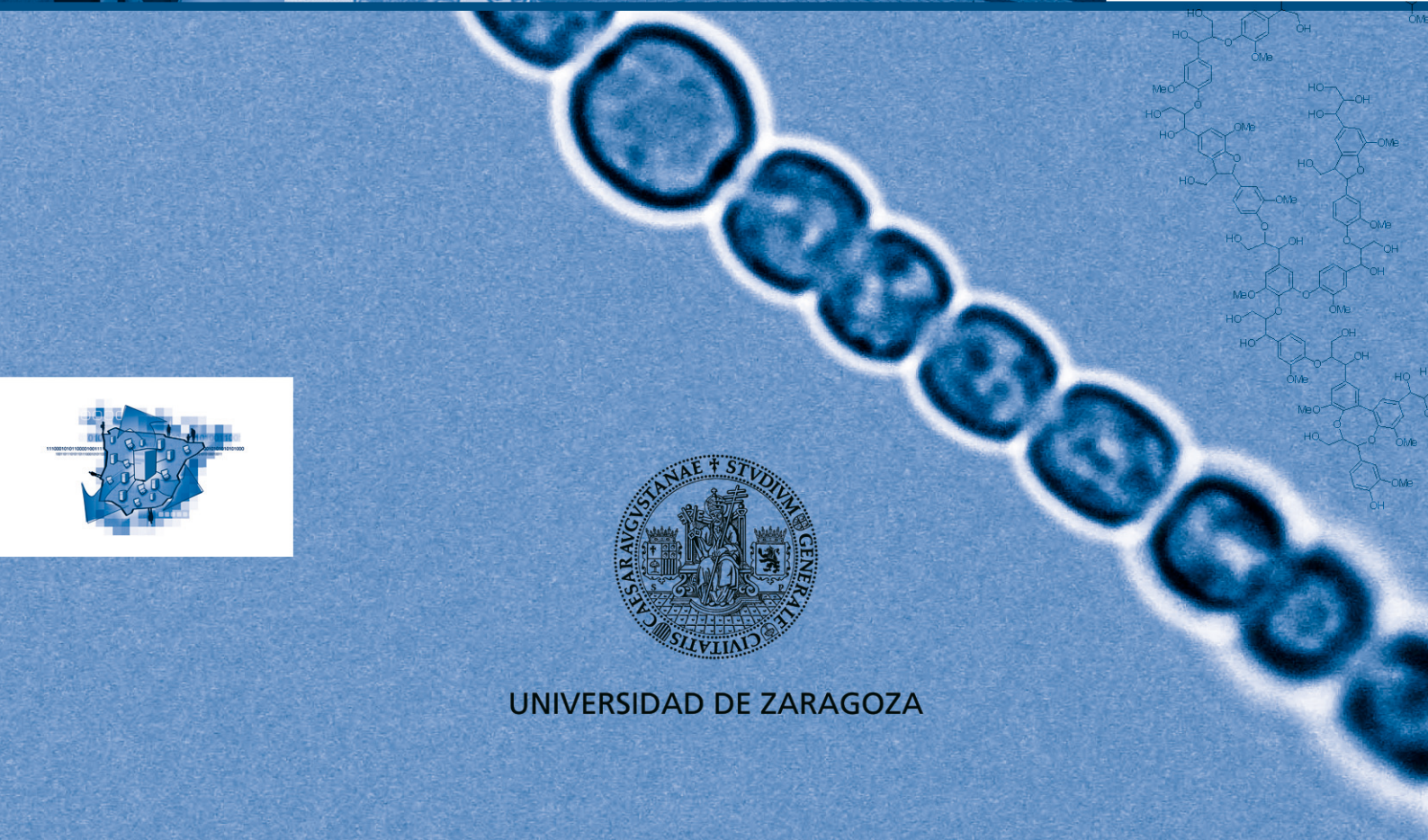


MEMORIA ANUAL 2009

INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS BIFI

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA



UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

VI Memoria anual: año 2009

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Índice

1. Funcionamiento institucional.....	3
1.1 Principales Actuaciones en 2009.....	3
1.2 Organigrama y Gobierno.....	5
1.3 Congresos organizados por el BIFI en 2009.....	7
1.4 Coloquios y Seminarios BIFI.....	8
1.5 Convenios y Relaciones con otros Centros.....	9
1.6 El CECAM en Zaragoza. El ZCAM.....	10
1.7 Relaciones con Empresas. Patentes.....	10
1.8 Ayudas obtenidas.....	11
1.9 Personal. Contratación investigadores y Técnicos.....	13
1.10 Plan Estratégico.....	14
2. Infraestructuras e instalaciones.....	15
2.1 Laboratorio de Computación y Supercomputación,.....	15
2.2 El Laboratorio de Biología Molecular y Cristalografía.....	24
2.3 Nuevo edificio.....	28
3. Investigación.....	31
3.1 Organigrama de Investigación.....	31
3.2 Grupos de Investigación.....	32
3.3 Líneas de investigación.....	32
3.4 Investigación. Proyectos de investigación.....	49

3.5 Publicaciones Científicas.....	60
3.6. Tesis doctorales leídas en 2009.....	73
4. Otras actuaciones	75
4.1 Estancias de investigadores externos.....	75
4.2 Estancias de miembros de nuestro instituto en otros centros	76
4.3 Algunas ponencias y comunicaciones a congresos (no de todos los grupos).....	76
4.4 Distinciones y premios.....	83
4.5 Charlas y conferencias impartidas en otras instituciones	83
4.6. Otra información relevante	84

1. Funcionamiento institucional

1.1 Principales Actuaciones en 2009

A lo largo del año 2009 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 ha celebrado el **Consejo ordinario** del Instituto el 5 de febrero a las 19.30h, en el que se aprobaron las actuaciones realizadas y los proyectos más importantes a llevar a cabo a lo largo de 2009. El **Equipo de Gobierno** ha realizado cinco reuniones formales a lo largo del año. Se ha constituido un grupo de trabajo para proponer un **Plan Estratégico** del Instituto que plantee las actuaciones y reformas a realizar para un más eficiente funcionamiento del mismo.
- Realizamos el **IV Congreso Nacional del BIFI 2009** del 5 al 7 de febrero en la Sala de Grados de la Facultad de Ciencias de 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, participamos en la organización del Sexto Encuentro de Neurociencia sobre ESTRUCTURA Y FUNCIÓN DEL SISTEMA NERVIOSO celebrado en Zaragoza el viernes 11 de Diciembre de 2009.

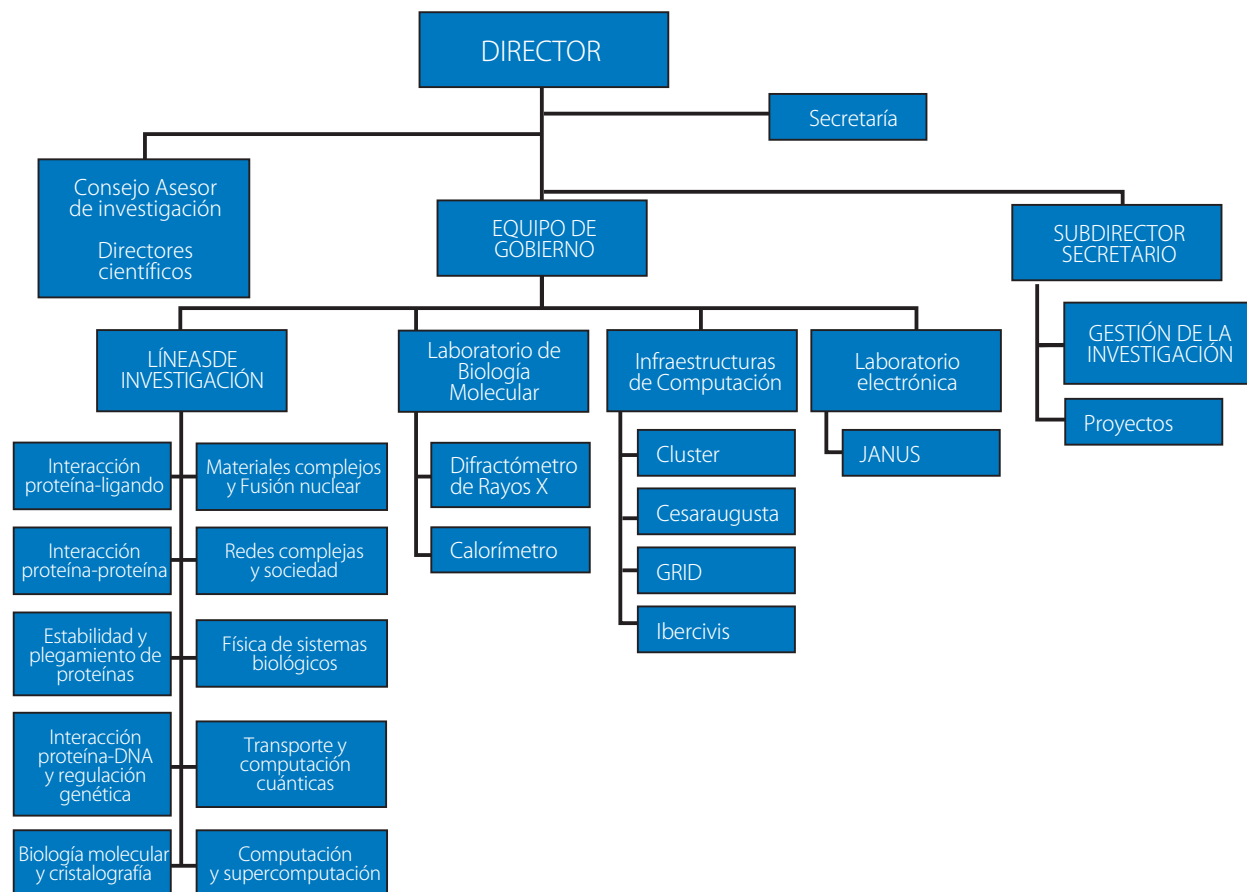
Estamos organizando la **IV Conferencia Internacional del BIFI** en febrero de 2010 bajo el título: **"BIFI 2010. Networks: A Framework for Cross-Disciplinary Applications"**.

- 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.
- En enero de 2010 esperamos poder ocupar las nuevas instalaciones del BIFI en el **nuevo edificio** de Institutos en el Campus del ACTUR. Por lo que hemos creado una Comisión encargada de supervisar las nuevas instalaciones y prever las necesidades para el traslado. Mientras tanto, hemos seguido 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.
- Hemos participado con notable éxito en el Proyecto de nuevas **Infraestructuras de investigación** financiadas por fondos FEDER y del Gobierno de Aragón, en el que hemos obtenido cuatro proyectos para el Laboratorio de Biología Molecular: Robot de Cristalografía, Biacore para estudios cinéticos de interacciones biológicas, Calorímetro de titulación isoterma y Sistema de análisis de fluorescencia, por un importe de 1.240.000€, y tres para Computación: Aragrid, computador del CECAM y JANUS II por un importe de 1.870.000€. En total, más de tres millones de € a invertir en los dos años próximos. Todavía estamos pendientes del traslado al nuevo edificio para instalar el **difractómetro de rayos X** en los nuevos laboratorios.

- A lo largo de 2009 hemos seguido gestionando en colaboración con el BSC (Barcelona Supercomputer Center) el superordenador CAESARAUGUSTA **nodo de la “Red Española de Supercomputación”**, instalación calificada de “Singular” por el Ministerio. En estos momentos tenemos una propuesta de **ampliación** (duplicación de su capacidad), que requiere una reforma de las instalaciones de la Facultad de Ciencias en cuya tramitación estamos trabajando.
- El **proyecto “Ibercivis”**, superordenador ciudadano de ámbito estatal para cálculos científicos y que desarrollamos con la colaboración del CIEMAT y CSIC se ha convertido en una de las instalaciones de computación distribuida con más experiencia en Europa por lo que se nos invita a participar en los más importantes proyectos europeos de tecnología GRID altamente potenciada en el VII Programa Marco de la UE. Portugal, Argentina y Cuba están interesados en participar en el proyecto y se nos han dado ayudas para facilitar esta participación. Estamos tramitando la creación de una fundación con participación del MIN, Gobierno de Aragón, CSIC, CIEMAT y la Universidad de Zaragoza a través del BIFI para su gestión.
- Hemos continuado en 2009 con la participación en varios proyectos de investigación europeos ambos relacionados con la **tecnología GRID** (prevemos la participación en otros dos proyectos europeos) y se han aprobado 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 **Piregrid** proyecto europeo “Interreg IV” dentro del Programa de Cooperación Transfronteriza España – Francia, que ha sido aprobado definitivamente en junio de 2009 y que está ya en marcha.
- Hemos participado en numerosos proyectos y **grupos de investigación** tanto estatales como autonómicos; cuatro Grupos 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 2009 se han incorporado al BIFI como **investigadores ARAID** Ramón Hurtado para trabajar en cristalización de proteínas y Alberto Castro en colaboración con el Instituto de Carboquímica ICB (CSIC). También se ha incorporado como investigador contratado por la Universidad de Zaragoza, procedente del programa Ramón y Cajal, Jesús Clemente y próximamente Yamir Moreno y Víctor Gopar. Como investigador del CSIC adscrito al BIFI se ha incorporado Pablo Echenique. Como técnicos en Computación para la gestión de nuestros recursos hemos contratado con cofinanciación dos del MICINN y dos del GA y uno del CIEMAT cuatro **técnicos ingenieros informáticos**. Hemos contratado una nueva **técnica en Biología Molecular** que también ha recibido apoyo del MICINN. Disponemos también de becarios de los distintos sistemas, algunos de ellos ligados a proyectos públicos y con empresas.
- Se han seguido realizando los **Coloquios y Seminarios BIFI**, algunos de los cuales que 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.

1.2 Organigrama y Gobierno

Organigrama BIFI



Los órganos estatutarios del BIFI son el **Director**, la **Subdirectora**, el **Secretario** y el **Consejo del Instituto**. El director José Félix Sáenz fue elegido en febrero de 2008 para un mandato de cuatro años. A comienzos de 2009 Milagros Medina accede al cargo de Subdirectora del Instituto y Alfonso Tarancón sigue de Secretario del mismo.

Del director dependen:

- La **Secretaría** del BIFI con una técnico de apoyo y una administrativa
- El **Equipo de Gobierno** formado por Director, Subdirectora, Secretario y los siguientes vocales: José Luís Alonso, Adrián Velázquez, Mario Floría, Fernando Faló, Pierpaolo Bruscolini, Yamir Moreno, María Fillat, Olga Abian, Víctor Gopar, José A. Carrodegua, Guillermo Losilla y Fermín Serrano. El Equipo de Gobierno ha realizado cinco reuniones ordinarias a lo largo del año 2009.
- El **Consejo Asesor de Investigación** cuya composición y funciones está sometida a discusión en el **Plan Estratégico del Instituto** de cuya coordinación se responsabilizó Fernando Faló con la colaboración de Fermín Serrano. La compo-



De izda a dcha: Secretario, Director y Subdirectora del BIFI

sición provisional de ese órgano está formada por Director, Subdirectora, Secretario, directores científicos Ernesto Freire y Enzo Marinari, los coordinadores de las distintas líneas de investigación y José Luís Alonso. Se ha reunido en una ocasión el 28 de octubre para discutir los contenidos de la Memoria del Instituto 2009.

Del Equipo de Gobierno dependen, las **Instalaciones** y las **Líneas de Investigación**, con la asistencia del Consejo Asesor de Investigación.

De la Subdirectora y Secretario dependen los **Gestores de Proyectos**, que se relacionan directamente con las líneas de investigación para gestionar nuevas iniciativas.



Equipo de Gobierno del BIFI

Líneas de investigación

La investigación del BIFI se estructura en ocho líneas de investigación con sus correspondientes coordinadores responsables. 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 y Computación cuánticas (Quantum Transport and Quantum Computing)

Coordinador Victor 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 proteína DNA y regulación genética (Protein-DNA interaction and genetic regulation)

Coordinadora María Fillat.

Instalaciones e investigación:

Computación y Supercomputación (Computing and SuperComputing).

Coordinador Guillermo Losilla. Dirige el Laboratorio de Electrónica, con tres técnicos de apoyo.

Laboratorios de Biología Molecular y Cristalografía de Proteínas (Molecular Biology and Crystallography).
Coordinadora Olga Abián, con un técnico de apoyo.

1.3 Congresos organizados por el BIFI en 2009

Conferencia Nacional BIFI 2009

Realizamos el IV Congreso Nacional del BIFI 2009 del 5 al 7 de febrero en la Sala de Grados de la Facultad de Ciencias de 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:

Plenary Sessions Speakers

Victor Muñoz (CNB-CSIC - Madrid)

Downhill Protein Folding: Peculiarities of Living in a World without Barriers

Alex Arenas (Universitat Rovira i Virgili/BIFI - Tarragona)

How topological features can affect the success of regional innovation networks

Francisco Domínguez-Adame (UCM-Madrid):

Challenges of the electronic transport across single DNA molecule

Workshops Keynote Speakers

WS1: Antonio Rey (UCM Madrid/BIFI)

Simplified simulation models to explore the thermodynamics of protein folding

WS1: Marta Bruix (Instituto Rocasolano, CSIC, Madrid)

Protein structure and stability studied by NMR

WS3: Juan Jesús Ruiz Lorenzo (U. Extremadura/BIFI)

Spin Glasses Wars

WS3: Rafael Molina (Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid):

Conductance of laser-driven quantum wires

Fueron también "Workshops Speakers" los coordinadores de las distintas líneas de investigación del BIFI. El debate sobre la orientación de la investigación en el BIFI fue especialmente enriquecedor.

Asimismo participamos en la organización del Sexto Encuentro de Neurociencia sobre Estructura y Función del Sistema Nervioso celebrado en Zaragoza el viernes 11 de Diciembre de 2009.

Estamos organizando la **IV Conferencia Internacional** del BIFI que tendrá lugar en febrero de 2010 bajo el título: **"BIFI 2010. Networks: A Framework for Cross-Disciplinary Applications"**.

1.4 Coloquios y Seminarios BIFI

A lo largo de 2009 se han celebrado 11 Coloquios y Seminarios con participación de los correspondientes científicos procedentes de todo el mundo.

Jueves 12 de Febrero, 12.30 h. BIFI (Sala de Reuniones del Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Dr. JOSE LUIS NEIRA. Actualmente el Dr. Neira es Profesor Titular de la Universidad Miguel Hernández, presenta amplia experiencia en el estudio estructural de Sistemas Biológicos mediante en empleo de RMN.
TÍTULO DEL SEMINARIO: "Siete años de Resonancia Magnética Nuclear en una pequeña Universidad Española: una visión personal"

Miercoles 18 de Febrero, 12.30 h. BIFI (Salón de Actos. Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Daniel Lietha. Harvard Medical School, Boston, USA.
TÍTULO DEL SEMINARIO: Structure and Regulation of Focal Adhesion Kinase.

Lunes 23 de Febrero. BIFI (Salón de Actos. Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Francisco Enguita. Principal Investigator, Institute of Molecular Medicine, Faculty of Medicine, University of Lisbon, Lisbon, Portugal
Es candidato a una plaza ARAID
TÍTULO DEL SEMINARIO: Intrinsic disorder as a key regulatory factor in protein complexes

Martes, 3 de Marzo, 16:30 h. BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Ramón Hurtado-Guerrero. Universidad de Dundee, Reino Unido
TÍTULO DEL SEMINARIO: "Glicosiltransferasas: novedosas dianas terapéuticas"

Lunes 9 de Marzo, 12:30 h. BIFI (Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Prof. Marco Tomassini. University of Lausanne.
TÍTULO DEL SEMINARIO: "Hard Combinatorial Spaces and Their Networks"

Martes 19 de Mayo, 12:00 h. BIFI (Salón Actos, Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Juan Andrés, Universidad Jaume I, Castellón Departamento de Química Física y Analítica
TÍTULO DEL SEMINARIO: "Diseño asistido por ordenador de nuevos catalizadores biológicos"

Martes 16 de Junio, 12:30 h. BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Dr. Tassos Papageorgiou. University of Turku & Turku Centre for Biotechnology Protein Crystallography Core Facility
TÍTULO SEMINARIO: "Dps/Dpr miniferritins in oxidative stress: Mechanisms of iron entry, oxidation and deposition"

Viernes 10 de Julio, 12:30h. BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Liliana Arrachea. Universidad de Buenosaires
TÍTULO DEL SEMINARIO: "Energy transport and heat production in driven quantum systems"

Lunes 21 de septiembre, 12:30 h. BIFI (Salón de Actos Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Alejandro Massa. Director del Instituto de Bioinformática de Chile
TÍTULO DEL SEMINARIO: Presentation of Laboratory of Bioinformatics and Mathematics of Genoma LBMG and discussion

Jueves 29 de octubre, 12:30 h. BIFI (Edificio Cervantes)

CONFERENCIANTE: Alberto Robledo. Instituto de Física Universidad Nacional Autónoma de México
TÍTULO DEL SEMINARIO: "Generalized thermodynamics underlying the laws of Zipf and Benford"

1.5 Convenios y Relaciones con otros Centros

El convenio de colaboración con el **CIEMAT** se desarrolla con fuerza y ha dado lugar a la presentación de una tesis doctoral y al desarrollo 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.

En mayo de 2009 se ha renovado el convenio (iniciado en 2007) con el CSIC que reconoce al Grupo de Estabilidad, Plegamiento e Interacción de Proteínas del BIFI encabezado por Javier Sancho, como unidad asociada al CSIC a través del Instituto de Química-Física **Rocasolano** con el que las relaciones científicas son muy fructíferas. En el marco de esta relación el investigador del CSIC Pablo Echenique realizará su trabajo de investigación en el BIFI.

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

Está en tramitación la creación de la Fundación Ibervicis a propuesta del MICINN, con su participación y la del Gobierno de Aragón, La Universidad de Zaragoza (a través del BIFI), el CIEMAT y el CSIC y con otras entidades colaboradoras. Esa estructura permitirá al proyecto una adecuada financiación y facilitará su participación en proyectos internacionales.

Está también en tramitación tras largas conversaciones un Convenio con HP, que supondrá la puesta en marcha del “**Observatorio Tecnológico HP**”: ubicado en el Edificio del BIFI y equipado por HP, y cuyo objetivo es permitir a los alumnos de la Unizar (principalmente en último año de carrera o doctorado), familiarizarse, aprender y trabajar con algunas de las últimas tecnologías de HP, desarrollando Proyectos Fin de Carrera (“PFC”) o trabajos académicamente dirigidos. Este Observatorio también podrá ser utilizado como centro de demostraciones que permita dar a conocer a las empresas de la región, tanto las soluciones de HP como las capacidades y conocimientos de la Universidad y sus alumnos.

Asimismo, estamos tramitando un Convenio de colaboración con el **Centro de Estudios Avanzados de Cuba (CEAC)**, un instituto con líneas de investigación similares a las del BIFI. A este respecto hemos solicitado y nos han sido concedidas las ayudas ACI-PROMOCIONA.

Seguimos participando en el nodo de Bioinformática y modelado de proteínas del **Instituto Nacional de Bioinformática**; y como Nodo de la **Red Española de Supercomputación** del BSC, mediante la gestión del ordenador CAESARAUGUSTA.

También participamos en la nueva versión de los proyectos europeos **EGEE** (“Enabling Grids for E-science”) que nos ha convertido en nodo español del GRID europeo y mundial. Encabezamos la iniciativa **Piregrid** aprobada en Intereg IV en la que participan más de ocho entidades de ambos lados del Pirineo.

El superordenador ciudadano Ibervicis que funciona desde 2008 a pleno rendimiento en distintas aplicaciones científicas, se ha desarrollado en colaboración con el CIEMAT, el Ceta (Ciemat) y el CSIC, y se va a implantar en Portugal, y también Argentina y Cuba están interesados en su implantación. Al mismo tiempo, se ha requerido su colaboración en varios proyectos europeos de cara a la creación de un superordenador europeo (Scalastructure: Creación de la mayor plataforma de test para el Internet del Futuro, en el que Ibervicis participaría como parte de los recursos de infraestructura, EDGI: Interconexión de Grids, Desktop Grids y Clouds a nivel Europeo, DEGISCO (Desktop Grid for International Scientific Collaboration): Expansión de Desktop Grids)

1.6 El CECAM en Zaragoza. El ZCAM

La reestructuración producida en el Centro Europeo de Computación Atómica y Molecular (CECAM), ha abierto la posibilidad de poder contar con una estructura multi-nodal, con sedes locales y cuyo nodo principal se encuentre en Lausana (Suiza). El nodo español se ha decidido alojarlo en Zaragoza ZCAM, en estrecha colaboración con el BIFI, con la pretensión ser el centro de referencia español en simulación por ordenador, con vínculos con todos los centros de investigación e infraestructuras nacionales y Europeas vía el CECAM global.

Se trata con su creación, de disponer en Aragón de un centro de alto rendimiento para investigadores, al que se desplazarán los mejores investigadores de distintos países para desarrollar parte de sus trabajos. Además, servirá para dar formación a los especialistas y celebrar congresos de alto nivel en investigación. Así lo establece el convenio de colaboración establecido entre el MICINN, la fundación ARAID y la Universidad de Zaragoza (a través del BIFI), que esperamos sea firmado antes de acabar el año.

De hecho, el pasado 11 de diciembre fue seleccionado en concurso internacional el Director del nodo del CECAM en Zaragoza que será el Dr. Michel Mareschal, actualmente en la Universidad Libre de Bruselas. Mareschal fue el Director del CECAM en Lyon en el momento en que España entró a formar parte del mismo y, de hecho, el fue el incitador de esta participación. Su talento, probado en el pasado en instituciones parecidas, así como su capacidad de aglutinar a muy diversas comunidades científicas, acredita su nombramiento. En los momentos iniciales del nodo, éstas son cualidades determinantes para un buen director.

Hay que recordar que uno de los proyectos de Infraestructuras aprobados para el BIFI es un superordenador para el ZCAM, y que en los primeros meses compartiremos a Beatriz Antolín en la secretaría de ambas instituciones (con la consiguiente cofinanciación).

1.7 Relaciones con Empresas. Patentes

En la filosofía de poner a disposición de la sociedad los conocimientos de los que disponemos, mantenemos proyectos de colaboración con las empresas:

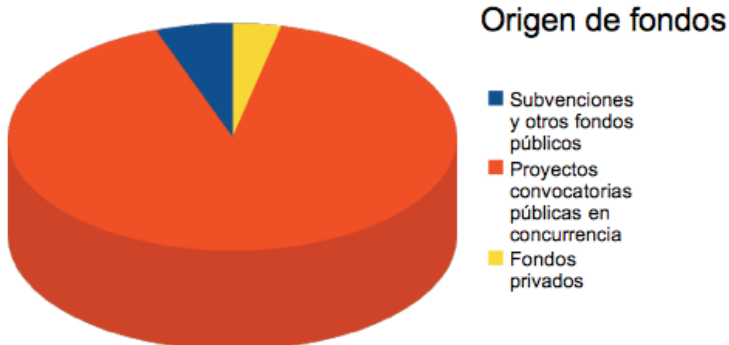
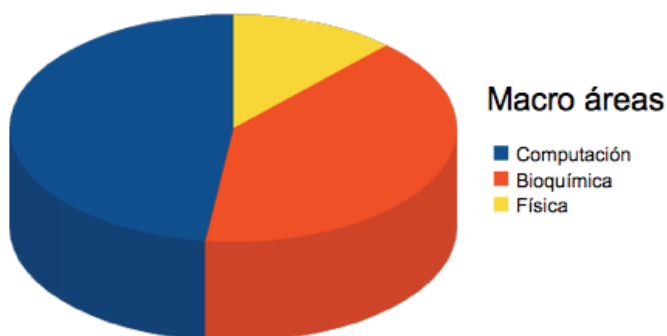
- **Spuderg**, con la que desarrollamos un proyecto de regadíos informatizados y con la que seguimos colaborando en su puesta en operación.
- **Cauchos Puntos**, con la que hemos desarrollado un proyecto de "Integración de algoritmos complejos de distribución y de tecnología RFID en sistema ERP"
- **Schnell Software S.L.**, con la que desarrollamos el proyecto de Optimización del Proceso de Corte de Ferralla vía Internet en cluster de PC's Bajo Linux con la que tenemos en marcha un cheque tecnológico de colaboración.
- **Sistemas Técnicos de Loterías del Estado STL** con la que hemos desarrollado un proyecto de TRANSFORMACION DE NÚMEROS MEDIANTE SCRAMBLING, sometido a altos parámetros de confidencialidad.
- **Zeu Inmunotec**. Como consecuencia de la colaboración con la empresa Zeu-Inmunotec se ha desarrollado un test para detección y valoración de péptidos tóxicos producidos por cianobacterias que en este momento esta en comercialización en España, Europa y Norteamérica

-
- MicroCystest**
- Test for detection of microcystins in water
Four steps to detection of microcystins in water
- 96 TESTS**
- CONTENTS COMPONENTS**
- 1x Microcystin plate (plate microcystin)
 - 4x Phosphate buffer (buffer)
 - 4x Chemical (control)
 - 4x Microcystin standard (microcystin standard)
 - 1x Phosphate (0.1 buffer) (0.1 buffer)
 - 1x Cleaning vial (vial cleaning)
 - 2x Adhesive film (adhesive film)
 - 1x Product certificate (certificate of product)
 - 1x Kit instructions (instructions)
- | REF | Lot |
|----------|---------|
| 05/04/20 | 090/001 |
| | 07/2008 |
- 10
- DISTRIBUTOR: S.L. MIRA DE LIMA 11 - 06743 GRANADA - SPAIN TEL.: +34 970 01 01 17 FAX.: +34 970 01 01 18

- Disponemos de unas 30 **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 2009 disponemos de apoyo para la contratación de cinco **técnicos**, tres con fondos del MICINN (dos nuevos concedidos este año), dos con fondos del GA y uno con fondos CIEMAT. Hemos solicitado técnicos también a la Universidad de Zaragoza en la reciente convocatoria.
- Participamos en proyectos europeos (PireGRID, EGEE "Enabling Grids for E-sciencE"...)
- Hemos recibido apoyo del proyecto Universidades de Excelencia.

