántica. Se ha estudiado la caracterización geométrica del “entanglement” en sistemas de 2 y 3 niveles, obteniendo las expresiones de los productos de Poisson y Jordan en ambos casos. Igualmente, se ha estudiado la independencia de los “entanglement witnesses” habitualmente manejados, desde un punto de vista geométrico para sistemas de dos niveles, tanto a nivel de estados puros, como a nivel de matrices densidad.

Redes Complejas y Sociedad (Complex Networks and Human Society)

Coordinador Yamir Moreno

La línea de investigación se divide en dos áreas fundamentales: la de redes complejas y sociedad, que estudia procesos dinámicos que ocurren en estas topologías, y la de sistemas dinámicos. Los miembros o investigadores vinculados a la línea de investigación son, actualmente: Y. Moreno, L. M. Floría, F. Falo, J. G. Gardeñes, A. Arenas, A. Díaz-Guilera, A. Sánchez, J. J. Manzo, R. López-Ruiz, P. Echenique, D. Prada, J. Poncela, y S. Meloni.

Redes Complejas y Sociedad

En el último año, hemos continuado trabajando en diferentes problemas específicos, tanto en el subtema de dinámica de redes complejas como en su caracterización topológica. Entre los estudios realizados, destacamos:

- Análisis de la topología de redes reales y de nuevos modelos de redes complejas.
- Sistemas dinámicos no lineales acoplados a estructuras complejas para la modelación de procesos.
- Procesos de transporte y difusión con aplicaciones en redes y tecnologías de comunicaciones.
- Dinámica de propagación de virus y rumores explorando la analogía entre procesos tecnológicos y biológicos.
- Fenómenos de sincronización en sistemas físicos.
- Surgimiento de efectos colectivos y cooperación en sistemas biológicos y fundamentalmente en entornos sociales.
- Diferentes procesos y algoritmos de optimización.
- Dinámica y estructura de sistemas sociales.

Específicamente, las principales tareas desarrolladas han sido las siguientes:

1. Hemos caracterizado redes reales de comunicación y sus patrones de tráfico, así como modelos algorítmicos de transmisión de datos e información.

2. Se han estudiado modelos de propagación de información, virus informáticos y del tipo “rumores” en redes reales (Internet a nivel de sistemas autónomos y routers). Los trabajos se han dedicado al estudio de modelos matemáticos para la propagación de información no deseada y al desarrollo de algoritmos para su control.

3. Se han analizado y propuesto nuevos modelos y algoritmos de manejo de tráfico en redes, tanto reales como generadas por ordenador.

4. Hemos estudiado, utilizando modelos que incorporan tanto la topología real de redes biológicas como mecanismos no lineales apropiados para su descripción cuantitativa, la dinámica de redes celulares relevantes para procesos como la regulación genética y el metabolismo celular.

5. Hemos caracterizado procesos dinámicos no lineales acoplados a redes complejas, analizando la relación entre la arquitectura de las mismas y procesos colectivos tales como la sincronización.

6. Se continúan explorando la aplicación y el desarrollo de diferentes técnicas analíticas.

7. Se han implementado algunos algoritmos de dinámica evolutiva de juegos cooperativos y de coordinación en redes sociales para estudiar el surgimiento de comportamientos colectivos, tales como la formación de grupos de opinión, de diferentes “culturas” y la cooperación.

Sistemas Dinámicos

Por su parte, Ricardo López-Ruiz lleva adelante varias líneas de investigación en colaboración con diversos investigadores, tanto locales como de otras universidades. En concreto, durante 2007, diferentes trabajos han sido publicados en las siguientes líneas:

- (i) Sistemas multi-agente en formato autómatas celulares o en formato redes complejas.
- (ii) Modelos biológicos con mappings.
- (iii) Modelo económico con mappings.
- (iv) Ciclos límite en Ecuaciones de Liénard.
- (v) Complejidad estadística

En esta línea de investigación, se ha estrechado la colaboración con investigadores externos como José Luis López (Univ. Pública de Navarra), Javier González Estévez (Univ. Nacional Experimental del Táchira, San Cristóbal, Venezuela) y Xavier Calbet (EU-METSAT, Darmstadt, Alemania).

Física de Sistemas Biológicos (Physics of Biological Systems)

Coordinador Pierpaolo Bruscolini.

MIEMBROS: Este sector está compuesto por cuatro diferentes grupos de investigación (tres en Zaragoza y uno en Madrid), con intereses complementarios. Los investigadores activos en cada grupo son:

- José Luis Alonso (catedrático de la Universidad de Zaragoza), Pablo Echenique Robba (postdoc), Pablo García Risueño (doctorando).
- Fernando Falo Forniés. (Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza), Dr. Pedro J. Martínez Ovejías (Profesor Titular de Escuela Universitaria, Zaragoza), Dr. Juan José Mazo Torres. (Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza), Santiago Cuesta López. (actualmente postdoc en ENS Lyon), Diego Prada Gracia. (Doctorando).
- Pierpaolo Bruscolini (investigador Ramón y Cajal, Universidad de Zaragoza), Angelo Rosa (investigador Juan de la Cierva, Universidad de Zaragoza), María M. Cotallo Abán (doctoranda), Mauro Faccin (doctorando).
- Antonio Rey Gayo (Prof. Titular de la Universidad Complutense de Madrid), Ana María Rubio Caparrós (Prof. Titular de la Universidad Complutense de Madrid), Lidia Prieto Frías (Doctoranda), María Larriva Hormigos (Doctoranda), Marta Enciso Carrasco (Doctoranda).

INVESTIGACIÓN: Las investigaciones teóricas sobre biomoléculas se enfocan sobre todo en el estudio del plegamiento de las proteínas y de la desnaturalización del ADN. El reto es conseguir con modelos teóricos, de diferente naturaleza y complejidad, un marco explicativo y predictivo de los comportamientos de esas biomoléculas en varias condiciones experimentales, y bajo los cambios de condiciones que se pueden realizar en los experimentos o en situaciones patológicas.

Una buena modelización teórica permite por ejemplo seleccionar las mutaciones más prometedoras para estabilizar/desestabilizar una proteína, diseñar racionalmente nuevas moléculas con aplicaciones farmacológicas, estudiar cómo mutaciones patológicas afectan el comportamiento de las moléculas, y proponer posibles soluciones teóricas.

En más detalle, las actividades de investigación en este sector se desarrollan a lo largo de siete líneas principales:

- a) mejora de los campos de fuerzas utilizados en las simulaciones de “resolución atómica”, para que sean a la vez sencillos de utilizar y fiables en su parecido con los resultados

que se obtienen con técnicas detalladas pero mucho más costosas de química cuántica (Alonso y Echenique);

b) análisis y mejora de los potenciales de campo medio utilizados en las simulaciones con modelos mesoscópicos simplificados (Rey);

c) estudio con modelos mesoscópicos sencillos del plegamiento de proteínas concretas, por un lado para caracterizar cinética y termodinámica del plegamiento, describir intermediarios o casos de mal plegamiento u agregación, y por otro lado, para identificar los determinantes de los comportamientos generales de las proteínas y racionalizar la enorme cantidad de datos experimentales (Bruscolini, Falo, Rey);

d) estudio detallado, con simulaciones de dinámica molecular de resolución atómica, de la respuesta de proteínas involucradas en el desarrollo de algunas enfermedades, bajo mutaciones o cambios del entorno (Falo);

e) estudio de la dinámica del ADN, con modelos simplificados y simulaciones de todos átomos (Falo);

f) simulaciones del desplazamiento y segregación de los cromosomas en el núcleo celular (Rosa);

g) interpretación de espectros de masa MS/MS para la caracterización de proteínas (Bruscolini).

Estabilidad y plegamiento de proteínas y cristalografía (Protein stability and protein folding)

Coordinador Javier Sancho

El trabajo de los distintos laboratorios del grupo durante este año ha continuado su apuesta por la biocomputación que se refleja en sus publicaciones, en diversos proyectos actualmente en marcha con soporte de la RES y en la compra de un cluster propio de 100 procesadores que se instalará en breve.

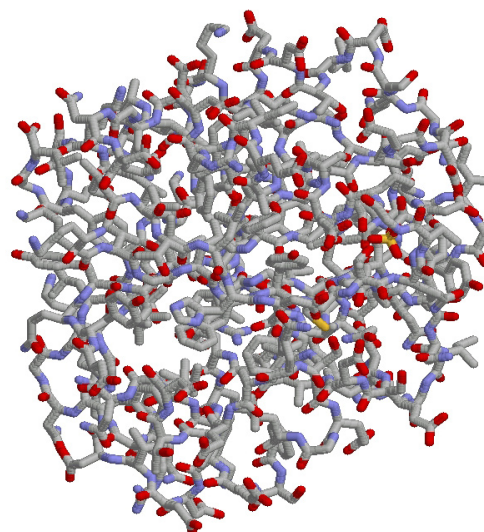
Por el lado aplicado, hemos avanzado en el desarrollo de técnicas experimentales de identificación y mejora de compuestos con actividad farmacológica (inhibidores, estabilizadores, desagregantes, etc) que nos han conducido a la realización de 5 patentes. Hemos continuado un proyecto interdisciplinar financiado por el Gobierno de Aragón en el que participan médicos involucrados en práctica clínica y químicos sintéticos, en el marco del cual planeamos perfeccionar los compuestos identificados e iniciar los ensayos preclínicos. Así mismo hemos iniciado un proyecto financiado por el Programa Aragonés de Medicina Regenerativa encaminado a la identificación de compuestos con actividad de diferenciación celular.

Interacción proteína-ligando (Protein-ligand interaction, docking and screening)

Coordinador Adrián Velázquez

Desarrollo de Inhibidores Enzimáticos Adaptables

Continúa el proyecto para el desarrollo de inhibidores potentes y adaptables de la proteasa NS3 del virus de la Hepatitis C. Actualmente no existe una terapia molecular específica, carente de efectos secundarios, y eficaz para esta enfermedad. La proteasa NS3 ha sido confirmada como una diana terapéutica válida recientemente. Existen actualmente inhibidores experimentales, pero no hay aún inhibidores en fase pruebas clínicas.



Para desarrollar inhibidores de la proteasa NS3 se empleará y extenderá la estrategia establecida mediante el estudio de los inhibidores de la proteasa HIV-1 (Dr. Ernesto Freire, Johns Hopkins University), que integra información termodinámica (calorimetría), integración estructural (cristalografía y NMR) e información genética (análisis de bases de secuencias) en el proceso de optimización.

