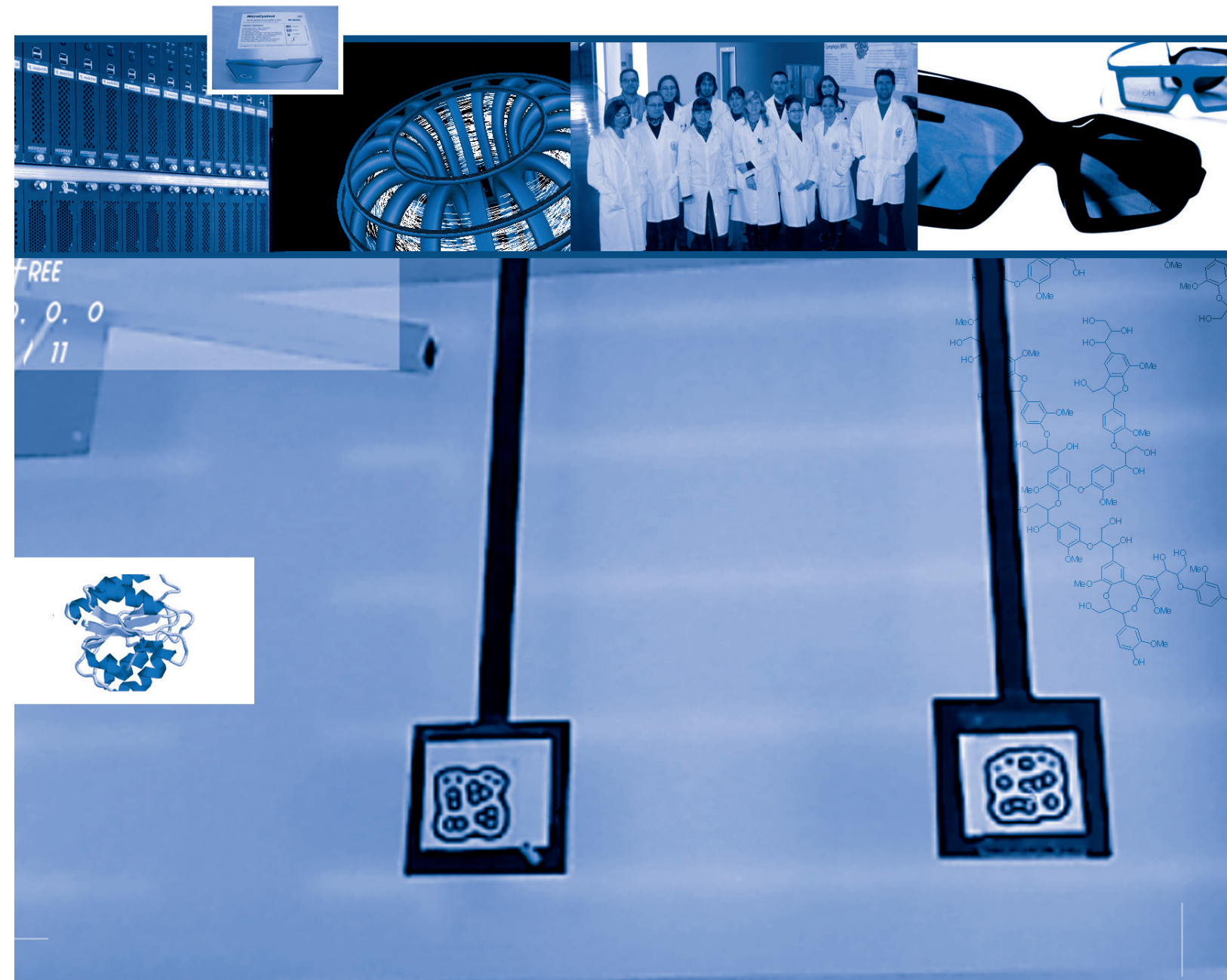


INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS

MEMORIA ANUAL 2010





Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

Memoria anual: año 2010

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

VII Memoria anual: año 2010

Contenido

1. FUNCIONAMIENTO INSTITUCIONAL	4
1.1 Principales Actuaciones en 2010	4
1.2 Organigrama y Gobierno.	6
1.3 Congresos organizados por el BIFI en 2010.	8
1.4 Coloquios y Seminarios BIFI	10
1.5 Convenios y Relaciones con otros Centros.	12
1.6 El CECAM en Zaragoza. El ZCAM	13
1.7 Relaciones con Empresas. Patentes	14
1.8 Ayudas obtenidas	16
1.9 Personal. Contratación investigadores y Técnicos.	18
1.10 Plan Estratégico.	19
2. INFRAESTRUCTURAS E INSTALACIONES	21
2.1 Laboratorio de Computación y Supercomputación,	21
2.2 Laboratorios de Bioquímica, Biofísica Biología Molecular, Biología Celular y Cristalografía	39
2.3 Nuevo edificio	50
3. INVESTIGACIÓN	51
3.1 Organigrama de Investigación	51
3.2 Grupos de Investigación	51
3.3 Líneas de Investigación	52
3.4 Investigación. Proyectos de investigación.	72
3.5 Publicaciones Científicas	82
3.6 Tesis doctorales leídas en 2010	94
4. OTRAS ACTUACIONES	96

1. FUNCIONAMIENTO INSTITUCIONAL

1.1 Principales Actuaciones en 2010

A lo largo del año 2010 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 celebró el **Consejo ordinario** del Instituto el 3 de febrero a las 19.45 h, en el que se aprobaron las actuaciones realizadas y los proyectos más importantes a llevar a cabo a lo largo de 2010. El **Equipo de Gobierno** ha realizado seis reuniones formales a lo largo del año. El grupo de trabajo constituido para proponer un **Plan Estratégico** del Instituto elaboró el documento con amplia participación, que se presentó para ser enmendado por todos los miembros del BIFI en reunión del 11 de junio y se aprobó por el Equipo de Gobierno en reunión celebrada el 30 de junio de 2010.

- Realizamos el **IV Congreso Internacional del BIFI 2010**, que tuvo lugar en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza los días 3, 4, 5, y 6 de Febrero, con el título: **"Networks: A Framework for Cross-Disciplinary Applications"**

En el Congreso se contó con la participación de 9 ponentes de reconocido prestigio internacional en el tema y otras 18 colaboraciones, así como una sesión doble de pósters, con asistencia de 110 investigadores procedentes de Universidades y Centros de Investigación, tanto internacionales como españoles.

- Participamos activamente en la organización del **IV SPANISH-PORTUGUESE BIOPHYSICAL CONGRESS** realizado en el Campus Río Ebro (EUITZ/EUEEZ), de la Universidad de Zaragoza,

del 7 al 10 de julio de 2010, con la participación de más de 300 investigadores.

- Dentro de la colaboración del BIFI en la puesta en marcha del nuevo instituto de investigación **ZCAM**, colaboramos en la organización de varios workshop, el primer de ellos, celebrado en Zaragoza los días 27 y 28 de mayo (**ZCAM Launching Meeting** "Atomic and molecular simulations: challenges for the next decade"). Otros de los talleres o workshops realizados fueron los siguientes: "Constraints in molecular simulation" y "Databases in Quantum Chemistry", ambos efectuados en el edificio I+D del Campus Río Ebro los días 2-4 de septiembre y 22-24 de septiembre, respectivamente.

- Colaboramos en la organización de la **Net-Works 2010 International conference** "From theory to applications of complex networked systems" realizada del 8 al 10 de junio.

- Organizamos la **III Jornada de Usuarios de la Red Española de Supercomputación** el jueves 1 de Julio en el Edificio I+D del Campus Río Ebro, así como el **Seminario científico de la RES: SIMULACIONES PARALELAS EN LA RED**, el martes 30 de noviembre, en el Salón de Actos Edificio I+D, Campus Río Ebro.

- Organizamos el **1er Workshop Ibercivis** de Investigación, Desarrollo y Comunicación en Zaragoza, el 8 y 9 de septiembre; y una reunión del proyecto Piregrid el 25 y 26 de noviembre en el mismo edificio de I+D.

- Estamos organizando la **V Conferencia Nacional del BIFI que tendrá lugar en febrero de 2011**.

- Participamos con nuestra presencia en el **Stand Científico** que se ubicó en el pabellón 2 de la Feria de Zaragoza del 14 al 17 de octubre, con intervenciones sobre la actividad del BIFI y los proyectos Janus, Ibercivis y Piregrid.

- Participamos en la Jornada técnica sobre fusión, el 4 de marzo en Terrassa, en el marco de **EXPO Fusión**. Organizador: EURATOM. En el museo de la ciencia y de la técnica de Cataluña (Terrassa): en la que se inaugurará la Exposición temporal de "Fusión Expo. Energía para el futuro". Estuvimos desde el día 3 hasta el domingo 7, realizando: "Servicio de proyección en 3D para la exposición itinerante FUSIÓN.

- En febrero se realizó (por fin) el traslado de nuestras instalaciones al nuevo edificio de Institutos universitarios, edificio I+D, en el Campus del ACTUR, lo que ha supuesto un esfuerzo económico para el Instituto, pues hemos tenido que renovar y mejorar algunos de nuestros equipamientos, tanto en computación como en los nuevos laboratorios de biofísica, bioquímica y biología molecular y celular. Hemos instalado el **difractómetro de rayos X** en los nuevos laboratorios.

- Estamos gestionando las compras e instalación de aparatos del Proyecto de nuevas **Infraestructuras de investigación** financiado por fondos FEDER y por el Gobierno de Aragón, para los Laboratorios de Biofísica, Bioquímica y Biología Molecular y Celular: Biacore para la media de interacciones moleculares, Calorímetro de titulación isoterma, Sistema de análisis de fluorescencia y el Robot de Cristalografía, por un importe de 1.240.000€. En Computación, estamos desarrollando Aragrid, el computador del CECAM y Janus II quedan para el año próximo, por un importe total de 1.870.000€. Hemos realizado nuevas propuestas de inversión en la nueva convocatoria, todavía pendiente de resolución.

- A lo largo de 2010 hemos seguido gestionando en colaboración con el BSC (Barcelona Supercomputing Center) el superordenador "Caesaraugusta" **nodo de la "Red Española de Supercomputación"**, instalación calificada de "Singular" por el MICINN. La propuesta de ampliación de la capacidad, dentro del proyecto Marenostrum II, 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 participa desde febrero de 2010 en Ibercivis y Argentina, Cuba y otros países están interesados en participar en el proyecto. Además, se nos han dado ayudas para facilitar esta participación. La creación de una fundación para su gestión y sus Estatutos con participación del MICINN, Gobierno de Aragón, CSIC, CIEMAT y la Universidad de Zaragoza a través del BIFI está dispuesta para su aprobación.