Presupuesto del BIFI en Zaragoza

Total: 6.250.000 €



Personal del BIFI en Zaragoza

Total: 97 personas



1.9 Personal. Contratación investigadores y Técnicos

- En 2009 se han incorporado al BIFI como **investigadores ARAID**: Ramón Hurtado para trabajar en cristalización de proteínas y Alberto Castro en colaboración con el Instituto de Carboquímica ICB (CSIC) para trabajar en Biofísica, con lo que junto a Adrián Velazquez disponemos de tres investigadores del programa ARAID.
- También se ha incorporado como **investigador contratado por la Universidad de Zaragoza**, procedente del programa Ramón y Cajal Jesús Clemente y próximamente lo harán Yamir Moreno y Víctor Gopar, con lo que dispondremos de cinco investigadores en esta modalidad.
- Como investigador del CSIC adscrito al BIFI, en virtud del Convenio de Unidad Asociada al Rocasolano, se ha incorporado este año el **investigador del CSIC** Pablo Echenique.
- Olga Abián sigue en el BIFI con su contrato FIS (3+3) del Instituto Carlos III para el IACS. Como investigador Juan de la Cierva ha estado en el BIFI Angelo Rosa y como investigadores del CIEMAT que trabajan en el BIFI como postdoc en fusión están Luca Rossi y Maxim Tereschenko. Alejandro Rivero colabora en el proyecto Ibercivis.
- Como técnicos en Computación para la gestión de nuestros recursos, hemos contratado con cofinanciación **cuatro técnicos ingenieros informáticos**: dos por el MICINN (Guillermo Losilla y Arturo Giner), dos del GA (Guillermo Losilla y Fermín Serrano) y uno del CIEMAT Rubén Vallés. Hemos contratado una nueva **técnica en Biología Molecular**, Sonia Vega que también ha recibido apoyo del MICINN (dos de los tres apoyos del MICINN). Disponemos de becarios de los distintos sistemas, algunos de ellos ligados a proyectos públicos o con empresas.
- Isabel Vidal sigue como técnico de procesos administrativos y Beatriz Antolí como administrativo del BIFI y técnica en innovación, sostenida con fondos propios, el año entrante en colaboración con el ZCAM.
- Disponemos de unas 24 becas de investigación de distintas procedencias, dos de ellas sostenidas con fondos propios, y cinco becas de iniciación a la investigación que colaboran en distintos proyectos.



Miembros del BIFI

1.10 Plan Estratégico

Elaboración del Plan Estratégico del BIFI.

Durante el año 2009 se han realizado las tareas previas a la elaboración del plan estratégico del Instituto, fundamentalmente el análisis DAFO. Estas tareas han sido coordinadas por los miembros del Instituto Fermín Serrano y Fernando Falo. Inicialmente se constituyeron varios grupos de trabajo en los estaban representadas todas las líneas de investigación del Instituto.

Las acciones realizadas durante el año 2009 son las siguientes:

- Abril y Mayo de 2009 : Recogida de Información a partir de los responsables de líneas de Investigación sobre la situación actual del Instituto.
- Mayo de 2009: Formación de los grupos de trabajo en análisis DAFO. Se establecieron tres grupos:
 - 1) Investigación + Desarrollo + Innovación.
 - 2) Estructura y Organigrama del Instituto.
 - 3) Proyección Exterior del Instituto

Durante los meses de Mayo, Junio y Julio se realizaron dos reuniones de cada grupo con el siguiente calendario.

27 de Mayo : Investigación + Desarrollo + innovación.
3 de Junio : Organización y Organigrama.
10 de Junio: Proyección exterior del Instituto.
17 de Junio: Investigación + Desarrollo + innovación.
24 de Junio: Organización y Organigrama.
1 de Julio: Proyección exterior del Instituto.

Finalmente, el 30 de Septiembre se reunieron de forma conjunta los tres grupos de trabajo para realizar una síntesis final del análisis DAFO discutido en las reuniones anteriores. En la actualidad, se está elaborando el documento final de Plan Estratégico que se espera esté concluido en el primer trimestre de 2010. Es de destacar la importante participación y el alto nivel de discusión que se produjo en todas las reuniones.

2. Infraestructuras e instalaciones

2.1 Laboratorio de Computación y Supercomputación,

PIREGRID

Tras la obtención de los fondos europeos a través del Programa de Cooperación Transfronteriza España- Francia-Andorra (POCTEFA Interreg IV A), el proyecto PireGrid comenzó en Junio de 2009. El BIFI, como socio coordinador del proyecto viene realizando tareas de gestión y coordinación generales para el correcto desarrollo de éste.

Una de la primeras tareas realizadas ha sido la gestión de la compra de las máquinas correspondientes al sitio del BIFI, que formarán parte de la infraestructura distribuida Grid de PireGrid: un rack compuesto por servidores, nodos de cómputo, sistema de almacenamiento integrado. Para la gestión de los servicios centrales se trabaja en una solución versátil, redundante y tolerante a fallos basada en máquinas virtuales Xen y almacenamiento SAN iSCSI.

Durante los tres primeros meses de proyecto se da especial prioridad a estudiar el tipo de formación que más adelante será necesaria para la diversa audiencia.

Se requiere una formación muy específica de temática de administración de sistemas grid para los partners que formen parte del núcleo de la infraestructura.



Representantes de todos los socios del proyecto PIREGRID en el Palacio Congressos de Jaca

El 25 de septiembre tuvo lugar en el Palacio de Congressos de Jaca el « Kick-off meeting » en el que se reunieron todos los socios del proyecto.

ARAGRID

En 2009 también se ha puesto en marcha el proyecto ARAGRID como iniciativa regional de Grid, interconectando los nodos del BIFI, de la Facultad de Ciencias, de la Politécnica de Huesca y de la Politécnica de Teruel. Este proyecto, lidera-

do por el BIFI, ha obtenido varios fondos del MICINN y de la DGA y va a crear una infraestructura distribuida dedicada a la investigación. Este proyecto ya cuenta con un WIKI con información técnica del proyecto y en estos momentos se están desplegando los nodo de pruebas del BIFI que albergan todos los servicios centrales.

EGEE-III

En el proyecto EGEE-III seguimos encargándonos de los recursos centrales de la VO fusión y de dar soporte a sus usuarios en todos los temas de acceso y ejecución de tareas en el grid de EGEE. Por su relación con otros proyectos, se colabora y se soporta en la integración y testeo de recursos para proyectos con EUFORIA <http://www.euforia-project.eu/EUFORIA/> y EDGES <http://www.edges-grid.eu/>

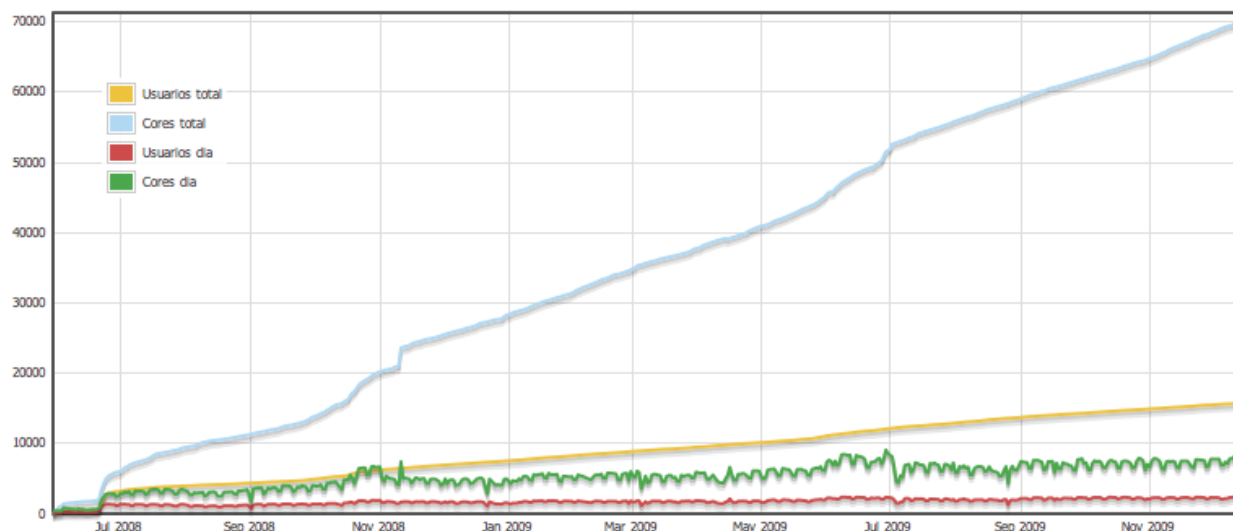
IBERCIVIS

En junio de 2009 Ibercivis cumplió un año como plataforma de computación voluntaria. En este tiempo se ha consolidado en todo el mundo como una herramienta eficaz y fiable para el cálculo científico capaz de suministrar gran potencia de cálculo para las aplicaciones capaces de ser ejecutadas en ordenadores domésticos.



Ibercivis es un proyecto de computación ciudadana donde todo el mundo puede colaborar desde su ordenador doméstico.

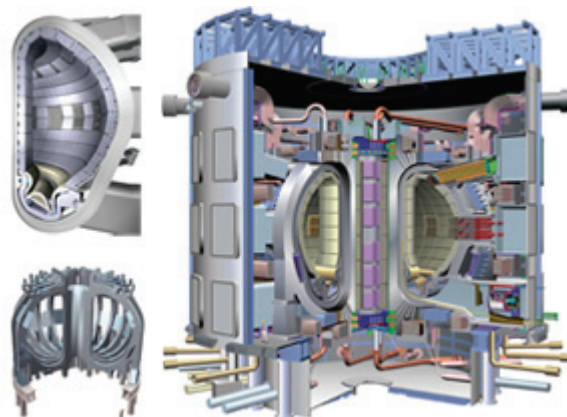
Hasta noviembre de 2009, 15000 ciudadanos han participado en Ibercivis desde su lanzamiento. El número total de cores que han aportado se sitúa en torno a los 70000. En la siguiente figura pueden verse los totales de usuarios y de cores.



Evolución del número de usuarios del proyecto Ibercivis desde junio 2008 hasta diciembre 2009.

Esta infraestructura permite a los grupos de investigación ejecutar sus cálculos y simulaciones. Si en 2008 eran tres los proyectos de investigación que participaban en el lanzamiento de Ibercivis, 2009 ha incrementando este número hasta 7 aplicaciones. Además, en diciembre de 2009 está previsto que se incorpore una nueva.

- **Fusión.** Científicos del CIEMAT y del BIFI realizan simulaciones de plasmas que se obtendrán en el proyecto ITER (Reactor Termonuclear Experimental Internacional).
- **Docking de Proteínas.** La Unidad de Bioinformática del Centro de Biología Molecular Severo Ochoa (CSIC-UAM) simula automáticamente interacciones de proteínas y pequeñas moléculas con el fin de encontrar nuevos fármacos para combatir enfermedades como el cáncer.
- **Materiales.** Físicos de la Universidad Complutense de Madrid, la Universidad de Extremadura y del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos analizan mediante simulaciones informáticas cómo las impurezas (átomos no magnéticos) en materiales magnéticos modifican las propiedades de la transición de fase.
- **Neurosim.** Científicos del Instituto de Estructura de la Materia del CSIC analizan las propiedades estructurales de los aminoácidos y de pequeños péptidos (secuencias de unas cuantas decenas de aminoácidos) que actúan en el cerebro y en el sistema nervioso.
- **Nanoluz.** Científicos del Instituto de Óptica Daza Valdés del CSIC investigan el comportamiento de la luz en sistemas estructurados a escala nanométrica con el fin de aplicar dichos sistemas a comunicaciones y computación ópticas así como a análisis biológicos basados en nanosensores.
- **Adsorción.** Investigadores del Instituto de Química-Física Rocasolano del CSIC estudian las propiedades de adsorción de las denominadas arcillas PILCS (Pillared clays) que, como otros materiales porosos, tienen una gran importancia industrial como catalizadores, materiales para almacenar gases y materiales utilizados en procesos de separación.

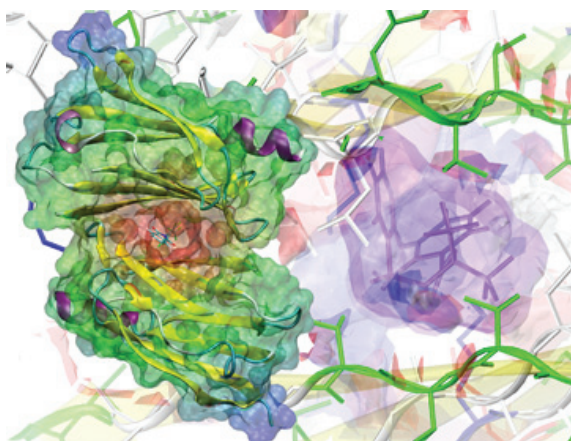


ITER, dentro del criostato que mantiene las bobinas en estado superconductor y dentro del blindaje que lo aísla del exterior

- **Amiloide.** El Centro de Neurociencia Computacional y Biología Celular (CNC) de la Universidad de Coimbra, pretende buscar compuestos que puedan interferir con la formación de agregados y fibrillas de amiloide en enfermedades neurodegenerativas como el PAF y la enfermedad de Alzheimer.

Además de estas aplicaciones, próximamente se va a lanzar Cuentables, una aplicación de la Universidad de Buenos Aires sobre cables cuánticos.

También se está estudiando la aplicación de Transporte electrónico en sistemas desordenados en la transición de Ardenon, del Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, México y la aplicación de simulaciones de Monte Carlo aplicadas a la sanidad, del Servicio de Radiofísica y P.R. Hospital Universitario Puerta del Mar de Cádiz.

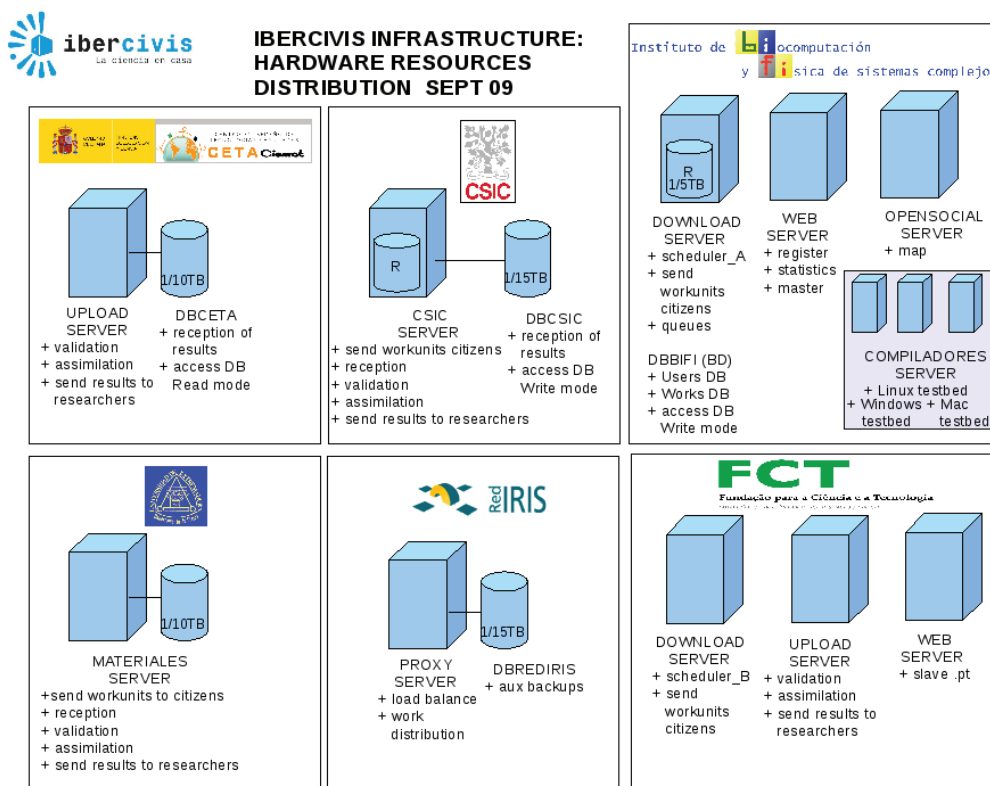


Representación gráfica de TTR estabilizadores relacionados con la aplicación Amiloide de Ibercivis

Proyección internacional.

Ibercivis nació como la iniciativa española de computación voluntaria, si bien durante 2009 se ha expandido a Portugal adoptando la denominación de iniciativa española y portuguesa. El proyecto fue acogido a nivel ministerial, asumiendo las cuestiones técnicas desde la Universidad de Coimbra y LIP (Laboratorio e-Ciencia) y la comunicación desde Ciencia Viva (Fundación nacional).

2009 ha sido un año en el que Ibercivis ha tenido una fuerte crecimiento de aplicaciones y una expansión internacional. Ha sido necesaria una reestructuración de la infraestructura que permita soportar un crecimiento progresivo.



Representación esquemática de la infraestructura interna de Ibercivis

Es por ello que el crecimiento de usuarios se ha realizado de forma pausada, para asegurar el correcto funcionamiento de la infraestructura y garantizando un crecimiento estable sin sobrecargas.

Las actuaciones en el campo de divulgación y comunicación se han centrado en la consolidación del proyecto y la obtención de nuevos usuarios a través de diferentes actividades: **nueva web**, con nuevos contenidos, blogs, hemeroteca, sala de prensa, descargas o las últimas novedades: **premios Ibercivis**, un concurso de participación ciudadana durante el mes de junio de 2009 que ha marcado un crecimiento en el número de usuarios; asistencia al **Pabellón de la Ciencia** en Octubre de 2009 en la Feria de Muestras de Zaragoza; **charlas** en centros de Enseñanza Secundaria; aparición en diferentes medios de comunicación como prensa y radio; **publicaciones** en prestigiosas revistas internacionales; Ibercivis en **Facebook**; **caso de éxito en el Club de Innovación** en la categoría Tecnología Comunicaciones y Administración electrónica; **finalista en los Premios de Internet**, donde Ibercivis fue finalista en la categoría C4 Mejor iniciativa.

Ibercivis está preparado para un crecimiento mayor: las nuevas aplicaciones de México y Argentina suponen la expansión a Latinoamérica. Por otra parte, la concesión de ayudas desde el Ministerio de Ciencia e Innovación bajo el programa de FCCI-ACI PROMOCIONA 2009, permiten realizar difusión del proyecto en Argentina y Cuba, con especial atención a los centros de Enseñanza Secundaria.



Organizadores y premiados el día de la entrega de premios de Ibercivis en el Digital Water Pavilion

El trabajo realizado por el BIFI en Ibercivis, junto con los desarrollos del proyecto EDGeS, ha propiciado que el BIFI haya sido invitado a participar como socio en tres proyectos satélites FP7 que son continuación y ampliación de este proyecto EDGeS: Scalafrastructure, DEGISCO y EDGI. Estos tres proyectos están en fase de propuesta, siendo evaluados a resolver en Marzo 2010.

Scalafrastructure propone la creación de la mayor plataforma de test para el Internet del Futuro (FIRE initiative). El BIFI participa en despliegue de recursos integrando Ibercivis y Piregrid.

EDGI (European Desktop Grid Initiative) realizará la interconexión de Grids, Desktop Grids y Clouds a nivel europeo, desarrollando para ello infraestructura, middleware y numerosas aplicaciones. El BIFI liderará la European Desktop Grid Federation (también llamada **Eurocivis**), que supone una expansión a nivel europeo de Ibercivis. También se integrará con todos los Grids de Europa y con Clouds.

DEGISCO (Desktop Grids for International Scientific Collaboration) busca la expansión de Desktop Grids por todo el mundo, integrando iniciativas existentes y realizando grandes esfuerzos en comunicación y formación. Ibercivis se consolidará como la iniciativa voluntaria en países de habla hispano-portuguesa. El BIFI liderará la International Desktop Grid Federation (mundial) y participará en el despliegue de recursos, soporte a usuarios y formación.

Por otra parte, está en marcha la creación de la Fundación Ibercivis, cuyo objetivo es crear una figura única para dotar de identidad, flexibilidad y continuidad al proyecto. Los Estatutos están redactados, y se encuentra en fase de negociación de fondos con los participantes entre los que se encuentran el CSIC, CIEMAT, Red.es, DGA, Ayuntamiento de Zaragoza, MICINN, entre otros.

EDGeS

El BIFI participa en el proyecto EDGeS de la UE (FP7) para portar la aplicación de fusión ISDEP al entorno de Desktop Grid y Service Grid integrados en dicho proyecto. En concreto, se ha trabajado con el código de simulación del proyecto ITER. El trabajo realizado incluye el portado y adaptación del código, incluyendo modificaciones en el código fuente y en los ficheros auxiliares (tanto para BOINC como para Xtremweb), uso y validación de las infraestructuras, y documentación.

Ordenadores Dedicados

Durante 2009, el ordenador dedicado JANUS ha entrado en periodo de explotación científica. JANUS es un ordenador dedicado, construido y optimizado para obtener muy altos rendimientos en simulaciones de Monte Carlo de Vidrios de Spin. El ordenador presenta cierta flexibilidad, lo que permite simular diferentes modelos, como el modelo de Edwards-Anderson, los modelos de Potts con diferentes estados, cambiar la dimensión espacial del sistema e incluyendo o no la presencia de campos magnéticos, constantes o variables.

Todos estos modelos presentan importantes problemas abiertos que durante años diferentes grupos en todo el mundo (en Europa, Estados Unidos y Japon) han tratado de resolver, encontrándose con una dificultad insalvable: la potencia necesaria para simular estos sistemas esta más allá del alcance de los más potentes ordenadores del mundo.

JANUS sin embargo, adapta su arquitectura al problema concreto, permite simular a velocidades entre 1000 y 100.000 procesadores convencionales. Esto ha supuesto un salto cualitativo en los resultados obtenidos.

Los estudios se han realizado principalmente por miembros del BIFI, participando los siguientes grupos:



Vista del interior de la máquina JANUS compuesta por FPGAs

A. Tarancón y A. Cruz: BIFI Zaragoza, D. Navarro, I3A Zaragoza, L.A. Fernández, V. Martín Mayor, A. Muñoz Sudupe, D. Yllanes, Universidad Complutense de Madrid y Miembros del BIFI, J.J. Ruiz-Lorenzo y A. Gordillo, Universidad de Extremadura y Miembros del BIFI, G. Parisi, E. Marinari (BIFI) A. Maiorano (BIFI) y S. P. Gavio (BIFI) de la Universidad de Roma I, La Sapienza, R. Tripicione, F. Mantonvani, Universidad de Ferrara, P. Young, Universidad de California (USA)

También se han generado tres tesis doctorales basadas en JANUS, más cuatro en curso.

Para obtener resultados relevantes, no solo hemos utilizado la gran potencia de JANUS, también se han desarrollado nuevos observables, se han introducido hasta 4 réplicas, todo lo cual ha permitido un avance significativo. Hemos logra-

do termalizar hasta retículos de tamaño 32 y calcular la temperatura crítica y los exponentes críticos con gran precisión. El punto más relevante ha sido el estudio de la fase rota del modelo para dilucidar si la fase rota tiene estructura tipo Droplet o tipo RSB. Este es el punto actualmente más polémico en el modelo en toda la literatura. El problema es altamente complejo, pero hemos avanzado sustancialmente. Para ello hemos introducido el Parallel Tempering y hemos simulado muy dentro de la fase rota, para el estudio de la distribución del overlap. También hemos comenzado con el estudio del comportamiento del sistema fuera del equilibrio, que da importantes informaciones acerca de la estructura del vacío del modelo.

Para el correcto uso de la infraestructura se ha puesto en marcha un sistema de almacenamiento masivo con redundancia (RAID) y alta disponibilidad, que es usado por todos los grupos de investigación. Se dispone actualmente de 4 hosts externos desde los que se puede gestionar, almacenar y analizar las ingentes cantidades de datos generados.

Dentro de la convocatoria de Fondos FEDER para infraestructuras, hemos obtenido financiación para la segunda generación de JANUS, que de momento llamaremos JANUS II. Esta nueva máquina tiene como objetivo fundamental ampliar el rango de aplicaciones que puede ejecutar, para incluir problemas tales como Dinámica Molecular, reconocimiento de secuencias en polipéptidos, acelerador numérico para problemas con fuerzas a largo alcance (potenciales tipo Coulomb, por ejemplo), Redes Neuronales, y problemas similares.

Para la realización del proyecto JANUS II nos hemos fijado varias etapas

- Identificar los grupos de investigación con aplicaciones susceptibles de ejecución eficiente en JANUS II y fijar el rango de problemas
- Diseñar la arquitectura de la máquina en función de las aplicaciones fijadas en el punto anterior. En esta fase deberemos fijar, tanto el procesador o procesadores que utilizar (CPU, GPUs, FPGAs, ASIC...), como la topología de las conexiones, tipo y cantidad de memoria, etc.
- Diseñar la placa base y el módulo de proceso básico
- Diseñar el RAC, alimentación, ventilación, etc
- Diseñar el sistema de Input/Output

En esta fase se colaborará especialmente con la empresa o empresas que más adelante construyan la máquina. La cuestión clave aquí es fijar el tipo de procesador a usar. Nuestro objetivo es que al menos para una aplicación obtengamos potencias en torno a los 100.000 procesadores. También que para unas pocas más (3 ó 4 al menos) la potencia sea del orden de miles de PCs. El procesador puede ser de diferentes tipos, incluso una mezcla de ellos. En un extremo estarían los ASIC con potencias muy elevadas para un solo tipo de problema, y en el otro, los procesadores convencionales (Intel de uso domestico esencialmente) que sirven para todo pero con potencia baja. También las soluciones mixtas como GPU+Intel o Intel+FPGA, serán analizadas.

Existe un problema adicional en el desarrollo del proyecto JANUS II. Los grupos de investigación disponen de sus aplicaciones desarrolladas para ordenadores y procesadores convencionales, usualmente escritas en C o en Fortran, para ejecutarse en modo no paralelo, o si existe paralelismo, utilizando alguno de los estandares habituales, como MPI por ejemplo.

En JANUS II los programas debes ser modificados, en la práctica reescritos completamente, para adaptarse a su arquitectura. Este proceso, llamado Porting, es largo y complejo, y no puede ser llevado a cabo únicamente por el personal que desarrolla JANUS II, es necesaria la participación activa de los investigadores que conocen y han creado la aplicación original. Para ello es necesario dedicar un buen periodo de tiempo, que en general, es imposible por falta de medios humanos.

Para resolver este problema, y facilitar la incorporación de nuevos grupos, estamos poniendo en marcha un nuevo proyecto Europeo dentro del VII programa marco para la incorporación de grupos que participen en el desarrollo de JANUS II y realicen el Porting de sus aplicaciones.

CAESARAUGUSTA

Durante 2009, el BIFI ha seguido gestionando CAESARAUGUSTA, nodo en Aragón de la Red Española de Supercomputación. Esta red, con núcleo en Marenostrom (Barcelona Supercomputing Center), fue creada en 2007 por el MICINN para

dar respuesta a las crecientes necesidades de computación de la investigación en España. Este año se ha incorporado un nuevo miembro a la RES; el Instituto Tecnológico de Canarias, con su supercomputador "Atlante". Con ello ya somos 8 los organismos participantes en el proyecto y muy pronto se esperan varias incorporaciones de otras autonomías.