Cribado y Diseño de Ligandos de Proteínas e Inhibidores

El diseño y la identificación de ligandos de proteínas es una necesidad en Medicina e Industria, cuyo objetivo final es el desarrollo de nuevos fármacos y nuevas moléculas de interés biotecnológico. Hemos desarrollado una metodología para cribado masivo experimental de quimiotecas de compuestos químicos. Ha sido aplicada con éxito en la identificación de ligandos inhibidores de flavodoxina de *Helicobacter pylori* (úlceras y cáncer de estómago), en colaboración con Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI), y ligandos rescatadores de función de fenilalanina hidroxilasa (fenilcetonuria), en colaboración con Dra. Aurora Martínez (Universidad de Bergen, Noruega). Esta misma

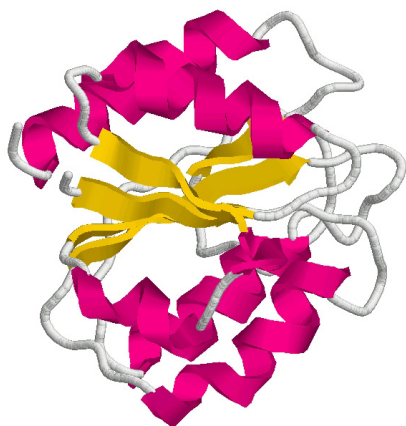
metodología se está aplicando en la búsqueda de inhibidores de la proteasa NS3.

Determinantes Termodinámicos de la Interacción de Proteína/Ligando

La afinidad de los complejos proteína/ligando es un reflejo de las interacciones establecidas entre la proteína, el ligando y las moléculas de agua, y puede ser estudiada mediante una combinación de medidas termodinámicas e ingeniería de proteínas. Entre las herramientas empleadas destacan las calorimétricas (calorimetría isotérmica de titulación y calorimetría diferencial de barrido) y espectroscópicas (fluorescencia, dicroísmo circular, espectrofotometría). La adquisición de un difractor de rayos X permitirá realizar estudios estructurales de complejos proteína/ligando a nivel atómico. Se están realizando estudios termodinámicos con flavodoxina, en colaboración con Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI), ferredoxina-NADP+ reductasa y FAD sintetasa, en colaboración con Dra. Milagros Medina (Universidad de Zaragoza y BIFI), y en otros sistemas biológicos.

Enfermedades Conformationales

Colaborando con Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI) estamos investigando una enfermedad conformacional muy común, hipercolesterolemia familiar, que es causada por mutaciones en el receptor de LDL que desestabiliza los módulos responsables de la interacción con las lipoproteínas. Se está realizando una caracterización exhaustiva de la estabilidad conformacional y la interacción entre el receptor de LDL y cationes,



en particular calcio, importante para su función biológica, junto con simulaciones de dinámica molecular. Posteriormente se llevará a cabo un proceso de cribado experimental de ligandos estabilizantes.

Cooperatividad de Unión en Proteínas

Los fenómenos cooperativos en la unión a proteínas son la base de la regulación de la función de proteínas, la señalización celular y la formación de estructuras multimoleculares. Se ha desarrollado un método exacto para caracterizar las interacciones cooperativas heterotrópicas en proteínas que permite determinar, en un único experimento, los parámetros termodinámicos de interacción cooperativa. Se ha validado la metodología con ferredoxina-NADP+ reductasa y tres de sus substratos, en colaboración con Dra. Milagros Medina (Universidad de Zaragoza y BIFI). Esta misma metodología también ha sido aplicada para determinar cooperatividad mediante medidas cinéticas de actividad enzimática en la proteasa NS3 (cooperatividad de unión de substrato y cofactor).

Sistemas Biológicos Complejos

En colaboración con diferentes grupos de investigación se aborda el estudio termodinámico, mediante calorimetría, de sistemas biológicos complejos:

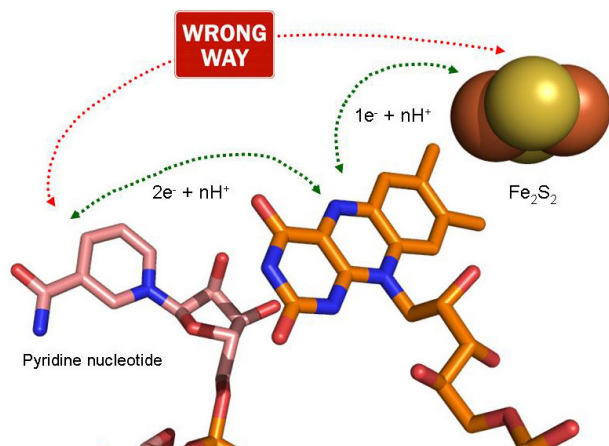
- Interacción de FAD sintetasa con sus diferentes substratos (Dra. Milagros Medina, Universidad de Zaragoza y BIFI).
- Interacción de nucleoplasmina con histonas (Dra. María Ángeles Urbaneja, Universidad del País Vasco).
- Interacción de chaperonas con sus substratos y cofactores (Dr. Arturo Muga, Universidad del País Vasco).
- Interacciones entre componentes del sistema fosfotransferasa bacteriano de transporte de azúcares y búsqueda de nuevos antibióticos (Dr. José Luis Neira, Universidad Miguel Hernández y BIFI).
- Cooperatividad de unión de ligandos en diferentes sistemas biológicos (Dr. Jayaraman Sivaraman, National University of Singapore).
- Interacción de membranas lipídicas y ligandos (Dra. Maria Joao Moreno, Universidade de Coimbra).

Interacción proteína-proteína y transferencia de electrones (Protein-protein interaction and electron transfer)

Coordinadora Milagros Medina

Las proteínas adoptan una estructura espacial tridimensional ordenada, estrechamente relacionada con su función, la cual en muchos casos está regulada mediante la interacción con otras proteínas y/o diferentes tipos de moléculas. Muchas funciones vitales dependen de procesos de transferencia de electrones donde intervienen flavoproteínas debido a su habilidad única de mediar procesos de dos electrones con aquellos de un solo electrón. En muchos casos estos procesos resultan de gran interés para la síntesis industrial de compuestos con actividad biológica. Nuestra investigación se centra tanto en el estudio de los mecanismos de reconocimiento proteína-proteína y proteína-

liando como en los procesos de transferencia de electrones e hidruro en proteínas dependientes de flavina. La combinación de estudios experimentales de bioquímica y biofísica clásicas,



y computacionales en la investigación de los sistemas dependientes de interacciones proteína-proteína y proteína-ligando puede proporcionar un importante avance en su conocimiento, comprensión y utilización con fines económicamente rentables o terapéuticos.

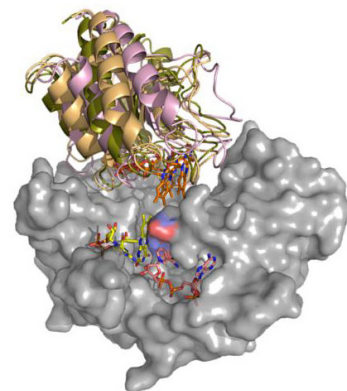
La FAD sintetasa (FADs).

Tanto FMN como FAD son sintetizados in vivo a partir de riboflavina (RB). Los eucariotas utilizan dos enzimas diferentes para la síntesis de FMN y FAD, mientras que en la mayoría de los microorganismos estas síntesis dependen de un enzima bifuncional, la FAD sintetasa. Resulta de interés prestar atención al estudio de su mecanismo ya que FMN y FAD son imprescindibles para la acción de muchas flavoproteínas. Nuestros estudios en el enzima de *C. ammoniagenes* proponen un mecanismo para la acción de las dos actividades en el cual los sustratos se unen ordenadamente a dos sitios catalíticos independientes. Simultáneamente hemos iniciado el estudio del enzima de *M. tuberculosis*.

El sistema de la Ferredoxina-NADP+ reductasa (FNR).

En la cadena de transporte de electrones fotosintética la ferredoxina (Fd) recibe electrones del Fotosistema I (PSI), para cederlos a la Ferredoxina-NADP+ reductasa (FNR) que finalmente reducirá al NADP+. Se establece una cadena de transporte electrónico desde PSI a NADPH mediante la formación de un complejo de vida corta Fd:FNR:NADP+. En deficiencia de hierro, algunos organismos sintetizan flavodoxina (Fld), que sustituye a la Fd. La interacción entre estas proteínas ha sido caracterizada mediante el empleo de diferentes metodologías que incluyen simulaciones de docking, mutagénesis dirigida, calorimetría de titulación isoterma y cinéticas resueltas en el tiempo. Nuestros resultados sugieren que el dipolo de la Fld es suficiente para orientarla so-

bre PSI o FNR, y que más de una orientación resulta eficiente. Un aspecto de los procesos de transferencia de hidruro que implican flavoenzimas es la interacción que debe producirse entre los anillos de isoaloxacina y nicotinamida de NAD(P)+/H-. La presencia de los aminoácidos aromáticos hace muy difícil el acercamiento del anillo de nicotinamida. En el caso particular de FNR se propone un desplazamiento de la Y303 para permitir al anillo de nicotinamida enfrentarse a la isoaloxacina. No se dispone de una imagen de la estructura tridimensional para esta interacción. Por tanto, es interesante analizar mediante una combinación de técnicas computacionales y cinéticas experimentales el mecanismo de esta reacción.



Rediseño de la función de enzimas y sistemas enzimáticos.

Modulación del potencial de reducción por el entorno proteico:

Tras la asociación con la parte proteica, los potenciales de reducción de la isoaloxacina resultan alterados y, a menudo, su estado semiquinona resulta significativamente estabilizado. Las flavinas presentes en proteínas son sólo tres, RB, FMN y FAD. Resulta conveniente observar el efecto producido si otras flavinas formaran parte de una flavoproteína reemplazando estos grupos por un análogo o si se reemplazan residuos en su entorno cercano, lo que permite evaluar las ventajas que ofrece la selección natural. Dadas las características especiales de la Fld de *Anabaena*, dicho sistema es apropiado para estos estudios, que están llevándose a cabo en nuestro laboratorio.

Interacción entre proteínas en sistemas redox híbridos cianobacteria-microsoma:

Existe una serie de CYPs que producen la modificación del colesterol dando lugar a compuestos esteroideos de interés farmacológico. En colaboración con la Prof. Rita Bernhardt, Universidad des Saarlandes, se ha puesto de manifiesto la transferencia de electrones eficiente de Fd, y especialmente Fld, a CYP.

Cambio de la especificidad por el cofactor en la FNR de Anabaena:

Uno de los cambios de sustrato que más interés presenta en los enzimas de óxido-reducción dependientes de piridín nucleótidos es la especificidad por el coenzima. Nuestros estudios han permitido conocer los determinantes de la especificidad de la FNR de *Anabaena*.

Mecanismos de acción de otras flavoenzimas redox.

R. capsulatus es una bacteria que en anaerobiosis y luz desarrolla metabolismo fotosintético, mientras que el oxígeno induce el metabolismo respiratorio. El Dr. Cortez, U. Nacional de Rosario, ha clonado una reductasa inducida por propagadores de superóxido, NADP(H)-flavodoxina oxidoreductasa (FPR). Estamos estudiando el mecanismo catalítico de esta enzima.

La aril-alcohol oxidasa es un enzima característico de hongos *P. eryngii* que constituye una fuente de H₂O₂ para la biodegradación de lignina. Produce H₂O₂ a partir de la oxidación de alcoholes aromáticos con una amplia especificidad. En colaboración con el grupo del Dr. Martínez, C.I.B. estamos caracterizando su mecanismo mediante técnicas de medidas rápidas.