- Estamos desarrollando los proyectos de tecnología GRID **Aragrid** de creación de una red de computación GRID en Aragón, dentro del proyecto de Infraestructuras Científicas apoyado con fondos FEDER, y el proyecto europeo **Piregrid** "Interreg IV", dentro del Programa de Cooperación Transfronteriza España – Francia, del que hemos desarrollado su primera fase de implantación de las infraestructuras.

- En marzo fue aprobado el proyecto europeo del VII Programa Marco EDGI que supone para el BIFI una financiación de 67.735 € a través de Ibercivis y el proyecto DEGISCO que nos supone unos 68.000 € en dos años. También seguimos participando en el proyecto EDGeS, todos ellos relacionados con tecnologías GRID.

- En julio se firma entre HP y la Universidad de Zaragoza 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 Universidad de Zaragoza (principalmente en último año de carrera o doctorado), familiarizarse, aprender y trabajar con algunas de las últimas tecnologías de HP, por ejemplo, desarrollando Proyectos Fin de Carrera

("PFC") sobre soluciones HP o trabajos académicamente dirigidos. Este Observatorio permitirá la colaboración de investigadores del BIFI y HP en el terreno de la tecnología de ordenadores.

- Se ha firmado un convenio de colaboración entre el BIFI y el Centro de Estudios Avanzados de Cuba. Para establecer una colaboración entre ambos centros. El BIFI ha donado equipos de computación que iban a ser renovados para su instalación en el citado centro.

- Hemos participado en numerosos proyectos y **grupos de investigación** tanto estatales como autonómicos. Cinco Grupos consolidados 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), de ARAID y de 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 2010 se ha incorporado al BIFI como **investigador ARAID** David Iñiguez con lo que son cuatro los investigadores ARAID que trabajan en el instituto (Ramón Hurtado, Alberto Castro y Adrián Velázquez). También se ha incorporado como investigador contratado por la Universidad de Zaragoza, procedente del programa Ramón y Cajal, Víctor Gopar, con lo que también son cinco los investigadores del BIFI con este tipo de contrato. Se mantienen adscritos al BIFI Olga Abián y Pablo Echenique. Como técnicos en Computación para la gestión de nuestros recursos tenemos contratados con cofinanciación dos del MICINN, dos del GA y uno del CIEMAT, y cuatro **técnicos ingenieros informáticos**. También dos **técnicos en Biofísica, Bioquímica y Biología Molecular y Celular**

una de ellas con apoyo del MICINN. Disponemos también de becarios de distintos programas, algunos de ellos ligados a proyectos públicos o con empresas.

- Se han seguido realizando los **Coloquios y Seminarios** BIFI, con la presencia de investigadores españoles y de todo el mundo, que han mantenido el necesario flujo de contacto y de colaboración externa.

- Hemos modificado la imagen corporativa del BIFI, de acuerdo y en coordinación con la que se ha realizado en la Universidad de Zaragoza.

- 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.

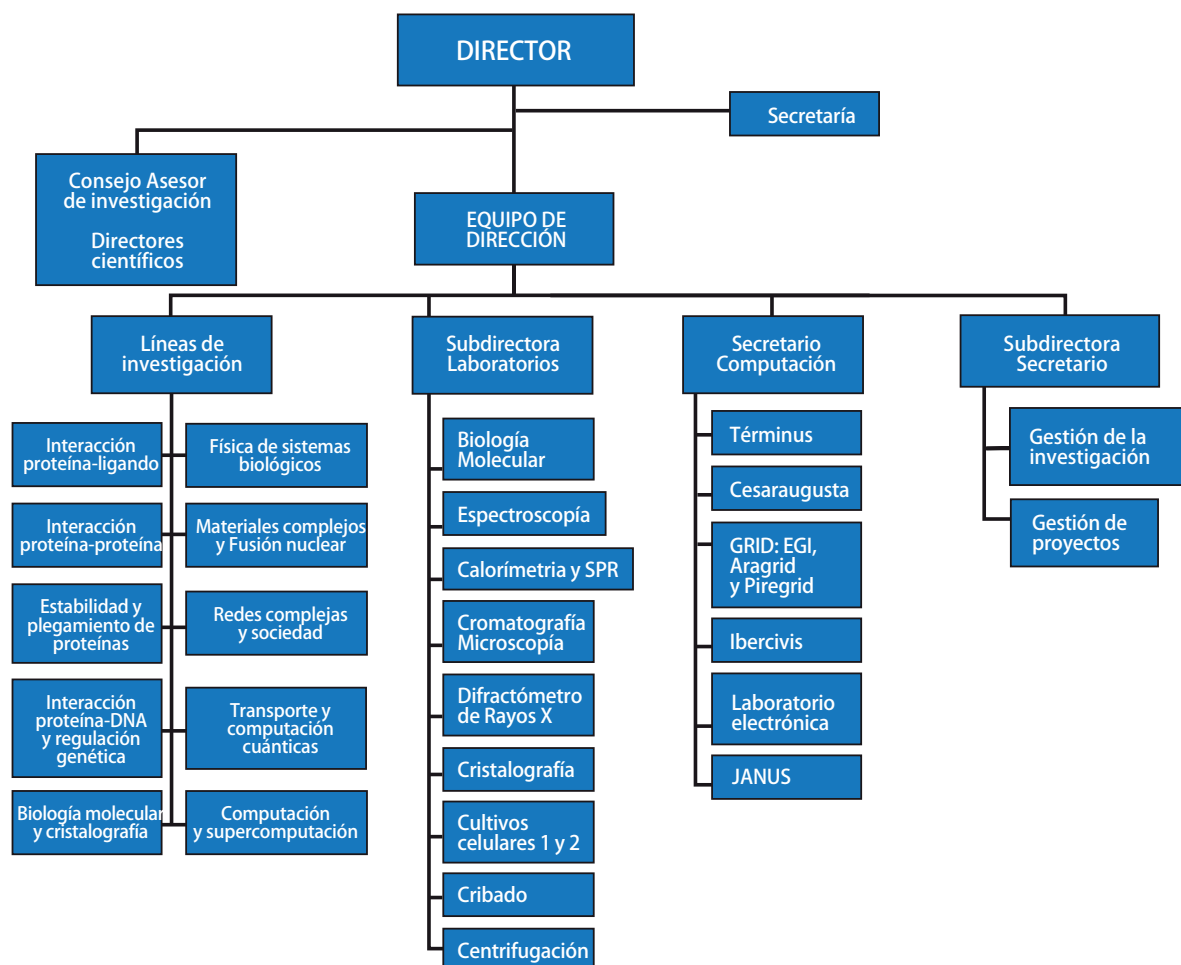
Organigrama BIFI

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. Milagros Medina ocupa el cargo de Subdirectora del Instituto y Alfonso Tarancón el de Profesor Secretario.

Del director dependen:

-La **Secretaría** del BIFI con una técnico de apoyo y una gestora de proyectos.

-El **Equipo de Gobierno** formado por Director, Subdirectora, Secretario y los siguientes vocales: José Luis Alonso, Adrián Velázquez, Mario Floría, Fernando Falo, Pierpaolo Bruscolini, Yamir Moreno, María Fillat, Olga Abián, Víctor Gopar, José A. Carrodegas, Guillermo Losilla y Fermín Serrano.



El Equipo de Gobierno ha realizado seis reuniones ordinarias a lo largo del año 2010.

-El **Consejo Asesor de Investigación**, cuya composición y funciones ha modificado el **Plan Estratégico del Instituto**, y cuya nueva composición está pendiente de concreción.

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 direc-

tamente con las líneas de investigación para gestionar nuevas iniciativas.

Líneas de investigación

La investigación del BIFI se estructura en ocho líneas de investigación con sus correspondientes coordinadores responsables. Esta estructura está pendiente de revisión a la luz del Plan Estratégico aprobado por el BIFI. En cualquier caso 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 Jesús Clemente.

- **Estabilidad y plegamiento de proteínas** (Protein stability and protein folding). Coordinador Javier Sancho.

- **Interacción proteína-ligando docking and screening** (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 génica** (Protein-DNA interaction and genetic regulation). Coordinadora María Fillat.

Instalaciones e investigación:

- **Computación y Supercomputación** (Computing and SuperComputing). Coordinador Guillermo Losilla, que cuenta con tres técnicos de apoyo

- **Laboratorio de Electrónica**

-

- Laboratorios de Supercomputación

- **Laboratorios de Biofísica, Bioquímica y Biología Molecular y Celular y de Cristalografía de Proteínas**. Coordinadora Olga Abián. Con dos técnicos de apoyo.

1.3 Congresos organizados por el BIFI en 2010.

-Realizamos el **IV Congreso Internacional del BIFI 2010**, que tuvo lugar en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza los días 3, 4, 5, y 6 de Febrero, con el título:

“Networks: A Framework for Cross-Disciplinary Applications”

La Conferencia Internacional fue un éxito científico y organizativo. A la misma se inscribieron 110 participantes, de los cuales el 71% provenía de fuera de la Universidad de Zaragoza, y el 31 % de instituciones fuera de España. En el Congreso se expusieron trabajos sobre la estructura y dinámica de sistemas biológicos (desde el genoma hasta ecosistemas), redes neuronales y cerebrales, propagación de epidemias en sistemas tecnológicos y sociales, y sistemas complejos en redes de comunicaciones. Se contó con la participación de 9 ponentes de reconocido prestigio internacional en el tema y hubo, además, otras 32 conferencias cortas, así como una sesión de pósters con 14 trabajos expuestos. Durante la Conferencia, también se organizó un curso-taller (tutorial) sobre el uso de grandes infraestructuras de computación y clústeres para cálculo científico. Este curso contó con la participación de cerca de 30 jóvenes investigadores participantes en la Conferencia y fue impartido por el personal especializado del BIFI. Además, por primera vez la misma se financió sin necesidad de poner fondos propios, gracias a las ayudas recibidas del MICINN, DGA y UNIZAR (por un total de 9500 euros) y a los ingresos por inscripción.

Keynote Speakers

Prof. Stefano Battiston, Chair of Systems Design, ETH Zürich, Switzerland.

Title: **Liaisons dangereuses: how risk diversification leads to systemic risk**

Prof. Stefano Boccaletti, CNR-Istituto dei Sistemi Complessi, Italy and Italian Embassy in Tel Aviv, Israel.

Title: **Optimal regulation of synchronous states in complex networks**

Dr. Marian Boguñá, Universitat de Barcelona, Spain.

Title: **The metric structure of the Internet**

Prof. Jordi García-Ojalvo, Universidad Politécnica de Cataluña, Spain.

Title: **Discriminating between functionally analogous genetic circuits**

Prof. Dick James, Bath University, U.K.