A fecha de hoy, CAESARAUGUSTA mantiene su configuración original formada por 512 procesadores PPC64, 24 TeraBytes de almacenamiento y red de interconexión Myrinet. Durante este año se ha obtenido financiación del MICINN en la convocatoria para mejora de ICTSs (Instalaciones Científicas y Tecnológicas Singulares) que ha permitido adquirir diversos servidores destinados a tareas de monitorización, backups y despliegue de una VLAN privada entre los centros que pertenecen a la RES. En estos momentos se está planificando ya una próxima renovación de Marenostrium, que traerá a su vez un upgrade del hardware del resto de nodos de la RES.

A lo largo de 2009 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.



Visita IES Segundo de Chomón (Teruel) 25 Marzo 2009

Durante los dos primeros periodos de 2009, en CAESARAUGUSTA se han computado 2.308.000 horas de CPU; 1.842.000 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 466.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité local (20% de tiempo restante).

Al terminar el segundo periodo del año, se ha realizado una actualización masiva del software del sistema: migración del sistema de colas (SLURM+MOAB), upgrade del sistema operativo (SLES10), del firmware Myrinet (GM a MX) y del sistema de ficheros paralelo GPFS (upgrade a versión 3.2).

A finales de este año, se ha renovado por otros 2 años la subvención de la DGA para cofinanciar un contrato de técnico de apoyo a la investigación destinado a CAESARAUGUSTA. Asimismo, se sigue contando con una subvención similar del MICINN concedida el año pasado y las aportaciones del convenio de colaboración firmado con la DGA, en vigencia hasta 2011.

TERMINUS

Terminus es la plataforma de cálculo más potente que se encuentra alojada en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI. Se trata de un cluster de memoria distribuida bajo GNU/Linux que en estos momentos cuenta ya con más de 600 procesadores, todos de arquitectura de doble precisión ("em64t" = 64-bit), conectados a través de Gigabit Ethernet e Infiniband.

Los últimos equipos de 32 bits que integraban Terminus (32 procesadores Pentium IV) han sido donados al Instituto CEAC de Cuba, como parte de un convenio de colaboración firmado recientemente.



Panorámica de Terminus en el Laboratorio de Supercomputación

Este año se ha sustituido NFS por el sistema de ficheros paralelo LUSTRE, con lo cual, además de aumentar notablemente la escalabilidad del sistema, el espacio de almacenamiento "online" ha pasado de 4 a 12TB. Este trabajo ha sido llevado a cabo por Patricia Santos Marco, como Proyecto Fin de Carrera de Ingeniería de Telecomunicación, desarrollado dentro del Area de computación del BIFI.

En total se cuenta con una potencia de cálculo superior a los 6 TeraFLOPs, lo que le sigue situando entre los superordenadores más potentes de España. Más 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).

SUPERCOMPUTADOR DE MEMORIA COMPARTIDA BIFI-CECAM

En la anterior convocatoria para proyectos de equipamiento científico-tecnológico cofinanciados con el fondo europeo de desarrollo regional (FEDER), el BIFI y el nodo del CECAM en España, solicitaron conjuntamente un sistema de memoria compartida tipo Altix con 256 procesadores IA64 y 1/2 TB de RAM.

Esta infraestructura de supercomputación, a diferencia de los superordenadores de memoria distribuida (MareNostrum, Roadrunner...), hace que toda la memoria RAM del sistema sea globalmente visible desde cada uno de los procesadores del supercomputador. Esta vasta cantidad de memoria permite ejecutar códigos y aplicaciones científicas computacionalmente intensivas o difícilmente paralelizables, que de otra forma serían inabordables.



SGI Altix 4700

Además, ya se ha obtenido una subvención del MICINN para cofinanciar (2010-2013) un contrato de un técnico de apoyo a la investigación destinado a administrar dicho supercomputador de memoria compartida.

Sala de visualización 3D

El BIFI ha mejorado y ampliado sus instalaciones de visualización estereoscópica presentes en la segunda planta del edificio Cervantes. Además de la proyección 3D se ha configurado satisfactoriamente el entorno de posicionamiento por infrarrojos y se han desarrollado aplicaciones aprovechando el hardware disponible. Estas aplicaciones permiten introducirse en la escena e interactuar con los elementos de las distintas simulaciones (realidad aumentada) de simulación de plasmas, dinámica de partículas y otras de carácter más didáctico.

El evento más importante realizado este año fue el traslado, montaje y exhibición del hardware y aplicaciones científicas a las instalaciones del proyecto ITER en Cadarache. A la exhibición asistieron todos los miembros del Consejo de ITER destacando la presencia de su Director General, D. Kaname Ikeda. La presentación científico técnica fue realizada por Francisco Castejón y José Miguel Reynolds y contaron con la asistencia de Rubén Vallés y Fermín Serrano. Debemos agradecer a D. Carlos Alejandre, Director General Adjunto por su amabilidad y apoyo.



Miembros del consejo de ITER presentes en la presentación de la instalación 3D realizada por el BIFI en Cadarache

Además, a través de la FE-CYT se solicitaron y obtuvieron este año 2009 ayudas al MICINN para mejorar el sistema 3D y poder realizar su montaje y exhibición durante las Fiestas del Pilar en

la Feria de Muestras de Zaragoza, concretamente en el Pabellón de la Ciencia. Se proyectó un video que contenía información visual tridimensional sobre los siguientes aspectos: teoría de dinámica de partículas; introducción a la fusión nuclear: bases y dispositivos; simulación de movimiento de una partícula de fusión nuclear dentro del dispositivo TJ-II del Laboratorio Nacional de Fusión (CIEMAT); Visualización a nivel atómico de partículas atravesando un cristal de cuarzo; introducción a las funciones biológicas de las proteínas; y Visualización de proteínas de interés farmacológico en distintos formatos. De nuevo la participación fue un éxito, consolidando el Pabellón de la Ciencia como la feria científica más importante de España. En particular, por la instalación 3D pasaron unas 4 mil personas.

Junto al stand de 3D el BIFI volvió a participar en dicho Pabellón de la Ciencia con la actividad del Espacio ADN. Además de los pósters divulgativos creados y expuestos, se trabajaba de cara al público para tomar muestras de ADN, procesarlas y entregar los botecitos. Finalmente, dicho Pabellón de la Ciencia también mostraba en una proyección y con pósters los desarrollos realizados en el proyecto Ibercivis.

Cheque tecnológico

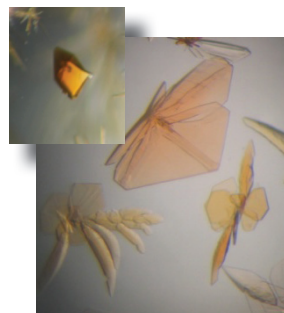
El cheque de innovación tecnológica consiste en una ayuda económica para la implantación de innovaciones tecnológicas en las pymes, desarrolladas por grupos o centros de investigación aragoneses. El BIFI, como centro de investigación y especialista en diferentes áreas de computación ha solicitado varias ayudas con diferentes empresas.

Hasta el momento ha sido concedida la solicitud de colaboración con la empresa Schnell Software dedicada al desarrollo de aplicaciones para el corte, clasificación y manipulación de corte de ferralla.

2.2 El Laboratorio de Biología Molecular y Cristalografía

Técnicas disponibles en el laboratorio:

- **Biología Molecular:** Ingeniería genética y proteínas recombinantes (clonación, mutagénesis, expresión de proteínas recombinantes de interés biotecnológico o biomédico)
- **Bioquímica:** Purificación de proteínas y ácidos nucleicos mediante Fast Performance Liquid Chromatography utilizando columnas de intercambio iónico, de afinidad y de exclusión molecular. Purificación de proteínas pequeñas y compuestos químicos mediante High Performance Liquid Chromatography utilizando columnas analíticas y semi-preparativas.
- **Biofísica de moléculas biológicas:** Caracterización de la estabilidad de proteínas, de la interacción proteína-proteína y proteína ligando y de la función de proteínas mediante Calorimetría Diferencial de Barrido, Calorimetría Isotérmica de Titulación, Dicroísmo Circular, Espectrofotometría y Fluorimetría.
- **Biología Celular:** Cultivos de células procariotas y eucariotas para expresión de proteínas recombinantes, determinación de eficacia y toxicidad de compuestos bioactivos, y estudios sobre apoptosis. Cultivos de células madre para estudios de diferenciación celular y muerte celular.
- **High Throughput Screening (HTS):** Métodos de cribado experimental para la búsqueda e identificación de compuestos bioactivos frente a dianas farmacológicas.



- **Cristalografía:** En el año 2009, en el laboratorio de cristalografía, se generaron cristales de diversas proteínas y complejos que son objeto de estudio en varias líneas de investigación del instituto. El procesamiento de los datos de difracción de rayos X de los monocristales ha permitido proponer un modelo estructural para cada proteína y complejo.

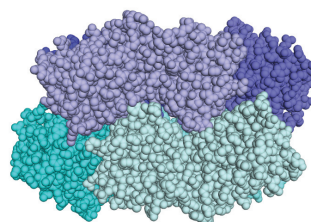
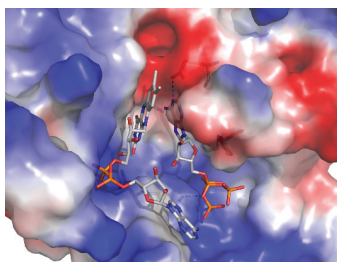
Las estructuras resueltas fueron depositadas en el Protein Data Bank (pdb) con los siguientes códigos:

2VYQ: estructura de una especie mutante de la FNR de cambio de especificidad.

2VZL: estructura del complejo de la especie mutante anterior con el coenzima NAD⁺.

3ESX, 3ESY, 3ESZ: estructuras de especies mutantes de Fld de *Anabaena* diseñados para el estudio del potencial redox y del momento dipolar de esta flavoproteína.

2W5U: estructura del complejo de la Fld de *H. pylori* con el inhibidor C3.



Además, durante 2009 se instalaron dos estaciones Linux implementadas con los paquetes de software necesarios para la resolución de estructuras a partir de los datos de difracción. Con ello se ha aumentado la capacidad de cálculo del que se disponía hasta la fecha.

Miembros permanentes trabajando en el laboratorio



Grupos de investigación de miembros del BIFI que utilizan las instalaciones habitualmente



Personal investigador incorporado durante 2009

Durante el 2009 nuevos investigadores contratados se han incorporado al Laboratorio:

Ramón Hurtado, investigador contratado por la Fundación ARAID (Diputación General de Aragón). Cristalógrafo y biólogo molecular procedente de la Universidad de Dundee (U.K.), contribuirá a consolidar la línea de investigación de cristalografía de proteínas de rayos X.

Sonia Vega, técnico de laboratorio. Le ha sido concedida una ayuda correspondiente al Subprograma de Personal Técnico de Apoyo (Subprograma PTA-MICINN 2009) para contratación de Técnicos de Infraestructuras Científico-Tecnológicas.

Estancias de investigadores durante 2009:

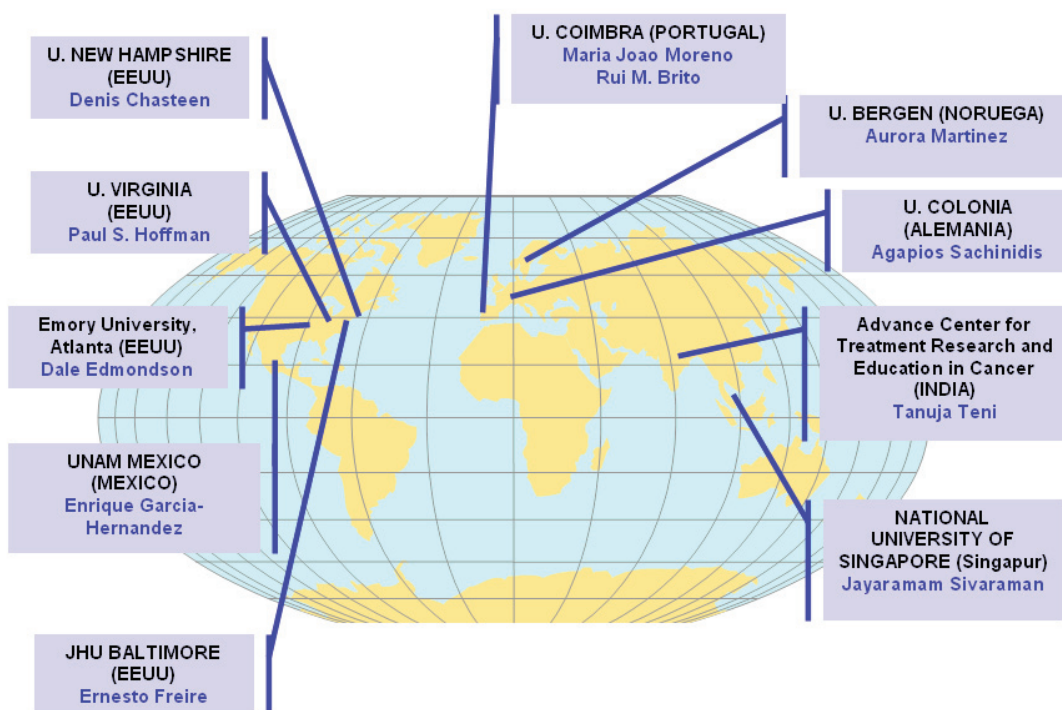
Durante el 2009 han venido a nuestro instituto los siguientes investigadores nacionales e internacionales:

Rafael Ruiz (CIPF, Valencia), Rosa Doménech (UMH Elche, Alicante), Pilar Alfonso (IACS, Zaragoza), Maria Joao Moreno (U. Coimbra, Portugal), Patricia Martins (U. Coimbra, Portugal). Catarina de Jesus (U. Coimbra, Portugal). Leslie Chávez (UNAM México). Alfredo Lagunas (UNAM México).

Colaboraciones con centros nacionales durante 2009:



Colaboraciones con centros internacionales durante 2009:



Equipos nuevos. Proyecto infraestructuras.

Están pendiente de compra los siguientes equipos con el proyecto de infraestructuras científico técnicas (fondos FEDER) que fue concedido en 2008:

1. Calorímetro Isotérmico de Titulación ITC-200 (MicroCal):

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.

2. Espectrofotómetro de fluorescencia Cary Eclipse (Varian):

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.

3. 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.

4. Sistema robotizado para la automatización del proceso de cristalización de macromoléculas biológicas:

Este sistema consta de tres módulos; dos para la dispensación de líquidos de volúmenes de mililitros a nanolitros en microplacas y Linbro y otro para la incubación, gestión y visualización de las distintas condiciones contenidas en las mismas. Este equipo permite la generación automatizada de monocristales de proteínas y complejos que serán medidos en el difractor de rayos x para macromoléculas que se concedió al BIFI en la anterior convocatoria.

5. Microscopio invertido de fluorescencia con sistema de adquisición de imágenes:

Permite la utilización de diversas técnicas habituales en microscopía de fluorescencia para la observación de diversos procesos celulares. Incluye un sistema informatizado de adquisición de imágenes y video así como una unidad accesoria termostatazada y con atmósfera controlada que permite la monitorización de cultivos celulares en tiempo real.

2.3 Nuevo edificio

Las obras de amueblamiento del nuevo edificio en el Campus del ACTUR prácticamente han terminado en diciembre de 2009, en este momento estamos determinando las necesidades de acondicionamiento de los laboratorios de modo que en enero de 2010 nos podamos incorporar a las nuevas instalaciones.

Seguimiento de la obras y acondicionamiento de la nueva sede del Instituto en el Edificio I+D

Durante el 2009 se ha estado en contacto, en primer lugar con la Unidad Técnica de Construcciones de la Universidad de Zaragoza (UTC) y en segundo lugar con la empresa adjudicataria del mobiliario e instalaciones (Flores Valles) del nuevo

edificio para controlar la correcta adecuación de nuestros laboratorios. Asimismo se han mantenido reuniones con la Unidad de Prevención de Riesgos Laborales de la Universidad de Zaragoza para que se evalúen las instalaciones y se incluyan los cambios necesarios en las mismas que conduzcan a la obtención de informes favorables que nos permitan trabajar en ellas de forma segura (condición necesaria para la obtención de fondos públicos).



3. Investigación

3.1 Organigrama de Investigación

DIRECTOR

Subdirectora, Secretario.

Consejo Asesor de Investigación

Equipo de Gobierno

Materiales Complejos y Física Fundamental

Redes Complejas y Sociedad

Transporte Cuántico y Computación Cuántica

Física de los Sistemas Biológicos

Interacción Proteína-ligando

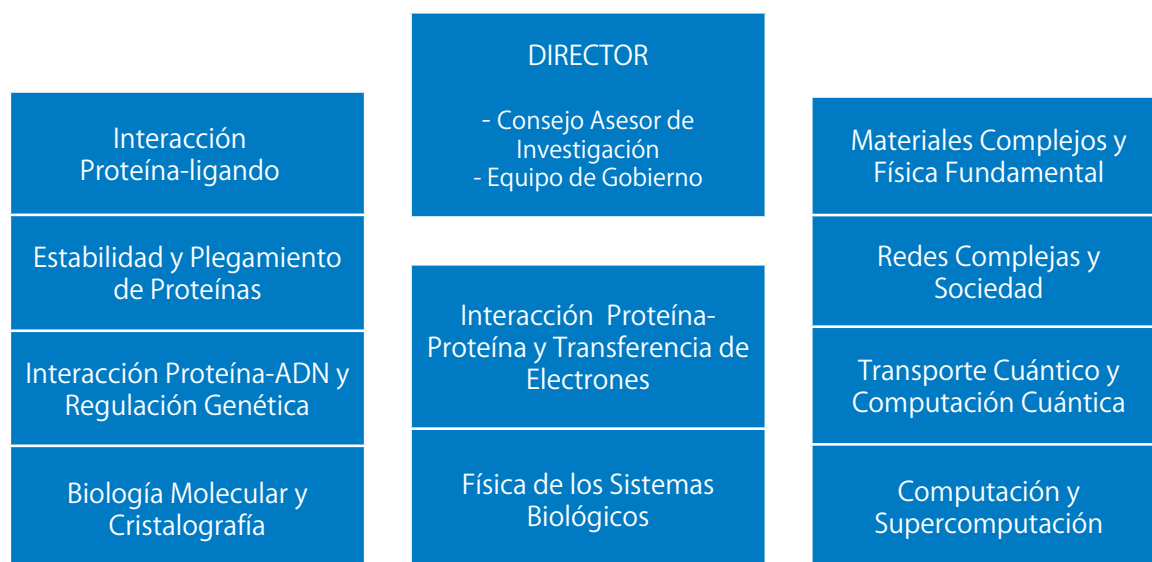
Interacción Proteína-Proteína y Transferencia de Electrones

Estabilidad y Plegamiento de Proteínas

Interacción Proteína-ADN y Regulación Genética

Biología Molecular y Cristalografía

Computación y Supercomputación



3.2 Grupos de Investigación

Los miembros del BIFI participan mayoritariamente en cuatro grupos de investigación reconocidos por el Gobierno de Aragón.

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 de Física Estadística y No Lineal.

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.

Investigador principal: L. Mario Floría

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

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Investigador principal: Carlos Gómez-Moreno

Título: Grupo de Bioflora B39

Entidad financiadora: Gobierno de Aragón

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

Investigador responsable: P. CATALÁN

3.3 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.

Simulación de Plasmas de Fusión

Dentro de la colaboración entre el BIFI y el LNF-Ciemat, se ha continuado con las colaboraciones iniciadas. Se ha finalizado la Tesis Doctoral de J.M. Reynolds Barredo, codirigida desde ambas instituciones. En ella se han desarrollado nuevas y potentes herramientas para el estudio y simulacro del plasma, en concreto las ecuaciones cinéticas de deriva en geometrías complejas, lo que incluye el TJ-II y también la geometría del futuro reactor ITER. El cuerpo central ha sido el desarrollo de un código de transporte en plasmas toroidales con los propósitos de que sirva de nexo entre la teoría y simulaciones complejas y también de que ayude por tanto a la explicación cualitativa de los resultados experimentales en la investigación de plasmas de fusión por confinamiento magnético.

Otro aspecto importante en la colaboración es el estudio del inyector de neutros en ITER. Para inyectar partículas en ITER, primero deben ser ionizadas, para acelerarlas después a grandes energías. Para ser introducidas en el reactor deben ser neutralizadas de nuevo para poder atravesar los intensos campos magnéticos. Todo este proceso es complejo y el diseño debe ser simulado intensivamente en el ordenador para lograr la máxima eficiencia.

Vidrios de Spin

Se han estudiado las propiedades críticas del modelo de Heisenberg-Edwards-Anderson utilizando recursos de la Red Española de Supercomputación, así como de la iniciativa europea DEISA. Se han empleado un total de 7 millones de horas en los ordenadores Mare Nostrum (Barcelona), Caesaraugusta (Zaragoza) y BCX-CINECA (Bologna). Esto ha hecho posible simular sistemas mucho mayores y con más precisión que lo conseguido hasta la fecha, lo que ha permitido concluir que la aparente diferencia entre la temperatura de transición de fase llamada de vidrio de espín y la de la transición de fase quiral es debida a las correcciones de fase subdominantes que sufre esta última.

El superordenador JANUS se ha mantenido en funcionamiento ininterrumpido durante todo el año. La mayor parte del tiempo se ha dedicado al estudio del modelo de Ising-Edwards-Anderson en equilibrio a baja temperatura. Se dispone de datos muy precisos en sistemas tan grandes como 323 espines (1000 muestras a temperatura 0.64 veces la crítica) y 243 espines (4000 muestras a temperatura 0.57 veces la crítica). Es de reseñar que ha sido posible obtenerlos gracias a la potencia de JANUS y a un protocolo de termalización que distribuye recursos según las dificultades de termalización de cada muestra. Para determinadas muestras, ha sido necesario utilizar hasta 32 nodos en paralelo para conseguir su termalización. La campaña de producción de estos datos ha terminado el 14 de Diciembre y en este momento se están procesando los resultados y preparando artículos describiéndolos. Disponemos de información muy detallada sobre temas de gran interés, como la estructura espacial de interfases, el caos en temperatura, etc.

Durante 2009 también se han realizado con JANUS otras simulaciones del modelo de Potts-Vidrio de espín con número de estados 5 y 6 y se han obtenido resultados muy precisos sobre las propiedades del punto crítico. Estos resultados serán enviados a publicar en breve.

En el momento presente se está comenzando una nueva campaña de simulación del modelo de Ising-Edwards-Anderson con campo magnético externo.

También se ha llevado a cabo una simulación del modelo de Ising-Edwards-Anderson en el hipercubo con conectividad fija (de todas las aristas del hipercubo sólo se activan 6 por vértice para que la conectividad coincida con la tridimensional) que tiene la notable propiedad de ser de tipo campo medio (es exacta la aproximación de Bethe) pero mantiene una noción natural de distancia. Se observado una dinámica de envejecimiento con crecimiento de la longitud de correlación, parecida a la tridimensional. Se ha observado que la función de correlación dos tiempos implica una cantidad infinita de sectores temporales y se ha encontrado un propagador de tipo cuártico en el momento. Es de destacar que el Ansatz de Finite Size Scaling estándar ha permitido describir los datos, a pesar de la estructura espacial del sistema.

En el área de vidrios estructurales y coloides, se ha estudiado un sistema polidisperso de esferas con alta dispersión de tamaños. Por primera vez se ha estudiado la transición sólido-fluido en una colectividad microcanónica. La construcción de Maxwell permite una determinación precisa de la temperatura de transición y su posterior extrapolación al límite termodinámico. Se ha observado una fase de baja energía en donde se produce fraccionización: el sistema se divide espacialmente en regiones amorfas y cristalinas. Las partículas se distribuyen de acuerdo con su tamaño, siguiendo un patrón muy complejo.

Algoritmos de simulación con cantidades conservadas

Se ha llevado a cabo un estudio del modelo de Ising en 2 y 3 Dimensiones mediante simulaciones a magnetización fija (Tethered Monte Carlo) utilizando métodos de cluster. El fijar el parámetro de orden no reduce de forma radical la eficiencia de los algoritmos de cluster, comparando con los canónicos, pero permite determinaciones muy precisas de cantidades como el máximo del potencial efectivo o incluso la dimensión anómala.

También se ha estudiado el modelo de Potts bidimensional con 4 estados mediante una simulación a energía fija (microcanónica), junto con el modelo de Ising en 3 dimensiones. Estos modelos presentan una singularidad como ley de potencias para el calor específico. Se ha reformulado el Ansatz de Finite Size Scaling para sistemas microcanónicos y se ha comprobado en ambos modelos. Se han observado fuertes correcciones de escala logarítmicas en el modelo de Potts, que no han impedido racionalizar los datos mediante las predicciones analíticas.

Finalmente se está finalizando un trabajo de gran envergadura numérica, llevado a cabo principalmente utilizando recursos del proyecto IBERCIVIS, consistente en el análisis microcanónico del modelo de Potts diluido con 8 estados. El modelo presenta una fuerte transición de fase de primer orden incluso a diluciones elevadas. Esto permite estudiar detalladamente las propiedades del punto en el la dilución hace que la transición pase a ser de segundo orden. Se han obtenido resultados muy precisos gracias al gran número de muestras simuladas.

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. Mazo, P. Echenique, D. Prada, J. Poncela, J. Sanz 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 en sistemas biológicos.
- Sistemas dinámicos no lineales acoplados a estructuras complejas para la modelación de procesos emergentes.
- 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 y biológicos.
- 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 en sistemas biológicos y sus patrones topológicos. En particular, en colaboración con investigadores del grupo de Mycobacterias de la Universidad de Zaragoza y del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud, hemos comenzado a construir y caracterizar la red de proteínas a través de la cual Mycobacterium Tuberculosis actúa. El trabajo es resultado de una colaboración multidisciplinar respaldada con un proyecto de la DGA, cuyo IP es el Dr. Yamir Moreno.
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. Para esto, hemos desarrollado y caracterizado nuevos modelos y adaptado otros conocidos a las nuevas condiciones de conectividad de

las redes reales de comunicación. Es de señalar que algunos de estos trabajos se están realizando con la colaboración del grupo de Complejidad de la BT, empresa líder del sector de las comunicaciones en el Reino Unido.

3. Se han analizado y propuesto nuevos modelos y algoritmos de manejo de tráfico en redes, tanto reales como generadas por ordenador. Específicamente, hemos seguido trabajando en algoritmos que incorporen la noción de "traffic-awareness", o sea, la posibilidad de que los paquetes de información sean transportados teniendo en cuenta tanto la topología de la red (camino más corto) como el estado de la misma (congestión local).

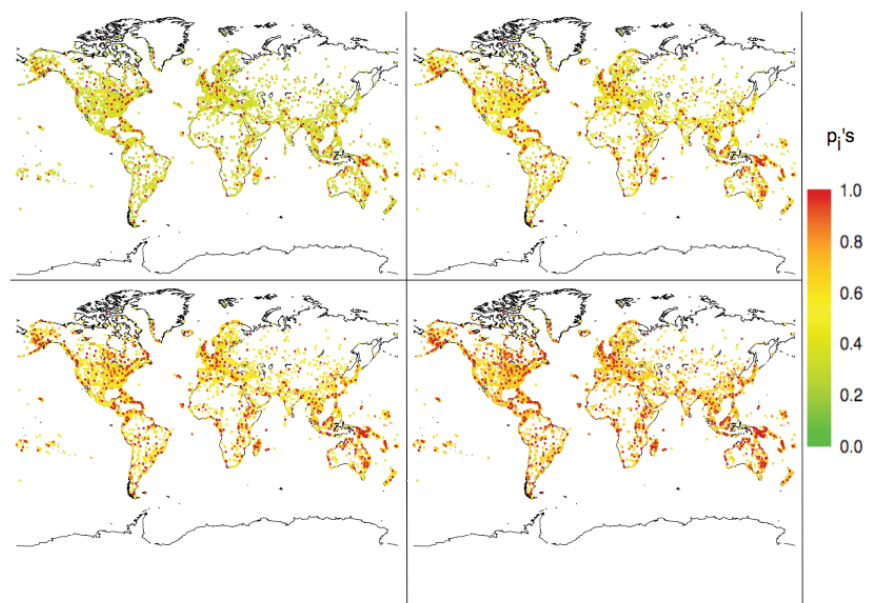
4. Estamos estudiando, utilizando modelos que incorporan tanto la topología real de redes biológicas como mecanismos no lineales apropiados para su descripción cuantitativa, la dinámica de redes celulares relevantes para procesos como la regulación genética y el metabolismo celular. En este campo, las mayores dificultades surgen de la carencia de modelos matemáticos universales que integren la gran diversidad de mecanismos, interacciones y variables bioquímicas observadas en experimentos. En nuestros estudios, hemos decidido comenzar incorporando algunas propiedades que definen la red de interacción biológica investigada (ya sea red génica o metabólica) y utilizar una dinámica genérica, para luego ir aumentando el grado de complejidad en ambas.