Interacción Proteína-DNA y regulación genética (Protein-DNA interaction and genetic regulation)

Coordinadora *María F. Fillat*

Las proteínas de la familia Fur (ferric uptake regulator) son reguladores globales de la transcripción en procariotas. En bacterias heterótrofas, Fur se encarga de mantener la homeostasis de hierro, está implicada en procesos de patogenidad y es una proteína esencial en los mecanismos de adaptación y protección frente a diversos tipos de estrés. Existen diferencias significativas en la estructura y el mecanismo de actuación de los miembros de esta familia. Especialmente, el conocimiento sobre este tipo de reguladores en cianobacterias es relativamente escaso. Nuestro grupo está implicado en la caracterización estructural y funcional de las proteínas Fur presentes en cianobacterias, así como en el estudio de su regulación y la identificación de nuevas funciones de esta familia en microorganismos fotosintéticos, particularmente su papel en la síntesis de cianotoxinas y su relación con los procesos de fotosíntesis, fijación y asimilación de nitrógeno.

Nuestro equipo está trabajando en la consecución de estos objetivos mediante dos sublíneas de actuación claramente diferentes:

1.- Coordinada por María Fillat: Caracterización estructural y funcional de reguladores transcripcionales de la familia Fur, en la que se abordan los siguientes problemas:

- Identificación y caracterización de proteínas Fur en cianobacterias.
- Estudio de la interacción DNA-proteína
- Caracterización de redes reguladoras mediadas por Fur

2- Coordinada por M. Luisa Peleato: Aplicaciones biotecnológicas de péptidos producidos por cianobacterias

La experiencia en conocimientos sobre metabolitos secundarios de cianobacterias nos permite desarrollar aspectos aplicados de interés biotecnológico

- Desarrollo de test de identificación y valoración de péptidos tóxicos
- Oxidación de péptidos tóxicos

16. TESIS DOCTORALES LEÍDAS EN 2008.

A lo largo de 2008 se han leído las siguientes tesis doctorales:

En la Universidad de Zaragoza:

Autor: Sergio Pérez Gavero

Título: Transiciones de fase y comportamiento crítico de los vidrios de espín

Directores: Alfonso Tarancon Lafita, Víctor Martín Mayor

Fecha de lectura: 5/2/2008. Calificación: Sobresaliente cum laude

Autor: José Luis Velasco Garasa.

Título: Ion kinetic transport in stellarators.

Director: Alfonso Tarancón Lafita y Francisco Castejón Magaña.

12/12/2008. Calificación: Sobresaliente cum laude

Autor: Beatriz Martín Luna

Título: Estudio de la proteína Fur (ferric uptake regulator) de *Microcystis aeruginosa* y de factores que afectan a la regulación de la síntesis de microcistina

Directora: María Fillat y M^a Luisa Peleato

FACULTAD: Ciencias. UNIVERSIDAD: Zaragoza

AÑO DE LECTURA: 2008. Calificación: Sobresaliente

Autor: Silvia Pellicer Espuña

Título: Mecanismos de defensa a estrés oxidativo en cianobacterias fijadoras de nitrógeno. Papel de las proteínas Fur y flavodoxina.

Directora: María Fillat y Teresa Bes

FACULTAD: Ciencias. UNIVERSIDAD: Zaragoza

Año de lectura: 2008 Calificación: Sobresaliente

Autor: Violeta Lamarca Gay.

Título: Caracterización funcional de PSAP/MTCH1

Director: José A. Carrodegua

Fecha de lectura: 26-5-2008. Calificación: Sobresaliente

En otras Universidades

Autor: Lidia Prieto Frías

TÍTULO: Potenciales basados en topología para el estudio de

las transiciones de plegamiento y agregación en proteína

DIRECTOR: Antonio Rey Gayo

FECHA: 2008

AUTOR: Luis Alcaraz Mas

TÍTULO: Aplicación de la resonancia magnética nuclear a la caracterización estructural y dinámica de las proteínas de la cápsida del virus VIH-1, metaloproteína-3 y rusticianina

DIRECTOR: J. L. Neira (co-dirigida con el Dr. Antonio Donaire)

UNIVERSIDAD: UNIVERSIDAD MIGUEL HERNÁNDEZ DE ELCHE

FECHA: 2008

Autor:: José Ángel Mier Maza

TÍTULO: Turbulencia inducida por ondas de deriva en plasmas de fusión. Influencia de la difusión colisional en las propiedades no locales y no Markovianas del transporte.

DIRECTOR: Luis García Gonzalo (Co-dirigida con el Dr. R. Sánchez Fernández)

UNIVERSIDAD: Complutense de Madrid

FECHA: 19/6/2008

17. OTRAS ACTUACIONES.

ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EXTERNOS

Parece interesante constatar las frecuentes (14) estancias de investigadores extranjeros o de otros centros españoles en el BIFI para colaborar con nuestros investigadores:

- Alfredo Lagunas Martínez. Universidad Nacional Autónoma de México. 1-9-08 a 29-1-09.
- Michel Mareschal, Université Libre de Bruxelles, Bélgica, 9 Diciembre 2008.
- Alberto Castro, Freie Universität Berlin, Alemania, 9-10 Julio 2008, 10 Septiembre 2008.
- David Zueco, Universität Augsburg, Alemania, 13-17 Octubre 2008, 15- Diciembre 2008.
- Raúl Gouet Bañares. Centro de Modelamiento Matemático de Chile y Dpto. Ingeniería Matemática de la Uiv. de Chile. Abril 2008.
- Arnoud Taton. Dept. of Biology and Center for the Study of Biological Complexity Virginia Commonwealth University. Marzo de 2008
- Sandro Meloni, Universidad de Roma III, Octubre 2008

- Roberta Sinatra, Universidad de Catania, Abril-Mayo de 2008

- Elio Profumo, Universidad de Catania, Marzo de 2008

- María Ángeles Urbaneja. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Universidad del País Vasco. Zaragoza, 18-20 Junio 2008

- Maria João Moreno Biological Chemistry Group, Chemistry Department, University of Coimbra. Zaragoza, 21 Septiembre-2 Octubre 2008

- Maria João Moreno. Biological Chemistry Group, Chemistry Department, University of Coimbra. Zaragoza, 29 Noviembre-19 Diciembre 2008

- Silvia Pardo. Instituto Principe Felipe, Valencia Fecha: Marzo 2008 y Septiembre 2008

- Rafael Ruiz. Instituto Principe Felipe, Valencia. Fecha: Agosto 2008

OTRA INFORMACIÓN RELEVANTE

Contrato de I+D con el Instituto Aragonés de Estadística

Título: Elaboración de Estadísticas Demográficas y Sociales de Aragón.

Duración: En vigor desde 2002 (renovable anualmente).
Gerardo Sanz

PREMIO Vincent Massey's Award a Jóvenes Investigadores con una trayectoria investigadora inferior a 10 años. A la Dra. Susana Frago

De entre los **48 artículos más citados** de la Universidad de Zaragoza (según el WoK Essential Science Indicators) en los últimos 10 años, existen 3 que corresponden a la producción científica del BIFI. Uno de ellos es el segundo (posiblemente ya primero) más citado con 532 referencias en menos de 3 años.

Cuatro estudiantes de Ingeniería han realizado su proyecto final de carrera en el 2009 en el área de computación: David Benito "Desarrollo de un shell de acceso y continuidad de trabajos en BOINC", Jorge Roy "Desarrollo de sistema para automatizar el proceso de colocación de fotolitos sobre una plancha de impresión flexográfica", Gonzalo Ruiz "Sistema para la telegestión de regadíos" y Patricia Santtos "Análisis e implantación de un sistema de ficheros paralelo sobre un cluster de memoria distribuida".

Tecnoebro, asociación de la que el BIFI es socio fundador, se ha afiliado en la APTE como Parque Científico Tecnológico. En

este marco, el BIFI ha participado en la gestión de la formación y ha mantenido su oferta tecnológica.

Colaboraciones con empresas

Hemos mantenido la colaboración con las empresas **Spuderg**, **Cauchos Puntos**, **OX-CTA** y con **Zeus Inmunotec** con las que estamos realizando proyectos de investigación e innovación tecnológica.

ANEXOS.

Anexo 1. Relación de artículos científicos de miembros del BIFI en 2008.

Anexo 2. Relación de proyectos del BIFI y en los que participa algún miembro del Instituto en 2008.

El director: José Félix Sáenz Lorenzo
Zaragoza diciembre de 2008.

ANEXO I

Artículos publicados por miembros del BIFI (CITAN BIFI)

1. S. Frago, A. Serrano, S. Arilla, A. Velazquez-Campoy, M. Medina. Interaction of FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes* with its substrates. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.537-542
2. M. Martinez-Julvez, M. Medina, A. Velazquez-Campoy. Protonation effects coupled to the binding of ferredoxin/ flavodoxin to ferredoxin NADP⁺ reductase from *Anabaena*. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.401-406
3. X. Zhou, T.-C. Tan, S. Valiyaveetil, M.-L. Go, R.M. Kini, A. Velazquez-Campoy, J. Sivaraman. Structural characterization of myotoxic ecarpholin S from *Echis carinatus* venom. *Biophysical Journal* (2008) 95 3366-3380
4. E. Hurtado-Gomez, O. Abian, F.J. Muñoz, M.J. Hernaiz, A. Velazquez-Campoy, J.L. Neira. Defining the epitope region of a peptide from the *Streptomyces coelicolor* phosphoenolpyruvate: sugar phosphotransferase system able to bind to the Enzyme I. *Biophysical Journal* (2008) 95 1336-1348
5. A.L. Pey, M. Ying, N. Cremades, A. Velazquez-Campoy, T. Scherer, B. Thöny, J. Sancho, A. Martinez. Pharmacological chaperones as new therapeutic agents to treat phenylketonuria. *Journal of Clinical Investigation* (2008) 118 2858-2867
6. X. Arias-Moreno, A. Velazquez-Campoy, J.C. Rodríguez, M. Pocovi, J. Sancho. The mechanism of LDL release in the endosome: Implications of the stability and Ca²⁺ affinity of the fifth binding module of the LDL receptor. *Journal of Biological Chemistry* (2008) 283 22670-22679
7. N. Cremades, M. Bueno, J.L. Neira, A. Velazquez-Campoy, J. Sancho. Conformational stability of *Helicobacter pylori* flavodoxin. Fit to function at pH 5. *Journal of Biological Chemistry* (2008) 283 2883-2895
8. N. Cremades, A. Velazquez-Campoy, E. Freire, J. Sancho. The flavodoxin from *Helicobacter pylori*: Structural determinants of thermostability and FMN cofactor binding. *Biochemistry* (2008) 47 627-639
9. J. Gonzalo-Asensio, C.Y. Soto, A. Arbués, J. Sancho, M. del Carmen Menéndez, M.J. García, B. Gicquel, C. Martín. The *Mycobacterium tuberculosis* phoPR operon is positively autoregulated in the virulent strain H37Rv. *Journal of Bacteriology* (2008) 190 7068-7078
10. N. Cremades, J. Sancho. Molten globule and native state ensemble of *Helicobacter pylori* flavodoxin: can crowding, osmolytes or cofactors stabilize the native conformation relative to the molten globule? *Biophysical Journal* (2008) 95 1913-1927
11. X. Arias-Moreno, J.L. Arolas, F.X. Aviles, J. Sancho, S. Ventura. Scrambled isomers as key intermediates in the oxidative folding of ligand binding module 5 of the low density lipoprotein receptor. *Journal of Biological Chemistry* (2008) 283 13627-13637
12. R. Gil-Redondo, J. Estrada, A. Morreale, F. Herranz, J. Sancho, A.R. Ortiz. VSDMIP: Virtual Screening Data Management on an Integrated Platform. *J. Comp. Aid. Mol. Design* (2008) en prensa DOI 10.1007/s10822-008-9249-9
13. G. Goñi, A. Serrano, S. Frago, M. Hervás, J.R. Peregrina, M.A. De la Rosa, C. Gómez-Moreno, J.A. Navarro, M. Medina. Flavodoxin-mediated electron transfer from Photosystem I to Ferredoxin-NADP⁺ reductase

in Anabaena: Role of Flavodoxin hydrophobic residues in protein-protein interaction. *Biochemistry* (2008) 47 1207-1217