Title: **Animal social networks**

Prof. Jurgen Kurths, Institute of Physics, Humboldt University, Berlin and Potsdam Institute for Climate Impact Research, Potsdam, Germany

Title: **Evolving Complex Networks: Are such Approaches Useful for Earth Sciences?**

Dr. Jukka-Pekka Onnela, Harvard Medical School, Harvard University, USA.

Title: **Classifying Networks Using Mesoscopic Response Functions**

Dr. Francisco C. Santos, Université Libre de Bruxelles, Belgium.

Title: **Coordinating towards a common good**

Prof. Alessandro Vespignani, School of Informatics, Indiana University, USA, and Institute for Scientific Interchange Foundation, Turin, Italy.

Title: **Predicting the behavior of techno-social systems**

Conference Chairman: Yamir Moreno (Universidad de Zaragoza, Spain)

Asimismo participamos activamente en la organización del **IV SPANISH-PORTUGUESE BIOPHYSICAL CONGRESS** realizado en el Campus Río Ebro (EUITIZ/EUEEZ), de la Universidad de Zaragoza, del 7 al 10 de julio, con la participación de más de 300 investigadores y que contó como ponentes invitados con:

Carlos Bustamante, U. California, Berkeley, USA;
Marta Bruix, IQFR-CSIC;
Ana M. Damas, IBMC, Portugal;
Chris M. Dobson, U. Cambridge, UK,
José Rizo, U. Texas, USA.

El 8, 9 y 10 de junio organizamos la “**Net-Works 2010 International Conference**”, titulada: “From theory to applications of complex networked systems”, que tuvo como conferenciantes invitados:

- Speaker: Alex Arenas (U. Rovira i Virgili, Spain) Optimal map of the modular structure of complex networks.
- Leon Chua (U. of California, Berkeley, USA) Memristor Minds: Remembrance of things past.
- S. Dorogovtsev (U. de Aveiro, Portugal) Percolation on correlated networks.
- M. Kaiser (U. Newcastle, UK) Understanding the connectome: Topological, spatial and dynamic features of brain network.
- M. Nekovee (UCL, London and British Telecom Labs, U.K) Coupled wireless communication and transportation networks.
- Francisco Pedroche (U. Politécnica Valencia, Spain) Modelling social networks sites with Page-Rank and social competences.

Dentro del compromiso del BIFI en la puesta en marcha del nuevo instituto de investigación

ZCAM, colaboramos en la organización de varios workshop y reuniones, la primera de ellas realizada en Zaragoza el 27 y 28 de mayo y que supuso la apertura del ZCAM como Instituto de investigación.

ZCAM Launching meeting “Atomic and molecular simulations: challenges for the next decade”

Colaboramos asimismo con en la organización del workshop titulado “**Constraints in molecular simulation**” en el edificio I+D del Campus Río Ebro los días 2-4 de septiembre,

También en el Workshop titulado “**Databases in Quantum Chemistry**” realizado en el edificio I+D del Campus Río Ebro los días 22-24 de septiembre.

Organizamos el 1er **Workshop Ibercivis** de Investigación, Desarrollo y Comunicación en Zaragoza, el 8 y 9 de septiembre, en el que se analizó el estado de la computación distribuida y computación voluntaria en Europa y Latinoamérica, así como las dificultades para realizar las distintas aplicaciones científicas: Fusión, Docking, Materiales, Neurosim + Nanoluz + Adsorción, Amiloide y Sanidad.

Organizamos la **III Jornada de Usuarios de la Red Española de Supercomputación** en Zaragoza, el jueves 1 de Julio, en el Salón de Actos, Edificio I+D, Campus Río Ebro UZ, evento anual que tiene como objetivo difundir y compartir los resultados obtenidos por los diferentes grupos de investigación que hacen uso de los recursos de supercomputación de la RES y del funcionamiento de los comités de acceso y de usuarios con la presencia e intervención del director del BSC, profesor Mateo Valero.

Organizamos las **jornadas Piregrid** el 25 y 26 de noviembre, en la sede del BIFI, orientadas a dar a conocer a las empresas que habían mostrado interés por la tecnología GRID para evaluar posibles análisis y colaboraciones conjuntas (PireGrid - empresa). Se presentó el estudio de mercado en

el que se valoraron las necesidades de cómputo y almacenamiento de dichas empresas. Se presentó la colaboración con Schnell Software con una demostración de su aplicación portada al grid.

Colaboramos como instituto en la organización del Sexto **Encuentro de Neurociencia** sobre “Estructura y Función del Sistema Nervioso” celebrado en Zaragoza el viernes 11 de Diciembre.

Realizamos un Seminario científico de la RES: SIMULACIONES PARALELAS EN LA RED. El Martes 30 de Noviembre de 2010 en el Salón de Actos Edificio I+D, Campus Río Ebro UZ, Zaragoza

Este seminario estuvo dirigido tanto a usuarios de la Red Española de Supercomputación como a investigadores y técnicos interesados en los métodos de simulación paralela, con el nexo común del uso de procesos paralelos para desarrollar mejoras en sus algoritmos y simulaciones.

Estamos organizando la **V Conferencia Nacional** del BIFI, que tendrá lugar en febrero de 2011.

1.4 Coloquios y Seminarios BIFI

A lo largo de 2010 se han celebrado 15 Coloquios y Seminarios con participación de los siguientes científicos procedentes de todo el mundo.

Título: Challenges in Molecular Dynamics Simulations.

Conferenciante: Giovanni Ciccotti.

Institución: Dept of Physics, University La Sapienza, Roma, Italy and University College, Dublin, Ireland

Fecha: 14 de Enero.

Título: Fotosíntesis y fijación del nitrógeno: multicelularidad en cianobacterias.

Conferenciante: Enrique Flores

Institución: Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis CSIC- Universidad de Sevilla

Fecha: 4 de Marzo.

Título: Cell differentiation and patterning: a Systems Biology approach.

Conferenciante: Marta Ibañez.

Institución: Universidad de Barcelona.

Fecha: 15 de Abril.

Título: Divorciarse del indeseable: una explicación de la evolución de la cooperación

Conferenciante: Luis Izquierdo.

Institución: Universidad de Burgos y Department of Economics. European University Institute. Florencia, Italia.

Fecha: 13 de Mayo.

Título: Playing billiards with electrons.

Conferenciante: Stefan Rotter.

Institución: Institute for Theoretical Physics Vienna University of Technology.

Fecha: 10 de Junio.

Título: Modelling ligand-protein interaction.

Conferenciante: Claudio N. Cavasotto.

Institución: School of Biomedical Informatics, University of Texas Health Science Center at Houston y School of Biomedical Engineering, University of Texas at Austin

Fecha: 18 de Noviembre.

Título: Dinámica y Estructura de Redes Complejas.

Conferenciante: Yamir Moreno.

Institución: BIFI

Fecha: 12 de enero

Título: Ultrafast non-thermal melting of III-V semiconductors

Conferenciante: Jessica Walkenhorst

Institución: University of Kassel, Germany

Fecha: 25 de Febrero.

Título: Aplicación de modelos físicos al empaquetamiento del genoma en virus de ADN de doble hebra.

Conferenciante: Javier Arsuaga.

Institución: Mathematics Department San Francisco State University

Fecha: 30 Marzo.

Título: Reinterpreting Boltzmann's Atomic Conjecture

Conferenciante: Angel Plastino

Institución: Universidad de La Plata, Argentina

Fecha: 28 de junio.

Título: Influencia de la conectividad en el comportamiento de caos colectivo.

Conferenciante: Javier González-Estévez.

Institución: Laboratorio de Física Aplicada y Computacional. Universidad Nacional Experimental del Táchira, Venezuela.

Fecha: 22 de Septiembre.

Título: How environment control selectronic energy transfer and light harvesting.

Conferenciante: Carles Curutchet

Institución: Institut de Química Computacional and Departament de Química, Universitat de Girona

Fecha: 3 de Noviembre.

Título: Development of force fields for atomistic simulation.

Conferenciante: Jorge Kohanoff.

Institución: Queen's University of Belfast, United Kingdom.

Fecha: 25 de Noviembre.

Título: Jarifa: Aprovechando recursos institucionales.

Conferenciante: Daniel Lombraña González

Institución: Universidad de Extremadura.

Fecha: 16 de Noviembre.

Título: Child Language Acquisition: Child-directed Speech and Developing Semantic Networks

Conferenciante: Thomas Hills.

Institución: Department of Psychology Cognitive and Decision Sciences, University of Basel, Suiza.

Fecha: 13 de Diciembre.

1.5 Convenios y Relaciones con otros Centros.

Hemos firmado un Convenio con HP, que supone la puesta en marcha del “**Observatorio Tecnológico HP**”; ubicado en las instalaciones del BIFI y equipado por HP, 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.

Hemos firmado un Convenio de colaboración con el **Centro de Estudios Avanzados de Cuba (CEAC)**, un instituto con líneas de investigación similares a las del BIFI, que supone la cesión de infraestructuras de computación, la colaboración en el proyecto Ibercivis y la celebración de un congreso científico en Cuba en marzo de 2011. A este respecto nos han sido concedidas las ayudas ACI-PROMOCIONA.

Hemos firmado un nuevo convenio de colaboración con **Ibercaja** orientado a financiar el coste de infraestructuras de investigación, tanto de los laboratorios de Bioquímica, Biofísica y Biología Molecular y Celular y Cristalografía como de la infraestructura de Computación, y del traslado al nuevo edificio, valorado en 70.000 €.

Tenemos listos para su aprobación, tras un año de negociaciones y reuniones, los estatutos de la **Fundación Ibercivis**, 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.

El superordenador ciudadano **Ibercivis**, que funciona desde el 2008 a pleno rendimiento en distintas

aplicaciones científicas, se ha desarrollado en colaboración con el CIEMAT, el Ceta (Ciemat) y el CSIC. Desde febrero de 2010 participa en el proyecto Portugal, y otros países como Argentina y Cuba están interesados en el proyecto. 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 Ibercivis 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)

En diciembre se ha realizado en la sede del BIFI la II reunión de la unidad **asociada BIFI-IOF Rocasolano** del CSIC, convenio iniciado en 2007, en el que participa el Grupo de Estabilidad, Plegamiento e Interacción de Proteínas del BIFI, encabezado por Javier Sancho. En el marco de esta relación el investigador del CSIC Pablo Echenique realizará su trabajo de investigación en el BIFI.

El convenio de colaboración con el **CIEMAT** sigue en vigor y ha dado lugar 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.

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.