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. Para esto, hemos adaptado a las nuevas condiciones topológicas el modelo de Kuramoto de osciladores de fase. Este modelo es un paradigma en el campo de la sincronización y se ha demostrado que tiene múltiples aplicaciones en sociología (dinámicas de consenso y formación de opiniones) y biología. En particular, se ha investigado la red cortical del gato y cómo la dinámica de sincronización puede revelar aspectos topológicos novedosos.

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. La mayor parte de los estudios realizados en este tema están relacionados con el surgimiento de comportamientos cooperativos en poblaciones estructuradas. En este sentido, hemos trabajado tanto en el análisis de la dinámica evolutiva global dado que la topología es fija, como en explorar la co-evolución de la dinámica y la estructura de estos sistemas.

Este año se le ha dado especial relevancia debido a sus implicaciones prácticas al estudio de procesos de propagación de epidemias en sistemas de transporte. Como recientemente se ha demostrado con la epidemia de gripe A (H1N1). La globalización de los sistemas de transporte modernos hace posible que hoy en día una enfermedad se propague en pocos días, algo que sólo unas decenas de años atrás hubiera tardado mucho más tiempo. El resultado es que la sociedad moderna está expuesta como nunca a este tipo de amenazas, por lo que su estudio es de vital importancia. En particular, nuestro grupo ha desarrollado un modelo matemático novedoso que tiene en cuenta más detalles sobre los mecanismos de propagación de la enfermedad. La figura 1 muestra



un ejemplo de los resultados obtenidos cuando se asume que la red a través de la cual la epidemia se extiende es la red internacional de aeropuertos. Como se puede ver, los patrones de infección coinciden cualitativamente con los informes de la WHO sobre las regiones de mayor riesgo. Actualmente se continúa trabajando en esta línea para refinar aún más nuestros modelos.

Además, el grupo de Ángel Sánchez ha continuado su trabajo en sistemas complejos y teoría de juegos evolutiva. Buena parte de la investigación realizada ha tenido que ver con juegos evolutivos en grafos, problema sobre el que han realizado importantes contribuciones en colaboración con Carlos P. Roca y José A. Cuesta, de la Universidad Carlos III de Madrid. Se ha logrado avanzar en la comprensión de qué factores motivan la emergencia de la cooperación en poblaciones estructuradas, identificando sobre todo dos: la existencia de transitividad en la red y la inhomogeneidad en la distribución de grado, es decir, la existencia de agentes con gran número de conexiones. Por otro lado, se ha mostrado también que hay dinámicas evolutivas en las cuales no se observa prácticamente promoción de la cooperación en ninguna red modelo, como es el caso de la regla de mejor respuesta, una de las más utilizadas por los economistas. Sin embargo, hemos encontrado un resultado interesante consistente en la existencia de cooperación combinando dos reglas de evolución distintas para valores de los parámetros del juego en los cuales cada regla por separado no da lugar a estados cooperativos, en clara analogía con los famosos juegos paradójicos de Parrondo y el efecto ratchet. Asimismo, hemos propuesto un nuevo mecanismo de emergencia de la cooperación: la implementación de un fondo de pagos adicionales para aquellos que cooperan. Este modelo, que puede representar aplicaciones reales como la subvención gubernamental de ciertas actividades económicas o incluso la mecánica de las loterías, había sido estudiado antes en poblaciones bien mezcladas pero no en detalle cuando la población tiene estructura, y durante este año hemos completado ese trabajo con resultados no intuitivos. Finalmente, vista la gran variedad de reglas de evolución existentes y la disparidad de los efectos a los que dan lugar, hemos propuesto, junto con el postdoc Luis Moyano, la evolución de las propias reglas como un mecanismo de selección de las que son relevantes en la vida real y las que no. Este trabajo es muy novedoso y ha llamado inmediatamente la atención de la comunidad, habiendo aparecido ya varios artículos que trabajan a partir de nuestra propuesta.

También quisiéramos destacar una de las actividades desarrolladas este año por nuestra línea. Dentro del Congreso Nacional del BIFI del 2009, tuvo lugar la Reunión de la Red Temática de Econo-Socio-Física, a la cual pertenecen la mayoría de los miembros de la línea y que ha sido una manera muy efectiva de desarrollar la colaboración entre los miembros externos del BIFI y aquellos que pertenecen a la Universidad de Zaragoza.

Los resultados obtenidos a lo largo de este período se traducen en la publicación de numerosos artículos científicos (ver anexo de publicaciones). Los miembros del equipo también han sido “referees” en la evaluación de trabajos, de proyectos de investigación y de numerosas revistas especializadas. Finalmente, quisiéramos mencionar que una de las publicaciones del grupo (S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno et al. *Physics Reports* 424, 175 (2006)) es actualmente el segundo artículo más citado de la Universidad de Zaragoza con más de 840 citas, el primero de los últimos 10 años, lo cual es una medida objetiva de que la visibilidad de nuestros resultados ha aumentado.

En resumen, la línea de investigación se ha consolidado en el Instituto, y se ha incorporado en cursos de licenciatura y de postgrado. Es de destacar que, no obstante al poco tiempo transcurrido desde que el grupo trabaja en estos temas, ya se han codirigido 2 Tesis Doctorales, una de ellas dedicada en su totalidad al tema (ambas defendidas con éxito en Diciembre de 2006). Continuamos trabajando en la formación de personal investigador a través del Máster en Física y Tecnologías Físicas y actualmente se dirigen 4 nuevas tesis doctorales en los temas de la línea de investigación. Una de estas Tesis es un doctorado europeo conjunto con la Universidad de Roma III.

El grupo de trabajo ha estrechado la colaboración con varios científicos de otros centros de investigación entre los que se encuentran: Dr. Maziar Nekovee (BT, Reino Unido), Dr. Vito Latora (Universidad de Catania, Italia), Dr. Stefano Boccaletti (Instituto de Óptica Aplicada de Florencia, Italia), Dr. Matteo Marsili (International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italia), Dr. Ginestra Bianconi (Northeastern University, USA), Dr. Jurguen Kurths (Postdam Institute for Climate Research, Germany) y Dr. Arne Traulsen (Max Planck Institute for Evolutionary Biology, Plon, Germany).

Por su parte, y dentro de esta línea, Ricardo López-Ruiz lleva adelante su investigación en colaboración con diversos investigadores: Jaime Sañudo de la Univ. de Extremadura, Xavier Calbet de EUMETSAT (Darmstadt, Alemania), José Luíz

López de la Univ. Pública de Navarra, Carmen Pellicer-Lostao de la Univ. de Zaragoza, Elvira Romera de la Univ. de Granada, Danièle Fournier-Prunaret del INSA de Toulouse (Francia), Mario Cosenza de la Univ. de los Andes (Mérida, Venezuela) y Javier González-Estévez de la UNET (Táchira, Venezuela). En concreto, durante 2009, diferentes trabajos han sido publicados en las siguientes áreas:

- (i) Sistemas multi-agente en econofísica.
- (ii) Modelos biológicos con mappings.
- (iii) Modelo económico con mappings.
- (iv) Ciclos límite en Ecuaciones de Liénard.
- (v) Complejidad estadística en gases y sistemas cuánticos.

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

Durante el presente año se han mantenido las líneas de trabajo de los años anteriores. Destacaremos así, desde el punto de vista científico, los resultados que consideramos más relevantes. A grandes rasgos, podemos considerar dos grandes líneas de trabajo, una referida al transporte cuántico en sistemas electrónicos, y otra referida al transporte de información y la computación cuántica.

En el primer tema, vamos a destacar tres resultados. El primero es el estudio del efecto de un material superconductor en la estadística de la conductancia de un “quantum dot”. En particular, se analizan los casos con uno y dos puntas de prueba sujetas a un “chaotic quantum dot”. Utilizando técnicas de la teoría de matrices aleatorias para la matriz de dispersión, hemos calculado analíticamente la distribución de la conductancia como función de la transparencia de una barrera Schottky formada en la interface entre las puntas de prueba y el “quantum dot”. Destacaremos también el estudio de las propiedades estadísticas del transporte y de dispersión en cables cuánticos en la transición metal-aislante. En este trabajo se contrastan los resultados de la teoría de matrices de banda aleatorias con simulaciones numéricas de llamado “tight-binding approximation”. Finalmente, el último de los resultados, seleccionado entre los mejores trabajos presentados en la conferencia Chaos 2009 en Creta (Grecia), presenta una recopilación de resultados de un modelo de matrices aleatorias dentro de un enfoque de máxima entropía, que hemos venido aplicando con éxito al estudio del transporte electrónico en sistemas mesoscópicos.

En el segundo tema se ha continuado el uso de la formulación geométrica de la Mecánica Cuántica para la caracterización del entrelazamiento de un sistema cuántico, con la mente puesta en las implicaciones que este concepto tiene para la estabilidad de la comunicación cuántica y su frecuente aparición en los algoritmos cuánticos. Queremos destacar dos trabajos: en el primero de ellos se hace uso de la estructura geométrica subyacente a la variedad de estados cuánticos de un sistema de dimensión finita para introducir un criterio de independencia de observables cuánticos que permite evitar la bien conocida limitación asociada al teorema de von Neumann que implica la dependencia funcional de dos observables que conmutan. Es este uno de los primeros ejemplos en los que la formulación geométrica ofrece herramientas de estudio que no están disponibles en la descripción usual basada en el análisis funcional. En el segundo de los trabajos, se relacionan la descripción geométrica y objetos tensoriales definidos sobre grupos de Lie que permiten una caracterización sencilla del entrelazamiento basado en criterios geométricos: es posible reconocer así regiones de estados separables o máximamente entrelazados a partir del valor o la anulación de tensores definidos sobre el grupo a partir de los objetos geométricos de la variedad de estados.

En otro orden de cosas queremos destacar también la coorganización del congreso internacional “XVIII Fall Workshop on Geometry and Physics” que tuvo lugar en Benasque (Huesca) entre el 6 y el 10 de septiembre de 2009, y del que el BIFI fue uno de los sponsors. El evento se valoró de forma enormemente positiva desde el punto de vista científico por los participantes, y se está procediendo en estos momentos a la edición del volumen de actas que se publicará a lo largo del año próximo.

Física de Sistemas Biológicos (Physics of Biological Systems). Coordinador PierPaolo Bruscolini.

Miembros:

Este sector esta 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 (científico titular CSIC), Alberto Castro (Investigador ARAID), Víctor Polo (Profesor Ayudante Doctor), Pablo García Risueño (doctorando), Angel Rubio (catedrático de la Universidad del País Vasco).
- Fernando Falo Forniés. (Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza), Dr. Pedro J. Martínez Ovejas (Profesor Titular de Escuela Universitaria, Zaragoza), Dr. Juan José Mazo Torres. (Profesor Titular de la Universidad de Zaragoza), Diego Prada Gracia. (Doctorando).
- Pierpaolo Bruscolini (Profesor Contratado Doctor, 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),

Investigación:

Las investigaciones teóricas sobre biomoléculas se enfocan sobre todo en el estudio del plegamiento y diseño de las proteínas, en la desnaturalización del ADN, en el transporte electrónico y protónico en biomoléculas, y en el estudio de las interacciones de moléculas de interés biológico con campos externos (procesos de absorción, emisión, fluorescencia, fotorreacciones, etc). 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.

Este proceso de modelización fiable permite interpretar desde un punto de vista microscópico los resultados experimentales, proporcionando una comprensión más detallada de los comportamientos físicos y químicos, y también predecir el comportamiento de las biomoléculas en condiciones no convenientemente accesibles a las técnicas experimentales actuales (por razones técnicas o económicas). De esta forma, la modelización teórica proporciona instrumentos para el diseño racional de los experimentos y para la ingeniería de biomoléculas con características determinadas en cuanto a estabilidad o funcionalidad.

Las actividades de investigación en este sector se desarrollan a lo largo de varias líneas, con diferentes detalles de descripción y enfoque, cuyo mínimo denominador común es el uso de técnicas propias de la física y química teórica y de la mecánica estadística, y un uso masivo de los recursos de computación del instituto. En concreto:

- 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) estudios sobre la participación de estados excitados en procesos químicos y biológicos; estudios fundamentales sobre Dinámica Molecular (DM) de primeros principios, basados esencialmente pero no exclusivamente en métodos de funcionales de la densidad; con particular énfasis, DM con estados excitados, con campos intensos, y acoplada a técnicas de optimización (Teoría de Control Óptimo) (Alonso, Echenique, Polo, Castro, García Risueño, Rubio);
- c) análisis y mejora de los métodos de dinámica molecular clásica buscando aumentar su eficiencia numérica, mediante la imposición de ligaduras, la aplicación de esquemas de paso de tiempo múltiple, o la implementación de mecanismos de control adaptativos (Echenique, García-Risueño)

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; estudio de la relación entre la dinámica microscópica y la dinámica macroscópica entre cuencas dinámicas (Falo);

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

f) estudio con modelos mesoscópicos 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 y racionalizar la enorme cantidad de datos experimentales (Bruscolini, Falo, Rey). Diseño de secuencias de proteínas para aumentar su estabilidad (Bruscolini);

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

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

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

Actividad docente:

Desde el punto de vista docente, hemos introducido nuevos contenidos en la licenciatura y Máster de Física, así como en los últimos cursos de la licenciatura de Química. Estamos impartiendo en la Universidad de Zaragoza una asignatura de libre elección ("Física Biológica") y otras dos de Máster ("Elementos de Física Biológica" y "Teoría Cuántica de la Materia") donde contribuyen miembros del BIFI. En la Licenciatura en Química se imparte docencia en una asignatura obligatoria ("Estructura Atómica y Enlace", tercer curso), una asignatura troncal ("Química Física Avanzada", cuarto curso) y una optativa ("Teoría de la Estructura y Reactividad Química", cuarto curso)) así como en el programa oficial de Posgrado en Investigación Química ("Herramientas para la Investigación", "Espectroscopia avanzada" y "Química Teórica y Computacional").

Estabilidad y plegamiento de proteínas (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 ha instalado en el Instituto. Así mismo, hemos iniciado un proyecto de desarrollo de software de simulación de dinámica molecular de proteínas en el marco de un convenio entre la Universidad de Zaragoza y la empresa Plebiotic SL. También hemos implementado una aplicación web para el cálculo de exposiciones al disolvente de proteínas desplegadas.

Por otro lado hemos avanzado en el desarrollo de técnicas experimentales de identificación y mejora de compuestos con actividad farmacológica (inhibidores, estabilizadores, desagregantes, etc) y **extendido cinco patentes nacionales a USA, EU, Canadá y Japón**. El desarrollo de tres de estas patentes está siendo financiado por la Fundación Genoma España y el de otra de ellas por la empresa JANUS Development, en el marco de sendos convenios con la Universidad de

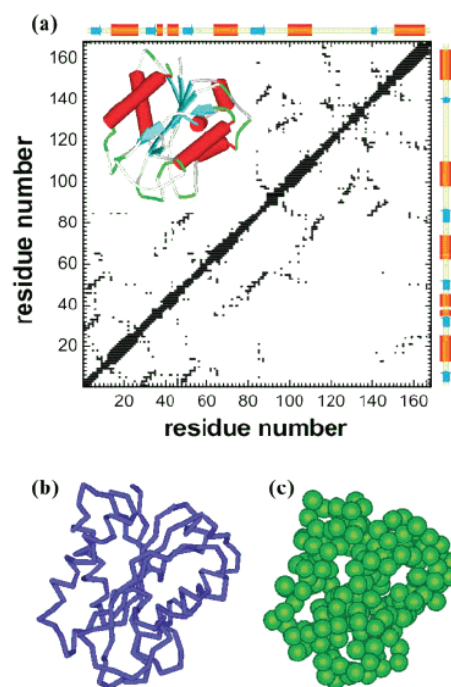


Figure 1

(a) Contact map for the apoflavodoxin structure, computed from the PDB file 1FTG. Part of the upper triangle contacts are hidden by a cartoon representation of the protein structure. The secondary structure elements, sketched along the axes, are taken from the header of the PDB file. (b) α -carbon trace of the native structure. (c) Native structure represented as it is used in the simulation model, with a bead per residue, centered at its α -carbon, depicted at a size corresponding to its repulsive core. The model does not differentiate between elements of secondary structure, and therefore no specific coloring method has been used in panels (b) and (c).

Zaragoza. Asimismo estamos desarrollando un proyecto financiado por el Programa Aragonés de Medicina Regenerativa encaminado a la identificación de compuestos con actividad apoptótica y de diferenciación celular.

Igualmente hemos continuado nuestras investigaciones básicas sobre la estabilidad y el plegamiento de las proteínas con especial atención a las conformaciones parcialmente desplegadas.

Interacción proteína-ligando (Protein-ligand interaction, docking and screening). Coordinador Adrián Velázquez.

Desarrollo de Inhibidores Enzimáticos

Actualmente no existe una terapia molecular específica, eficaz y carente de efectos secundarios para la Hepatitis C. La enzima NS3 ha sido confirmada como una diana terapéutica válida. Existen actualmente inhibidores experimentales, pero no hay aún inhibidores en fase pruebas clínicas. Para desarrollar inhibidores eficaces de la proteasa NS3 se empleará y extenderá la estrategia establecida mediante el estudio de los inhibidores de la proteasa HIV-1 (Dr. E. Freire, Johns Hopkins, USA), que integra información termodinámica (calorimetría), integración estructural (cristalografía y NMR) e información genética (análisis de bases de secuencias) en el proceso de optimización. Se está estudiando el equilibrio conformacional de la proteasa NS3 y su interacción con cofactores (NS4A, ión zinc) y sustratos, así como su mecanismo de activación alostérica inducida por la proteína viral NS4A. El objetivo es la identificación de pequeños compuestos que actúen como inhibidores competitivos (bloqueando el sitio de unión del sustrato) o como inhibidores alostéricos (bloqueando el sitio de unión de la proteína NS4A).



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. Esta metodología ha sido aplicada con éxito en la identificación de ligandos inhibidores de flavodoxina de *Helicobacter pylori* (microorganismo patógeno responsable de la úlcera de estómago), en colaboración con el Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI), y ligandos rescatadores de función de fenilalanina hidroxilasa (enzima implicada en fenilketonuria), en colaboración con Dra. Aurora Martínez (Universidad de Bergen, Noruega).

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). Se están realizando estudios termodinámicos de interacciones en proteínas en diferentes sistemas biológicos: flavodoxina y receptor de LDL en colaboración con el Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI), ferredoxina-NADP⁺ reductasa y FAD sintetasa en colaboración con la Dra. Milagros Medina (Universidad de Zaragoza y BIFI).

Enfermedades Conformationales.

En colaboración con el Dr. Javier Sancho (Universidad de Zaragoza y BIFI) estamos investigando una enfermedad conformacional muy usual (hipercolesterolemia humana) que es causada por mutaciones en el receptor de LDL que des-

tabiliza los módulos responsables de la interacción con las lipoproteínas. Se está realizando una caracterización exhaustiva de la interacción entre el receptor de LDL y cationes, en particular calcio, importante para su función biológica, y magnesio, junto con simulaciones de dinámica molecular. Posteriormente se llevará a cabo un proceso de cribado experimental de ligandos estabilizantes.

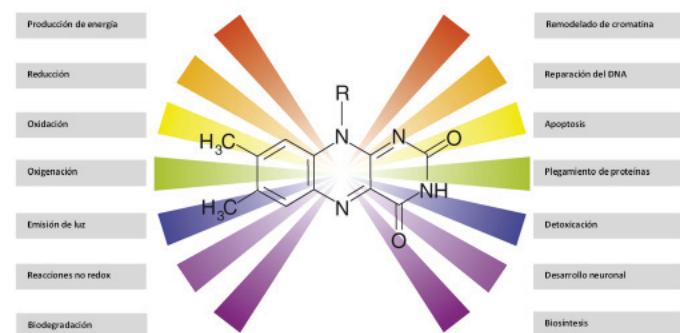
Cooperatividad de Unión en Proteínas.

Los fenómenos cooperativos en la unión a proteínas son la base de la regulación de la función de proteínas, 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 la Dra. Milagros Medina (Universidad de Zaragoza y BIFI). También se están estudiando interacciones cooperativas homotrópicas en proteínas mediante colaboraciones con diversos grupos de investigación.



Interacción proteína-proteína y transferencia de electrones (Protein-protein interaction and electron transfer) Coordinadora Milagros Medina.

Las proteínas adoptan una estructura tridimensional relacionada con su función, la cual en muchos casos está regulada mediante la interacción con otras moléculas. El FMN y el FAD, formas biológicamente activas de la riboflavina (RF, Vitamina B2), desempeñan papeles críticos en flavoproteínas y flavoenzimas que intervienen en un gran número de procesos celulares. Estudiamos varios sistemas biológicos dependientes de flavoproteínas y flavoenzimas que presentan interés



para su aplicación en las industrias química, biotecnológica, farmacológica, e incluso biomédica. Nuestra investigación se centra tanto en el estudio de los mecanismos de reconocimiento proteína-proteína y proteína-ligando, como en los procesos de transferencia de electrones e hidruro. La combinación de estudios experimentales de bioquímica y biofísica clásicas, con metodologías computacionales en la investigación de la físico-química de los sistemas dependientes de interacciones proteína-proteína y proteína-ligando en el marco de una aproximación multidisciplinar de Biología Estructural, proporciona

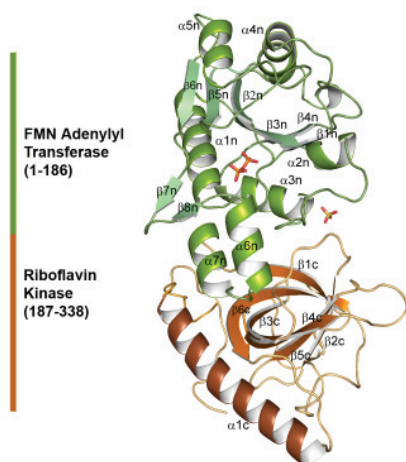
un importante avance en su conocimiento, comprensión y utilización con fines económicamente rentables o terapéuticos.

La FAD sintetasa (FADS).

El primer paso en la síntesis de FMN es la fosforilación de RF. Posteriormente el FAD es sintetizado a partir de FMN, en un proceso de adenilación. Mamíferos y levaduras utilizan dos enzimas diferentes, pero la mayoría de los microorganismos utilizan un enzima bifuncional, la FAD sintetasa (FADS). Esta FADS es una riboflavina quinasa (RFK) y una FMN adeniltransferasa (FMNAT).

Nuestra caracterización de la FADS del modelo de patógeno *C. ammoniagenes* (CaFADS) ha demostrado la existencia de dos sitios activos que unirían cada uno de ellos una molécula de flavina y una de ATP. Hemos resuelto la estructura tridimensional de CaFADS, que revela por primera vez la presencia de una estructura cuaternaria, dos trímeros ordenados en un hexámero. Cada monómero resulta plegado en dos dominios separados y relacionados con cada una de las actividades. No se dispone de una visión experimental



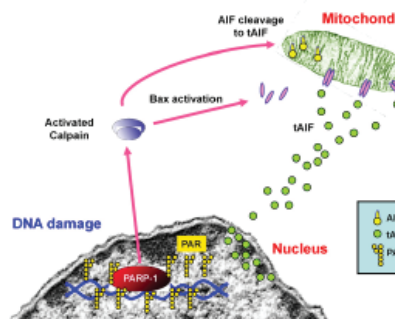


de la interacción con los sustratos, pero hemos propuesto un modelo e identificado una serie de residuos críticos en los centros activos.

El estudio de las actividades RfK y FMNAT ha despertado en los últimos años un notable auge en mamíferos, levaduras e incluso plantas, revelando características estructurales y funcionales diferenciales, y convirtiendo a la FADS procariótica en una potencial diana terapéutica. Su inhibición selectiva mediante un fármaco inocuo para sus homólogos eucariotas debe explorarse para el tratamiento de enfermedades producidas por bacterias patógenas. Las primeras etapas de este proceso son aumentar el conocimiento estructural y funcional de la enzima bifuncional.

La función de oxido-reducción del factor de inducción de apoptosis humano (hAIF)

AIF es una flavoproteína presente en todos los reinos primarios y que comparte homología con diferentes familias de reductasas. Su liberación del espacio intermembrana de la mitocondria y translocación nuclear producen fragmentación del DNA. Por tanto, AIF participa en una ruta de muerte celular programada independiente de caspasas. AIF presenta una actividad oxidoreductasa a través de su cofactor FAD, existiendo cierta controversia sobre su relación con el papel de AIF en apoptosis. AIF se ha relacionado también con la integridad de algunos de los complejos proteicos de la cadena de transporte de electrones durante la fosforilación oxidativa. Así, AIF parece presentar un papel dual en el ciclo de vida y muerte celular, pero pocos trabajos se han dedicado al estudio de sus propiedades redox y su actuación a nivel molecular. Estudios en el enzima de ratón indican que AIF resulta reducido por NADH con la aparición de especies de transferencia de carga y una serie de cambios conformacionales que incluyen la producción de un dímero. Estas observaciones sugieren una regulación del proceso de oxido-reducción, y por tanto una relevancia fisiológica. Estamos abordado la caracterización a nivel molecular del proceso de oxido-reducción de AIF humana, incluyendo el mecanismo de la transferencia de hidruro y el análisis del papel de los residuos del entorno del FAD. Pretendemos identificar qué podría ser el aceptor de electrones de AIF, conocer si la función redox está vinculada a la apoptosis e identificar compuestos que modulen su actividad.

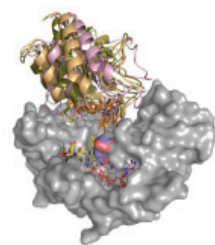
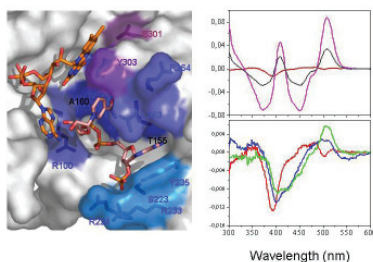


Flavoproteínas y flavoenzimas de oxido-reducción. Ferredoxina-NADP+reductasas (FNR) fotosintéticas y bacterias

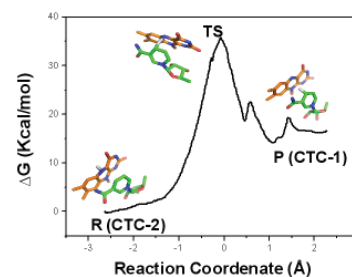
Aunque la función fotosintética fue la primera relacionada con la FNR, flavoproteínas con actividad FNR se han descrito en cloroplastos, bacterias fototróficas y heterotróficas, apicoplastos, y mitocondrias animales y de levaduras.

La cadena de transporte de electrones fotosintética. Durante la fotosíntesis, la ferredoxina (Fd) recibe electrones del Fotosistema I (PSI), para cederlos a la FNR que reduce NADP+ a NADPH. Se establece una cadena de transporte electrónico mediante la formación de un complejo ternario de vida transitoria, Fd:FNR:NADP+. Algunos organismos sintetizan flavodoxina (Fld), que sustituye a la Fd. Esto ha permitido estudiar comparativamente los parámetros que determinan

el reconocimiento entre proteínas, determinar residuos claves en estas interacciones, demostrar que el complejo FNR:Fd es más específico que el FNR:Fld y que el dipolo de la Fld la orienta generando un conjunto de orientaciones relativas con FNR que contribuye a la transferencia de electrones. Es interesante ahora analizar la eficiencia de cada una de estas orientaciones relativas mediante métodos teóricos, para comprobar si más de una orientación corresponde con la eficiencia observada experimentalmente.