14. M. Medina, R. Abagyan, C. Gómez-Moreno, J. Fernandez-Recio Docking analysis of transient complexes: Interaction of Ferredoxin-NADP⁺ Reductase with Ferredoxin and Flavodoxin. *Proteins* (2008) 72 848-862

15. S. Frago, M. Martínez-Júlvez, A. Serrano, M. Medina. Structural analysis of FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*. *BMC Microbiology* (2008) 8 160

16. A. Bortolotti, I. Perez-Dorado, G. Goñi, M. Medina, J. Hermoso, N. Carrillo, N. Cortez. Coenzyme binding and hydride transfer in *Rhodobacter capsulatus* ferredoxin/flavodoxin NADP⁺(H) oxidoreductase. *Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics*. (2008) PMID: 18973834

17. I. García-Rubio, P.J. Alonso, M. Medina, J.I. Martínez. HYSCORE and ESSEM study of the two coexisting forms of the heme protein cytochrome c6 from *Anabaena* PCC 7119. *Biophysical Journal*. PMID: 18835911 (2008)

18. G. Goñi, B. Herguedas, M. Hervás, J.R. Peregrina, M.A. De la Rosa, C. Gómez-Moreno, J.A. Navarro, J.A. Hermoso, M. Martínez-Júlvez, M. Medina. Flavodoxin: a compromise between efficiency and versatility in the electron transfer from Photosystem I to Ferredoxin-NADP⁺ reductase. *Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics*. (2008) PMID: 18177021

19. J.R. Peregrina, I. Lans, A. Sánchez-Azqueta, S. Frago, A. González-Lafont, J.M. Lluch, M. Garcia-Viloca, M. Medina. Flavin role in protein-protein interaction and electron transfer: from photosystem I to NADPH, a case study. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.89-98

20. V. Dumit, A. Bortolotti, N. Carrillo, N. Cortez, Y. Jouanneau, M. Medina. *Rhodobacter capsulatus* ferredoxinVI and ferredoxin(flavodoxin)-NADP(H) oxidoreductase are redox partners in vitro. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.107-112

21. I. Pérez-Dorado, J.A. Hermoso, G. Goñi, M. Medina, A. Bortolotti, N. Carrillo, N. Cortez. The coenzyme binding site of bacterial ferredoxin/flavodoxin-NADP(H) reductases. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.267-272

22. P. Ferreira, M.J. Martínez, J. Jiménez-Barbero, A.T. Martínez, B. Herguedas, M. Medina. Catalytic mechanisms of aryl-alcohol oxidase from *Pleurotus eryngii*. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.297-302

23. G. Goñi, B. Herguedas, J.R. Peregrina, C. Gómez-Moreno, J.A. Hermoso, M. Martínez-Júlvez, M. Medina. Mapping hot spots on the *Anabaena* flavodoxin binding site for the interaction with its counterpart ferredoxin-NADP⁺ reductase. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.407-412

24. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2008* (ISBN: 978-84-7733-017-2). Editores: S. Frago, C. Gómez-Moreno, M. Medina. Editorial: Prensas Universitarias de Zaragoza. Zaragoza, España

25. E. Sevilla, B. Martín-Luna, L. Vela, M.T. Bes, M.F. Fillat, M.L. Peleato. Iron availability affects mcyD expression and microcystin_{LR} synthesis in *Microcystis aeruginosa* PCC7806. *Environmental Microbiology* (2008) 10 2476-2483

26. L. Vela, E. Sevilla, C. González, M.T. Bes, M.F. Fillat, M.L. Peleato. Exploring the interaction of Microcystin_{LR} with proteins and DNA. *Toxicology in Vitro* (2008) 22 1714-1718

27. S. López-Gomollón, M.T. Bes, M.L. Peleato, M.F. Fillat. New insights into the role of Fur proteins: FurB (AlI2473) from *Anabaena* sp. PCC 7120 protects DNA and increases cell survival under oxidative stress. *Biochemical Journal* (2008) doi:10.1042/BJ20081066
28. V. Lamarca, I. Marzo, A. Sanz-Clemente, J.A. Carrodeguas. Exposure of any of two proapoptotic domains of PSAP/Mtch1 on the surface of mitochondria is sufficient for induction of apoptosis in a Bax/Bak-independent manner. *Eur. J. Cell Biol.* (2008) 87 325-334
29. F.N. Barrera, M. Del Alamo, M.G. Mateu, J.L. Neira. Envelope lipids regulate the in vitro assembly of the HIV-1 capsid. *Biophysical Journal* (2008) 94 L8-L10
30. L. Alcaraz, M. Del Alamo, M.G. Mateu, J.L. Neira. Structural mobility of the monomeric c-terminal domain of the HIV-1 capsid protein. *FEBS Journal* (2008) 275 3299-3311
31. M.L. Molina, F.N. Barrera, J.A. Encinar, M.L. Renart, A.M. Fernández, J.A. Poveda, J. Santoro, M. Bruix, F. Gavilanes, G. Fernández-Ballester, J.L. Neira, J.M. González-Ros. N-type inactivation of the potassium channel Kcsa by the shaker b "ball" peptide. Mapping the inactivating peptide binding epitope. *Journal of Biological Chemistry* (2008) 283 18076-18085
32. L.M. Contreras, J. Gómez, J.L. Prieto, J.M. Clemente-Jimenez, F.J. Las Heras-Vazquez, F. Rodríguez-Vico, F.J. Blanco, J.L. Neira. The family 52 b-xylosidase from *Geobacillus stearothermophilus* is a dimer: Structural and biophysical characterization of a glycoside hydrolase. *Biochimica et Biophysica Acta* (2008) en prensa
33. F.N. Barrera, L.A. Alcaraz, E. Hurtado-Gomez, J.L. Neira. Into the lipid realm. Stability and thermodynamics of membrane proteins, a review. *Current Protein and Peptide Science* (2008) en prensa
34. R. Carbajo, J.L. Neira, R. Farras. Spain should implement a model that's known to work. *Nature* (2008) 453 26-27
35. C. Carrasco, M. Castellanos, P.J. de Pablo, M.G. Mateu. Manipulation of the mechanical properties of a virus by protein engineering. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* (2008) 105 4150-4155
36. R. Mateo, E. Luna, V. Rincón, M.G. Mateu. Engineering viable foot-and-mouth disease virus of increased stability as a step in the development of improved vaccines. *Journal of Virology* (2008) 82 12232-12240
37. R. Jiménez, H. Lugo, J.A. Cuesta, A. Sánchez. Emergence and resilience of cooperation in the spatial Prisoner's dilemma via a reward mechanism. *Journal of Theoretical Biology* (2008) 250 475-483
38. J.A. Cuesta, R. Jiménez, H. Lugo, A. Sánchez. The shared reward dilemma. *Journal of Theoretical Biology* (2008) 251 253-263
39. S. Lozano, A. Arenas, A. Sánchez. Mesoscopic structure conditions the emergence of cooperation on social networks. *PLoS ONE* (2008) 3 e1892
40. J. Poncela, J. Gómez-Gardeñes, L.M. Floría, A. Sánchez, Y. Moreno. Complex cooperative networks from evolutionary preferential attachment. *PLoS ONE* (2008) 3 e2449
41. J.A. González, M.A. García-Ñustes, A. Sánchez, P.V.E. McClintock. Hawking-like emission in kink-soliton escape from a potential well. *New Journal of Physics* (2008) 10 113015
42. S. Lozano, A. Arenas, A. Sánchez. Community connectivity and heterogeneity: clues and insights on cooperation on social networks. *Journal of Economic Interaction and Coordination* (2008) 3 183-199

43. F. Belletti, M. Cotallo, A. Cruz, L.A. Fernandez, A. Gordillo, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, D. Navarro, A. Munoz-Sudupe, S. Perez-Gaviro, J.J. Ruiz Lorenzo, F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancon, R. Tripiccione, J.L. Velasco. Simulating spin systems on IANUS, an FPGA based computer. *Computer Physics Communications* (2008) 178 208-216
44. F. Belletti, M. Cotallo, A. Cruz, L. A. Fernández, A. Gordillo-Guerrero, M. Guidetti, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martín-Mayor, A. Muñoz-Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Pérez-Gaviro, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancón, R. Tripiccione, J.L. Velasco, and D. Yllanes. Nonequilibrium spin-glass dynamics from picoseconds to a tenth of a second. *Physical Review Letters* (2008) 101 157201
45. J. Munárriz, J.J. Mazo, F. Falo. Model for hand-over-hand motion of molecular motors. *Physical Review E* (2008) 77 031915
46. J.J. Mazo, F. Naranjo, K. Segall. Thermal depinning of fluxons in discrete Josephson rings. *Physical Review B* (2008) 78, 174510
47. K. Segall, A. Dioguardi, N. Fernandes, J.J. Mazo. Experimental observation of fluxon diffusion in Josephson rings. *Journal of Low Temperature Physics* 154, 41-54 (2009) (publicado online el 39 de octubre de 2008)
48. F. Castejón, J.M. Reynolds, F. Serrano, R. Valles, A. Tarancón, J.L. Velasco. Fusion plasma simulation in the interactive Grid. *Computing and Informatics* (2008) 27 261-270
49. L.A. Fernández, A. Maiorano, E. Marinari, V. Martín-Mayor, D. Navarro, D. Sciretti, A. Tarancón, J.L. Velasco. Critical properties of the four-state commutative random permutation glassy Potts model in three and four dimensions. *Physical Review B* (2008) 77 p 104432.
50. J. Marco, I. Campos, I. Coterillo, I. Diaz, A. Lopez, R. Marco, C. Martinez-Rivero, P. Orviz, D. Rodriguez, J. Gomes, G. Borges, M. Montecelo, M. David, B. Silva, N. Dias, J.P. Martins, C. Fernandez, L. Garcia-Tarres, C. Veiga, D. Cordero, J. Lopez Cacheiro, I. Lopez, J. Garcia-Tobio, N. Costas, J.C. Mourino, A. Gomez, W. Wogacki, N. Meyer, M. Owsiak, M. Plociennik, M. Pospieszny, M. Zawadzki, A. Hammad, M. Hardt, E. Fernandez, E. Heymann, M.A. Senar, A. Padee, K. Nawrocki, W. Wislicki, P. Heinzlreiter, M. Baumgartner, H. Rosmanith, D. Kranzmueller, J. Volkert, S. Kenny, B. Coghlan, R. Pajak, Z. Mosurska, T. Szymocha, P. Lason, L. Skital, W. Funika, K. Korcyl, J. Pieczykolan, K. Balos, R. Slot, K. Guzy, L. Dutka, J. Kitowski, K. Zielinski, L. Hluchy, M. Dobrucky, B. Simo, O. Habala, J. Astalos, M. Ciglan, R. Valles, J.M. Reynolds, F. Serrano, A. Tarancon, J.L. Velasco, F. Castejon K. Dichev, R. Keller, S. Stork. The Interactive European Grid: Project objectives and achievements. *Computing and Informatics* (2008) 27 161-171
51. J.L. Velasco, F. Castejón, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Tarancón, T. Estrada. Ion heating in transitions to CERC in the Stellarator TJ-II. *Nuclear Fusion* (2008) 48 065008
52. F. Castejón, A. López-Fraguas, A. Tarancón, J.L. Velasco. The search for a flux-expansion divertor in TJ-II. III BIFI International Conference Proceedings, Zaragoza, España (2008) p.29
53. J.M. Reynolds, D. López-Bruna, J. Guasp, J.L. Velasco, A. Tarancón, A new code for collisional drift kinetic equation solving. III BIFI International Conference Proceedings, Zaragoza, España (2008) p.72
54. J.L. Velasco, F. Castejón, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Tarancón, Ion kinetic transport studies in TJ-II plasmas. III BIFI International Conference Proceedings, Zaragoza, España (2008) p.109
55. L.A. Fernández, A. Maiorano, E. Marinari, V. Martín-Mayor, D. Navarro, D. Sciretti, A. Tarancón, J.L. Velasco. Critical properties of the four-state Commutative Random Permutation Glassy Potts model in three and four dimensions. *Physical Review B* (2008) 77 104432
56. L.A. Fernández, A. Gordillo-Guerrero, V. Martín-Mayor, J.J. Ruiz-Lorenzo. First order transition in a three dimensional disordered system. *Physical Review Letters* (2008) 100 057201