1.6 El CECAM en Zaragoza. El ZCAM

En 2010 ha comenzado a existir el ZCAM ("Centro Científico de Simulaciones Avanzadas de Zaragoza"), un nacimiento gestado en gran parte gracias al apoyo y colaboración del BIFI – durante este año, de hecho, el soporte técnico y administrativo fue proporcionado por el BIFI. El ZCAM es un miembro de un centro europeo de mayor tamaño, el "CECAM" (www.cecarn.org), una institución distribuida en una serie de nodos por varios países europeos, uno de los cuales está localizado en Zaragoza. En 2010 este nodo, el ZCAM, ha pasado por su fase inicial, que finalizó con la firma de un convenio entre ARAID, el MICINN (que es oficialmente el socio español del CECAM), y la Universidad de Zaragoza. El director del centro es el Prof. Michel Mareschal. El ZCAM está localizado en el mismo edificio donde reside el BIFI. Aparte de espacio para oficinas, está dotado con una sala equipada con 20 ordenadores para la realización de ejercicios prácticos y tutoriales.

El ZCAM (y, en general, todos los nodos del CECAM) se dedicará, en gran medida, a la organización de eventos científicos (talleres, conferencias, tutoriales) para incentivar la investigación en el modelado atómico y molecular. A pesar de las dificultades administrativas y presupuestarias lógicas y esperadas en este primer año de andadura, se han realizado ya en 2010 una serie de conferencias y tutoriales. Todos ellos contaron con una fuerte participación del BIFI.

Symposium de lanzamiento del ZCAM, 27-28 de mayo de 2010: Simulaciones atómicas y moleculares: retos para la próxima década.

El symposium de lanzamiento del ZCAM reunió unos 50 participantes que asistieron a la ceremonia formal de inauguración (presidida, entre otros, por el Secretario de Estado de investigación, Dr. Felipe Pérez). La parte científica del evento consistió en presentaciones desarrolladas por los líderes de la comunidad, recorriendo los variados campos de investigación que involucran las simulaciones atómicas y moleculares.

Tutorial "Herramientas y técnicas básicas para el desarrollo y mantenimiento de software para la escala atómica" (21 a 25 de Junio de 2010).

Este tutorial tuvo como objetivo explicar herramientas de software eficaces para estudiantes y post-docs que deban desarrollar códigos de modelado atómico y molecular. Se desarrolló en la nueva sala de ordenadores del ZCAM, ya que se trataba en gran medida de una actividad práctica. Uno de los miembros del BIFI, Alberto Castro, fue co-organizador del tutorial.

Superficies complejas de energía: métodos computacionales y estadísticos para estudios de "soft matter" (2 a 4 de Junio de 2010).

El propósito de este workshop era dar a los investigadores que trabajan en la caracterización de superficies de energía la oportunidad de diseminar su trabajo y reforzar las colaboraciones existentes, o bien incentivar nuevas colaboraciones. Por otro lado, dadas las notables diferencias en las técnicas utilizadas para analizar superficies de energía, y el amplio número de áreas científicas en las que se estudia este problema, es el momento necesario para compartir los puntos de vista y los éxitos de cada uno de los procedimientos utilizados, para así poder converger hacia métodos computacionales más generales. Varios miembros del BIFI (Pierpaolo Bruscolini, Fernando Falo, Jesús Gómez y Diego Prada) organizaron el evento.

Ligaduras en simulaciones moleculares (2 a 4 de Septiembre de 2010)

Este workshop se dedicó a los problemas relacionados con la imposición de ligaduras en sistemas físicos y, especialmente, en moléculas. Los especialistas internacionales en el tema fueron invitados a tratar sobre los puntos más relevantes en un ambiente distendido y flexible, con el objetivo de alcanzar un punto de vista consensado sobre el estado de la cuestión. Igualmente, el propósito

era interaccionar con áreas diferentes en las que se usa la noción de “ligadura”, como la cinemática de robots. Por otro lado, se discutió sobre técnicas alternativas y sobre los retos numéricos y teóricos principales. Jose Luis Alonso y Pablo Echenique, miembros del BIFI, organizaron el evento en colaboración con Pep Español. Uno de los resultados del workshop será la edición de un libro, un esfuerzo que será liderado por Pablo Echenique.

Bases de datos en Química Cuántica: validación de métodos y de software, y repositorios de resultados computacionales de referencia (22 a 24 de septiembre de 2010)

El tema en este caso era el desarrollo de bases de datos en Química Cuántica. El principal problema: establecer la necesidad de trabajar en el desarrollo de repositorios organizados de datos de Química Cuántica obtenidos mediante métodos computacionales de diferentes niveles. Se discutió sobre los problemas técnicos asociados al diseño, construcción y mantenimiento de estas posibles bases de datos. Varios miembros del BIFI (José Luis Alonso, Pablo Echenique, Jorge Estrada, Angel Rubio y Fermín Serrano) co-organizaron el evento.

1.7 Relaciones con Empresas. Patentes

El BIFI colabora con empresas en el ámbito regional, nacional y europeo. Se realizan proyectos de investigación colaborativa, desarrollo tecnológico e innovación tanto en convocatorias de concurrencia competitiva como mediante convenios bilaterales. Además, el BIFI participa en numerosos foros de colaboración empresarial como son INZA (Innovación en Zaragoza) o la plataforma INES (Iniciativa Española de Software y Servicios) que es la Plataforma Tecnológica Española de Sistemas y Servicios Software, muy relacionada con la plataforma Tecnológica Europea NESSI “Networked European Software and Services Initiative”. También participamos

en la plataforma tecnológica Tecnoebro de difusión de tecnologías.

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

- **Convenio con HP** de puesta en marcha del “OBSERVATORIO TECNOLÓGICO HP”: ubicado en el Edificio del “BIFI” y equipado por HP, orientado principalmente a las ingenierías (también grados de Ciencias) para la realización de proyectos fin de carrera.
- **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.

Durante este último año el grupo dirigido por M. Luisa Peleato ha realizado trabajos que pretenden 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.

- **Zeus Inmunotec.** Como consecuencia de la colaboración con la empresa Zeus-Inmunotec se ha desarrollado un test para detección y valoración de péptidos tóxicos producidos por cianobacterias que en este momento está en comercialización en España, Europa y Norteamérica.
- **OX-CTA** Como consecuencia de la colaboración con la empresa se han puesto a punto



métodos eficaces de destrucción por oxidación de péptidos tóxicos en aguas de consumo humano y ganadero.

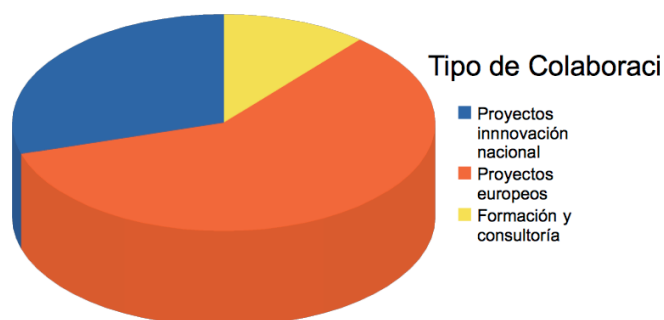
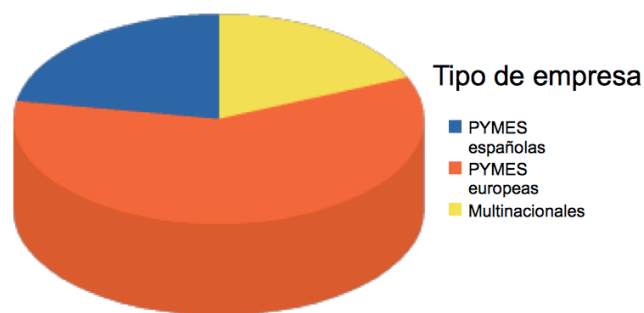
- **Plebiotic SL.** Hemos iniciado un proyecto de desarrollo de software de simulación de dinámica molecular de proteínas en el marco de un convenio entre la Universidad de Zaragoza y la empresa Plebiotic SL.

Colaboramos con numerosas empresas españolas y extranjeras en el marco de los proyectos, en particular europeos, en los que participamos. Algunas de ellas son:

Ibercaja, Hewlett Packard, Eurotech, Adidas, Schnell Software, Atos Origin, Quantum BioInc, iQuestint, Erasmus MC, Jahoma, Correlation Systems, Charity Engine, Gridwisetech, Alca, Stichting Alemeregrid, Platform Computing GmbH, Correlation Systems, Oxalya, Inycom, CS Horizon, Computing For Science.

Empresas colaboradoras con el BIFI

Total 28



Patentes

El grupo encabezado por Javier Sancho ha 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 Zaragoza.

El grupo de José Alberto Carrodegua Villar ha obtenido **dos patentes en España** en 2010 y tiene **una tercera** en preparación:

- Título: Isoformas de PSAP, determinantes antigénicos, método de obtención de anticuerpos y usos de los mismos. N. de solicitud: P200502840. Entidad titular: Universidad de Zaragoza.

La invención se refiere a anticuerpos contra la proteína PSAP/Mtch1 que hemos generado. PSAP es una proteína mitocondrial relacionada con el proceso de muerte celular por apoptosis. Además, interacciona con la presenilina 1, proteasa implicada en la enfermedad de Alzheimer.

- Título: Polipéptidos derivados de la proteína PSAP (presenilin 1-associated protein) capaces de inducir apoptosis y usos de los mismos. N. de solicitud: P200701973. Entidad titular: Universidad de Zaragoza.

La invención se refiere a polipéptidos con actividad apoptótica derivados de la proteína PSAP/Mtch1. Estos fragmentos de la proteína son capaces de inducir muerte celular apoptótica cuando se sintetizan dentro de la célula, y podrían tener utilidad en terapias antitumorales.

Patente en preparación

- Título: Compuestos químicos inductores de muerte diferencial en células madre y células somáticas.

Esta patente se refiere a la identificación de compuestos químicos, mediante cribado funcional de colecciones de compuestos químicos (quimiotecas) que inducen muerte celular específica en células madre, pero no en fibroblastos (células diferenciadas). Esta patente está siendo tramitada por la Universidad de Zaragoza, pero también serán titulares de la misma el Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud y la Universidad de Colonia (proyecto financiado por el I+CS).

1.8 Ayudas obtenidas

Nos han concedido ayudas distintas instituciones públicas y privadas:

- Estamos realizando la compra e instalación de nuevos equipos dentro del Proyecto de nuevas **Infraestructuras de investigación** financiadas por fondos FEDER y del Gobierno de Aragón. Las cuatro instalaciones que se están ejecutando para el Laboratorio de Bioquímica, Biofísica, Biología Molecular y Celular y Cristalografía: Robot de Cristalografía, Biacore para medida de interacciones entre biomoléculas, Calorímetro de titulación isoterma y sistema de análisis de fluorescencia, por un importe de 1.240.000€. En Computación hemos puesto en marcha el proyecto Aragrid y sus instalaciones, mientras el computador del ZCAM y Janus II se realizarán el año 2011 (por un importe de 1.870.000€). En el nuevo edificio hemos instalado finalmente el **difractómetro de rayos X**. En el nuevo proyecto de infraestructuras hemos solicitado la creación de un Centro de Computación y la instalación de un RMN para proteínas.