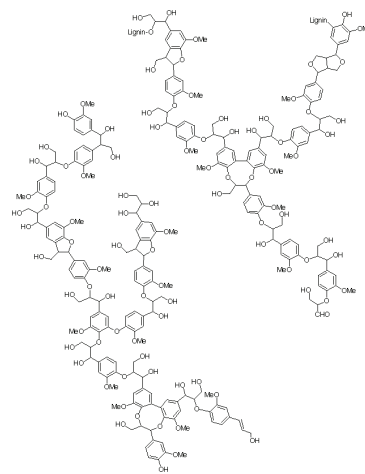
El mecanismo de reducción de FNR por NADPH ha sido estudiado como modelo para el estudio del mecanismo catalítico de enzimas de su familia. Los parámetros cinéticos y de interacción para el proceso en ambos sentidos se han determinado en diferentes condiciones para el enzima nativo y una serie de mutantes que modulan la condición de equilibrio y las velocidades de transferencia de hidruro o deuterio. Esto ha permitido proponer una serie de residuos implicados en la localización del anillo de nicotinamida en el centro activo y, sugerir que existe un importante componente de efecto túnel en este proceso. Un aspecto clave de los procesos de transferencia de hidruro que implican flavoreductasas es la interacción que debe producirse en el complejo catalíticamente competente entre los anillos de isoaloxazina y nicotinamida de NAD(P)⁺/H. Los aminoácidos aromáticos que emparejan a la isoaloxazina hacen difícil el acercamiento del anillo de nicotinamida en la FNR. Se propone un desplazamiento de la Tyr303, pero no disponemos de una imagen para esta interacción. Por el momento, el estudio se ha realizado mediante técnicas computacionales para el mutante Tyr303Ser con NADP⁺, a partir de una estructura cristalina que localiza los anillos reactivos en una posición sugerida como la reactiva. Además, de obtener información sobre la dinámica de la interacción enzima-coenzima, se ha descrito mediante QM/MM el proceso de transferencia de hidruro, estando los parámetros teóricos de acuerdo con la baja eficiencia en el proceso redox observada experimentalmente. Queda ahora analizar la proteína nativa, desentrañando cómo tiene lugar el movimiento propuesto para la cadena lateral de la Tyr303 para que se produzca el complejo catalíticamente competente.



NADPH-flavodoxina reductasas (FPR) Bacterianas: Las FPRs bacterianas exhiben eficiencias catalíticas pobres con respecto a las enzimas fotosintéticas. Esto se ha relacionado con el hecho de que su principal función es transferir electrones a reacciones biosintéticas donde la velocidad es poco crítica. Estas FPRs presentan diferencias estructurales con respecto a las plastídicas en su extremo C-terminal y en la interacción con el FAD. Su estudio comparativo con las FNRs plastídicas permite plantear hipótesis interesantes sobre los mecanismos de regulación de la eficiencia catalítica, así como del propio mecanismo de acción. La FPR de *Rhodobacter capsulatus* está involucrada en respuesta al estrés oxidativo y presenta una extensión en el C-terminal. Pese a esta región, transfiere hidruro con el coenzima mediante un mecanismo de aproximación similar al de las enzimas plastídicas. La caracterización de los procesos de mutantes de esta FPR en el C-terminal mediante métodos en estado pre-estacionario nos está permitiendo identificar el papel de diferentes regiones de estas proteínas en la modulación de su eficiencia catalítica, interacción con los sustratos y mecanismo de transferencia de hidruro.

Oxidasa: el sistema de la aril-alcohol oxidasa de *Pleurotus enryngii*

La degradación de la lignina es un proceso fundamental para el reciclaje del carbono fijado en los ecosistemas terrestres, donde la lignina protege a los polisacáridos de las plantas del ataque microbiano. Este proceso representa también un papel central en la utilización industrial de la biomasa ligno-celulósica para la producción de materiales reciclables, productos químicos y fuel para futuras bio-refinerías. Algunos basidiomicetos lignolíticos contienen, además de peroxidasas, diferentes tipos de oxidasas que proporcionan el H₂O₂ requerida en la biodegradación de lignina. Entre ellas se encuentra la aril-alcohol oxidasa (AAO). Con el grupo del Dr. Martínez, C.I.B., hemos caracterizado la cinética enzimática de AAO en estado estacionario y pre-estacionario, indicando que AAO cataliza la deshidrogenación oxidativa de alcoholes y aldehídos aromáticos con una amplia especificidad, con la reducción concomitante de O₂ a H₂O₂. Esto ocurre a través de un proceso de transferencia de hidruro en el cual los enlaces O-H y C_α-H se rompen simultáneamente en el estado de transición. Se ha iniciado el análisis del papel de los residuos del centro activo en la catálisis mediante el empleo de mutantes sitio dirigidos, con objeto de determinar la/s base/s catalíticas que deben activar la reacción. La comprensión bioquímica y estructural de la actividad de la AAO



La degradación de la lignina es un proceso fundamental para el reciclaje del carbono fijado en los ecosistemas terrestres, donde la lignina protege a los polisacáridos de las plantas del ataque microbiano. Este proceso representa también un papel central en la utilización industrial de la biomasa ligno-celulósica para la producción de materiales reciclables, productos químicos y fuel para futuras bio-refinerías. Algunos basidiomicetos lignolíticos contienen, además de peroxidasas, diferentes tipos de oxidasas que proporcionan el H₂O₂ requerida en la biodegradación de lignina. Entre ellas se encuentra la aril-alcohol oxidasa (AAO). Con el grupo del Dr. Martínez, C.I.B., hemos caracterizado la cinética enzimática de AAO en estado estacionario y pre-estacionario, indicando que AAO cataliza la deshidrogenación oxidativa de alcoholes y aldehídos aromáticos con una amplia especificidad, con la reducción concomitante de O₂ a H₂O₂. Esto ocurre a través de un proceso de transferencia de hidruro en el cual los enlaces O-H y C_α-H se rompen simultáneamente en el estado de transición. Se ha iniciado el análisis del papel de los residuos del centro activo en la catálisis mediante el empleo de mutantes sitio dirigidos, con objeto de determinar la/s base/s catalíticas que deben activar la reacción. La comprensión bioquímica y estructural de la actividad de la AAO

es de interés para su aplicación en procesos industriales de bioremediación basados en mecanismos naturales de biodegradación de lignina.

Interacción Proteína-DNA y regulación genética (Protein-DNA interaction and genetic regulation). Coordinadora: Maria F. Fillat .

Las proteínas de unión a DNA desempeñan funciones cruciales para la perpetuación, conservación y regulación de la información génica. Entre ellas, los interruptores genéticos o factores de transcripción se encargan de modular la expresión de grupos de genes mediante la transducción de diferentes señales que pueden actuar como efectores de la interacción DNA-proteína o modificando postraducionalmente al interruptor genético. Por otra parte, la regulación de los propios factores de transcripción suele ser bastante compleja y es frecuente la cooperación entre ellos.

La investigación realizada durante los últimos años sobre la familia de reguladores Fur (ferric uptake regulator) en cianobacterias ha dado lugar al desarrollo de dos líneas de investigación



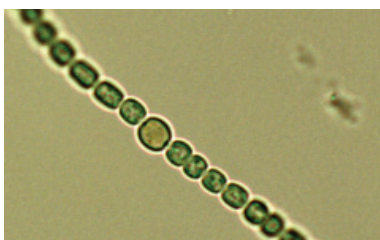
Caracterización estructural y funcional de reguladores transcripcionales de la familia Fur en cianobacterias (coordinadora: María F. Fillat)

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 patogenicidad 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.

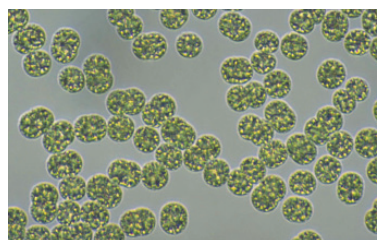
Identificación y caracterización de proteínas Fur en cianobacterias.

Para ello se han tomado como modelos la cianobacteria filamentososa fijadora de nitrógeno *Anabaena* PCC 7120 y la estirpe tóxica, no fijadora *Microcystis aeruginosa* PCC 7806. En ambos casos se han identificado tres parálogos denominados FurA, FurB y FurC.

En colaboración con el Dr. Luis Angel Inda (BIFI), se ha llevado a cabo un estudio sistemático de los genes anotados como "ferric uptake regulator" en todas las cepas de cianobacterias cuyo genoma está liberado. En todos los casos se



Anabaena sp. PCC 7120



Microcystis aeruginosa PCC 7806

han encontrado varios parálogos Fur en la misma cianobacteria, que se agrupan en cuatro clados diferentes, que probablemente desempeñan distintas funciones.

Estudio de la interacción Fur-DNA

El modo de actuación propuesto para Fur es el de un represor clásico que utiliza Fe^{2+} como co-represor para unirse a las secuencias de reconocimiento (fur-boxes o iron-boxes) presentes en los promotores de sus genes-diana. Este modelo no es tan sencillo y hemos demostrado la intervención de otros factores como el estado redox de las cisteínas, la unión a hemo y la interacción con otros reguladores. Así mismo, en colaboración con los Dres. Adrián Velazquez y Olga Abian, utilizando calorimetría isotérmica de titulación se han identificado dos sitios de unión a metal en FurA de *Anabaena* sp. PCC 7120, uno de los cuales correspondería al metal co-represor y el otro podría tener carácter estructural. La interacción de FurA y FurB con el DNA también se ve afectada por la presencia del parálogo FurC.

Caracterización de redes reguladoras mediadas por Fur

Se ha demostrado la participación de Fur en las rutas de modulación del metabolismo nitrogenado a través de su interregulación con NtcA y el solapamiento de ambos regulones. Actualmente se está investigando la posible implicación de Fur en otras redes reguladoras mediante la generación de un mutante de sobreexpresión en *Anabaena* PCC 7120.

Regulación del regulador

La expresión de Fur está estrictamente controlada en cada una de las etapas del flujo de información génica. (Figura 1). Además de los efectores que modulan su interacción con el DNA, mencionados anteriormente y su interrelación con otros reguladores, nuestro grupo identificó en 2006 el primer RNA antisentido descrito para un regulador Fur. Este RNA antisentido está codificado en un dicistrón junto con la proteína de membrana Alr1690. Su delección produce un incremento de la expresión de Fur y severas alteraciones en el metabolismo fotosintético y la ultraestructura de la cianobacteria (Figura 2).

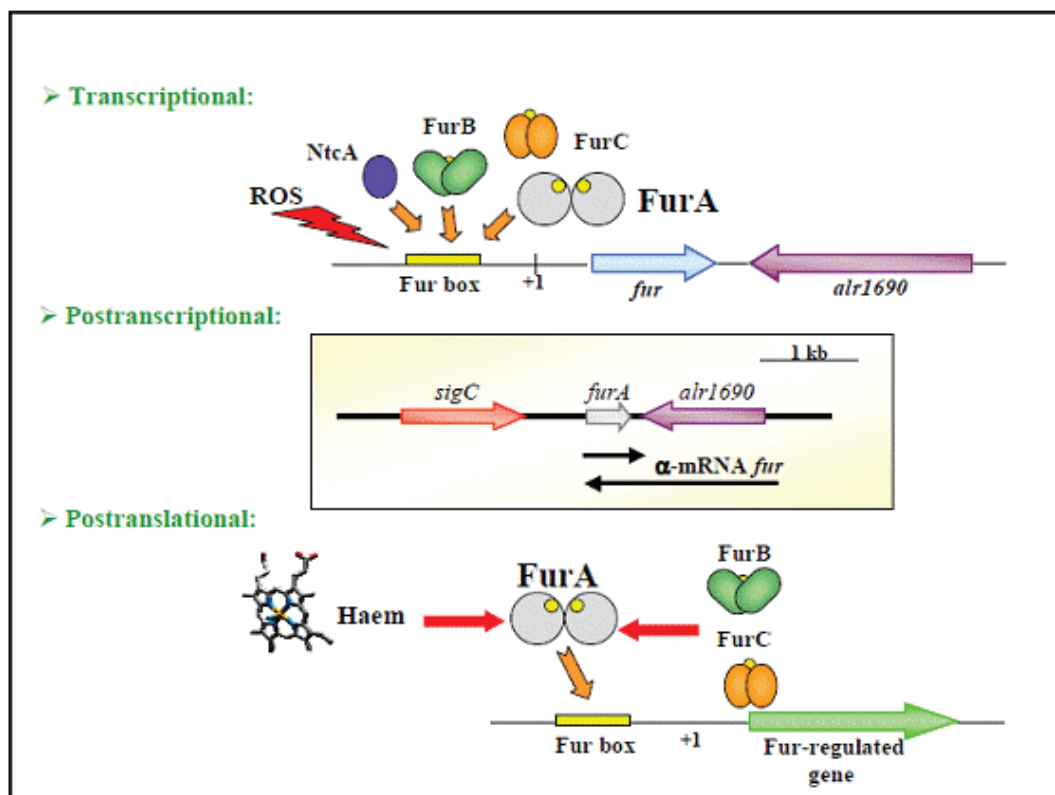


Figura 1. Regulación de FurA en *Anabaena* sp. PCC 7120

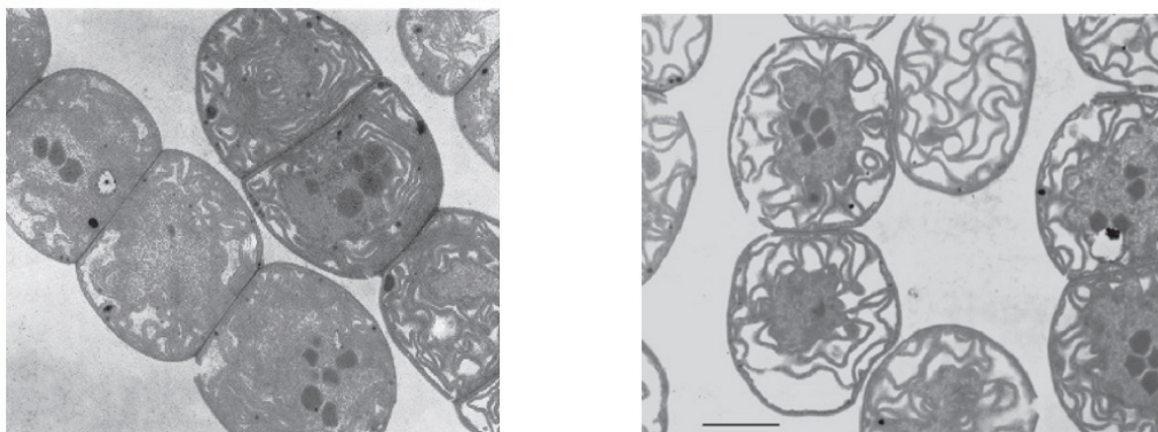


Figura 2. Ultraestructura de *Anabaena* sp. PCC 7120 (izquierda) y del mutante de delección *alr1690-α furA* (derecha).

Aplicaciones biotecnológicas de péptidos producidos por cianobacterias (coordinadora: María Luisa Peleato)

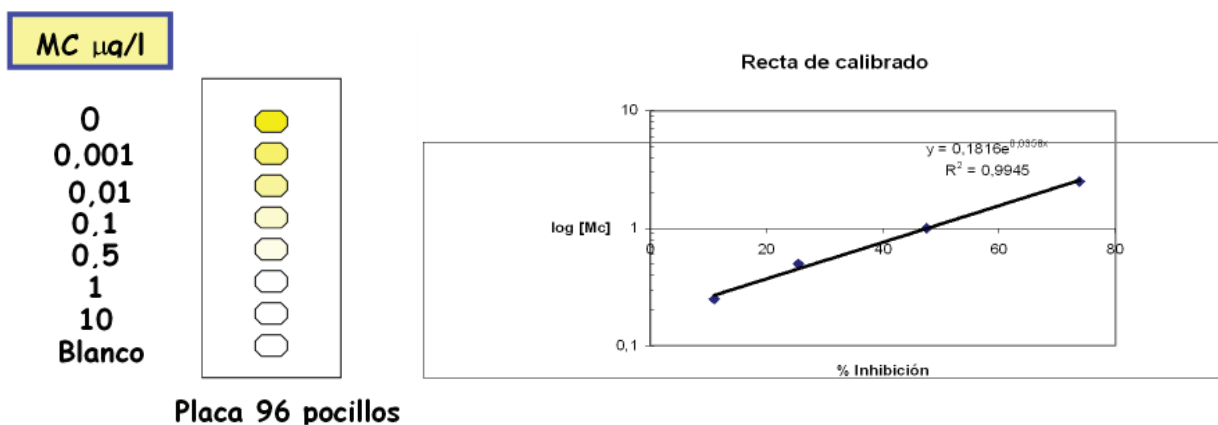
La experiencia en conocimientos sobre metabolitos secundarios de cianobacterias nos permite desarrollar aspectos aplicados de interés biotecnológico en colaboración con varias empresas aragonesas.

- Desarrollo de test de detección y valoración de péptidos tóxicos
- Detrucción de péptidos tóxicos

Durante este último año se ha llevado trabajo encaminado a mejorar y ampliar la utilidad de un kit encaminado a detectar y cuantificar microcistinas y nodularinas en aguas. Este kit que inicialmente se planteó con un formato en placa microtiter, se ha adaptado también a un formato microtubo.

El producto desarrollado se basa en la propia toxicidad de los péptidos, que inhiben a protein-fosfatasa de eucariotas. Se trata de un bioensayo in vitro, y tiene la ventaja frente a otras opciones, de no mostrar falsos negativos, y detectar la toxicidad de las muestras inequívocamente. Los falsos positivos pueden ser fácilmente descartados. Se trata además de un método que no requiere tecnología ni formación sofisticada, y se ha calibrado en los márgenes de toxina indicados por la legislación Española, y que comparten gran cantidad de países europeos y no europeos.

El fundamento de la técnica se expresa en la siguiente figura, en la que se muestra una recta de calibrado con patrones de microcistina en el rango adecuado.



El kit esta siendo comercializado con los dos formatos indicados anteriormente y está ya siendo vendido en España, Europa y Norteamérica.

El formato comercial que presenta es el siguiente:



Laboratorio de Biología Celular

En este Laboratorio desarrolla su investigación un grupo encabezado por José Alberto Carrodegua Villar

Apoptosis y células madre

Apoptosis

Desde hace unos años trabajamos en la caracterización funcional de una proteína mitocondrial conocida como PSAP o MTCH1. Más recientemente hemos comenzado a trabajar también con su único homólogo conocido (Mimp o Mtch2).

PSAP/Mtch1 (presenilin 1-associated protein/mitochondrial carrier homolog 1) y Mimp/Mtch2 (met-induced mitochondrial protein/mitochondrial carrier homolog 2) son proteínas de la membrana externa mitocondrial implicadas en apoptosis. PSAP/Mtch1 se descubrió por su interacción con la presenilina 1, proteasa implicada en la enfermedad de Alzheimer, y posteriormente se describieron su actividad proapoptótica y su localización mitocondrial. Mimp/Mtch2 se identificó primero como una proteína cuya expresión se induce al ser activado el receptor Met por su ligando HGF/SF (hepatocyte growth factor/scatter factor) y posteriormente se describió que es una diana de la proteína tBid en la mitocondria, conectando las rutas apoptóticas extrínseca (receptores de muerte) e intrínseca (mitocondria). Una publicación muy reciente también ha implicado a Mch2 en el proceso de metástasis.

En nuestro grupo hemos descubierto que PSAP posee dos isoformas proapoptóticas que se localizan en la membrana externa mitocondrial y que ambas poseen dos dominios independientes con actividad proapoptótica. Además, PSAP puede inducir apoptosis en ausencia de las proteínas Bax y Bak, lo cual sugiere un mecanismo de acción a través del poro de transición de permeabilidad. Resultados nuestros más recientes han indicado que PSAP se encuentra en la mitocondria formando parte de complejos proteicos, posiblemente como un dímero.

Nuestra investigación se centra actualmente en la identificación de las proteínas que se asocian a PSAP en la mitocondria y en determinar cómo esas interacciones afectan a las actividades de las proteínas del complejo. Por otro lado, queremos averiguar cómo se regulan las actividades de PSAP y de Mtch2, analizando sus promotores, los factores de transcripción

que controlan su expresión y la presencia de posibles modificaciones posttraduccionales, así como la estabilidad de ambas proteínas.

La finalidad de este proyecto a más largo plazo no es solamente conocer la función de estas proteínas sino determinar las patologías en las que podrían participar debido a la alteración de su función.

Células madre, terapia celular y medicina regenerativa

El estudio de la diferenciación de células madre a tipos celulares concretos es esencial para la utilización de estas células en terapia celular y medicina regenerativa. Aunque en los últimos años se ha avanzado considerablemente en el estudio de la propagación y diferenciación de células madre, todavía se desconocen muchos de los factores implicados en estos procesos. Se han descrito diversos factores, tanto endógenos –factores de transcripción, por ejemplo- como exógenos –diversos compuestos químicos- que inducen diferenciación celular específica a partir de células pluripotentes o multipotentes. No obstante, son necesarios la identificación de nuevos compuestos químicos que induzcan esas diferenciaciones de manera precisa, la caracterización de los factores celulares sobre los que actúan esos compuestos y el conocimiento de las rutas de transducción de señales implicadas. Por otro lado, se sabe poco acerca del papel de la muerte celular programada en la proliferación y diferenciación de células madre. Sin embargo, este es un proceso necesario para la correcta proliferación de las células madre, al eliminar aquellas que acumulan daños irreparables y también para su diferenciación, eliminando células innecesarias. El conocimiento de estos procesos permitirá eliminar los problemas de formación de tumores o teratomas, para la utilización de estas células en terapia celular y en medicina regenerativa.

En este proyecto pretendemos continuar una línea de investigación enfocada a la identificación de compuestos químicos que inducen diferenciación celular específica a partir de células madre embrionarias de ratón, y también de otros que inducen muerte celular programada durante la proliferación y diferenciación de estas células. En particular, queremos identificar compuestos que inducen diferenciación a cardiomiocitos, considerando las aplicaciones clínicas del trasplante de cardiomiocitos generados in vitro. La diferenciación de estas células de forma eficiente in vitro, el control del potencial teratogénico de las células incorrectamente diferenciadas, y el conocimiento de la toxicidad y de la capacidad inductora de muerte celular o de proliferación incontrolada de diversos compuestos son esenciales para el éxito de estas terapias.

Pretendemos también comenzar a estudiar los mecanismos que sensibilizan especialmente a los cardiomiocitos a la muerte celular por hipoxia, factor importante en los infartos de miocardio.

El grupo de investigación

El grupo está actualmente formado por seis personas. Además del investigador principal, José A. Carrodegua, contamos con una investigadora postdoctoral financiada por el Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (I+CS), la Dra. Celia Conesa, quien trabaja en el proyecto de diferenciación y apoptosis en células madre. Entre los estudiantes, Angélica Ospina Correa, colombiana, comenzó su proyecto Máster en septiembre de 2008, habiéndolo defendido en septiembre de 2009 y trabajando ahora en su Tesis Doctoral; posee una beca de doctorado del Santander Central Hispano/Universidad de Zaragoza. Abraham Vázquez Mencos, de Guatemala, comenzó a trabajar en su proyecto Máster en febrero de 2008, y prevé defenderlo en febrero de 2009; cuenta con una beca de la Fundación Carolina. María Alejandra Nelo Bazán, de Venezuela, se incorporó al grupo en septiembre de 2009, con una beca de la Fundación Ayacucho, para realizar su Tesis Doctoral. Erandi Lira Navarrete, procedente de México, se incorporó al grupo en septiembre de 2009 y está realizando su proyecto Máster e intentando conseguir una beca. Los cuatro estudiantes trabajan en el proyecto de apoptosis con las proteínas PSAP y Mtch2.

Colaboramos con un grupo de investigación de la Universidad de Colonia en el campo de las células madre y hemos establecido contactos con diversos grupos de investigación internacionales para iniciar colaboraciones y participar en proyectos internacionales.

Financiación

El grupo dispone de financiación del MICINN y del I+CS. Hemos participado también en solicitudes de proyectos de colaboración internacional todavía no resueltos, un proyecto ACI-COLABORA con India, y una acción integrada con Alemania. Hemos agrupado también a diversos grupos de investigación de otros países para solicitar proyectos a la Comunidad Europea.

Productividad

El grupo ha publicado dos artículos en revistas internacionales sobre el proyecto de PSAP. Actualmente sólo hay un total de seis publicaciones a nivel mundial sobre esta proteína. Tenemos varias líneas de investigación abiertas, que esperamos aumenten la producción científica en breve. Hemos presentado resultados también en varios congresos nacionales e internacionales, y solicitado dos patentes.

3.4 Investigación. Proyectos de investigación.

EUROPEOS

Con gestión económica en Zaragoza:

Título: PIREGRID

Entidad Financiadora: UE (Interreg IV A – Programa Operativo de Cooperación Territorial España Francia Andorra)
Ref. EFA35/08

Duración: 2009-2012

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

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

Entidad Financiadora: UE (FP VII) EC211727

Investigador principal: Peter Kacsuk

Investigador principal (subcontrato Zaragoza) Alfonso Tarancón

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

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

Duración: 2008-2010

Investigador Principal: Robert Jones

Investigador principal (subcontrato Zaragoza): Alfonso Tarancón

Título: Global Approach to Brain Activity

Entidad Financiadora: UE

Duración: 2007-2009

Investigador Principal: Yamir Moreno (nodo Zaragoza)

Con gestión externa:

Título: Physics of Cooperation and Conflict.

Entidad Financiadora: Unión Europea (COST Actions).

Duración: 1/09/2008 - 31/08/2011.

Investigador principal: Peter Richmond (Representantes de España en el Management Committee: Maxi San Miguel y Angel Sánchez).

Título: Action for the science of complex systems and socially intelligent ICT (ASSYST).
Entidad Financiadora: 7 Programa Marco de la UE.
Duración: 1/1/2009 - 31/3/2012.
Investigador principal: Jeff Johnson (Angel Sánchez IP del grupo español).

Título: Fusion-GRID Proyecto de Fusión en EGEE-III (NA4)
Entidad Financiadora: Unión Europea. VII Programa Marco (EGEEIII)
Duración: 1/1/2008 – 31/12/2009
Investigador principal: Francisco Castejon (coordinador europeo)

Título: Proyecto EUFORIA - Joint Research Activity 1 (JRA1: Grid Codes)
Entidad Financiadora: VII Programa Marco Unión Europea (Facilities)
Duración: 1-1-2008 – 31-12-2010
Investigador principal: Francisco Castejon

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: Octubre 2007 - Septiembre 2010
Investigador principal: Dr. Milagros Medina

Título: Nuevas funciones de proteínas FUR (Ferric Uptake Regulator) en cianobacterias
Entidad Financiadora: Programa I+D, Ministerio de Educación y Ciencia (BFU2006-3454)
Duración: 2007-2009
Investigador principal: Maria Luisa Peleato Sánchez

Título: Desarrollo de un test rápido para la detección de microcistinas en aguas.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia (PET2006-0089)
Duración: 1/08/2007 – 2/08/2009
Investigador principal: Maria Luisa Peleato Sánchez

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: 1/10/2006 – 30/09/2009
Investigador principal: José A. Carrodegas

Título: Regulación de la actividad de proteínas proapoptóticas mitocondriales
Entidad financiadora: MICINN BFU2009-11800
Duración: 2009-2010
Investigador principal: José A. Carrodegas

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: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Entidad Financiadora: MICINN BFU2009-07508-E/BMC

Duración: 1/01/2010-31/12/2010

Investigador Principal: Javier Sancho

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 - CICYT. (CGL2006-00319/BOS)

Duración: 2006-2009

Investigador principal : P. Catalán

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 Cuánticos y Clásicos.

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

Duración: 2006-2009

Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita.