57. L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, D. Yllanes. Tethered Monte Carlo: computing the effective potential without critical slowing down. *Nuclear Physics B* (2008) en prensa. (DOI 10.1016/j.nuclphysb.2008.07.009)
58. R. Kenna, J.J. Ruiz-Lorenzo. Scaling Analysis of the Site-Diluted Ising Model in Two Dimensions. *Physical Review E* (2008) 78 031134
59. L. Leuzzi, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, J.J. Ruiz-Lorenzo. Diluted one-dimensional spin glasses with power law decaying interactions. *Physical Review Letters* (2008) 101 107203
60. F. Castejón, A. López-Fraguas, A. Tarancón, J.L. Velasco. The particle flux structure and the search for a flux-expansion divertor in TJ-II. *Plasma and Fusion Research* (2008) 3 S1009
61. L. Rossi, F. Castejón, C. Moreno, M. Liniers. Study of plasma formation within the electrostatics residual ion dump proposed for the HNB injectors of ITER. *Nuclear Fusion* (2008) 49 015002
62. F. Belletti, M. Cotallo, A. Cruz, L.A. Fernández, A. Gordillo, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, A. Muñoz-Sudupe, D. Navarro, S. Perez-Gaviro, M. Rossi, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancón, R. Tripiccione, J.L. Velasco. JANUS: an FPGA-based System for High Performance Scientific Computing. *Computing in Science and Engineering* (2008) en prensa (arXiv: 0710.3535v1)
63. J. Marco, I. Campos, I. Coterillo, I. Diaz, A. Lopez, R. Marco, C. Martinez-Rivero, P. Orviz, D. Rodriguez, J. Gomes, G. Borges, M. Montecelo, M. David, B. Silva, N. Dias, J.P. Martins, C. Fernandez, L. Garcia-Tarres, C. Veiga, D. Cordero, J. Lopez Cacheiro, I. Lopez, J. Garcia-Tobio, N. Costas, J.C. Mourino, A. Gomez, W. Wogacki, N. Meyer, M. Owsiak, M. Plociennik, M. Pospieszny, M. Zawadzki, A. Hammad, M. Hardt, E. Fernandez, E. Heymann, M. A. Senar, A. Padee , K. Nawrocki , W. Wislicki , P. Heinzlreiter, M. Baumgartner, H. Rosmanith, D. Kranzmueller, J. Volkert, S. Kenny, B. Coghlan, R. Pajak, Z. Mosurska, T. Szymocha, P. Lason, L. Skital, W. Funika, K. Korcyl, J. Pieczykolan, K. Balos, R. Slota, K. Guzy, L. Dutka, J. Kitowski, K. Zielinski, L. Hluchy, M. Dobrucky , B. Simo, O. Habala , J. Astalos , M. Ciglan, R. Valles, J.M. Reynolds, F. Serrano, A. Tarancon, J.L. Velasco, F. Castejon, K. Dichev, R. Keller, S. Stork. Interactivity and parallelism in grids: support of advanced applications across distributed infrastructures. *Computing and Informatics* (2008) en prensa
64. F. Castejon, D. Lopez Bruna, J.M. Reynolds, A. Tarancón, R. Valles, J.L. Velasco. Fusion Simulations, data visualization results and future requirements for the interactive grid infrastructure. *Ingrid 2008 Conference Proceedings* (2008) en prensa
65. P. Echenique, J.L. Alonso. Efficient model chemistries for peptides. I. General framework and a study of the heterolevel approximation in RHF and MP2 with Pople split-valence basis sets. *Journal of Computational Chemistry* (2008) 29 1408-1422
66. J.L. Alonso, X. Andrade, P. Echenique, F. Falceto, D. Prada-Gracia, A. Rubio, Efficient formalism for large scale ab initio molecular dynamics based on time-dependent density functional theory. *Physical Review Letters* (2008) 101 096403
67. D. Sciretti, P. Bruscolini, A. Pelizzola, M. Pretti, A. Jaramillo. Computational protein design with side-chain conformational entropy. *Proteins* (2009) 74 176-191 (on-line desde 2008)
68. D. Sciretti, P. Bruscolini, A. Pelizzola, M. Pretti, A. Jaramillo. Protein design at room temperature: the role of side-chain conformational entropy. *AIP Conference Proceedings Volume 1071*, p.82-97 (2008). *Proceedings of the BIFI2008 International Conference "Large Scale Simulations of Complex Systems, Condensed Matter and Fusion Plasma"*.
69. J. Clemente-Gallardo, P. Bruscolini, F. Castejón, P. Echenique, J.F. Sáenz-Lorenzo. Large Scale Simulations of Complex Systems, Condensed Matter and Fusion Plasma. *AIP Conference Proceedings Volume 1071*,

- p.1-123 (2008). Proceedings of the BIFI2008 International Conference "Large Scale Simulations of Complex Systems, Condensed Matter and Fusion Plasma", Zaragoza (Spain), 6-8 February 2008
70. J. Clemente-Gallardo, G. Marmo. Basics of quantum mechanics, geometrization and some applications to quantum information. *Int. J. Geom. Meth. Modern Physics* (2008) 5 1-44
 71. J. Sañudo, A.F. Pacheco. Electrons trapped in an anisotropic parabolic potential well. Thomas-Fermi approach. *International Journal of Modern Physics B* (2008) 22 469-484
 72. J. Sañudo, A.F. Pacheco. Lower bounds for the energy of a many-body model. *International Journal of Modern Physics E* (2008) 17 1031-1039
 73. A. Tejedor, S. Ambroj, J.B. Gómez, A.F. Pacheco. Predictability of the large relaxations in a Cellular Automaton Model. *Journal of Physics A: Math. Theor.* (2008) 41 375102
 74. A. Rosa, R. Everaers. Structure and dynamics of interphase chromosomes. *PLoS Computational Biology* (2008) 4 e1000153/1-10
 75. L.A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, V. Martin-Mayor, J.J. Ruiz-Lorenzo. First order transition in a 3D disordered system. *AIP Conference Proceedings Volume 1071*, p.46-57 (2008). Proceedings of the BIFI2008 International Conference "Large Scale Simulations of Complex Systems, Condensed Matter and Fusion Plasma".
 76. S.B. Yuste, K. Lindenberg, J.J. Ruiz-Lorenzo. Subdiffusion limited reactions , in "Anomalous Transport: Foundations and Applications" published by Wiley-VCH (Weinheim), 2008.
 77. C. Pellicer-Lostao, R. López-Ruiz. Role of symmetry and geometry in a chaotic pseudo-random bit Generator. *International Journal of Computer Science and Software Technology (IJCSST)* (2008)
 78. C. Pellicer-Lostao, R. López-Ruiz. Generación pseudoaleatoria basada en mapas caóticos: Beneficios de sus simetrías y de sus propiedades geométricas. *Actas de la X Reunión Española sobre Criptología y Seguridad de la Información, RECSI-2008-Salamanca*, pp. 91-99 (2008)
 79. C. Pellicer-Lostao, R. López-Ruiz. Pseudo-random bit generation based on 2D chaotic maps of logistic type and its applications in chaotic cryptography. *Lectures Notes on Computer Science (LNCS). Proceedings, Part II (5073)* (2008) pp.784-789
 80. C. Pellicer-Lostao, R. López-Ruiz. Generación de bits pseudoaleatorios con mapas caóticos de tipo logístico. *Anales del Centro Asociado de la UNED en Calatayud XV* (2008) pp 87-106
 81. J. López, G. Sanz, M. Sobottka. Dualities for multistate probabilistic cellular automata. *Journal of Statistical Mechanics* (2008) P05006
 82. Y. Moreno. Complex Networks Modelling: A New Approach to Neurosciences. Chapter contribution in "Coordinated Activity in the Brain: measurements and relevance to brain function and behavior Springer Verlag, submitted (2008)
 83. M. Nekovee, Y. Moreno. Rumor-like information dissemination in complex computer networks. Chapter contribution in "Unifying Themes in Complex Systems", vol. 5, Springer Complexity Series, in press (2008)
 84. M. Nekovee, Y. Moreno. Dynamics of gossip-like information dissemination in complex computer networks. *International Journal of Computer Mathematics* (2008) 85 1165