- El **Convenio con el GA** para investigación y funcionamiento ha mantenido su cuantía, tras

superar con excelente calificación la evaluación externa realizada de cara a la continuidad de la financiación.

- Se ha firmado un nuevo Convenio con **Ibercaja** por 70.000€ que ha sido destinado a los costes de pequeñas infraestructuras asociadas al traslado a los nuevos laboratorios y al significativo aumento de capacidad de los mismos, tanto en biología como en computación.

- Sigue en vigor el convenio para asegurar el funcionamiento de **Caesaraugusta** por una cuantía de 39.000€ anuales en los próximos dos años.

- El proyecto **Ibercivis** ha recibido 20.000€ del GA y 10.000€ de Ibercaja para su desarrollo, disponemos de apoyo de Acciones Complementarias del MICINN, y se han aprobado ayudas para su implantación en Portugal, Argentina y Cuba. En este momento estamos negociando la creación de una fundación con participación del MICINN, ARAID, CIEMAT, CSIC y Universidad de Zaragoza (BIFI) que facilite su financiación.

- El **Congreso** internacional del BIFI recibió ayudas del MICINN, DGA y UNIZAR por un total de 9500 euros, lo que junto con las inscripciones permitió la autofinanciación del mismo.

- Gestionamos **proyectos** plurianuales por un monto superior a los 6 millones de euros (unos 6.500.000 €).

- Disponemos de unas **30 becas** de investigación del MICINN, de la DGA y de entidades extranjeras, asociadas a proyectos para la

realización de tesis doctorales. También dotamos becas puente pre y postdoctorales.

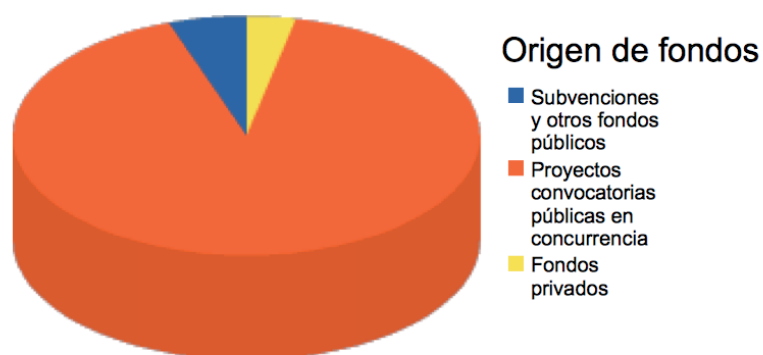
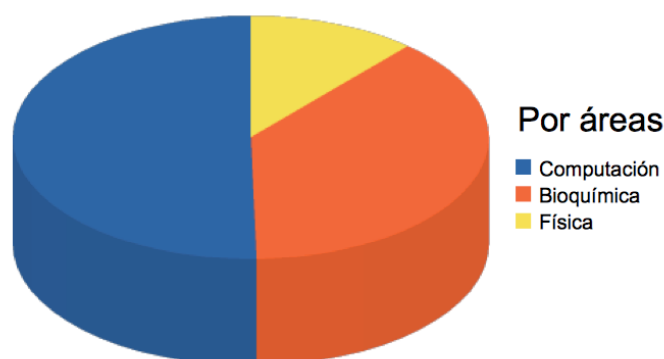
- En 2010 dispusimos de apoyo para la contratación de cinco **técnicos**, tres con fondos del MICINN, dos con fondos del GA y uno con fondos de la Universidad de Zaragoza.

- Participamos en proyectos europeos (PireGRID, EGEE "Enabling Grids for E-science", EDGeS: Scalafrastructure, DEGISCO y EDGI)

- Hemos recibido apoyo del proyecto Universidades de Excelencia.

Presupuesto del BIFI en Zaragoza

Total: 6.500.000 €



1.9 Personal. Contratación investigadores y Técnicos.

- En 2010 se ha incorporado al BIFI como **investigador ARAID** David Iñiguez para trabajar en computación y transferencia de conocimientos, con lo que junto a Adrián Velazquez, Ramón Hurtado y Alberto Castro disponemos de cuatro investigadores del programa ARAID. Tenemos algunos candidatos para la convocatoria internacional que está en tramitación.

- También se ha incorporado como **investigador contratado por la Universidad de Zaragoza**, procedente del programa Ramón y Cajal, Víctor Gopar, con lo que disponemos de cinco investigadores en esta modalidad.

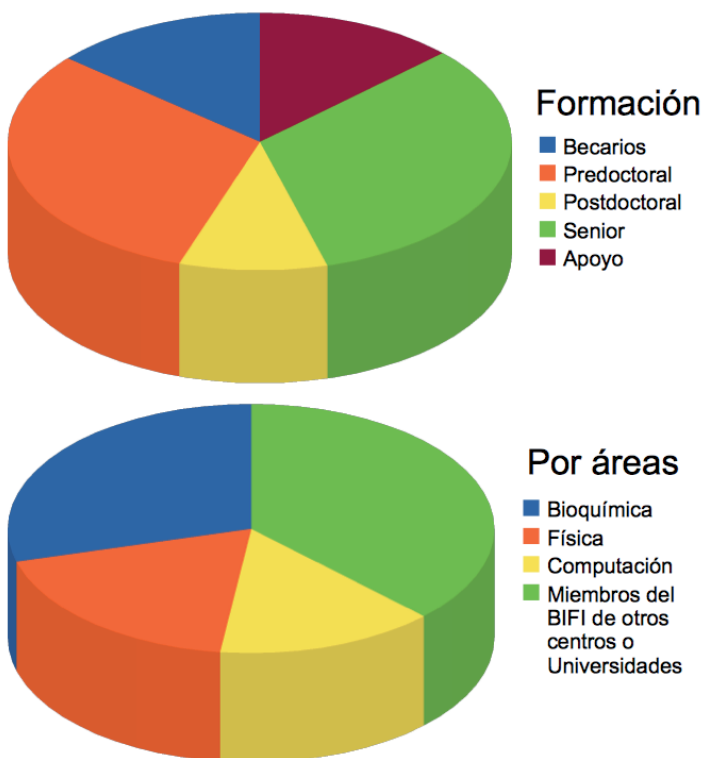
- Pablo Echenique sigue como investigador del CSIC adscrito al BIFI, en virtud del Convenio de Unidad Asociada al Instituto Rocasolano, y Olga Abián con su contrato con el IACS. Como investigador Juan de la Cierva ha estado en el BIFI Angelo Rosa y como investigadores del CIEMAT que trabajan en el BIFI como postdoc en fusión están Luca Rossi y Maxim Tereschenko. Alejandro Rivero colabora en el proyecto Ibercivis. Celia Conesa, investigadora postdoctoral financiada por el PAMER (I+CS).

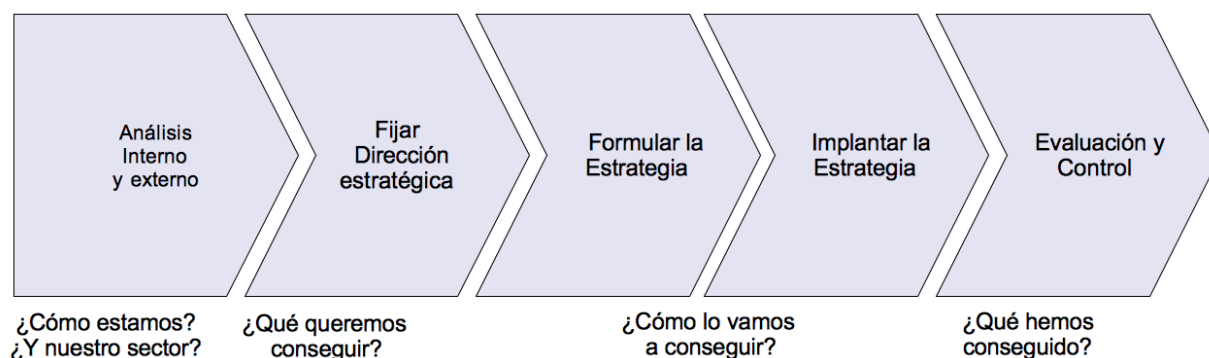
- Como técnicos en Computación para la gestión de nuestros recursos tenemos contratados con cofinanciación **cinco técnicos ingenieros informáticos** dos por el MICINN, dos del GA y uno del CIEMAT. Hemos contratado una nueva **técnico en Biología Molecular**, con lo que disponemos de dos técnicos de laboratorio, uno con apoyo del MICINN y otro de la Universidad. Disponemos también de becarios de distintos programas, algunos de ellos ligados a proyectos públicos o con empresas.

- Isabel Vidal sigue como Técnico de apoyo y Beatriz Antolí como administrativo del BIFI y técnica en innovación, sostenida con fondos propios, en este año en colaboración con el ZCAM.

- Disponemos de unas 30 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.

Personal del BIFI
Total: 175 personas





1.10 Plan Estratégico.

1. Introducción

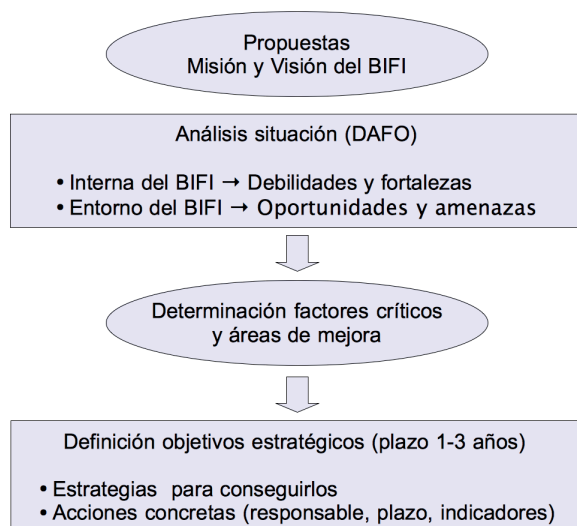
Esta sección presenta la estrategia formulada tras realizar un análisis interno y externo, y tras fijar la dirección estratégica del BIFI.

El equipo de Dirección del BIFI ha planteado este Plan Estratégico como concepto clave en el proceso de conseguir el estado futuro deseado: aumentar la competitividad y visibilidad del BIFI. Se

ha constituido un grupo de trabajo formado por Fernando Falo y Fermín Serrano para proponer este Plan Estratégico y plantear actuaciones y reformas a realizar para un mejor funcionamiento del BIFI. Este grupo de trabajo ha diseñado las fases, ha promovido las actividades y ha recopilado la información.