Título: Cooperación Hispano-Cubana en temáticas de Computación Avanzada

Entidad Financiadora: MICINN ACI-2009-1027)

Duración: 2009-2011

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Cooperación Hispano-Argentina en temáticas de Computación Avanzada

Entidad Financiadora: MICINN (ACI-2009-1033)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Acciones Complementarias Ibercivis

Entidad Financiadora: MICINN (005007011-7011-6-109)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Preparación de las solicitudes al Programa Marco del nodo del CECAM

Entidad Financiadora: MICINN FIS2009-06267-E/FIS

Duración: 2009

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

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

Entidad Financiadora: MICINN-FIS2009-12648-C03-02

Duración: 2009-2012
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Estudio de Fusión por Confinamiento Magnético en Ibercivis
Entidad Financiadora: 164-40 Convenio BIFI-CIEMAT
Duración: 2009-2010
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Calentamiento de Plasmas e Inducción de Corriente mediante NBI
Entidad Financiadora: Convenio CIEMAT 08/334
Duración: 2008-2009
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Espacio 3D en Pabellón de la Ciencia 2009
Entidad Financiadora: MICINN FCT-09-1625
Duración: 2009
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Implementación de estudios in vitro e in vivo de compuestos antiinfecciosos efectivos frente a *Helicobacter pylori* y el VHC (virus de la hepatitis C)
Entidad Financiadora: Instituto de Salud Carlos III
Duración: 2008-2011
Investigador principal: Olga Abián

Título: Separación/obtención de bioplaguicidas con fluidos supercríticos
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia – CTQ2009-14629-C02-02
Duración: 1/10/2009 – 30/09/2012
Investigador Principal: Jose Urieta
Participantes del BIFI: Víctor Polo Ortiz

Título: Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas y sistemas de muchos agentes
Entidad Financiadora: MICINN FIS2009-13364-C02-01
Duración: 2010-2012
Investigador Principal: Pierpaolo Bruscolini

Título: Evolucion multigenomica de las gramineas templadas (Pooideae, Poaceae). Biogeografía y filogeografía de especies modelo de pooideas (*Festuca*, *Anthoxanthum* s.l., *Brachypodium*, *Bromus*) en el viejo mundo
Entidad Financiadora: MICINN - CICYT. (CGL2009-12955-C02-01)
Duración: 2010-2012
Investigador Principal: P. Catalán (Huesca)

Título: Genética y ecología del paisaje de pastos subalpinos pirenaico-cantábricos (*Festuca*, Gramineae): Conservación de la biodiversidad y restauración vegetal.
Entidad Financiadora: Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino. Organismo Autónomo de Parques Nacionales. 059/2009
Duración: 2010-2012
Investigador Principal: P. Catalán (Huesca)

Título: Dinámica y Estructura de Sistemas Complejos.
Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. (FIS200801240).Duración: 2009- 2011.
Investigador Principal: Juan José Mazo Torres.

Con gestión externa:

Título: Modelización, simulación y análisis de sistemas complejos (MOSAICO).
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia, Proyectos Eje C-Consolider.
Duración: 1/10/2006 - 30/09/2011.
Investigador principal: Angel Sánchez.

Título: Teoría de juegos en redes sociales: Simulación y experimentos.
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Consolider Ingenio MATHEMATICA (i-math).
Duración: 1/01/2008 - 31/12/2009.
Investigador principal: Angel Sánchez.

Título: Red Temática "Dinámica y fenómenos colectivos de sistemas socioeconómicos".
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia, Acciones Complementarias.
Duración: 1/10/2008 - 31/12/2009.
Investigador principal: Angel Sánchez.

Título: Ingenio-MATHEMATICA (I-MATH).
Entidad Financiadora: Programa CONSOLIDER-INGENIO 2010 del Ministerio de Educación.
Duración: 1/10/2006 - 30/09/2011.
Investigador principal: Enrique Zuazua (hasta junio de 2008), Marco A. López Cerdá (desde junio de 2008).
Participante del BIFI: Angel Sánchez.

Título: Simulación del plegamiento y agregación de proteínas
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia (FIS2006-12781-C02-02)
Duración: 2007-2009
Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Título: Nanociencia Molecular
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia (CONSOLIDER CSD2007-00010)
Duración: 2007-2011
Investigador principal: Eugenio Coronado Miralles
Participante del BIFI: Antonio Rey Gayo

Título: "Dinámica y estructura de fluidos complejos y sus interfases (DEFICI)".
Entidad Financiadora: Ministerio Educación y Ciencia, FIS2007-65869-C03-03
Duración: 2008-2010
Investigador principal: Pep Español

Título: "Red Temática de Física Estadística y No-Lineal"
Entidad financiadora: Ministerio Ciencia y Tecnología, BFM2001-0290
Duración: 2008-2010
Investigador principal: P. Garrido
Participante del BIFI: Pep Español

Título: Biotecnología de la Interacciones Beneficiosas Planta Microorganismo.
Entidad Financiadora: MEC. VII Red Temática. (Acciones Complementarias)
Duración: 02/08/2007 - 1/08/2009
Investigador principal: Manuel Sánchez Díaz
Participante del BIFI: M. Fillat

Título: Red Temática Nacional PLEGAMIENTO, ESTABILIDAD E INGENIERIA DE PROTEINAS.
Entidad Financiadora: MICCIN

Duración: 1993-2010
Investigador Principal: Marta Bruix
Participantes del BIFI: Javier Sancho

Título: Aproximación asintótica de integrales y métodos de pasos fraccionarios: aplicaciones a la resolución de problemas de perturbación singular.

Entidad Financiadora: MEC-DGCT. MTM2007-63772.

Duración: 2008-2010.

Investigador principal: Juan Carlos Jorge Ulecia.

Participante del BIFI: José Luis Lopez García

Título: Complejidad en Materiales y Fenómenos de Transporte. (Proyecto Coordinado)

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia (Spain). FIS2006-08533-C03-01.

Duración: 2007-2009.

Investigador principal: Víctor Martín Mayor.

Título: Simulación y modelización de materiales complejos.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. FIS2009-12648-C03-01

Duración: 2010-2012.

Investigador Principal: Víctor Martín Mayor

Título: Spanish Ion Channel Initiative (CONSOLIDER project, CSD-2008-00005)

Entidad Financiadora: MCINN

Duración: 2009-2014

Investigador Principal: Antonio Ferrer-Montiel (del conjunto del Consolider total); José Luis Neira IP del grupo 4 (de los 35 que forman el consorcio)

Título: Proteómica en sistemas de fosforilación de azúcares en bacterias: una aproximación cristalográfica y espectroscópica (SAF2008-05742-C02-01).

Entidad Financiadora: MCINN

Duración: 2009-2011

Investigador Principal: José L. Neira

Título: Nuevo proyecto concedido oficialmente: "Teoría de Campos, Física de Partículas y Cosmología: Mecánica Estadística y Aplicaciones".

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. FIS2008-01323.

Duración: 1/1/2009 - 31/12/2011.

Investigador principal: Ramon Fernandez Alvarez-Estrada.

Título: Mecanismos del transporte turbulento en plasmas confinados magnéticamente y su descripción óptica.

Entidad Financiadora: M.E.C. Dirección General de Investigación. ENE2006-15244-C03-01

Duración: 2006-2009

Investigador principal: Luis García Gonzalo

Título: Incremento del potencial biotecnológico de cápsidas víricas y sus subunidades mediante su modificación por mutagénesis combinatorial".

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia BIO2006-00793

Duración: 2006-2009

Investigador principal: M.G. Mateu.

Título: Modificación de cápsidas víricas por ingeniería de proteínas, como una etapa en el desarrollo de nanocontenedores para la administración dirigida de fármacos.

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia y Tecnología. BIO2009-10092

Duración: 2010 - 2012.

Investigador principal: Mauricio García Mateu

Título: Orden, Ruido y Dinámicas Emergentes bajo Nolinearidades

Entidad Financiadora: MEC FIS2006-11452-C03-01

Duración: 1/12/2006 - 30/11/2009.

Investigador principal: José M. Sancho

Título: Modelos computacionales de sistemas químicos en fases condensadas: Cálculos QM/MM de reacciones en sistemas biológicos y en sólidos

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia – CTQ2006-15447-C02-01

Duración: 1/10/2006 – 30/09/2009

Investigador Principal: Juan Andrés Bort

Participantes del BIFI: Víctor Polo Ortiz

Título: Física estadística, teoría y simulación de sistemas complejos, y sus aplicaciones multi-disciplinarias

Entidad Financiadora: MICINN-FEDER, FIS2009-08451

Duración: 2009-2012

Investigador Principal: J. Marro

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: 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: Apoyo al proyecto PETRI "Desarrollo de un test rápido para la detección de microcistinas en aguas".

Entidad Financiadora: OTRI-ZEU INMUNOTEC (2009/0041)

Duración: 11/ 2008 –11/2009

Investigador principal: María Luisa Peleato Sánchez

Título: Identificación de cianobacterias potencialmente tóxicas y microorganismos patógenos en amebas de vida libre en aguas de Aragón

Entidad Financiadora: Diputación general de Aragón-DGA (2009/00372)

Duración: 10/ 2009 –10/2011

Investigador principal: María F. Fillat Castejón

Título: Grupo de Investigación de Excelencia: Física Estadística y No Lineal.
Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón (E19).
Duración: 2009.
Investigador principal: Luis Mario Floría Peralta.

Título: JANUS II
Entidad Financiadora: MICINN-DGA-Feder UNZA08-4E-020
Duración: 2009-2012
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: ARAGRID
Entidad Financiadora: MICINN-DGA-Feder UNZA08-4E-018
Duración: 2009-2012
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Supercomputador de Memoria Compartida BIFI-CECAM
Entidad Financiadora: MICINN-DGA-Feder UNZA08-4E-023
Duración: 2009-2012
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Acciones de soporte para el proyecto de Grid Regional ARAGRID
Entidad Financiadora: DGA PI065/08
Duración: Indefinida
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Técnico DGA Cluster Computación
Entidad Financiadora: Convenio DGA BSC
Duración: 2008-2011
Investigador Principal: José Félix Sáenz

Título: Convenio desarrollo de IBERCIVIS (Plataforma nacional de computación.)
Entidad Financiadora: Convenio DGA 69049
Duración: 2009
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Red Española de Supercomputación Caesaraugusta BSC
Entidad Financiadora: DGA Convenio 16434
Duración: 2008-2011
Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Grupo de Excelencia "Biocomputación y Física de Sistemas Complejos".
Entidad Financiadora: Gobierno de Aragón (E24/3)
Duración: 2009 - 2009
Investigador principal: Prof. Alfonso Tarancón

Título: Técnicos DGA Caesaraugusta
Entidad Financiadora: Convenio DGA CNS-RES
Duración: 2009
Investigador Principal: José Félix Sáenz

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 racional de compuestos bioactivos frente a cinco enfermedades humanas

Entidad Financiadora: DGA

Duración: 2009 -2010

Investigador principal: Javier Sancho Sanz

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: Equilibrio conformacional de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Estados no nativos e identificación de un nuevo tipo de inhibidores alostéricos

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón (PI044/09)

Duración: 2009-2011

Investigador Principal: Adrián Velázquez Campoy

Título: Identificación de compuestos químicos que inducen diferenciación celular específica o muerte celular apoptótica en células madre embrionarias de ratón. PIPAMER 08/17.

Entidad Financiadora: Instituto Aragonés de Ciencias de la salud

Duración: 26/9/2008-27/07/2010

Investigador Principal: José Alberto Carrodegua Villar

Con gestión externa:

Título: Modelización matemática y simulación numérica en ciencia y tecnología (SIMUMAT).

Entidad Financiadora: Programa de actividades entre grupos de la Comunidad Autónoma de Madrid.

Duración: 1/01/2006 - 31/12/2009.

Investigador principal: Enrique Zuazua (hasta noviembre de 2008), Manuel de León (desde noviembre de 2008).

Participante del BIFI: Angel Sánchez.

Título: Análisis Asintótico y Numérico de Problemas de Perturbación Singular y Aplicaciones".
Entidad Financiadora: Gobierno de Navarra, Res. 07/05/2008
Duración: 01/01/2009 - 30/12/2010
Investigador principal: Ricardo Lopez

Título: Métodos asintóticos y numéricos para problemas de perturbación singular y aplicaciones.
Entidad Financiadora: Gobierno de Navarra. Ref 2008/2301.
Duración: 1/7/2008 - 30/6/2010.
Investigador principal: José Luis Lopez Garcia..

Título: Estudio biogeográfico del área de Doñana y caracterización de especies singulares
Entidad financiadora: Junta de Andalucía. Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa - Proyecto 2006-8474
Duración: 2007 - 2009
Investigador principal : B. Valdés
Participante del BIFI: P. Catalán

Título: Propiedades mecánicas, eléctricas y catalíticas de nanoobjetos: Síntesis, caracterización y modelización.
Entidad Financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid S-0505/MAT/0303
Duración: 2006-2009
Investigador principal: M.G. Mateu (subproyecto).

Título: Proteómica en sistemas de fosforilación de azúcares en bacterias: una aproximación cristalográfica y espectroscópica (ACOMP-2009-185).
Entidad Financiadora: Generalitat valenciana
Duración: 2009
Investigador Principal: José L. Neira

Título: Modelos fisicomatemáticos de procesos cooperativos en el cerebro y sus aplicaciones en biología, neurociencia y computación
Entidad Financiadora: Junta de Andalucía, FQM-01505 (programa "Proyectos de Excelencia")
Duración: 2007-2010
Investigador Principal: J. Marro

UNIVERSIDADES

Con gestión en Zaragoza:

Título: Estudios estructurales y espectroscópicos mediante difracción de rayos X y EPR de proteínas implicadas en sistemas biológicos.
Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza.
Duración: 2009
Investigador Principal: Marta M^a Martínez Júlvez.

Con gestión externa:

Título: Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas
Entidad Financiadora: UCM – Banco Santander
Código: GR58/08 (Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación)
Duración: 2009-2010
Investigador Principal: Antonio Rey Gayo

OTRAS ENTIDADES

Con gestión en Zaragoza:

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: Análisis de nueva algorítmica para acelerar la simulación de plegamiento de proteínas

Entidad Financiadora: Plebiotic S.L. 2009/0349

Duración: 1/01/2009-31/12/2010

Investigador Principal: Javier Sancho

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

Título: Desarrollo de un módulo de optimización de distribución logística

Entidad Financiadora: Schnell Software (OTRI)

Duración: 2009

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Sistema de Gestión Avanzada de recursos hídricos destinados al regadío

Entidad Financiadora: Spuderg (OTRI)

Duración: 2009

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Estudio de distribuciones estadísticas

Entidad Financiadora: STL (OTRI)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Creación supercomputador ciudadano nacional IBERCIVIS

Entidad Financiadora: Convenio Ibercaja

Duración: 2007-2009

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Royalties por la explotación comercial de la patente US-6,781,034 "Stress resistant plants" y de su familia de patentes

Entidad Financiadora: Plant Bioscience Limited (2009/0364)

Duración: 07/ 2009 - 12/2012

Investigador principal: María F. Fillat Castejón

Con gestión externa:

Título: Diffusion optimization in social networks.

Entidad Financiadora: IBM.

Duración: 1/04/2007 - 31/03/2009.

Investigador principal: Esteban Moro.

Participante del BIFI: Angel Sánchez.

Título: Diseño racional y combinatorial de péptidos inhibidores del ensamblaje del virus de la inmunodeficiencia humana para el desarrollo de agentes anti-VIH".

Entidad Financiadora: FIPSE, Fundación para la investigación y la prevención del SIDA en España, Exp. 36557/06

Duración: 2007-2010

Investigador principal: M.G. Mateu, Jose L. Neira

Título: Teoría Estadística de Campos

Entidad Financiadora: Banco de Santander-Universidad Complutense

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: Luis Antonio Fernández Pérez

3.5 Publicaciones Científicas.

Hay que resaltar la diversidad y calidad de las publicaciones, el que algunas de ellas estén entre las más citadas de nuestra universidad y el hecho de que la mayoría de las mismas tengan carácter multidisciplinar.

Artículos publicados por miembros del BIFI en 2009 (que citan expresamente al BIFI 139)

1. Abbasbandy S., J.L. Lopez and R. Lopez-Ruiz. Formulas for the amplitude of the van der Pol limit cycle. Scholarly Research Exchange. 2009 in press
2. Abbasbandy S., J.L. Lopez and R. Lopez-Ruiz. The homotopy analysis method and the Lienard equation. Int. J. Comp. Math. 2009 in press
3. Abian O., J.L. Neira and A. Velazquez-Campoy. Thermodynamics of Zinc Binding to Hepatitis C Virus NS3 Protease: A Folding by Binding Event. Proteins 2009 77:624-636
4. Alias M., S. Ayuso-Tejedor, J. Fernandez-Recio, C. Cativiela and J. Sancho. Helix propensities of conformationally restricted amino acids. Non-natural substitutes for helix breaking proline and helix forming alanine. Org. Biomol. Chem. 2009 in press
5. Alonso J.L., A. Cruz, J.C. Cuchi and A. Tarancon. Bayesian Inference for Pedestrians. In Mathematical Physics and Field Theory: Julio Abad, in Memoriam. Eds. M. Asorey, J.V. Garcia-Esteve, M.F. Rañada and J. Sesma. Prensas Universitarias de Zaragoza, 2009
6. Andrade X., A. Castro, D. Zueco, J.L. Alonso, P. Echenique, F. Falceto and A. Rubio. A modified Ehrenfest formalism for efficient large-scale ab initio molecular dynamics. J. Chem. Theor. Comput. 2009 5:728-742

7. Aniello P., J. Clemente-Gallardo, G. Marmo and G. Volkert. Classical tensors and quantum entanglement I: pure states. *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* 2009 in press
8. Arias-Moreno X., S. Cuesta-Lopez, O. Millet, J. Sancho and A. Velazquez-Campoy. Thermodynamics of Protein-Cation Interaction: Ca+2 and Mg+2 Binding to the Fifth Binding Module of the LDL Receptor. *Proteins* 2009 doi:10.1002/prot.22619
9. Ayuso-Tejedor S., S. Nishikori, T. Okuno, T. Ogura and J. Sancho. FtsH cleavage of non-native conformations of proteins. *J. Struct. Biol.* 2009 in press
10. Belletti F., A. Cruz, L. A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, M. Guidetti, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Perez-Gaviro, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancon, R. Tripiccone and D. Yllanes. Nonequilibrium spin glass dynamics with JANUS. *AIP Conference Proceedings*. 2009 Volume 1091:228-230
11. Belletti F., A. Cruz, L.A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, M. Guidetti, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Perez-Gaviro, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancon, R. Tripiccone, D. Yllanes. An in-depth view of the microscopic dynamics of Ising spin glasses at fixed temperature. *J. Stat. Phys.* 2009 135:1121-1158
12. Belletti F., M. Cotallo, A. Cruz, L. A. Fernandez, A. Gordillo, M. Guidetti, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, A. Muñoz-Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Perez-Gaviro, M. Rossi, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancon, R. Tripiccone, J.L. Velasco. JANUS: an FPGA-based System for High Performance Scientific Computing. *Comput. Sci. Eng.* 2009 11:48-58
13. Boccaletti S., V. Latora and Y. Moreno (Eds.). *Handbook of Biological Networks*, World Scientific, 2009, 450pp
14. Bortolotti A., I. Perez-Dorado, G. Goñi, M. Medina, J. Hermoso, N. Carrillo and N. Cortez. Coenzyme binding and hydride transfer in *Rhodobacter capsulatus* ferredoxin/ flavodoxin NADP+(H) oxidoreductase. *Biochim. Biophys. Acta - Proteins and Proteomics*. 2009 1794: 199-210
15. Calbet X. and R. Lopez-Ruiz. Extremum Complexity in the Monodimensional Ideal Gas: the Piecewise Uniform Density Distribution Approximation. *Physica A* 2009 388:4364-4378
16. Carrasco C., M. Douas, R. Miranda, M. Castellanos, J.L. Carrascosa, M.G. Mateu, M. Marques, and P.J. de Pablo. Action of capillary forces of water confined at the nanoscale during dessication of viruses. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2009 106:5475-5480
17. Castejon F., A. Gomez-Iglesias, A. Bustos, I. Campos, A. Cappa, M. Cardenas, L.A. Fernandez, L.A. Flores, J. Guasp, E. Huedo, D. Lopez-Bruna, I.M. Llorente, V. Martin-Mayor, R. Mayo, R.S. Montero, E. Montes, J.M. Reynolds, M. Rodriguez, A.J. Rubio-Montero, A. Tarancon, M. Tereshchenko, J.L. Vazquez-Poletti and J.L. Velasco. Grid Computing for Fusion Research. *Proceedings of the 3rd Iberian Grid Infrastructure Conference (IBERGRID)*, Valencia, Spain, 2009
18. Castejon F., D. Lopez Bruna, J. M. Reynolds, A. Tarancon, R. Valles and J.L. Velasco. Fusion Simulations, data visualization results and future requirements for the interactive grid infrastructure. *Ingrid 2009 Conference Proceedings*
19. Castejon F., J.L. Velasco, A. Lopez-Fraguas, A. Tarancon, J. Guasp, F. Tabares, M.A. Pedrosa, E. de la Cal and M.A. Ochoando. Flux-expansion divertor studies in TJ-II. *Nuclear Fusion* 2009 49:085019
20. Castro A., E. Rasanen, A. Rubio and E.K.U. Gross. Femtosecond laser pulse shaping for enhanced ionization. *Europhys. Lett.* 2009 87:53001

21. Clemente-Gallardo J. and G. Marmo. Towards a definition of Quantum Integrability. *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* 2009 6:129-172
22. Contreras-Moreira B., J. Sancho and V.E. Angarica. Comparison of DNA-binding across protein superfamilies. *Proteins* 2009 doi:10.1002/prot.22525
23. Cremades N., A. Velazquez-Campoy, M. Martinez-Julvez, J.L. Neira, I. Perez-Dorado, J. Hermoso, P. Jimenez, A. Lanas, P.S. Hoffman and J. Sancho. Discovery of specific flavodoxin inhibitors as potential therapeutic agents against *Helicobacter pylori* infection. *ACS Chemical Biology* 2009 4:928-938
24. Cruz A., L.A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, M. Guidetti, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, A. Munoz-Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Perez-Gaviro, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, D. Sciretti, A. Tarancon, R. Tripic-cione, J.L. Velasco, D. Yllanes, A.P. Young. The Spin Glass Phase in the Four-State, Three-Dimensional Potts Model. *Phys. Rev. B.* 2009 79:184408
25. Cuenda S., N.R. Quintero and A. Sanchez. Sine-Gordon wobbles through Backlund transformations. *Discrete Cont. Dyn. Syst.* 2009 in press
26. Diaz-Guilera A., J. Gomez-Gardeñes, Y. Moreno and M. Nekovee. Synchronization of Kuramoto oscillators in Random Geometric Graphs. *Int. J. Bifurcation and Chaos* 2009 19:687-693
28. Diaz-Perez A., M. Sequeira, A. Santos-Guerra and P. Catalan. Statistical Parsimony Species Tree reconstruction (SPSTR): a coalescent-based method to recover the tree topology of recently diverged taxa: The Macaronesian red fescues (*Festuca* L., Gramineae). *Systematic Biology* 2009 in press
29. Echenique P. and G.A. Chass. Efficient model chemistries for peptides. II. Basis set convergence in the B3LYP method. *Phil. Nat.* 2009 1:1-18
30. Escalona-Moran M., M.G. Cosenza, R. Lopez-Ruiz and P. Garcia. Complexity and Nontrivial Collective Behavior in Electroencephalographic Signals. *Int. J. Bifurcat. Chaos* 2009
31. Español P. and H. Lawmen. Derivation of dynamical density functional theory using the projection operator technique. *J. Chem. Phys.* 2009 in press
32. Español P. and I. Zuñiga. On the definition of discrete hydrodynamic variables. *J. Chem. Phys.* 2009 131:164106
33. Español P. and M. Serrano. Voronoi Fluid Particles & Tessellation Fluid Dynamics. In *Tessellations in the Sciences Virtues, Techniques and Applications of Geometric Tilings*. Eds. R. van de Weijgaert, G. Vegter, J. Ritzerveld and V. Icke. Kluwer/Springer 2009
34. Español P. Einstein-Helfand form for transport coefficients from coarse-grained descriptions. *Phys. Rev.* 2009 in press
35. Español P. Hybrid description of complex molecules. *Europhys. Lett.* 2009 in press
36. Español P., J.G. Anero and I. Zuñiga. Microscopic derivation of discrete hydrodynamics. *J. Chem. Phys.* 2009 in press
37. Esteve J.G., F. Falceto, C. Garcia-Canal. Generalization of the Hellmann-Feynman theorem. *Phys. Lett. A* 2009 in press
38. Estrada J., P. Bernado, M. Blackledge and J. Sancho. ProtSA: A web application for calculating sequence specific protein solvent accessibilities in the unfolded ensemble. *BMC Bioinformatics.* 2009 10:104

39. Fernandez L.A., A. Gordillo-Guerrero, V. Martin-Mayor, J.J. Ruiz-Lorenzo. Microcanonical finite-size scaling in second-order phase transitions with diverging specific heat. *Phys. Rev. E* 2009 80:051105
40. Fernandez L.A., V. Martin-Mayor, D. Yllanes. Tethered Monte Carlo: Computing the effective potential without critical slowing down. *Nuclear Physics B* 2009 807:424-454
41. Fernandez L.A., V. Martin-Mayor. Mean-value identities as an opportunity for Monte Carlo error reduction. *Phys. Rev. E* 79:051109
42. Ferreira P., A. Hernandez-Ortega, B. Herguedas, J. Rencoret, A. Gutierrez, J. Jimenez-Barbero, M.J. Martinez, M. Medina and A.T. Martinez. Kinetic and chemical characterization of aldehyde oxidation by fungal aryl-alcohol oxidase. *Biochem. J.* 2009 doi:10.1042/BJ20091499
43. Ferreira P., A. Hernandez-Ortega, B. Herguedas, M.J. Martinez, A.T. Martinez and Milagros Medina. Aryl-Alcohol Oxidase Involved in Lignin Degradation. A mechanistic study based on steady and pre-steady state kinetics and primary and solvent isotope effects with two alcohol substrates. *J. Biol. Chem.* 2009 284:24840-24847
44. Fillat M.F. Fur (ferric uptake regulation) proteins in cyanobacteria. In *Biometals: Molecular Structures, Binding Properties and Applications*. Frank Columbus (ed.) NOVA Publishers, NY 11788, 2009
45. Floria L.M., C. Gracia-Lazaro, J. Gomez-Gardeñes and Y. Moreno. Social Network Reciprocity as a Phase Transition in Evolutionary Cooperation. *Phys. Rev. E* 2009 79:026106
46. Frago S., A. Velazquez-Campoy and M. Medina. The Puzzle of Ligands Binding to *Corynebacterium ammoniagenes* FAD Synthetase. *J. Biol. Chem.* 2009 284:6610-6619
47. Frago S., I. Lans, J.A. Navarro, M. Hervas, D.E. Edmondson, M.A. de la Rosa, C. Gomez-Moreno, S.G. Mayhew and Milagros Medina. Dual role of FMN in Flavodoxin function: electron transfer cofactor and surface involved in protein-protein interaction. *Biochim. Biophys. Acta - Bioenergetics*. 2009 doi:10.1016/j.bbabi.2009.10.012
48. Freire E., A. Schon and A. Velazquez-Campoy. Isothermal Titration Calorimetry: General Formalism Using Binding Polynomials. *Methods Enzymol.* 2009 455:127-155
49. Garcia-Regana J.M., A. Cappa, F. Castejon, M. Tereshchenko. Estimations of Electron Bernstein Emission in the TJ-II Stellarator. *International Sherwood Fusion Theory Conference*. Denver, 2009
50. Garcia-Regana J.M., F. Castejon, A. Cappa, M. Tereshchenko, N. Marushchenko. Electron Bernstein current drive calculations in TJ-II. *36th EPS Plasma Physics Conference*, Sofia, ECA Vol.33E, P-4.180
51. Garcia-Regana J.M., J.B.O. Caughman, A. Cappa, F. Castejon, M. Tereshchenko, A. Ros. Experimental characterization of EBE in the TJ-II Stellarator. *17th International Stellarator/Heliotron Workshop*, Princeton, 2009, P01-12
52. Garcia-Rubio I., P.J. Alonso, M. Medina and J.I. Martinez. Hyperfine Correlation Spectroscopy and Electron Spin Echo Envelope Modulation spectroscopy study of the two coexisting forms of the hemeprotein cytochrome c6 from *Anabaena* PCC 7119. *Biophys. J.* 2009 96:141-152
53. Gil-Redondo R., J. Estrada, A. Morreale, F. Herranz, J. Sancho and A.R. Ortiz. VSDMIP: Virtual Screening Data Management on an Integrated Platform. *J. Comp. Aided Mol. Des.* 2009 23:171-184
54. Gironella M., C. Malicet, C. Cano, M.J. Sandi, T. Hamidi, R.M. Tauil, M. Baston, P. Valaco, S. Moreno, F. Lopez, J.L. Neira, J.C. Dagorn and J.L. Iovanna. p8/nupr1 Regulates DNA-Repair Activity after Double-Strand Gamma Irradiation-Induced DNA Damage. *J. Cell Physiol.* 2009 221-594-602