85. R. Sinatra, J. Gómez-Gardeñes, Y. Moreno, L.M. Floría, D. Condorelli, V. Latora. Structural and dynamical properties of cellular regulatory networks. *Statistical mechanics of cellular systems and processes*. Edited by M. H. Zaman, Cambridge University Press (2008)
86. A. Díaz-Guilera, J. Gomez-Gardeñes, Y. Moreno, M. Nekovee. Synchronization of Kuramoto oscillators in random geometric graphs. *International Journal of Bifurcation and Chaos* (2008) in press (arXiv:physics/0801.3044)
87. S. Meloni, J. Gomez-Gardeñes, V. Latora, Y. Moreno. Scaling breakdown in flow fluctuations on complex networks. *Physical Review Letters* (2008) 100 208701
88. J. Gomez-Gardeñes, J. Poncela, L.M. Floría, Y. Moreno. Natural Selection of cooperation and degree hierarchy in heterogeneous populations. *Journal of Theoretical Biology* (2008) 253 296
89. J. Gomez-Gardeñes, V. Latora, Y. Moreno, E. Profumo. Spreading of sexually transmitted diseases in heterosexual populations. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* (2008) 105 1399
90. A. Díaz-Pérez, M. Sequeira, A. Santos-Guerra, P. Catalán. Multiple colonizations, in situ speciation, and volcanism-associated stepping-stone dispersals shaped the phylogeography of the Macaronesian red fescues (*Festuca L.*, Gramineae). *Systematic Biology* (2008) 57 732-749
91. A. Arenas, A. Díaz-Guilera, J. Kurths, Y. Moreno, C. Zhou. Synchronization in Complex Networks. *Physics Reports* (2008) 469 93-153
92. V. Gopar. Statistical analysis of the transmission based on the DMPK equation: an application to Pb nanocontacts. *European Physics Journal B* (2008) 62 299
93. V. Gopar, D Frustaglia. Statistics of orbital entanglement production in quantum-chaotic dots. *Physical Review B* (2008) 77 153403
94. V. Gopar, M. Martínez-Mares, R.A. Méndez. Chaotic scattering with direct processes: A generalization of Poisson's kernel for non-unitary matrices. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* (2008) 41 015103

Artículos publicados por miembros del BIFI. (NO CITAN BIFI)

1. K. Segall, J. Moyer, J.J. Mazo. Subgap biasing of superconducting tunnel junctions without a magnetic field. *Journal of Applied Physics* (2008) 104 043920
2. D. De Sancho, A. Rey. Energy minimizations with a combination of two knowledge-based potentials for protein folding. *Journal of Computational Chemistry* (2008) 29 1187 1684-1692
3. L. Prieto, A. Rey. Simulations of the protein folding process using topology-based models depend on the experimental structure. *Journal of Chemical Physics* (2008) 129 115101 1-7
4. M.F. Rey-Stolle, M. Enciso, A. Rey. Topology-based models and NMR structures in protein folding simulations. *Journal of Computational Chemistry* (2008) DOI 10.1002/jcc.21149
5. C. Hijón, M. Serrano, P. Español. Response to "Comment on 'Markovian approximation in a coarse-grained description of atomic systems. [*J. Chem. Phys.* 128, 147101 (2008)]". *Journal of Chemical Physics* (2008) 128, 147102

6. V. Tognetti, M.D. Zurbriggen, E.M. Valle, N. Carrillo, E.N. Morandi, M. Melzer, M.R. Harjirezaei, M.F. Fillat. Recovering the cyanobacterial heritage in land plants: The case of flavodoxin. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins* (2008) p.527-536
7. M.D. Zurbriggen, V. Tognetti, M.F. Fillat, M.R. Harjirezaei, E.M. Valle, N. Carrillo. Combating stress with flavodoxin: a crop improvement promise. *Trends in Biotechnology* (2008) 26 531-537
8. E. Moreno, S.G. Rodrigo, S.I. Bozhevolnyi, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Guiding and focusing of electromagnetic fields with wedge plasmon polaritons. *Physical Review Letters* (2008) 100 023901
9. S.G. Rodrigo, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Influence of material properties on Extraordinary Optical Transmission thorough metal films. *Physical Review B* (2008) 77 075401
10. A. Mary, S.G. Rodrigo, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Theory of light transmission through an array of rectangular holes. *Physical Review B* (2008) 76 195414
11. A.I. Fernandez-Dominguez, I. Hernandez-Carrasco, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Transmission resonances through a Fibonacci array of subwavelength slits. *Electromagnetics* (2008) 28 186-197
12. C.R. Williams, S.R. Andrews, S.A. Maier, A.I. Fernandez-Dominguez, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Highly confined guiding of terahertz surface plasmon polaritons on structured metal surfaces. *Nature Photonics* (2008) 2 175
13. A.L. Baudrion, F. de Leon-Perez, O. Mahboub, A. Hohenau, H. Ditlbacher, F.J. Garcia-Vidal, J. Dintinger, T.W. Ebbesen, L. Martin-Moreno, J.R. Krenn. Coupling efficiency of light to surface plasmon polariton for single subwavelength holes in a gold film. *Opt. Express* (2008) 16 3420-3429
14. F. Lopez-Tejeira, S.G. Rodrigo, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal, E. Devaux, J. Dintinger, T.W. Ebbesen, J.R. Krenn, I. Radko, S. Bozhevolnyi, M. U. Gonzalez, J.C. Weeber, A. Dereux. Modulation of surface plasmon coupling-in by one-dimensional surface corrugation. *New Journal of Physics* (2008) 10 033035
15. E. Hendry, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno, J.G. Rivas, M. Bonn, A.P. Hibbins, M.J. Lockyear. Optical control over surface-plasmon-polariton-assisted THz transmission through a slit aperture. *Physical Review Letters* (2008) 100 123901
16. A.V. Nikitin, G. Brucoli, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Scattering of surface plasmon polaritons by impedance barriers: Dependence on angle of incidence. *Physical Review B* (2008) 77 195441
17. A. Mary, S.G. Rodrigo, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Plasmonic metamaterials based on holey metallic films. *J. of Phys.-Cond. Matt.* (2008) 20 304215
18. L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Minimal model for optical transmission through holey metal films. *J. of Phys.-Cond. Matt.* (2008) 20 304214
19. J. Christiansen, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Theory of resonant acoustic transmission through subwavelength apertures. *Physical Review Letters* (2008) 101 014301
20. F. Przybilla, A. Degiron, C. Genet, T.W. Ebbesen, F. de Leon-Perez, J. Bravo-Abad, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Efficiency and finite size effects in enhanced transmission through subwavelength apertures. *Opt. Express* (2008) 16 9571-9579
21. J. Christiansen, P.A. Huidobro, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Confining and slowing airborne sound with a corrugated metawire. *Physical Review Letters* (2008) 101 014301

22. A. Mary, S.G. Rodrigo, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Theory of Negative-Refractive-Index Response of Double-Fishnet Structures. *Physical Review Letters* (2008) 101 103902
23. A.I. Fernandez-Dominguez, D. Martin-Cano, E. Moreno, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal. Resonant transmission and beaming of cold atoms assisted by surface matter waves. *Physical Review A* (2008) 78 023614
24. F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Plasmones superficiales y sus aplicaciones. *Investigacion y Ciencia*, Octubre (2008) 67-76
25. I.P. Radko, S.I. Bozhevolnyi, G. Brucoli, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal, A. Boltasseva. Efficiency of local surface plasmon polariton excitation on ridges. *Physical Review B* (2008) 78 115115
26. A.I. Fernandez-Dominguez, C.R. Williams, L. Martin-Moreno, F.J. Garcia-Vidal, S.R. Andrews, S.A. Maier. Terahertz surface plasmon polaritons on a helically grooved wire. *Appl. Phys. Lett.* (2008) 93 141109
27. F. de Leon-Perez, G. Brucoli, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Theory on the scattering of light and surface plasmon polaritons by arrays of holes and dimples in a metal film. *New Journal of Physics* (2008) 10 105017
28. A.Y. Nikitin, D. Zueco, F.J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno. Electromagnetic wave transmission through a small hole in a perfect electric conductor of finite thickness. *Physical Review B* (2008) 78 165429
29. Adolfo Vázquez-Quesada, Marco Ellero y Pep Español. Smoothed-particle-hydrodynamic model for visco-elastic fluids with thermal fluctuations. *Physical Review E* (2008) en prensa
30. P. Español, M. Serrano. Voronoi fluid particles and tessellation fluid Dynamics. Capítulo del libro "Tessellations in the Sciences Virtues, Techniques and Applications of Geometric Tilings". Editores: Rien van de Weijgaert, Gert Vegter, Jelle Ritzerveld & Vincent Icke, Kluwer/Springer 2008. En prensa
31. A. Fernández, A.Cappa, F. Castejón, J.M.Fontdecaba, K.Nagasaki. ECCD Experiments in the TJ-II Stellarator. *Fusion Science and Technology* (2008) 53 254
32. F.Castejón, S. Eguilior, I. Calvo, D. López-Bruna, J. M. García-Regaña. Estimation of pump-out and positive radial electric field created by ECRH in magnetic confinement devices. *Physics of Plasmas* (2008) 15 012504
33. F. Castejón, S.S. Pavlov. The exact plasma dispersion functions in complex region. *Nuclear Fusion* (2008) 48 054003
34. D. López-Bruna, T. Estrada, F. Medina, E. de la Luna, E. Ascasíbar, F. Castejón, V.I. Vargas. Tracking magnetic resonances in the effective electron heat diffusivity of ECH plasmas of the TJ-II Helic. *European Physics Letters* (2008) 82 65002
35. F. Castejón, Á. Cappa, M. Tereshchenko, Á. Fernández. Computation of EBW heating in the TJ-II Stellarator. *Nuclear Fusion* (2008) 48 075011
36. E. Ascasíbar, D. López-Bruna, F. Castejón, V. I. Vargas, V. Tribaldos, H. Maasberg, C. D. Beidler, R. Brakel, A. Dinklage, J. Geiger, J. H. Harris, A. Kus, T. Mizuuchi, S. Murakami, S. Okamura, R. Preuss, F. Sano, U. Stroth, Y. Suzuki, J. Talmadge, Y. Turkin, K. Y. Watanabe, H. Yamada, M. Yokohama. Effect of rotational transform and magnetic shear on confinement of stellarators. *Plasma and Fusion Research* (2008) 3 S1004
37. A Köhn, Á. Cappa, E. Holzhauer, F. Castejón, Á. Fernández, U. Stroth, Full-wave calculation of the O-X-B mode conversión of Gaussian beams in a cylindrical plasma. *Plasma Phys. Control. Fusion* (2008) 50 085018