De esta forma, se ha procedido a completar los siguientes pasos reflejados en el siguiente gráfico:

El presente Plan Estratégico fue aprobado por el Equipo de Gobierno del BIFI en Junio de 2010.



2. Misión y Visión del BIFI

Misión

Realizar investigación multidisciplinar de excelencia y promover sinergias apoyándose en la aplicación de técnicas comunes a sus líneas.

Visión

Ser referencia internacional en Física, Biología y Computación, apostando por la investigación, la transferencia de conocimientos y resultados a la sociedad y la gestión eficiente.

Cultura y Valores del BIFI

- El BIFI es un Instituto de Investigación de la Universidad de Zaragoza. Nacido con una vocación interdisciplinar, el BIFI pretende reunir y establecer sinergias entre investigadores de distintos campos y áreas del conocimiento, especialmente las que están entre la computación, la física y la biología.
- EL BIFI aspira a la excelencia investigadora, promoviendo la máxima calidad en su producción y proporcionando los medios humanos y técnicos para ello.
- El BIFI pretende ser un catalizador a nivel nacional e internacional de la investigación teórica y experimental en las áreas de biocomputación, biología molecular y celular, biofísica y física de sistemas complejos mediante la organización de reuniones nacionales e internacionales.
- El BIFI debe aumentar la autofinanciación mediante la obtención de proyectos en concurrencia competitiva con financiación pública y privada o mediante convenios de colaboración.
- El BIFI está comprometido con la difusión de la cultura científica en la Universidad y en La Sociedad.
- El BIFI está comprometido con la formación de investigadores multidisciplinares.
- EL BIFI aboga por la transmisión del conocimiento a la sociedad mediante la transferencia del mismo a su entorno productivo e industrial.
- El BIFI aspira a ser referente nacional e internacional en la investigación de vanguardia en computación, biología molecular y celular, biofísica y física de sistemas complejos.
- El BIFI aspira a ser un centro de innovación tecnológica en las áreas de su competencia.
- El BIFI quiere ser un foco de formación de científicos y tecnólogos dentro de la Universidad de Zaragoza.

Tras un análisis DAFO se plantean las siguientes estrategias.

Estrategias

Para cada uno de los objetivos se plantean unas estrategias que lleven a su consecución en el medio plazo:

Objetivo 1 Mejorar la efectividad científica	
Estrategias	1.1. Potenciar la investigación interdisciplinar aprovechando sinergias internas y oportunidades estratégicas externas
	1.2. Identificar y rediseñar las líneas de investigación
	1.3. Establecer una clara política de personal científico
Objetivo 2 Aumentar la eficiencia en la gestión	
Estrategias	2.1. Mejorar la política presupuestaria
	2.2. Mejorar la comunicación interna
	2.3. Aumentar la financiación externa en convocatorias públicas de concurrencia competitiva
	2.4. Mejorar la toma de decisiones
Objetivo 3 Impulsar las relaciones con otras instituciones científicas, empresas y estudiantes	
Estrategias	3.1. Mejorar la visibilidad
	3.2. Mejorar la interacción con empresas y la transferencia de resultados
	3.3. Potenciar la incorporación de nuevos estudiantes y doctorandos

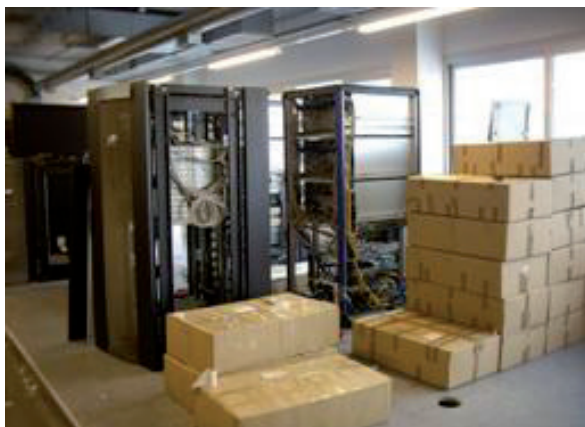
Para cada una de las estrategias planteadas, se presentan acciones concretas a tomar, en un total de 29, junto con los responsables propuestos, los plazos de ejecución y los indicadores de seguimiento y de realización.

2. INFRAESTRUCTURAS E INSTALACIONES

2.1 Laboratorio de Computación y Supercomputación,

2.1.1 NUEVO EDIFICIO

En los primeros días de Marzo de 2010, se produjo el traslado del Área de Computación desde el antiguo Edificio Cervantes de Corona de Aragón, a las nuevas instalaciones del Edificio I+D en el Campus Río Ebro.



Tareas de empaquetado y posterior montaje durante el traslado

El traslado de personas y especialmente infraestructura supuso un auténtico reto para nosotros. En este sentido es necesario reconocer el esfuerzo y la excelente coordinación de todo el personal técnico que participó en esta tarea, que en apenas dos semanas llevó a cabo el traslado y puesta en producción de todos nuestros recursos en el nuevo emplazamiento.



Nuevo CPD en el Edificio I+D

Las nuevas instalaciones del Edificio I+D han supuesto una mejora más que notable en varios aspectos de nuestra actividad:

- Contamos con un nuevo CPD (Laboratorio de Supercomputación + Sala de Control) de 140 m² equipado con todas las instalaciones necesarias: UPS de 120 KVA, climatización industrial, suelo técnico, sistema anti-incendios, servicio de aire comprimido centralizado... Esto nos ha permitido ampliar Terminus y alojar nuevos recursos.
- Los nuevos Laboratorios de Electrónica y Sala Multimedia, son más amplios y están mejor adaptados a nuestras necesidades. También contamos con una nueva Aula de Ordenadores donde poder realizar cursos y talleres.
- Contamos con más y mejores despachos para alojar al personal del Área.
- Hay que destacar otras nuevas ventajas que ha traído el traslado al nuevo Edificio I+D. Por ejemplo, ahora nos beneficiamos de un servicio de mantenimiento de la UZ más amplio y eficiente. Por otro lado, en el nuevo Edificio contamos con Sala de Conferencias y varias salas de reuniones, donde podemos organizar eventos y reuniones

en muchas mejores condiciones que con anterioridad.

2.1.2 LINEA SUPERCOMPUTACIÓN

2.1.2.1 CAESARAUGUSTA

Durante 2010, el BIFI ha seguido gestionando CAESARAUGUSTA, nodo en Aragón de la Red Española de Supercomputación (RES). Esta red, con núcleo en Marenostrum (Barcelona Supercomputing Center), fue creada en 2007 por el MICINN para dar respuesta a las crecientes necesidades de computación de la investigación en España.



A fecha de hoy, CAESARAUGUSTA mantiene su configuración original formada por 512 procesadores PPC64, 24 TeraBytes de almacenamiento y red de interconexión Myrinet.

En este año se ha vuelto a obtener financiación del MICINN en la convocatoria para mejora de ICTSs (Instalaciones Científicas y Tecnológicas Singulares) que en esta ocasión va a permitir ampliar el sistema de refrigeración del CPD que alberga el supercomputador. También cabe destacar las mejoras llevadas a cabo en colaboración con la Unidad de Mantenimiento de la UTC, con el fin de optimizar el sistema de climatización actual y

mejorar la monitorización de todos los sistemas envueltos.

Durante 2010, en CAESARAUGUSTA se han computado 3.000.000 horas de CPU; 2.018.000 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 950.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité local (20% de tiempo restante).

Con la inminente aprobación de los estatutos de la RES por parte del MICINN, se prevé que durante 2011 se produzcan nuevas incorporaciones al grupo de 8 nodos que en estos momentos participamos en el proyecto.

El BIFI ha albergado en 2010 algunos importantes eventos organizados en el marco de la Red Española de Supercomputación:

- III Jornada de Usuarios de la RES (1 Julio 2010)
- Seminario científico "Parallel Simulations in the Network" (30 Noviembre 2010)



Imágenes III Jornada de Usuarios de la RES

A lo largo del año también se han realizado varias reuniones (presenciales y por videoconferencia) de coordinación con el resto de integrantes de la RES. Del mismo modo, hemos participado y en algunos casos colaborado en la organización de varios seminarios técnicos organizados en otros nodos de la Red (Barcelona y Santander).

Como fruto de los proyectos internos llevados a cabo entre los miembros de la RES, el BIFI ha puesto en marcha un mirror privado a través del cual se sincronizan los sistemas operativos de todos los nodos de la Red. Del mismo modo, hemos iniciado un PFC para el desarrollo de una herramienta gráfica que trate de integrar los diversos tipos de información que se generan en la RES: monitorización, accounting, red...

Igualmente se ha continuado con la labor de divulgación ofreciendo visitas guiadas a CAESA-RAUGUSTA para grupos interesados.



Visita alumnos "Técnicas Informáticas", 1º Físicas UZ. 28 Enero 2010

2.1.2.2 TERMINUS

Terminus es la plataforma de cálculo más potente que se encuentra alojada en el nuevo Laboratorio de Supercomputación del BIFI en el Edificio I+D. Se trata de un cluster de memoria distribuida bajo OpenSUSE GNU/Linux con 1,6 TB de memoria RAM (distribuida), 12 TB de almacenamiento sobre Lustre y redes Infiniband y Gigabit Ethernet, que en estos momentos cuenta ya con más de 800 procesadores, todos de arquitectura de doble precisión ("em64t" = 64-bit).

Los últimos equipos de 32 bits que integraban Terminus (32 procesadores Pentium IV) fueron donados durante 2010 al Instituto CEAC de Cuba, como parte de un convenio de colaboración.



En total se cuenta con una potencia de cálculo superior a los 8 TeraFLOPs, lo que lo sitúa entre los superordenadores más potentes de España, como hemos podido comprobar en el reciente catálogo de recursos HPC que se está elaborando desde el Área de Supercomputación de la Red Española de Ciencia.

Más de 100 investigadores del BIFI o colaboradores suyos poseen cuenta en Terminus, donde durante 2010 han ejecutado 3,25 millones de horas de CPU.

Programa Hosted Clusters

Con las posibilidades de crecimiento que ofrecen las nuevas instalaciones, este año hemos decidido dar un impulso al programa "Hosted Clusters", un servicio del BIFI que permite a los grupos de investigación con financiación para infraestructura pero sin personal dedicado ni unas instalaciones apropiadas, gozar de una solución completa de hosting para sus recursos de supercomputación.

El BIFI

El Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) es un centro de la Universidad de Zaragoza dedicado a la investigación interdisciplinar en computación aplicada a la física de sistemas complejos y los sistemas biológicos.