55. Gomez-Iglesias A., M.A. Vega-Rodriguez, F. Castejon, E. Morales-Ramos, M. Cardenas-Montes, J.M. Reynolds. Grid-based metaheuristics to improve a nuclear fusion device. *Concurrency and Computation: Practice and Experience* 2009 in press
56. Gonzalez-Estevez J., M.G. Cosenza, O. Alvarez-Llamoza and R. Lopez-Ruiz. Transition from Pareto to Boltzmann-Gibbs behaviors in a deterministic economic model. *Physica A* 2009 388:3521-3526
57. Gonzalez-Navarrete P., P.B. Coto, V. Polo and J. Andres. A theoretical study on the thermal ring opening rearrangement of 1H-bicyclo[3.1.0]hexa-3,5-dien-2-one: a case of two state reactivity. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2009 11:7189-7196
58. Goñi G., A. Zollner, M. Lisurek, A. Velazquez-Campoy, S. Pinto, C. Gomez-Moreno, F. Hannemann, R. Bernhardt and M. Medina. Cyanobacterial electron carrier proteins as electron donors to CYP106A2 from *Bacillus megaterium* ATCC 13368. *Biochim. Biophys. Acta - Proteins and Proteomics*. 2009 1794:1635-1642
59. Goñi G., B. Herguedas, M. Hervás, J.R. Peregrina, M.A. De la Rosa, C. Gomez-Moreno, J.A. Navarro, J.A. Hermoso, M. Martinez-Julvez and M. Medina. Flavodoxin: a compromise between efficiency and versatility in the electron transfer from Photosystem I to Ferredoxin-NADP⁺ reductase. *Biochim. Biophys. Acta – Bioenergetics*. 2009 1787:144-154
60. Gopar V.A., J.A. Mendez-Bermudez and A.H. Aly. Effects of Andreev reflection on the conductance of quantum chaotic dots. *Phys. Rev. B* 2009 79:245412
61. Gracia-Lazaro C., L.F. Lafuerza, L. M. Floria and Y. Moreno Residential Segregation and Cultural Dissemination: an Axelrod-Schelling model. *Phys. Rev. E* 2009 80:046123
62. Grazu V., F. Lopez-Gallego, T. Montes, O. Abian, R. Gonzalez, J.A. Hermoso, J.L. Garcia, C. Mateo, J.M. Guisan. Promotion of multipoint covalent immobilization through different regions of genetically modified penicillin G acylase from *E. coli*. *Process Biochemistry* 2009 doi:10.1016/j.procbio.2009.10.013
63. Herguedas B., M. Martinez-Julvez, S. Frago, M. Medina and J.A. Hermoso. Crystallization and preliminary X-ray diffraction studies of the FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*. *Acta Cryst. Sect. F Struct. Biol. Cryst. Commun.* 2009
64. Hernandez J.A., I. Alonso, S. Pellicer, M.L. Peleato, R. Cases, R.J. Strasser, F. Barja and Fillat M.F. Mutants of *Anabaena* sp. PCC 7120 lacking of *alr1690* and *a-furA* antisense RNA show a pleiotropic phenotype and altered photosynthetic machinery. *J. Plant Physiol.* 2009 doi:10.1016/j.plaphys.2003.10.071
65. Hijon C., P. Español, E. van den-Eijnden and R. Delgado-Buscalioni. Mori-Zwanzig formalism as a practical computational tool. *Faraday Discussions* 2009 doi: 10.1039/b902479b
66. Jimenez R., J.A. Cuesta, H. Lugo and A. Sanchez. The shared reward dilemma on structured populations. *J. Econ. Interaction Coordination* 2009 4:183-193
67. Jobichen C., A.Z. Fernandis, A. Velazquez-Campoy, K.Y. Leung, Y.-K. Mok, M.R. Wenk and J. Sivaraman. Identification and Characterization of the Lipid Binding Property of GrIR, a Locus of Enterocyte Effacement Regulator. *Biochem. J.* 2009 420:191-199
68. L.A. Fernandez, V. Martin-Mayor, S. Perez-Gaviro, A. Tarancon, A.P. Young. Phase transition in the three dimensional Heisenberg spin glass: Finite-size scaling analysis. *Phys. Rev. B* 2009 80: 024422
69. Larriva M., L. Prieto, P. Bruscolini and A. Rey. A simple simulation model can reproduce the thermodynamic folding intermediate of apoflavodoxin. *Proteins* 2010 78:73–82 (online 2009)

70. Lopez J.L. and R. Lopez-Ruiz. The Limit Cycles of Lienard Equations in the Weakly Nonlinear Regime. *Far East J. Dynam. Syst.* 2009 in press
71. Lopez J.L., S. Abbasbandy and R. Lopez-Ruiz. Formulas for the Amplitude of the van der Pol Limit Cycle through the Homotopy Analysis Method. *Scholarly Research Exchange* 2009 854060
72. Lopez-Gomollon S., E. Sevilla, M.T. Bes, M.L. Peleato and 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. *Biochem. J.* 2009 418:201-207
73. Lopez-Ruiz R. and D. Fournier-Prunaret. Periodic and Chaotic Events in a discrete Model of Logistic Type for the Competitive Interaction of Two Species. *Chaos, Solitons and Fractals* 2009 41:334-347
74. Lopez-Ruiz R. and D. Fournier-Prunaret. Regions of Multistability in Some Low-Dimensional Logistic Models with Excitation Type-Coupling. *Proceedings of the NOMA'09 Conference (Urbino - Italy)* pp.1-4
75. Lopez-Ruiz R. and J. Sañudo. Complexity Invariance by Replication in the Quantum Square Well. *Open Syst. Inf. Dyn.* 2009
76. Lopez-Ruiz R., A. Nagy, E. Romera and J. Sañudo. A Generalized Statistical Complexity Measure: Applications to Quantum Systems. *J. Math. Phys.* 2009
77. Lopez-Ruiz R., J.L. Lopez and S. Abbasbandy. El Metodo de Analisis Homotopico Aplicado a la Ecuacion de van der Pol. *Actas del XXI Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones* 2009 CEDYA-2007-Ciudad Real, pp.1-5
78. Luna E., A. Rodriguez-Huete, V. Rincon, R. Mateo and M.G. Mateu. A systematic study of the genetic response of a variable virus to the introduction of deleterious mutation in a functional capsid region. *J. Virol.* 2009 83:10140-10151
79. Martinez-Cruz L.A., J.A. Encinar, D. Kortazar, J. Prieto, J. Gomez, P. Fernandez-Millan, M. Lucas, E.A. Arribas, J.A. Fernandez, M.L. Martinez-Chantar, J.M. Mato and J.L. Neira. The CBS Domain Protein Mj0729 of *Methanocaldococcus Jannaschii* is a Thermostable Protein with a pH-Dependent Self-Oligomerization. *Biochemistry* 2009 48:2760-2776
80. Martinez-Julvez M., M. Medina and A. Velazquez-Campoy. Binding Thermodynamics of Ferredoxin:NADP⁺ Reductase: Two Different Protein Substrates and One Energetics. *Biophys. J.* 2009 96:4966-4975
81. Martinez-Rodriguez S., J.A. Encinar, E. Hurtado-Gomez, J. Prieto, J.M. Clemente-Jimenez, F.J. Las Heras-Vazquez, F. Rodriguez-Vico and J.L. Neira. Metal-Triggered Changes in the Stability and Secondary Structure of a Tetrameric Dihydropyrimidinase: A Biophysical Characterization. *Biophys. Chem.* 2009 139:42-52
82. Martin-Mayor V., D. Yllanes. Cluster Monte Carlo algorithm with a conserved order parameter. *Phys. Rev. E* 2009 80:015701
83. Mateu M.G. Capsid protein interactions in human immunodeficiency virus type 1 assembly. *FEBS J.* 2009 276:6098-6109
84. Medina M. Structural and Mechanistic Aspects of Flavoproteins: Photosynthetic Electron Transfer from Photosystem I to NADP⁺. *FEBS J.* 2009 276:3942-3958
85. Mello P.A., V.A. Gopar and J.A. Mendez-Bermudez. Quantum Scattering and Transport in Classically Chaotic Cavities: An overview of Old and New Results. In *Chaotic Systems: Theory and Applications*. (Eds. C.H. Skiadas and I. Dimotikalis) World Scientific, 2009 in press

86. Meloni S., A. Arenas and Y. Moreno. Traffic-Driven Epidemic Spreading in Finite-Size Scale-Free Networks. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2009 106:16897-16902
87. Meloni S., A. Buscarino, L. Fortuna, M. Frasca, J. Gomez-Gardeñes, V. Latora and Y. Moreno. Effects of mobility in a population of Prisoner's Dilemma Players. *Phys. Rev. E* 2009 79:067101
88. Mendez-Bermudez J.A., V.A. Gopar and I. Varga. Conductance distribution at criticality: one-dimensional Anderson model with random long-range hopping. *Ann. Phys.* 2009 18:891
89. Moreno M.J., M. Bastos and A. Velazquez-Campoy. Partition of Amphiphilic Molecules to Lipid Bilayers by ITC. *Anal. Biochem.* 2009 doi:10.1016/j.ab.2009.11.015
90. Moreno Y. Complex Network Modeling: a New Approach to Neurosciences. In *Coordinated Activity in the Brain: measurements and relevance to brain function and behaviour*, Springer Verlag, 2009
91. Moukadiri I., S. Prado, J. Piera, A. Velazquez-Campoy, G.R. Bjork and M.E. Armengod. Evolutionarily Conserved Proteins MnmE and GidA Catalyze the Formation of Two Methyluridine Derivatives at tRNA Wobble Positions. *Nucleic Acids Res.* 2009 doi:10.1093/nar/gkp762
92. Moyano L.G. and A. Sanchez. Evolving learning rules and emergence of cooperation in spatial Prisoner's Dilemma. *J. Theor. Biol.* 2009 259:84-95
93. Neira J.L. Biophysical and Structural Studies on the Capsid Protein of the Human Immunodeficiency Virus Type 1: A New Drug Target? *Scientific World Journal.* 2009 29:404-419
94. Neira J.L. Interactions Between Small Molecules and the Capsid Protein of HIV-1: Designing Inhibitors of Capsid Assembly. *FEBS J.* 2009 276:6110-6117
95. Neira J.L. The Capsid Protein of Human Immunodeficiency Virus: Molecular Recognition and Design of Antiviral Agents. *FEBS J.* 2009 276:6097
96. Neira J.L. The Positively Charged C-Terminal Region of the Inactivating Shaker B Peptide Binds to the Potassium Channel KcsA. *Prot. Eng. Des. Sel.* 2009 22:341-347
97. Neira J.L., M. Roman-Trufero, L.M. Contreras, J. Prieto, G. Singh, F.N. Barrera, M.L. Renart and M. Vidal. The Transcriptional Repressor RYBP is a Natively Unfolded Protein which Folds upon Binding to DNA. *Biochemistry* 2009 48:1348-1360
98. Nekovee M. and Y. Moreno. Rumor-like information dissemination in complex computer networks. In *Unifying Themes in Complex Systems, vol.5 (Proceedings from the Fifth International Conference on Complex Systems)*, Springer Complexity Series, 2009
99. Osacar C. and A.F. Pacheco. Symmetry and degeneracy in quantum mechanics. Self-duality in finite spin systems. *Eur. J. Phys.* 2009 30:891-899
100. Pellicer S., M.T. Bes, A. Gonzalez, J.L. Neira, M.L. Peleato and M.F. Fillat. An optimized procedure for efficient purification of functional FurA (ferric uptake regulator) from *Anabaena* PCC 7120 based on mild guanidine hydrochloride treatment. *Process Biochem.* 2009 in press
101. Pellicer-Lostao C. and R. Lopez-Ruiz. Money Distributions in Chaotic Economies. *Proceedings of the NOMA'09 Conference (Urbino - Italy)* pp.1-5

102. Pellicer-Lostao C., R. Lopez-Ruiz. Economic Models with Chaotic Money Exchange. Proceedings of the ICCS'09 Conference (Baton Rouge - USA), Part I, Lecture Notes in Computer Science 2009 5544:43-52
103. Pellicer-Lostao C., R. Lopez-Ruiz. Introducing Chaos in Economic Gas-like Models. Proceedings of the CHAOS'09 Conference (Chania - Crete), 2009 pp.1-8
104. Pellicer-Lostao C., R. Lopez-Ruiz. Role of Symmetry and Geometry in a chaotic Pseudo-Random Bit Generator. *Int. J. Comput. Sci. Software Tech.* 2009 2:43-53
105. Peregrina J.R., B. Herguedas, J.A. Hermoso, M. Martinez-Julvez and Milagros Medina. Protein motifs involved in coenzyme interaction and enzymatic efficiency in *Anabaena* Ferredoxin-NADP+ reductase. *Biochemistry* 2009 48:3109-3119
106. Perez A.G., V.E. Angarica, J. Collado-Vides, A.T. Vasconcelos. From sequence to dynamics: the effects of transcription factor and polymerase concentration changes on activated and repressed promoters. *BMC Mol. Biol.* 2009 10:92
107. Poncela J., J. Gomez-Gardeñes, A. Traulsen and Y. Moreno. Evolutionary game dynamics in a growing structured population. *New J. Phys.* 2009 11:083031
108. Poncela J., J. Gomez-Gardeñes, L.M. Floria and Y. Moreno. Cooperation in the Prisoner's Dilemma Game in Random Scale-Free Networks. *Int. J. Bifurcation Chaos* 2009 in press
109. Poncela J., J. Gomez-Gardeñes, L.M. Floria, A. Sanchez and Y. Moreno. Cooperative scale-free networks despite the presence of defector hubs. *Europhys. Lett.* 2009 88:38003
110. Pozo-Dengra J., S. Martinez-Rodriguez, L.M. Contreras, J. Prieto, M. Andujar-Sanchez, J.M. Clemente-Jimenez, F.J. Las Heras-Vazquez, F. Rodriguez-Vico and J.L. Neira. Structure and Conformational Stability of a Tetrameric Thermos-table N-Succinylamino Acid Racemase. *Biopolymers* 2009 91:751-772
111. Prada-Gracia D., J. Gomez-Gardeñes, P. Echenique and F. Falo. Exploring the Free-Energy Landscape: From Dynamics to Networks and back. *PloS Comput. Biol.* 2009 5:e1000415
112. Reynolds J.M. and D. Lopez-Bruna. Calculo numerico del transporte mediante la ecuacion cinetica de deriva para plasma en geometria magnetica toroidal: convergencia y comparaciones. *Informes Tecnicos Ciemat* 2009
113. Reynolds J.M. and D. Lopez-Bruna. Calculo numerico del transporte mediante la ecuacion cinetica de deriva para plasma en geometria magnetica toroidal: metodos numericos. *Informes Tecnicos Ciemat* 2009 1172
114. Reynolds J.M. and D. Lopez-Bruna. Calculo numerico del transporte mediante la ecuacion cinetica de deriva para plasma en geometria magnetica toroidal: Preliminares. *Informes Tecnicos Ciemat* 2009 1165
115. Roca C.P., J.A. Cuesta and A. Sanchez. Evolutionary game theory: temporal and spatial effects beyond replicator dynamics. *Phys. Life Rev.* 2009 6:208-249
116. Roca C.P., J.A. Cuesta and A. Sanchez. Imperfect imitation can enhance cooperation. *Europhys. Lett.* 2009 87:48005
117. Roca C.P., J.A. Cuesta and A. Sanchez. On the effect of spatial structure on the emergence of cooperation. *Phys. Rev. E* 2009 80:046106
118. Roca C.P., J.A. Cuesta and A. Sanchez. Promotion of cooperation on networks? The myopic best response case. *Eur. Phys. J. B* 2009 71:587-595

119. Romera E., R. Lopez-Ruiz, J. Sañudo and A. Nagy. Generalized Statistical Complexity and Fisher-Renyi Entropy Product in the H-Atom. *Int. Rev. Phys.* 2009 3:207-211
120. Romero C.M., A. Albis, J.M. Lozano and J. Sancho. Thermodynamic study of the influence of polyols and glucose on the thermal stability of holo-bovine α -lactalbumin. *J. Therm. Anal. Calorim.* 2009 98:165-171
121. Rossi L., F. Castejon, C. Moreno and M. Liniers. Study of plasma formation within the electrostatic residual ion dump proposed for the HNB injectors of ITER. *Nuclear Fusion* 2009 49:029801
122. Sanchez J., M. Acedo, A. Alonso, J. Alonso, P. Alvarez, E. Ascasibar, A. Baciero, R. Balbin, L. Barrera, E. Blanco, J. Botija, A. Bustos, E. de la Cal, I. Calvo, A. Ascasibar, J. M. Carmona, D. Carralero, R. Carrasco, A. Benjamin, A. Carreras, F. Castejon, R. Castro, G. Catalan, A. Chmyga, M. Chamorro, L. Eliseev, L. Esteban, T. Estrada, A. Fernandez, R. Fernandez-Gavilan, J. A. Ferreira, J.M. Fontdecaba, C. Fuentes, L. Garcia, I. Garcia-Cortes, R. Garcia-Gomez, J.M. Garcia-Regana, J. Guasp, L. Guimaraes, T. Happel, J. Hernanz, J. Herranz, C. Hidalgo, J.A. Jimenez, A. Jimenez-Denche, R. Jimenez-Gomez, D. Jimenez-Rey, I. Kirpichev, A.D. Komarov, A.S. Kozachok, L. Krupnik, F. Lapayese, M. Liniers, D. Lopez-Bruna, A. Lopez-Fraguas, J. Lopez-Razola, A. Lopez-Sanchez, G. Marcon, F. Martin, K.J. McCarthy, F. Medina, M. Medrano, A.V. Melnikov, M. Van Boudewijn, E. Mirones, I.S. Nedzelskiy, M.A. Ochando, J. Olivares, J.L. de Pablos, L. Pacios, I. Pastor, M.A. Pedrosa, A. de la Pena, A. Pereira, G. Perez, D. Perez-Risco, A. Petrov, S. Petrov, A. Portas, D. Pretty, D. Rapisarda, G. Ratta, J.M. Reynolds, E. Rincon, L. Rios, C. Rodriguez, J.A. Romero, A. Ros, A. Salas, M. Sanchez, E. Sanchez, E. Sanchez-Sarabia, K. Sarkisian, J.A. Sebastian, C.G. Silva, S. Schchepetov, N.N. Skvortsova, E.R. Solano, A. Soletto, F.L. Tabares, D. Tafalla, J. Tera, A. Tolkachev, V. Tribaldos, V. Vargas, J. Vega, G. Velasco, J.L. Velasco, M. Weber, G. Wolfers, B. Zurro. Confinement transitions in TJ-II under Li-coated wall conditions. *Nuclear Fusion* 2009 49:104018
123. Sanz G., F.J. Lopez and R. Gouet. Limit laws for the cumulative number of ties for the maximum in a random sequence. *J. Stat. Planning and Inference* 2009 139:2988-3000
124. Sañudo J. and A.F. Pacheco. Complexity and White Dwarf Structure. *Phys. Lett.* 2009 A373:807-810
125. Sañudo J. and R. Lopez-Ruiz. Alternative evaluation of statistical indicators in atoms: the non-relativistic and relativistic cases. *Phys. Lett. A* 2009 373:2549-2551
126. Sciretti D., P. Bruscolini, A. Pelizzola, M. Pretti and A. Jaramillo. Computational protein design with side-chain conformational entropy. *Proteins* 2009 74:176-191
127. Serena P.A., M. Douas, M.I. Marques, C. Carrasco, P.J. de Pablo, R. Miranda, J.L. Carrascosa, M. Castellanos and M.G. Mateu. MC simulations of water meniscus in nanocontainers: explaining the collapse of viral particles due to capillary forces. *Phys. Status Solidi C* 2009 6:2128-2132
128. Shi R., M. Villarroja, R. Ruiz-Partida, Y. Li, A. Proteau, S. Prado, I. Moukadiri, A. Benitez-Paez, R. Lomas, J. Wagner, A. Matte, A. Velazquez-Campoy, M.E. Armengod and M. Cygler. Structure-Function Analysis of E. coli MnmG (GidA), a Highly-Conserved tRNA-Modifying Enzyme. *J. Bacteriol.* 2009 191:7614-7619
129. Sinatra R., J. Gomez-Gardeñes, Y. Moreno, D. Condorelli, V. Latora and L.M. Floria. Structural and dynamical properties of cellular and regulatory networks. In *Statistical Mechanics of Cellular Systems*. M.H. Zaman (ed.) 2009
130. Sinatra R., J. Iranzo, J. Gomez-Gardeñes, L.M. Floria, V. Latora and Y. Moreno. The Ultimatum Game in Complex Networks. *J. Stat. Mech.* 2009 P09012
131. Stevens R.C., J. Sancho and A. Martinez. Rescue of misfolded proteins and stabilization by small molecules. *Methods Mol. Biol.* 2009 in press

132. Taneva S.G., S. Bañuelos, J. Falces, I. Arregi, A. Muga, P.V. Konarev, D.I. Svergun, A. Velazquez-Campoy and M.A. Urbaneja. A Mechanism for Histone Chaperoning Activity of Nucleoplasmin: Thermodynamic and Structural Models. *J. Mol. Biol.* 2009 393:448-463
133. Tejedor A., J.B. Gomez and A.F. Pacheco. Earthquake size-frequency statistics in a forest-fire model of individual faults. *Phys. Rev.* 2009 E79:046102
134. Tejedor A., J.B. Gomez and A.F. Pacheco. Prediction of stasis and crisis in the Bak-Sneppen model. *Phys. Lett. A* 2009 in press
135. Vargas V.I., D. Lopez-Bruna, J. Guasp, J. Herranz, T. Estrada, F. Medina, M.A. Ochando, J.L. Velasco, J.M. Reynolds, J.A. Ferreira, D. Tafalla, F. Castejon, A. Salas and the TJ-II Team. Density dependence of particle transport in ECH plasmas of the TJ-II stellarator. *Informes Tecnicos Ciemat* 2009 1162
136. Vazquez-Quesada A., M. Ellero and P. Español. Consistent scaling of thermal fluctuations in smoothed dissipative particle dynamics. *J. Chem. Phys.* 2009 130:034901
137. Vazquez-Quesada A., M. Ellero and P. Español. Smoothed particle hydrodynamic model for viscoelastic fluids with thermal fluctuations. *Phys. Rev. E* 2009 79:056707
138. Velasco J.L., F. Castejon and A. Tarancon. Finite orbit width effects in ion collisional transport in TJ-II. *Physics of Plasmas* 2009 16:052303
139. Velez E., A. Alberola and V. Polo. A Density Functional Theory Study of the Magnetic Exchange Coupling in Dinuclear Manganese(II) Inverse Crown Structures. *J. Phys. Chem. A*. doi:10.1021/jp907200u

Artículos publicados por miembros del BIFI (no citan expresamente al BIFI, 61)

1. Acebron J.A., S. Lozano and A. Arenas. Enhancement of signal response in complex networks induced by topology and noise. Applications of Nonlinear Dynamics Model and Design of Complex Systems. In *Series: Understanding Complex Systems*, Springer, 2009
2. Alvarez-Estrada R.F. Nonequilibrium Quantum Anharmonic Oscillator and Scalar Field: High Temperature Approximations. *Annalen der Physik* 2009 18:391-409
3. Alvarez-Estrada R.F. Nonequilibrium Quantum Meson Gas: Dimensional Reduction. *Eur. Phys. J. A* 2009 41:53-70
4. Alvarez-Estrada R.F. Nonequilibrium quasi-classical effective meson gas. In *Strong and Electroweak Matter 2008* (Proc. SEWM2008 Meeting, Ed. J. Smit)
5. Alvarez-Estrada R.F. Nonequilibrium quasi-classical effective meson gas. *Nuclear Physics A* 2009 820:299C-302C
6. Arenas A. and A. Diaz-Guilera. Identificación de comunidades analizando el uso del correo electrónico. *El Profesional de la Información* 2009 18:571108
7. Arenas A., A. Cabrales, L. Danon, A. Diaz-Guilera, R. Guimera and F. Vega-Redondo. Optimal Information Transmission in Organizations: Search and Congestion. *Rev. Econ. Des.* 2009 in press
8. Arenas A., A. Fernandez and S. Gomez. An optimization approach to the structure of the neuronal layout of *C. elegans*. *Handbook on Biological Networks* 2009 in press

9. Bazzani A., C. Benedetti, S. Rambaldi, L. Rossi and G. Turchetti. Dynamical models of molecular chains and efficient integration algorithms. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2009 14:593-612
10. Belletti F., M. Guidetti, A. Maiorano, F. Mantovani, S.F. Schifano and R. Tripiccone. Challenges in Monte Carlo Spin Glasses Simulation on Cell Broadband Engine. *Proc. 8th Int. Conf. Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2009)* in press
11. Borge-Holthoefer J. and A. Arenas. Navigating word association norms to extract semantic information. *Proceedings of the 31st Annual Conference of the Cognitive Science Society 2009* in press
12. Brower E.T., A. Schon, J.C. Klein and E. Freire. Binding thermodynamics of the N-terminal peptide of the CCR5 coreceptor to HIV-1 envelope glycoprotein gp120. *Biochemistry* 2009 48:779-785
13. Calvo I., B.A. Carreras, L. Garcia, M.A. Pedrosa and C. Hidalgo. Zonal flows and long-distance correlations during the formation of the edge shear layer in the TJ-II stellarator. *Plasma Physics and Controlled Fusion* 2009 51:065007
14. Calvo I., R. Sanchez and B.A. Carreras. Fractional Levy motion through path integrals. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 2009 42:055003
15. Catalan P. Festuca L. In: Blanca G, Romero AT et al. (eds.). *Flora de Andalucía Oriental*. 2009 1:298-310
16. Catalan P., R.J. Soreng and P.M. Peterson. Festuca aloha and F. molokaiensis (Poaceae: Loliinae), two new species from Hawai'i. *Journal of the Botanical Research Institute of Texas* 2009 3:51-58
17. Cauliez P., V. Polo, T. Roisnel, R. Llusar and M. Fourmigue. The thiocyanate anion as a polydentate halogen bond acceptor. *Cryst. Eng. Comm.* 2009 doi:10.1039/b913559f
18. Ciudad A. and J.M. Sancho. An analysis of nucleotide dependent conformations of kinesin. *J. Chem. Phys.* 2009 131:015104
19. Freire E.. A thermodynamic approach to the affinity optimization of drug candidates. *Chem. Biol. Drug Des.* 2009 74:468-472
20. Garcia A. and J.L. Lopez. The Appell's Function F2 for large values of its variables. *Q. Appl. Math.* 2009 in press
21. Garcia L., B.A. Carreras, I. Llerena and I. Calvo. Topological characterization of the transition from laminar regime to fully developed turbulence in the resistive pressure-gradient-driven turbulence model. *Phys. Rev. E* 2009 80:046410
22. Gomez S., P. Jensen and A. Arenas. Analysis of community structure in networks of correlated data. *Phys. Rev. E* 2009 80:016114
23. Gomez-Marin A. and J.M. Sancho. Two-state flashing molecular pumps. *Europhys. Lett.* 2009 86:40002
24. Gordillo-Guerrero A., R. Kenna and J.J. Ruiz-Lorenzo. The quenched-disordered Ising model in two and four dimensions. *J. Phys. Studies* 2009 in press
25. Gordillo-Guerrero A., R. Kenna and J.J. Ruiz-Lorenzo. The Site-Diluted Ising Model in Four Dimension. *Phys. Rev. E* 2009 80:031135
26. Grebenshchikov S.E., I.S. Danilkin, M.A. Tereshchenko. The peculiarities of the drift rotational angle for counter-streaming particles in a magnetic-sheared stellarator (in Russian). 36th International Conference on Plasma Physics and Controlled Fusion, Zvenigorod, 2009