38. D. Chelouche, R. Rabadán, S.S. Pavlov, F. Castejón. Spectral signatures of photon-particle oscillations in celestial objects. Accepted in the *Astrophysical Journal* (ApJ) for publication. In press.
40. J. Montagnat, I. Campos-Plasencia, F. Castejón, T. Glatard, X. Pennec, G. Taffoni, V. Voznesensky, C. Vuerli. Workflow-based data parallel applications on the EGEE production grid. *Journal of Grid Computing* (2008) DOI 10.1007/s10723-008-9108-x
41. J.M. García-Regaña, F. Castejón, A. Cappa. Linear Estimation of Electron Bernstein Current Drive. *Fusion Science and Technology*, en prensa
42. G.F. Calvo, R.F. Alvarez-Estrada. The time duration for DNA thermal denaturation. *Journal of Physics: Condensed Matter* (2008) 20 035101
43. N. Madani, A. Schön, A.M. Princiotto, J.M. Lalonde, J.R. Courter, T. Soeta, D. Ng, L. Wang, E.T. Brower, S.H. Xiang, Y. Do Kwon, C.C. Huang, R. Wyatt, P.D. Kwong, E. Freire, A.B. Smith 3rd, J. Sodroski. Small-molecule CD4 mimics interact with a highly conserved pocket on HIV-1 gp120. *Structure* (2008) 16 1689-1701
44. K. Hidaka, T. Kimura, A.J. Ruben, T. Uemura, M. Kamiya, A. Kiso, T. Okamoto, Y. Tsuchiya, Y. Hayashi, E. Freire, Y. Kiso. Antimalarial activity enhancement in hydroxymethylcarbonyl (HMC) isostere-based dipeptidomimetics targeting malarial aspartic protease plasmepsin. *Bioorganic Medicinal Chemistry* (2008) 16 10049-10060
45. E. Freire. Do enthalpy and entropy distinguish first in class from best in class? *Drug Discovery Today* (2008) 13 869-874
46. U. Bacha, J. Barrila, S.B. Gabelli, Y. Kiso, L.M. Amzel, E. Freire. Development of broad-spectrum halomethyl ketone inhibitors against coronavirus main protease 3CL(pro). *Chemical Biology & Drug Design* (2008) 72 34-49
47. H. Gopi, M. Umashankara, V. Pirrone, J. LaLonde, N. Madani, F. Tuzer, S. Baxter, I. Zentner, S. Cocklin, N. Jawanda, S.R. Miller, A. Schön, J.C. Klein, E. Freire, F.C. Krebs, A.B. Smith, J. Sodroski, I. Chaiken. Structural determinants for affinity enhancement of a dual antagonist peptide entry inhibitor of human immunodeficiency virus type-1. *Journal of Medicinal Chemistry* (2008) 51 2638-2647
48. E.T. Brower, U.M. Bacha, Y. Kawasaki, E. Freire. Inhibition of HIV-2 protease by HIV-1 protease inhibitors in clinical use. *Chemical Biology & Drug Design* (2008) 71 298-305
50. M. Costas, D. Rodríguez-Larrea, L. De Maria, T.V. Borchert, A. Gómez-Puyou, J.M. Sanchez-Ruiz. Between-Species Variation in the Kinetic Stability of TIM Proteins Linked to Solvation-Barrier Free Energies. *Journal of Molecular Biology* (2008) en prensa
51. R. Perez-Jimenez, A.P. Wiita, D. Rodríguez-Larrea, P. Kosuri, J.A. Gavira, J.M. Sanchez-Ruiz, J.M. Fernandez. Force-clamp spectroscopy detects residue co-evolution in enzyme catalysis. *Journal of Biological Chemistry* (2008) 283 27121-27129
52. O. Halskau Jr, R. Perez-Jimenez, B. Ibarra-Molero, J. Underhaug, V. Muñoz, A. Martinez, J.M. Sanchez-Ruiz. Large-scale modulation of thermodynamic protein folding barriers linked to electrostatics. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* (2008) 105 8625-8630
53. A. Fung, P. Li, R. Godoy-Ruiz, J.M. Sanchez-Ruiz, V. Muñoz. Expanding the realm of ultrafast protein folding: gpW, a midsize natural single-domain with alpha+beta topology that folds downhill. *Journal of the American Chemical Society* (2008) 130 7489-7495

54. R. Godoy-Ruiz, E.R. Henry, J. Kubelka, J. Hofrichter, V. Muñoz, J.M. Sanchez-Ruiz, W.A. Eaton. Estimating free-energy barrier heights for an ultrafast folding protein from calorimetric and kinetic data. *Journal of Physical Chemistry B* (2008) 112 5938-5949
55. R. Szoszkiewicz, S.R. Ainarapu, A.P. Wiita, R. Perez-Jimenez, J.M. Sanchez-Ruiz, J.M. Fernandez. Dwell time analysis of a single-molecule mechanochemical reaction. *Langmuir* (2008) 24 1356-1364
56. A.L. Pey, D. Rodriguez-Larrea, S. Bomke, S. Dammers, R. Godoy-Ruiz, M.M. Garcia-Mira, J.M. Sanchez-Ruiz. Engineering proteins with tunable thermodynamic and kinetic stabilities. *Proteins* (2008) 71 165-174
57. D. Rodriguez-Larrea, B. Ibarra-Molero, L. de Maria, T.V. Borchert, J.M. Sanchez-Ruiz. Beyond Lumry-Eyring: an unexpected pattern of operational reversibility/irreversibility in protein denaturation. *Proteins* (2008) 70 19-24
58. J.L. Lopez, E. Perez-Sinusa. Two-point Taylor expansions in the asymptotic approximation of double integrals. Application to the second and fourth Appell's functions. *J. Math. Anal. Appl.* (2008) 339 530-541
59. A. Ferreira, J.L. Lopez, P. Pagola. Asymptotic approximations between the Hahn-type polynomials and Hermite, Laguerre and Charlier polynomials. *Acta Applicanda Mathematicae* (2008) 103 235-252
60. J.L. Lopez. The Liouville-Neumann expansion at a regular singular point. *J. Diff. Equat. Appl.* (2008)
61. J.L. Lopez. Asymptotic methods for convolution integrals unified and demystified. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.* (2008) 42 91-101
62. J.L. Lopez, E. Perez. A singular perturbation problem with discontinuous data in a cuboid. *IMA J. Appl. Math.* (2008) 9 1-11
63. L.A. Inda, J.G. Segarra-Moragues, J. Müller, P.M. Peterson, P. Catalán. Dated historical biogeography of the temperate Loliinae (Poaceae, Pooideae) grasses in the northern and southern hemispheres. *Molecular Phylogenetics and Evolution* (2008) 46 932-957
64. E. Pérez-Collazos, P. Sánchez-Gómez, J.F. Jiménez, P. Catalán. The phylogeographic history of the Iberian steppe plant *Ferula loscosii* (Apiaceae): a test of the Abundant-centre hypothesis. *Molecular Ecology* (2008) en prensa
65. J.G. Segarra-Moragues, P. Catalán. Glacial survival, phylogeography, and a comparison of microsatellite evolution models for explaining population structure in two species of dwarf yams (*Borderea*, *Dioscoreaceae*) endemic to the central Pyrenees. *Plant Ecology and Diversity* (2008) 1 229-243
66. J. Cano-Maqueda, S. Talavera, M. Arista, P. Catalán. Speciation and biogeographical history of the *Campanula lusitanica* complex (*Campanulaceae*) in the western Mediterranean region. *Taxon* (2008) 57 17
67. J. Viruel, J.G. Segarra-Moragues, E. Pérez-Collazos, L. Villar, P. Catalán. Chromosomal analyses within the narrow *Epipetrum* Phil. reveal the relict diploid nature of this Chilean genus and a new chromosome base number in the *Dioscoreaceae*. *New Zealand Journal of Botany* (2008) 46 327-339
68. L.A. Inda, P. Torrecilla, P. Catalán, T. Ruiz-Zapata. Phylogeny of *Cleome* L. and its close genera *Podandrogynae* Ducke and *Polanisia* Raf. (*Cleomoideae*, *Cleomaceae*) based on analysis of nuclear ITS sequences and morphology. *Plant Systematics and Evolution* (2008) 274 111-126
69. E. Pérez-Collazos, P. Catalán. Conservation genetics of the endangered Iberian steppe plant *Ferula loscosii* (Apiaceae). *Plant Biology* (2008) 10 492-501

70. E. Pérez-Collazos, J.G. Segarra-Moragues, P. Catalán. Two approaches for the selection of Relevant Genetics Units for Conservation (RGUCs) in the narrow European endemic steppe plant *Boleum asperum* (Brassicaceae). *Biological Journal Linnean Society* (2008) 94 341-354
71. P. Catalán, E. Pérez-Collazos, J.G. Segarra-Moragues, L.A. Inda, P. Sánchez-Gómez. Bases genéticas para la conservación de la flora amenazada de Aragón (II), de Murcia y de Castilla-La Mancha (*Puccinellia pungens*, *Boleum asperum*, *Ferula loscosii*). *Conservación Vegetal* (2008) 12 14-17
72. B.A. Carreras, I. Llerena, L. Garcia, I. Calvo. Topological characterization of flow structures in resistive pressure-gradient-driven turbulence. *Physical Review E* (2008) 78 066402
73. I. Calvo, R. Sánchez. The path integral formulation of fractional Brownian motion for the general Hurst exponent. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* (2008) 41 282002
74. B.Ph. van Milligen, I. Calvo, R. Sánchez. Continuous time random walks in finite domains and general boundary conditions: some formal considerations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* (2008) 41 215004
75. I. Calvo, L. Garcia, B.A. Carreras, R. Sánchez, B.Ph. van Milligen. Pseudochaotic poloidal transport in the laminar regime of the resistive ballooning instabilities. *Physics of Plasmas* (2008) 15 042302
76. A. Gomez-Marin, J.M. Sancho. A Brownian pump driven by a white-noise flashing ratchet. *Physical Review E* (2008) 77 031108
77. A. Ciudad, J.M. Sancho. A unified phenomenological analysis of the experimental velocity curves in molecular motors. *Journal of Chemical Physics* (2008) 128 225107
78. M. Khoury, A.M. Lacasta, J.M. Sancho, A.H. Romero, K. Lindenberg. Charged particle transport in antidot lattices in the presence of magnetic and electric fields: Langevin approach. *Physical Review B* (2008) 78 155433
79. A. Sancristobal, J. Garcia-Ojalvo, J.M. Sancho. Resonant Spike Propagation in Coupled Neurons with Subthreshold Activity in "ICAMM2008", V. Kurková et al. (Eds.), Part II, LNCS 5164 (2008) p.695-702
80. Nueva edición de libro (con adiciones y nuevo material): *Física Cuántica* (coordinador: Carlos Sanchez del Rio). Ediciones Piramide, Grupo Anaya, Madrid, 2008. ISBN: 978-84-36822250 (Ramon F. Alvarez-Estrada y Antonio Muñoz Sudupe son coautores en el libro).
81. J. Mier, R. Sanchez, L. Garcia, B.A. Carreras, D.E. Newman. Characterization of nondiffusive transport in plasma turbulence via a novel lagrangian method. *Physical Review Letters* (2008) 101 165001-1
82. J. Mier, R. Sanchez, L. Garcia, D.E. Newman, B.A. Carreras. On the nature of transport in near-critical dissipative-trapped-electron- mode turbulence: Effect of a subdominant diffusive channel. *Physics of Plasmas* (2008) 15 112301-1
83. S. Sakakibara, K.Y. Watanabe, Y. Suzuki, Y. Narushima, S. Ohdachi, N. Nakajima, F. Watanabe, L. Garcia, A. Weller, K. Toi, I. Yamada, K. Tanaka, T. Tokuzawa, K. Ida, H. Yamada, A. Komori, O. Motojima and the LHD Experimental Group. MHD study of the reactor-relevant high-beta regime in the Large Helical Device. *Plasma Physics and Controlled Fusion* (2008) 50 124014
84. Liliana Arrachea, Alfredo Levy Yeyati, Álvaro Martín-Rodero, *Phys. Rev. B* 77, 165326 (2008)
85. Liliana Arrachea, Carlos Naón, Mariano Salvay, *Phys. Rev. B* 77, 233105 (2008)

ANEXO II

PROYECTOS

EUROPEOS

Con gestión en Zaragoza:

Título: EDGeS (Enabling Desktop Grids for E-Science) (Subcontratación)

Entidad Financiadora: UE (FP VII)

Duración: 2008- 2010

Investigador principal: Peter Kacsuk

Investigador principal (subcontrato Zaragoza) Alfonso Tarancón

Título:EGEEIII (Enabling Grids for E-scienceE III)

Entidad Financiadora: UE (FP VII) INFSO-RI-222667*

Duración: 2008 - 2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título:EGEEII (Enabling Grids for E-scienceE II)

Entidad Financiadora: UE (FP VII) 031688

Duración: 2006 - 2008

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título:Int Eu Grid (Interactive European Grid)

Entidad Financiadora: UE (FP VII) 031857

Duración: 2005-2008

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Global Approach to Brain Activity

Entidad Financiadora: UE

Duración: 2007-2009

Investigador Principal: Yamir Moreno (nodo Zaragoza)

NACIONALES

Con gestión en Zaragoza:

Título: Flavoproteínas y flavoenzimas: transformación de energía y dianas farmacológicas

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia

BIO2007-65890-C02-01

Duración: Diciembre 2007 - Diciembre 2010

Investigador principal: Dr. Milagros Medina

Título: Complejidad en Materiales y Fenómenos de Transporte Cuánticos y Clásicos.