Por su dilatada experiencia en el campo de la supercomputación, el BIFI cuenta con infraestructuras y personal técnico especializado en el manejo de hardware de altas prestaciones para uso científico.

Nuestro CPD

El BIFI cuenta en sus instalaciones del Campus Río Ebro con un CPD de 140 m² equipado con UPS, climatización industrial, suelo técnico y sistema anti-incendios.



El programa Hosted Clusters del BIFI permite a los grupos de investigación con financiación para infraestructura pero sin personal dedicado ni unas instalaciones apropiadas, gozar de una solución completa de hosting para sus recursos de supercomputación.



Instituto de
Biocomputación y Física
de Sistemas Complejos
Universidad de Zaragoza

Campus Río Ebro
Mariano Esquivel, Edificio I+D
50018 Zaragoza
hosted.clusters@bifi.es / http://bifi.es
Telf: (+34) 976762992
Fax: (+34) 976762990

PROGRAMA
HOSTED
CLUSTERS
Servicio de alojamiento de
hardware para supercomputación
BIFI - Universidad de Zaragoza



Cabe destacar que más del 75% de los recursos integrados en Terminus pertenecen a Hosted Clusters. Al grupo de 5 hosted clusters existentes hasta ahora (BIOCOMPLEX, CONMAT, JSS, MMT y RTN4) se acaba de incorporar un nuevo grupo de investigación del CSIC-Estación experimental de

Aula Dei y existen conversaciones para la incorporación de otros grupos ajenos al Instituto.

2.1.3 LINEA GRID COMPUTING

2.1.3.1 PIREGRID

PireGrid es un proyecto de cooperación transfronteriza España-Francia cofinanciado por el programa europeo Interreg IV A del POCTEFA que tiene una duración de tres años (2009-2012).

Durante este primer año y medio de proyecto se han realizado las siguientes tareas:

A nivel de infraestructura, se ha desplegado una infraestructura grid gLite completamente funcional entre España y Francia (Zaragoza , Pau y Toulouse). También se han evaluado posibles interfaces de usuario para facilitar el acceso al grid.

En la parte de transferencia, se ha llevado a cabo un estudio de mercado para evaluar las necesidades tanto de computación como de almacenamiento de las PYMES, que derivó en la celebración de un evento público de presentación a las empresas.

Se contó con la presencia destacada del Director General de Tecnologías para la Sociedad de la Información del Gobierno de Aragón, D. Miguel Ángel Pérez Costero. Se realizaron diferentes exposiciones relacionadas, destacando la presentación del primer caso de éxito en portar una aplicación empresarial al entorno de PireGrid.

En colaboración con la empresa Schnell Software, se desarrolló una aplicación para la optimización del corte de ferralla, que aprovecha la potencia de cálculo del grid para obtener soluciones mejores en mucho menos tiempo de lo que tardaría en recursos computacionales normales.

Toda esta información se puede ampliar en la web <http://www.piregrid.eu> y en el WIKI colaborativo <http://wiki.piregrid.eu>



Evento público de presentación de PireGrid a empresas



Participantes en la reunión técnica de PireGrid

2.1.3.2 ARAGRID

AraGrid es una infraestructura científico-tecnológica financiada con fondos FEDER.

Esta red servirá para dar servicio de cálculo a los investigadores, acercar las empresas a esta tecnología y será un catalizador para que otros grupos,

instituciones públicas y privadas integran sus recursos propios en la grid aragonesa, dado que esta tecnología es perfectamente escalable.

AraGrid consta de 4 nodos: un nodo central de gestión global situado en el BIFI (Zaragoza-Campus Río Ebro) y otros tres nodos de cálculo con servicios de respaldo, localizados en la Facultad de Ciencias (Zaragoza-Campus San Francisco), EPSH en Huesca y EUPT en Teruel.

Cada uno de los nodos contará con aproximadamente 480 cores de cálculo para un total de unos 2000 en toda la infraestructura. Del mismo modo, se contará con 40 Terabytes de almacenamiento por site y 9,6 Terabytes de RAM en total.

Actualmente se ha resuelto la adjudicación del proveedor de las máquinas, que ha recaído en HP (Hewlett Packard).

Los acondicionamientos de las salas que albergarán dicha infraestructura en Huesca (EPSH) y en Teruel (EUPT) están a punto de finalizar, por lo que el despliegue definitivo de la infraestructura se llevará a cabo durante principios de 2011.

Gracias a esta infraestructura, se conseguirá una verdadera articulación del territorio de Aragón, aprovechando la red de comunicaciones autonómica ya existente y estando en conexión constante con iniciativas a nivel nacional y europeo. El nodo aragonés asegurará su integración con los nodos existentes a nivel nacional (Ibergrid, que da servicio a España y Portugal) y europeo (EGI), gracias a un sistema basado en middleware gLite. Todo ello ayudará a colocar la región de Aragón en la vanguardia de la investigación.

Más información en <http://www.aragrid.es>

2.1.3.3 EGEE III – EGI InSPIRE

El proyecto EGEE III, en el que la principal tarea del BIFI es el mantenimiento y soporte técnico tanto a nivel de infraestructuras como de usuarios de la VO de fusión, finalizó en mayo de 2010, pero tiene su continuación natural dentro del proyecto EGI-InSPIRE

El proyecto EGI-InSPIRE (Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe - <http://www.egi.eu/projects/egi-inspire/>) comenzó el 1 de Mayo de 2010, cofinanciado por la Unión Europea y tiene una duración de cuatro años. Se trata de una colaboración que envuelve a más de 50 instituciones pertenecientes a unos 40 países diferentes.

Su misión principal es la de establecer y gestionar una infraestructura Grid Europea (EGI). Del mismo modo, dentro de sus objetivos está la de albergar conjuntamente todo tipo de recursos distribuidos como puedan ser el Cloud Computing, redes de supercomputación, recursos de computación vo-

luntaria o desktop grids para el aprovechamiento por parte de los investigadores de toda Europa.

En este nuevo modelo jerárquico de gestión de la infraestructura grid, entra en acción la figura de las Iniciativas Grid Nacionales (NGIs), las cuales son las encargadas de velar por el correcto funcionamiento de los recursos a nivel de cada país. En nuestro caso, el BIFI forma parte también de la iniciativa es-NGI (<http://www.e-ciencia.es/ngi/>), que junto con Portugal forman la iniciativa IBER-GRID, que sustituye a la antigua SouthWest Federation y que gestiona las operaciones técnicas de grid entre ambos países con respecto a EGI de forma conjunta.

El BIFI, sigue manteniendo su rol de gestor de la VO internacional de fusión, administrando los servicios centrales y dando soporte a los usuarios de dicha comunidad.

2.1.3.4 OMNI-DATA

En este proyecto financiado por los gobiernos de Aragón y de Aquitania (Francia), el BIFI ha contribuido con la infraestructura de Piregrid a simular y tratar grandes cantidades de datos provenientes de complejas redes de sensores, así como a evaluar los workflows científicos usados.

2.1.4 LINEA COMPUTACIÓN VOLUNTARIA

2.1.4.1 IBERCIVIS

Ibercivis se ha consolidado como iniciativa de computación voluntaria española. Se trata de una importante infraestructura de e-ciencia y de una plataforma de divulgación científica que acerca la ciencia a la sociedad a través de colaboraciones con institutos, asistencia a ferias y presencia en Internet.

En diciembre de 2010 contó con más de 20.000 usuarios conectados desde su lanzamiento en junio de 2008, con una media de 10.000 cores conectados diariamente. Son 10 las aplicaciones que hasta el momento se han lanzado en Ibercivis:



Fusión

Una estrella en tu ordenador



Docking de proteínas

En busca de fármacos contra el cáncer



Materiales

Simulación de sistemas magnéticos



Adsorción

Simulación de fluidos moleculares confinados



Neurosim

Una inmersión en la estructura molecular de la memoria



Nanoluz

Luz a escala nanométrica



Amiloide

Búsqueda de fármacos para enfermedades amiloides neurodegenerativas



Cuanticables

Simulación de cables cuánticos



Sanidad

Simulación del transporte de partículas



Criticalidad

transporte electrónico en sistemas desordenados con propiedades fractales

En 2010 se han lanzado 3 nuevas aplicaciones: Cuanticables, una aplicación de la Universidad de Buenos Aires sobre cables cuánticos; Criticalidad, transporte electrónico en sistemas desordenados en la transición de Anderson, del Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla en México y Sanidad, simulaciones de Monte Carlo aplicadas a la sanidad, del Servicio de Radiofísica y P.R. Hospital Universitario Puerta del Mar de Cádiz.

Ibercivis para investigadores

Ibercivis es una plataforma de computación voluntaria dirigida a investigadores de diferentes áreas cuyas necesidades de cálculo son elevadas. Cualquier instituto de investigación puede entrar en contacto con el equipo de Ibercivis. Sólo es necesario rellenar el documento "Cuestionario nuevas aplicaciones" que se encuentra en la web en Ibercivis > Investigación > Lanza tu aplicación y enviarlo a desarrollo@ibercivis.es. Las aplicaciones apropiadas para ser ejecutadas en Ibercivis son aquellas aplicaciones relacionadas con la ciencia que reúnen las siguientes características:

- Interés científico-tecnológico

- Runs segmentables en periodos cortos, sobre 30-60 minutos cada uno.
- Uso de RAM inferior a 500 Mbytes
- Paralelismo nulo
- Input/output bajo para cada job (del orden 1

Mbyte máximo) para no saturar el ancho de banda comercial

- No necesitan licencias
- Necesidad de ejecutar del orden de millones de jobs.

El equipo de desarrollo de Ibercivis analizará los proyectos que se propongan para su ejecución. Aquellos que cumplan los requisitos, serán aprobados y se colaborará con el grupo de investigadores para realizar los cambios necesarios en el código para que pueda ser ejecutado eficientemente en la arquitectura de Ibercivis.

Expansión del proyecto

2010 ha sido un año de expansión para el proyecto Ibercivis.

En febrero de 2010 se presentó oficialmente en Portugal como iniciativa hispano-lusa. Esta expansión ha sido a nivel de infraestructura, de aplicaciones y a nivel político.

En infraestructura se ha duplicado el scheduling, teniendo actualmente uno en Zaragoza y otro en Lisboa. También dispone de un servidor de upload

y download para aplicaciones y un servidor web para alojar la página de Ibercivis.

A nivel de aplicaciones se ha cumplido un año desde el lanzamiento de Amiloide del Centro de Neurociencia Computacional y Biología Celular (CNC) de la Universidad de Coimbra, y para celebrarlo han realizado un vídeo-trailer disponible en la web.