27. Johnson S., J. Marro, J. Megias, and J. Torres. Development of Neural Network Structure with Biological Mechanisms. *Lecture Notes in Computer Science* 2009 5517:228-235
28. Johnson S., J.J. Torres, J. Marro. Nonlinear Preferential Rewiring in Fixed-Size Networks as a Diffusion Process. *Phys. Rev. E* 2009 79:050104R
29. Johnson S., J. Marro, J. Torres. Network Topology and Dynamical Task Performance. *AIP Conf. Proc.* 2009 1091:280
30. Kassa A., N. Madani, A. Schon, H. Haim, A. Finzi, S.H. Xiang, L. Wang, A. Princiotta, M. Pancera, J. Courter, A.B. Smith 3rd, E. Freire, P.D. Kwong and J. Sodroski. Transitions to and from the CD4-bound conformation are modulated by a single-residue change in the human immunodeficiency virus type 1 gp120 inner domain. *J. Virol.* 2009 83:8364-8378
31. Khoury M., J.O. Gleeson, J.M. Sancho, A.M. Lacasta and K. Lindenberg. Diffusion coefficient in periodic and random potentials. *Phys. Rev. E* 2009 80:021123
32. Lopez J.L. and E. Perez. Two-point Taylor expansions and one-dimensional boundary value problems. *Math. Comput.* 2009 in press
33. Lopez J.L. and N. Temme. Large degree asymptotics of generalized Bernoulli and Euler polynomials. *J. Math. Anal. Appl.* 2009 in press
34. Lopez J.L. and P. Pagola. An Explicit Formula for the Coefficients of the Saddle Point Method. *Constructive Approximation* 2009 in press
35. Lopez J.L. and P. Pagola. Asymptotic expansions of Mellin convolution integrals: an oscillatory case. *J. Comput. Appl. Math.* 2009 in press
36. Lopez J.L. and P. Pagola. The confluent hypergeometric functions $M(a; b; z)$ and $U(a; b; z)$ for large b and z . *J. Comput. Appl. Math.* 2009 in press
37. Lopez J.L. The Liouville-Neumann expansion in one-dimensional boundary value problems. *Integral Transforms and Special Functions.* 2009 in press
38. Lopez J.L., E. Perez and N. Temme. Multi-point Taylor approximations in one-dimensional linear boundary value problems. *Appl. Math. Comput.* 2009 207:519-527
39. Lopez J.L., P. Pagola and E. Perez. A systematization of the saddle point method. Application to the Airy and Hankel functions. *J. Math. Anal. Appl.* 2009 354:347-359
40. Lopez J.L., P. Pagola and E. Perez-Sinuaia. A simplification of Laplace's method: Applications to the Gamma function and Gauss hypergeometric function. *J. Approx. Theor.* 2009 in press
41. Manshour P., S. Saberj, Muhammad Sahimi, A. F. Pacheco, and M. Reza Rahimi Tabar. Turbulencelike Behavior of Seismic Time Series. *Phys. Rev. Lett.* 2009 102:014101
42. Muller J. and P. Catalan. A rhizomatous new species of *Festuca* L. (Poaceae-Poaceae) from NW Argentina. *Darwiniana* 2009 in press
43. Orlandi J.G. and J.M. Sancho. Theoretical study of a membrane channel gated by ATP. *Eur. J. Phys. E* 2009 29:329-336
44. Ortega-Olivencia A. and P. Catalan. Systematics and evolutionary history of the circum-Mediterranean genus *Anagyris* L. (Fabaceae) based on morphological and molecular data. *Taxon* 2009 58:1290-1306

45. Pavlov S.S., F. Castejon, A. Cappa, M. Tereshchenko. Fast computation of the exact plasma dispersion functions. *Problems of Atomic Science and Technology*. 2009 1:69-71
46. Perez-Collazos E., P. Sanchez-Gomez, J.F. Jimenez and P. Catalan. The phylogeographic history of the Iberian steppe plant *Ferula loscosii* (Apiaceae): a test of the Abundant-centre hypothesis. *Molecular Ecology* 2009 18:848-861
47. Prieto L. and A. Rey. Topology-based potentials and the study of the competition between protein folding and aggregation. *J. Chem. Phys.* 2009 130:115101
48. Regnier T., D. Sarma, K. Hidaka, U. Bacha, E. Freire, Y. Hayashi, Y. Kiso. New developments for the design, synthesis and biological evaluation of potent SARS-CoV 3CL(pro) inhibitors. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2009 19:2722-2727
49. Rey-Stolle M.F., M. Enciso and A. Rey. Topology-Based Models and NMR Structures in Protein Folding Simulations. *J. Comput. Chem.* 2009 30:1212–1219
50. Rossi B., P. Verrocchio, G. Viliani, I. Mancini, G. Guella, E. Rigo, C. Tsallis, A.R. Plastino and R.F. Alvarez-Estrada. Escort Mean Values and the Characterization of Power-Law-Decaying Probability Densities. *J. Math. Phys.* 2009 50:043303
51. Scarduelli G. and G. Mariotto. Vibrational properties of ibuprofen-cyclodextrin inclusion complexes investigated by Raman scattering and numerical simulation. *J. Raman Spectroscopy* 2009 40:453-458
52. Segarra-Moragues J.G. and P. Catalan. The fewer and the better: prioritization of populations for conservation under limited resources, a study with *Borderea pyrenaica* (Dioscoreaceae) in the Pyrenean National Park. *Genetica* 2009 in press
53. Sequeira M., A. Diaz-Perez, A. Santos-Guerra and P. Catalan. Karyological analysis of the five native Macaronesian *Festuca* (Gramineae) grasses supports a distinct diploid origin of two schizoendemic groups. *Anales del Jardín Botánico de Madrid* 2009 66:55-63
54. Sharifi-Tehrani M., M. Mardi, J. Sahebi, A. Diaz-Perez and P. Catalán. Genetic diversity and structure among Iranian tall fescue phenotypes based on SSR and EST-SSR marker analysis. *Plant Systematics and Evolution* 2009 282:57-70
55. Sokolov I., S.B. Yuste, J.J. Ruiz-Lorenzo and K. Lindenberg. Mean Field Model of Coagulation and Annihilation Reactions of a Subdiffusive Species. *Phys. Rev. E* 2009 79:051113
56. Sokolov I.M., S.B. Yuste, J.J. Ruiz-Lorenzo and K. Lindenberg. Mean field model of coagulation and annihilation reactions in a medium of quenched traps: Subdiffusion. *Phys. Rev. E* 2009 79:051113
57. Torres J., J. Marro and S. de Franciscis. Chaos in Heterogeneous Networks. *Int. J. Bifurcation and Chaos* 2009 19:1-10
58. Torres J., J.F. Mejias, JM and H.J. Kappen. Information Processing in Neural Nets With Dynamic Synapses. *AIP Conf. Proc.* 2009 1091:295
59. Viruel J., J.G. Segarra-Moragues, E. Perez-Collazos, P. Catalán, L. Villar, Z. Diaz-Lifante, B. Valdes and J. Muller. Proposal to reject the name *Luzuriaga cordata* (Dioscoreaceae). *Taxon* 2009 58:1007
60. Viruel J., J.G. Segarra-Moragues, E. Perez-Collazos, L. Villar, and P. Catalan. Systematic revision of *Epipetrum*, a small genus of the Dioscoreaceae endemic to Chile. *Systematic Botany* 2009 in press
61. Yuste S.B., J.J. Ruiz-Lorenzo and K. Lindenberg. Coagulation reactions in low dimensions: Revisiting subdiffusive A+A reactions in one dimension. *Phys. Rev. E* 2009 80:051114

3.6 Tesis doctorales leídas en 2009

A lo largo de 2009 se han leído las siguientes tesis doctorales:

DOCTORANDO: Daniele Sciretti

Título: Spin Glasses, Protein Design and Dedicated Computers
(Doctorado Europeo)

Director: Alfonso Tarancon

Fecha: Noviembre 2008 (no aparece en la memoria de 2008)

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

DOCTORANDO: Jose Miguel Reynolds

Título: Simulación de Plasmas mediante las ecuaciones cinéticas de deriva en geometrías complejas

Directores: Alfonso Tarancon y Daniel Lopez Bruna

Fecha: 20/11/2009

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

DOCTORANDO: José Ramón Peregrina Bonilla

Título: Determinantes mecánicos de la reactividad y especificidad de la Ferredoxina-NADP⁺ reductasa de Anabaena PCC 7119 con su coenzima.

Director: Milagros Medina

Fecha: 8 Septiembre 2009. Universidad de Zaragoza. Facultad de Ciencias.

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

4. Otras actuaciones

4.1 Estancias de investigadores externos

Parece interesante constatar las frecuentes (17) estancias y visitas de investigadores extranjeros o de otros centros españoles en el BIFI para colaborar con nuestros investigadores:

Nombre: Aitor Hernández
Procedencia: Centro de Investigaciones Biológicas
Fecha: Septiembre 2009-Diciembre 2009

Nombre: Néstor Cortez
Procedencia: Universidad Nacional de Rosario
Fecha: Marzo 2009

Nombre: Eduardo Ceccarelli
Procedencia: Universidad Nacional de Rosario
Fecha: Septiembre 2009

Xavier Calbet, EUMETSAT, Darmstadt (Alemania).
Jaime Sañudo, UNEX, Badajoz (España).
Alberto Robledo, UNAM, Capital Federal (México).

Rafael Ruiz (CIPF, Valencia)
Rosa Doménech (UMH Elche, Alicante)
Pilar Alfonso (IACS, Zaragoza)
Maria Joao Moreno (U. Coimbra, Portugal)
Patricia Martins (U. Coimbra, Portugal)
Catarina de Jesus (U. Coimbra, Portugal)
Leslie Chávez (UNAM México)
Alfredo Lagunas (UNAM México)

En Huesca:

Dra.Teresa Garnatje Roca, científica titular, Institut Botànic de Barcelona (CSIC)
Dra. Carmen Acedo, profesora TU, Universidad de Leon
José David Orgaz. Becario FPI, Universidad de Murcia

4.2 Estancias de miembros de nuestro instituto en otros centros

Nombre: Beatriz Herguedas
Estancia: Instituto de Física-Química Rocasolano. CISC. Madrid
Fecha: Octubre 2009-Noviembre 2009

Nombre: Isaias Lans
Estancia: Universidad Autónoma de Barcelona. Departamento de Química Física
Fecha: Enero 2009-Julio 2009

Nombre: Ana Serrano
Estancia:
Fecha: Mayo 2009

Ricardo López
'Una medida estadística de complejidad: algunas aplicaciones',
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional, Univ. de Granada,
Granada ; Febrero - 2009.

Nombre: Yamir Moreno
Estancia: Max Planck Institute for Evolutionary Biology, Plön, Alemania.
Fecha: Abril 2009

4.3 Algunas ponencias y comunicaciones a congresos

AUTORES: B. Herguedas, M. Martínez-Júlvez, S. Frago, M. Medina and J.A. Hermoso
Título: X-Ray Crystal Structure of C. ammoniagenes FADS: mechanistic implications
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación Oral B. Herguedas
CONGRESO: IV National Conference Bifi2009
PUBLICACIÓN: Abstract.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza (Spain) FECHA: Febrero 2009

AUTORES: P. Ferreira, A. Hernández-Ortega, B. Herguedas, A.T. Martínez and M. Medina
Título: Probing the catalytic mechanism of aryl-alcohol oxidase: A fungal flavoenzyme involved in lignin degradation
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación Oral P. Ferreira
CONGRESO: IV National Conference Bifi2009
PUBLICACIÓN: Abstract.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza (Spain) FECHA: Febrero 2009

AUTORES: Martínez-Júlvez, M.
Título: Crystallography (BIFI Research Outlines)
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación oral
CONGRESO: IV National Conference Bifi2009.
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza (Spain) FECHA: Febrero de 2009

AUTORES: P. Ferreira, A. Hernández-Ortega, B. Herguedas, A.T. Martínez and M. Medina
Título: Profundizando en el mecanismo de acción de la enzima Aril-alcohol oxidasa: una flavoproteína fúngica impli-

cada en procesos de biodegradación de lignina

TIPO DE PARTICIPACION: Presentación Invitada Patricia Ferreira

CONGRESO: XII Reunión de la Red Temática Biotecnología de Materiales Lignocelulósicos: Retos moleculares, enzimáticos y químicos para su aplicación industrial y medioambiental.

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Alcalá de Henares (Spain) FECHA: June, 2009

AUTORES: Isaias Lans, José Ramón Peregrina, Milagros Medina, Mireia Garcia-Viloca, Àngels González-Lafont and José M. Lluch

Título: The Hydride Transfer Mechanism between Anabaena Tyr303Ser FNRrd/FNRox and NADP⁺/H.

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: Theoretical chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids celebrating 25 years of the theoretical chemistry network of catalonia, (Spain)

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (Spain) FECHA: July 2009

AUTORES: Isaias Lans, José Ramón Peregrina, Milagros Medina, Mireia Garcia-Viloca, Àngels González-Lafont and José M. Lluch

Título: The mechanism of the hydride transfer between Anabaena Tyr303Ser FNRrd/FNRox and NADP⁺/H. A combined pre-steady-state kinetic/ensemble-averaged transition state theory with multidimensional tunneling study.

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación Oral Àngels González-Lafont

CONGRESO: Theoretical chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids celebrating 25 years of the theoretical chemistry network of catalonia (Spain)

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona (Spain) FECHA: July 2009

AUTORES: Ana Serrano, Susana Frago, Adrián Velázquez-Campoy y Milagros Medina

Título: Characterization of FAD synthetase from *C. ammoniagenes*

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: Biomolecules for Quality of Life. 21st IUBMB and 12th FAOBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Shanghai (China) FECHA: August 2009

AUTORES: Ana Serrano, Susana Frago, Adrián Velázquez-Campoy and Milagros Medina

Título: Characterization of FAD synthetase from *C. ammoniagenes*

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: 21st IUBMB and 12th FAOBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology. Young Scientific Programm

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Shanghai (China) FECHA: August 2009

AUTORES: Sonia Arilla Luna, Adrián Velazquez-Campoy y Milagros Medina

Título: Localización del sitio de unión para flavinas en el dominio N-terminal de la FAD sintetasa de *C. ammoniagenes*

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: XXXII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular.

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (Spain) FECHA: September 2009

AUTORES: Ana Sánchez-Azqueta, Milagros Medina

Título: Implicación de la zona de unión a FAD de la enzima ferredoxina-NADP⁺ reductasa de Anabaena en la eficiencia catalítica y especificidad por el coenzima.

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: XXXII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular.

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (Spain)

FECHA: September 2009

AUTORES: Beatriz Herguedas, Marta Martínez-Júlvez, Susana Frago, Milagros Medina, Juan A. Hermoso

Título: Bases estructurales de la biosíntesis de FMN y FAD en procariotas: Estructura de la FAD sintetasa de *Corynebacterium ammoniagenes*.

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: XXXII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular.

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (Spain)

FECHA: September 2009

AUTORES: Villanueva R., Ferreira P., Miramar MD, Susin SA., Peleato M.L. and Medina M.

Título: Estudios preliminares en la caracterización redox del Factor de Inducción de Apoptosis humano (hAIF)

TIPO DE PARTICIPACION: Póster

CONGRESO: XXXII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular.

PUBLICACIÓN: Abstract.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo (Spain)

FECHA: September 2009

AUTORES: Fillat, M.F.

TÍTULO: Protein-DNA interaction and genetic regulation :The case of the Fur family in cyanobacteria

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

CONGRESO: IV National Conference BIFI

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, febrero 2009.

AUTORES: Vela, L; Martínez J.I., Sevilla, E.; Bes, M.T.; Peleato M.L. and Fillat, M.F.

TÍTULO: Interacción de la microcistina LR con metales

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: CIC 2009 - 1º Congreso Ibérico de Cianotoxinas

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Oporto, julio 2009.

AUTORES: Kuniyoshi, T., Martín-Luna, B., Valladares, A., González, A., Sevilla, E.; Bes, M.T.; Peleato M.L. and Fillat, M.F.

TÍTULO: NtcA reconoce promotores del operon mcy de *Microcystis aeruginosa* PCC 7806

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: CIC 2009 - 1º Congreso Ibérico de Cianotoxinas

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Oporto, julio 2009.

AUTORES: Sevilla, E.; Martín-Luna, B., Bes, M.T.; Fillat, M.F. and Peleato M.L.

TÍTULO: Análisis transcripcional del gen mcy y determinación de microcistina en *Microcystis aeruginosa* PCC 7806 en diferentes condiciones de luz y estrés oxidativo

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: CIC 2009 - 1º Congreso Ibérico de Cianotoxinas

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Oporto, julio 2009.

AUTORES: Kuniyoshi T, Sevilla E, Martín-Luna B, Bes MT, Peleato ML, Fillat MF.

TÍTULO: Influence of nitrogen availability on the production of microcystin by *Microcystis aeruginosa* PCC 7806.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster CONGRESO: 18 ª Reunión de la Sociedad Española de Fisiología Vegetal (SEFV) y 11 º Congreso Hispano-Luso de Fisiología Vegetal

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, septiembre 2009.

AUTORES: González A, Bes MT, Peleato ML, Fillat MF

TÍTULO: Obtención y caracterización de una estirpe de sobreexpresión del regulador FurA en *Anabaena* sp. PCC

7120

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 18ª Reunión de la Sociedad Española de Fisiología Vegetal (SEFV) y 11º Congreso Hispano-Luso de Fisiología Vegetal

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, septiembre 2009.

AUTORES: Sevilla E, Martín-Luna B, Bes MT, Peleato ML, Fillat MF.

TÍTULO: Identificación, caracterización y estudio de la regulación de un RNA antisentido del gen fur en la cianobacteria *Microcystis aeruginosa* PCC 7806

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 18ª Reunión de la Sociedad Española de Fisiología Vegetal (SEFV) y 11º Congreso Hispano-Luso de Fisiología Vegetal

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, septiembre 2009.

AUTORES: Inda LA, Fillat MF.

TÍTULO: Filogenia de la familia Fur (Ferric uptake regulator) en cianobacterias

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 18ª Reunión de la Sociedad Española de Fisiología Vegetal (SEFV) y 11º Congreso Hispano-Luso de Fisiología Vegetal

LUGAR Y AÑO DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, septiembre 2009.

AUTORES: Abian, O. & Velázquez-Campoy, A.

Título: "Calorimetric Studies of Potential NS3 Protease Inhibitors"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 16th International Symposium on Hepatitis C virus and related viruses

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Niza, Francia, 3-7 Octubre

AÑO: 2009

AUTORES: Velázquez-Campo A. & Abian, O.

TÍTULO: "Drug development against NS3 protease: implications from conformational equilibrium and Zn binding"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 16th International Symposium on Hepatitis C virus and related viruses

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Niza, Francia, 3-7 Octubre

AÑO: 2009

AUTORES: Abian, O. & Velázquez-Campoy, A.

TÍTULO: "Screening, Identification and In vitro assays of new potent and selective compounds against Hepatitis C virus using as target NS3 protease"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: COMUNICACIÓN ORAL

CONGRESO: 4th International Workshop on Hepatitis C Resistance & New Compounds

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Boston, USA, 25-26 June

AÑO: 2009

AUTORES: Doménech R., Abian O., Correa J., Sousa-Herves A., Riguera R., Fernández-Megía E., Velázquez A. y Neira J. L.

TÍTULO: "Caracterización biofísica de interacciones dendrímero-proteína en el ensamblaje de la cápsida del HIV-1"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: XXXII Congreso de la SEBBM

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo

AÑO: 2009

AUTORES: Abian, O. & Martinez M.

TÍTULO: "Molecular Biology and Crystallography"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: COMUNICACIÓN ORAL

CONGRESO: IV BIFI National Conference
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza
AÑO: 2009

AUTORES: Violeta Lamarca, Isabel Marzo, Antonio Sanz-Clemente y José A. Carrodegua
TÍTULO: Functional characterization of PSAP/Mtch1, a proapoptotic mitochondrial protein that interacts with presenilin 1, a protease involved in Alzheimer's disease.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación oral
CONGRESO: IV National Conference BIFI 2009.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza Fecha: 5-7 Febrero, 2009

AUTORES: Angelica Ospina, Alfredo Lagunas-Martinez and José A. Carrodegua
TÍTULO: PSAP/MTCH1 is present in mitochondrial protein complexes.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación póster (A. Ospina)
CONGRESO: EMBO workshop: Mitochondria, apoptosis and cancer: targeting mitochondria to defeat cancer.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Praga. Fecha: 1-3 Octubre, 2009

AUTORES: Diaz-Guilera, A.
TÍTULO: Synchronization in complex networks
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Working Group on Physics of Socio-economic Systems Arbeitskreis Physik sozial-ökonomischer Systeme (AGSOE)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Dresden (ALEMANIA) Año: 2009
Código: 294958 Orden: 075

AUTORES: Diaz-Guilera, A.
TÍTULO: Synchronization in complex networks
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Net2009: Evolution and complexity
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rome (ITALIA) Año: 2009
Código: 294959 Orden: 076

AUTORES: Diaz-Guilera, A.
TÍTULO: Relación entre las propiedades topológicas y dinámicas en redes complejas de osciladores
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Complejidad: nuevos retos en la ciencia y en la tecnología. Móstoles, 11-12 Mayo 2009.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Móstoles (ESPAÑA) Año: 2009
Código: 294960 Orden: 077

Evolutionary game theory on graphs, network reciprocity and emergence of cooperation.
Angel Sánchez.
Conferencia invitada en International Conference on "Evolution of Cooperation: Models and Theories". Viena, Austria, 15 a 18 de septiembre de 2009.

What is the effect of networks on cooperation? Lack of universality in evolutionary game theory on graphs.
Angel Sánchez, Carlos P. Roca, Sergi Lozano, José A. Cuesta y Alex Arenas.
Charla en III Reunión general de la División de Física Socio-Económica de la Sociedad Alemana de Física.
Dresden, Alemania, 23 a 28 de marzo de 2009.

What is the effect of networks on cooperation? Lack of universality in evolutionary game theory on graphs.
Angel Sánchez, Carlos P. Roca, Sergi Lozano, José A. Cuesta y Alex Arenas.
Charla en "NET 2009: Evolution and Complexity". Roma, 28 a 30 de mayo de 2009.

95. The shared reward prisoner's dilemma: Structured populations and evolutionary dynamics.
Raúl Jiménez, José A. Cuesta, Haydee Lugo y Angel Sánchez.
Charla en SING 5 (Spain-Italy-Netherlands Meeting on Game Theory). Amsterdam, 1 a 3 de julio de 2009.

José A. Cuesta, Angel Sánchez y Miguel Ángel de Zavala
How water-saving plants resist the invasion of water-wasting plants: an evolutionary explanation.
Póster en International Conference on "Evolution of Cooperation: Models and Theories". Viena, Austria, 15 a 18 de septiembre de 2009.

How water-saving plants resist the invasion of water-wasting plants: an evolutionary explanation.
José A. Cuesta, Angel Sánchez y Miguel Ángel de Zavala.
Póster en "150 years after Darwin: From Molecular Evolution to Language". Palma de Mallorca, 23 a 27 de noviembre de 2009.

Ángel Sánchez
Cooperación en redes: los efectos de la micro-dinámica en el macro-comportamiento.
Seminario en el Departament d'Anàlisi Econòmica, Universitat de València, 3 de abril de 2009.

Ángel Sánchez
Resultados recientes sobre teoría evolutiva de juegos en grafos: complejidad y ausencia de universalidad.
Seminario en el Grupo de Investigación "Comportamiento Asintótico y Dinámica de Ecuaciones Diferenciales",
Departamento de Matemática Aplicada, Universidad Complutense de Madrid. 8 de mayo de 2009.

Ángel Sánchez
On the effect of spatial structure on the emergence of cooperation.
Seminario en el Centro de Física Teórica e Computacional da Universidade de Lisboa. Lisboa, Portugal,
13 de mayo de 2009.

Ángel Sánchez
Refrescando sostenibilidad.
Ponente invitado en los debates organizados por "La Casa Encendida." Madrid, 9 y 10 de diciembre de 2009.

AUTORES/AS: J. Gómez-Gardeñes, D. Prada-Gracia, P. Echenique, F. Falo
TÍTULO: Explorando el paisaje de Energía Libre: De la dinámica molecular a la termoestadística usando redes complejas
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla Invitada
CONGRESO: Conferencia sobre Complejidad: Nuevos retos en la Ciencia y la Tecnología.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles (Madrid).
AÑO: Mayo 2009

AUTORES/AS: J. Gómez-Gardeñes, J. Poncela, Y. Moreno, L.M. Floría, A. Sánchez
TÍTULO: Formation of Complex Networks from Evolutionary principles
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Charla
CONGRESO: Statistical Physics and Game Theory
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nordic Institute for Theoretical Physics. Mariehamn (Finlandia).
AÑO: Mayo 2009

AUTORES: Y. Moreno.
TÍTULO: Evolutionary Dynamics on Graphs.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia Invitada.
CONGRESO: International Workshop "Evolution and Co-evolution".
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad Carlos III, Madrid.
AÑO: 2009.

AUTORES: Y. Moreno.
TÍTULO: Red Temática Socioeconofísica.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Organizador del Encuentro y miembro del Comité Científico y Organizador.
CONGRESO: IV Congreso Nacional BIFI 2009.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de Zaragoza, Zaragoza.
AÑO: 2009.

AUTORES: Y. Moreno.
TÍTULO: Dinámicas de Propagación en Redes Complejas: Epidemias y Tráfico.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia Invitada.
CONGRESO: Complejidad: Nuevos retos en la Ciencia y la Tecnología.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad Rey Juan Carlos, España.
AÑO: 2009.

AUTORES: Y. Moreno.
TÍTULO: Evolutionary Dynamics of Ultimatum Game Players.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral.
CONGRESO: Statistical Physics and Game Theory.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Åland, Finlandia.
AÑO: 2009.

AUTORES: Catalán P.
TÍTULO: Model testing analysis in plant evolution
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia invitada.
CONGRESO: IV Conferencia Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI).
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza. Fecha: 06/02/2009

AUTORES: Catalán P.
TÍTULO: Pruebas de modelos en evolución de plantas: herencia de patrones poliploides y filogeografía
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia invitada.
CONGRESO: El legado de Darwin: la evolución en acción
LUGAR DE CELEBRACIÓN: A Coruña. Fecha: 05/05/2009

AUTORES: Catalán P.
TÍTULO: Capítulo XIV: Afinidades entre los seres orgánicos
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia invitada
CONGRESO: El Origen de las especies (Darwin) y la evolución de las plantas
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid Fecha: 24/11/2009

AUTORES: Ricardo López
TÍTULO: 'ICCS 2009: Compute, Discover, Innovate',
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Baton Rouge (Louisiana,USA) ; May - 2009.

Ricardo López
'CHAOS 2009: 2nd Chaotic Modeling and Simulation Internat. Conference', Chania (Crete-Greece) ; Juin - 2009.

Ricardo López
'NOMA-09: Workshop on Nonlinear Maps and Applications',
Urbino (Italy) ; Septiembre - 2009.

Ricardo López
'CEDYA-2009: XXI Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones', Ciudad Real ; Septiembre - 2009.

4.4 Distinciones y premios

Beatriz Herguedas fue seleccionada para su participación como representante de España en la edición 2009 de "Nobel Laureate Meetings at Lindau" para jóvenes investigadores que tuvo lugar en Lindau, Alemania en Julio de 2009.

Ibercivis fue finalista en los Premios de Internet, donde en la categoría C4 a la Mejor iniciativa.

Guillermo Losilla mediante el trabajo titulado "Aprovechamiento el calor generado por el supercomputador Caesar Augusta para calefacción", obtuvo el premio de Lucha frente al cambio climático dentro del Concurso de Ideas para una Universidad Sostenible, una iniciativa de la Fundación Ecología y Desarrollo, el Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad del Gobierno de Aragón y la Universidad de Zaragoza a través de su Consejo Social.

Ricardo López ha obtenido el Premio al Mejor Artículo del Congreso ICCS-2009, Baton Rouge, Louisiana (USA), "Best Paper Award". Y Segundo Accésit del I Premio Santander de la Cátedra Banco Santander de la Universidad de Zaragoza (2009).

4.5 Charlas y conferencias impartidas en otras instituciones

Barcelona Supercomputer Centre. "Catalytic determinants in FNR:NADP(H) reaction: a experimental and theoretical view". 19 Octubre 2009. José Ramón Peregrina

Curso de "Proteínas y anticuerpos de interés biotecnológico y biomédico". Fundación IDEA. Caracas (Venezuela). Charlas: "Estudios en flavoproteínas de interés biotecnológico y biomédico: Aril-Alcohol Oxidasa y Factor de Inducción de Apoptosis" y "Metodologías para el estudio y caracterización de reacciones redox e interacciones proteína-ligando". 23-27 de Noviembre 2009.

La Evolucion de la Teoria Evolutiva. Conferencia divulgativa impartida dentro del ciclo "Dialogos sobre la Evolucion" en COSMOCAIXA. Barcelona. 14 de Octubre de 2009.

4.6. 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.

El Bifi se ha asociado a INZA (Innovación Zaragoza, dentro de la CEZ), en donde la mayoría de los socios son empresas, también está AITIP, ITA y CSIC. Indicar igualmente que el Bifi pertenece a TecnoEbro (asociación de centros de investigación y desarrollo aragoneses).

Finalmente, quisiéramos mencionar que una de las publicaciones del grupo (S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno et al. Physics Reports 424, 175 (2006)) es actualmente el segundo artículo más citado de la Universidad de Zaragoza con más de 840 citas, el primero de los últimos 10 años, lo cual es una medida objetiva de que la visibilidad de nuestros resultados ha aumentado.

El director: José Félix Sáenz Lorenzo

Zaragoza diciembre de 2009.