Entidad Financiadora: MEC-FIS2006-08533-603-02

Duración: 2006 - 2009

Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita.

Título: Acuerdo específico para la evaluación del actual diseño del inyector de neutros.

Entidad Financiadora: CIEMAT

Duración: 2007-2008

Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Título: Calentamiento de Plasmas e Inducción de Corriente mediante NBI

Entidad Financiadora: CIEMAT

Duración: 2008-2009

Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Título: Teoría y Simulación de Sistemas Complejos

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación (FIS2005-00337)

Investigador principal: Fernando Falo Forniés

Duración: 31/12/2005 - 30/12/2008

Título: Nuevas funciones de proteínas FUR (Ferric Uptake Regulator) en cianobacterias

Entidad Financiadora: Programa nacional de I+D, Ministerio de Educación y Ciencia BFU2006-3454

Duración: 1 de enero de 2006 - 31 de diciembre de 2009

Investigador principal: María Luisa Peleato Sánchez

Título: Estudios sobre cianotoxinas y su incidencia en España II.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia: Acciones Complementarias para la creación de redes temáticas de carácter científico-técnico. CTM2007-30981E-TECNO

Duración: 01/01/2008 - 31/12/2008

Investigador principal: María Luisa Peleato Sánchez

Título: Teoría y Simulación de Sistemas Complejos 2.

Entidad Financiadora: MEC (FIS2005-00337).

Duración: 2005-2008.

Investigador principal: Fernando Falo.

Título: Complejidad en proteínas, redes y sistemas de muchos agentes

Entidad Financiadora: MEC FIS2006-12781-C02-01 (proyecto coordinado)

Duración: 1/10/2006 - 30/09/2009

Investigador principal: Pierpaolo Bruscolini

Título: Mecanismos moleculares de proteínas de la membrana externa mitocondrial similares a transportadores implicadas en apoptosis. Papel en enfermedades degenerativas y en cáncer.

Entidad Financiadora: MEC (BFU2006-07026)
Duración:: 2006 - 2009
Investigador principal: José A. Carrodegua

Título: Modelos Estocásticos con Interacciones y Aplicaciones
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia.
MTM2007-63769.
Duración: 2008-2010
Investigador principal: Gerardo Sanz

Título: Principios de estabilidad conformacional de proteínas, análisis estructural y energético de conformaciones no nativas e identificación de ligandos bioactivos.
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC
Duración: 2008 - 2010
Investigador principal: Javier Sancho Sanz

Título: Sistemática, evolución y biogeografía de los linajes basales de la subtribu Loliinae y transferencia horizontal de genes en la supertribu Aveneae-Poeae (Gramineae)
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología - CI-CYT. (CGL2006-00319/BOS)
Duración: 2006 - 2009
Investigador principal : P. Catalán

Título: Colaboración INFN-Grupo de Altas Energías,
Entidad financiadora: MEC,
Duración:2007-2008
Investigador principal: Manuel Asorey
Participante del BIFI: Jesús Clemente Gallardo

Título: Generalized lagrangian and hamiltonian techniques for geometric control theory
Entidad financiadora: MEC
Duración:2007-2009
Investigador principal: Jesús Clemente-Gallardo

Título: Complejidad en materiales y fenómenos de transporte cuántico y clásico
Entidad financiadora: MEC
Duración:2006-2009
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Cálculos cinéticos de calentamiento y transporte en plasmas de fusión por confinamiento magnético
Entidad Financiadora: CIEMAT
Duración: 2008-2009
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Realización de estudios cinéticos en plasmas de fusión
Entidad Financiadora: CIEMAT

Duración: 2008
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita.

AUTONOMICOS

Con gestión en Zaragoza:

Título: Biofísica de proteínas implicadas en procesos de transporte en organismos fotosintéticos
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón.
PM062/2007
Duración: Octubre 2007 - Diciembre 2009
Investigador principal: Dr. Milagros Medina

Título: Grupo de Excelencia Biología Estructural (B18)
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón
Duración: 2008 - 2011
Investigador principal: Dr. Carlos Gómez-Moreno

Título: Grupo Física Estadística y no lineal. Grupo de excelencia de investigación.
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón. Grupo E19.
Duración: 2008
Investigador principal: L. M. Floría

Título: Síntesis de complejos de oro y plata con biomoléculas dirigidas al diseño de especies biológicamente activas.
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón. Proyectos multidisciplinares.
Duración: 2007 - 2009
Investigador principal: María Concepción Gimeno Floría
Participante del BIFI: M. Fillat

Título: Desarrollo de Ibercivis
Entidad Financiadora: DPZ
Duración: 2008
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Título: Grupo de Investigación de Excelencia: Física Estadística y No Lineal.
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón.
Duración: 2008-2009.
Investigador principal: Luis Mario Floría Peralta.

Título: Aceleración del cribado virtual para el desarrollo de fármacos en un superordenador de FPGAs
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón (Proyecto Multidisciplinar PM057/2006)
Duración:: 2006 - 2008

Investigador principal: Dr. Denis Navarro Tabernero (Universidad de Zaragoza – BIFI)
Participante del BIFI: P. Bruscolini, A. Velazquez, J.L. Alonso, P. Echenique

Título: Grupo de Excelencia “Biocomputación y Física de Sistemas Complejos”.
Entidad Financiadora: Gobierno de Aragón (E24/3)
Duración: 2008 - 2008
Investigador principal: Prof. Alfonso Tarancón

Título: Acciones de soporte para el proyecto de grid regional ARAGRID
Entidad Financiadora: Gobierno de Aragón
Duración: 2008-2010
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Título: Desarrollo racional de compuestos bioactivos frente a cinco enfermedades humanas
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón (PI078/08)
Duración: 2008 - 2010
Investigador principal: Javier Sancho Sanz (Universidad de Zaragoza – BIFI)

Título: Desarrollo y Optimización de Nuevos Inhibidores Preclínicos contra *Helicobacter pylori*
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón (Proyecto Multidisciplinar PM076/2006)
Duración: 2006 - 2008
Investigador principal: Dr. Javier Sancho Sanz (Universidad de Zaragoza – BIFI)

Título: Biología de Sistemas de *Mycobacterium Tuberculosis*
Entidad Financiadora: DGA
Duración: 2008-2010
Investigador principal: Yamir Moreno

Título: Bioflora (Grupo de investigación consolidado en Aragón). A52
Entidad financiadora: Gobierno de Aragón – Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad
Duración: 1/01/2008 - 31/12/2011
Investigador principal : P. Catalán

Título: Genética del paisaje y ecología de pastos subalpinos (*Festuca*, Gramineae): conservación de la biodiversidad y restauración vegetal
Entidad financiadora: Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad – Gobierno de Aragón. Proyecto PI097/08
Duración: 2009 - 2010
Investigador principal : P. Catalán

Título: Genética del paisaje de pastos subalpinos (*Festuca*, Gramineae): restauración vegetal y conservación de la biodiversidad
Entidad financiadora: Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad – Gobierno de Aragón y Fundación La Caixa.
Duración: 2009 - 2011
Investigador principal: P. Catalán

Título: INNOVARAGON. Cauchos Puntos
Entidad Financiadora: Instituto Tecnológico de Aragón.
Duración: 2007-2008
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Título: La investigación al Aula: Un proyecto de participación y difusión de la investigación
Entidad Financiadora: Gobierno de Aragón
Duración: 2008
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Título: Ibercivis. Creación de un Supercomputador ciudadano nacional
Entidad Financiadora: IberCaja
Duración: 2008-2009
Investigador principal: José Félix Sáenz Lorenzo

Título: CAESARAUGUSTA.
Entidad Financiadora: Gobierno de Aragón
Duración: 2008-2011
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

UNIVERSIDADES

Con gestión en Zaragoza:

Título: Caracterización de la interacción del hemo con el regulador transcripcional Fur (ferric uptake regulator) y sus implicaciones funcionales en cianobacterias
Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza
Duración: 01/01/2008 - 31 de diciembre de 2008
Investigador principal: María Francisca Fillat Castejón

Título: Estudio completo de las relaciones asintóticas y los límites entre los polinomios ortogonales de la tabla de Askey.
Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza. UZ2006-CIE-07.
Duración: 2007 - 2008.
Investigador principal: Chelo Ferreira Gonzalez.
Participante del BIFI: José Luis Lopez García.

Título: Adquisición de infraestructura para el cultivo de cianobacterias: Incubador orbital con iluminación
Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza
Duración: 2008
Investigador principal: María F. Fillat Castejón

Título: Ampliación de Sistema de Visualización 3D (Convocatoria de Infraestructuras de Investigación - Universidad de Zaragoza)
Entidad Financiadora: Coofinanciación (70% DGA - 30% BIFI)
Duración: 2008 - 2008
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

OTRAS ENTIDADES

Con gestión en Zaragoza:

Título: Identificación de compuestos químicos que inducen diferenciación celular específica o muerte celular apoptótica en células madre embrionarias de ratón.
Entidad Financiadora: Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (PIPAMER 08/17)
Duración: 2008 - 2009
Investigador principal: José A. Carrodegua

Título: Cribado masivo de compuestos químicos para combatir la hipercolesterolemia familiar: ensayos con el módulo cinco del receptor de las LDL
Entidad financiadora: FEA/SEA "Almirall"
Duración: 2008 - 2009
Investigador principal: Javier Sancho Sanz

Título: Desarrollo de inhibidores contra la infección de Helicobacter pylori
Entidad Financiadora: Genoma España
Duración: 2009 - 2010
Investigador principal: Javier Sancho Sanz

Título: Convergencia evolutiva transcontinental y genética de la conservación de los ñames enanos (Dioscoreaceae) críticamente amenazados (Borderea, Epipetrum)
Entidad financiadora: Fundación BBVA (proyecto BIOCON05/093)
Duración: 1/07/2006 - 31/06/2009
Investigador principal : P. Catalán