También se presentó oficialmente en Buenos Aires, donde la financiación recibida por parte del Ministerio no sólo ha facilitado la incorporación de la aplicación Cuanticables, sino que se están preparando Unidades Didácticas en colaboración con profesores de centros de enseñanza de Zaragoza. Estas Unidades didácticas están enfocadas a acercar el grafeno (aprovechando el Premio Nobel de Física 2010) a los estudiantes de bachillerato de distintos centros de Argentina, para dar a conocer el proyecto Ibercivis así como la actividad científica que se está llevando a cabo en su país.

Además de Argentina, Ibercivis también está colaborando con el Centro de estudios Avanzados de Cuba, donde han realizado las primeras pruebas de instalación de BOINC en máquinas y de testeo de la red.

También se está preparando la asistencia al congreso de la Habana, donde Alejandro Rivero ofrecerá una charla sobre la computación voluntaria.

Al mismo tiempo se realizarán actividades de divulgación en centros de enseñanza cubanos.

Estas tareas se encuentran dentro de los proyectos de Colaboración Hispano-Argentina y Colaboración Hispano-Cubana que en noviembre de 2009 recibieron la aprobación de ayudas del plan Nacional de I+D, Subprograma Fomento de Cooperación Científica Internacional (FCCI) en la modalidad ACI-promociona.

En la actualidad estamos empezando una colaboración con el País Vasco para llevar Ibercivis a centros de formación (KZguneas) tanto para la instalación en los equipos como para hacer divulgación entre la ciudadanía. Además han mostrado mucho interés en llevar las Unidades Didácticas a las aulas y fomentar las carreras científico-tecnológicas entre los jóvenes.

Ibercivis participa en 2 importantes propuestas a nivel europeo del VII Programa Marco:

- EDGI: Interconexión de Grids, Desktop Grids y Clouds a nivel Europeo.
- DEGISCO (Desktop Grid for International Scientific Collaboration): Expansión de Desktop Grids.

Fundación Ibercivis

La consolidación de Ibercivis como Fundación es un paso clave a nivel estratégico e institucional. Se han redactado los Estatutos de la Fundación Ibercivis y se ha invitado a colaborar al CIEMAT, al Ayuntamiento de Zaragoza, a la Dirección General de Aragón, al Ministerio de Ciencia e Innovación, red.es/RedIRIS y CSIC. Se está trabajando por lo tanto en crear una Fundación sin ánimo de lucro que asegure la permanencia del proyecto y que conceda a este proyecto una estructura formal y un carácter legal. La fundación Ibercivis otorgará a los participantes diferentes tareas y responsabilidades, según su nivel de implicación.

Esperamos que los Estatutos puedan firmarse en Febrero de 2010. Debemos destacar la inclusión por parte del Ministerio de Ciencia e Innovación de una Nominativa en el Borrador de los Presupuestos del Estado por valor de 60.000 €.

Actividades de divulgación

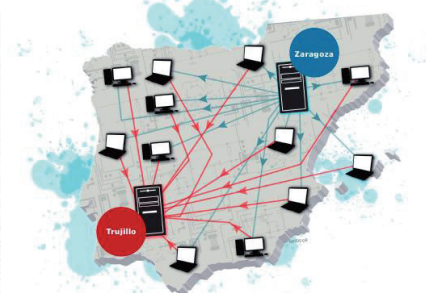
Desde su nacimiento Ibercivis cuenta con una página web donde se puede obtener información



15.000 personas ceden potencia de sus ordenadores para agilizar investigaciones

Científicos aragoneses dirigen un proyecto que aprovecha el rendimiento de los computadores personales para contar con una gran capacidad de cálculo y poder estudiar fármacos contra el cáncer o nuevas fuentes de energía

ZARAGOZA. Cualquier persona puede ayudar a buscar fármacos contra el cáncer, mejorar los tratamientos que se producen en los hospitales o sentir las horas de los días de forma diferente en la vida de una y solo con un ordenador conectado a Internet. Un novedoso proyecto de computación distribuida por investigadores de la Universidad de Zaragoza permite que los ciudadanos cedan voluntariamente su capacidad de cálculo de sus ordenadores personales a los científicos. La suma de esos pequeños recursos permite a los científicos disponer de un recurso con un rendimiento comparable al de los mejores supercomputadores que existen y que están agitando los proyectos de investigación que desarrollan el proyecto científico. Desde que hace años y muchos científicos a funcionar en esta forma, denominada Ibercivis, más de 15.000 personas de España y Portugal se han adherido a ella y se espera que esa cifra crezca en los próximos meses.



LA CLAVE DEL SISTEMA: DIVIDE Y VENCERÁS

Hacer millones de ensayos virtuales para ver cómo funcionan una molécula o qué tipo de moléculas pueden ser útiles para tratar una enfermedad es un trabajo muy costoso. Pero, si se divide el trabajo en millones de pequeños, cada uno de ellos puede ser realizado por un ordenador personal. En la práctica, se hace un ensayo virtual para ver si una molécula funciona o no. Si funciona, se pasa a la siguiente molécula. Si no funciona, se descarta. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada.

Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada. Este proceso se repite millones de veces para encontrar la molécula más adecuada.

sobre el proyecto. Sus nuevos contenidos, blogs, hemeroteca, sala de prensa, descargas o las últimas novedades intentan despertar el interés de la ciudadanía no sólo en la computación ciudadana sino en los contenidos y resultados de las investigaciones que forman parte de esta plataforma. El diseño y la interactividad de la nueva web responden así a las necesidades y tendencias de la sociedad actual. La información se puede encontrar en español, inglés y portugués. Un contenido muy interesante de la web es el mapa de visualización de la actividad de Ibercivis en tiempo real: se puede observar cómo los trabajos son enviados por los servidores a los usuarios y de ellos se devuelven los datos a los servidores de almacenamiento.

Ibercivis ha aparecido en diversas publicaciones como la noticia publicada el 3 de enero de 2010 en el Heraldo de Aragón, que supuso semanas después la aparición en el programa de humor

Oregón Televisión con una parodia del proyecto. También se publicó la entrevista realizada a Francisco Castejón de la aplicación Fusión en el Cultural de El Mundo. En noviembre de 2010 Aragón Televisión y Zaragoza TV emitieron en sus espacios de noticias reportajes sobre el proyecto Ibercivis entrevistando a su director Alfonso Tarancón y a uno de sus usuarios.

Sin duda 2010 ha sido un año en el que Ibercivis ha potenciado su presencia en las redes sociales. La página de Ibercivis de Facebook cuenta con más de 900 fans y también se ha creado perfil en Tuenti y Twitter.

En Septiembre de 2010 tuvo lugar el 1er Workshop de Ibercivis donde investigadores, desarrolladores y miembros de comunicación debatieron sobre el estado actual del proyecto en cada uno de sus ámbitos. Fueron 2 días de actividad muy bien valoradas por sus asistentes y que hacen casi obligatorio una segunda edición para 2011.

Ibercivis también estuvo presente en el stand preparado por el BIFI en el Pabellón de la Ciencia en Octubre de 2010 en la Feria de Muestras de Zaragoza con el fin de mostrar a los ciudadanos qué es Ibercivis y cómo se puede participar en la investigación científica desde casa.



Otras actividades de divulgación realizadas:

- Premio ECODES, Fundación Ecología y Desarrollo donde la propuesta de instalar Ibercivis en salas de usuarios de la Universidad y el uso por parte de investigadores fue premiada en la categoría Lucha contra el cambio climático.
- Concurso de Felicitaciones navideñas para los usuarios de Ibercivis.

Financiación

Ibercivis ha recibido financiación del Ministerio de Ciencia e Innovación en forma de Acciones Complementarias con una cantidad concedida de 100.000€.

De la FECYT se han obtenido 10.000€.

También la DGA y la Universidad de Zaragoza han concedido 3.900€ en ayudas para la realización de Workshop Ibercivis.

Estamos a la espera de la resolución del programa CYTED, en el que solicitan ayudas para la creación de una Red Temática de Computación Voluntaria en Iberoamérica con Argentina, Brasil, México, Cuba, Portugal y España.

2.1.4.2 EDGeS

EDGeS (Enabling Desktop Grid for e-Science) es un proyecto FP7 donde el BIFI ha participado como subcontratado para portar la aplicación de fusión a la infraestructura mixta de Desktop Grids y Service Grids.

2.1.4.3 EDGI

EDGI (European Desktop Grid Initiative) es otro proyecto europeo FP7 donde se investiga la inter-

conexión de Grids, Desktop Grids y Clouds a nivel Europeo. En EDGI el BIFI representa a Ibercivis liderando la gestión de calidad y dando soporte a usuarios en producción. El BIFI también gestiona la International Desktop Grid Federation. Cabe destacar que el BIFI organizó el 1er internal meeting de este proyecto en Octubre.

En EDGI, junto con DEGISCO, se ha creado la International Desktop Grid Federation. La IDGF es una organización que reúne entre sus 60 miembros a gente de empresas, universidades e institutos que están interesados en usar este tipo de infraestructuras de cálculo y que desean intercambiar experiencias con otros. La federación ofrece varios servicios a sus miembros: reuniones presenciales, talleres y tutoriales, biblioteca de documentación, tablón de mensajes, un portal y la ayuda de expertos. Los miembros de la IDGF cuentan con una amplia experiencia en Desktop Grids y Cloud Computing y tienen la oportunidad de encontrarse online o personalmente con otros desarrolladores y usuarios de Desktop Grid.

2.1.4.4 DEGISCO (Desktop Grid for International Scientific Collaboration)

En este proyecto FP7 se da soporte para ampliar EDGeS a nivel mundial. El BIFI participa consolidando Ibercivis como la iniciativa de computación voluntaria en los países de habla hispana y portuguesa.

2.1.5 LÍNEA ORDENADORES DEDICADOS

Durante 2010 el ordenador dedicado Janus ha cumplido un año 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 pero se han encontrado con una dificultad insalvable: la potencia necesaria para simular estos sistemas esta más allá del alcance de los más potentes ordenadores del mundo.

Sin embargo Janus, al adaptar 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:

A. Tarancón, A. Cruz, R. Alvarez, J. Monforte.
J.M Gil: BIFI Zaragoza

D. Navarro, I3A Zaragoza

L.A. Fernández, V. Martín Mayor, A. Muñoz Sudepe, 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. Gaviro (BIFI) de la Univesidad de Roma I, La Sapienza

R. Tripiccion, F. Mantonvani, Universidad de Ferrara

P. Young, Universidad de California (USA)

Se han publicado varios artículos científicos gracias a los resultados obtenidos con Janus en diversas publicaciones Físicas de impacto, como el Physical Review Letters y el Journal of Statistical Mechanics. En la actualidad están desarrollándose cuatro tesis doctorales en torno a Janus.

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

Hemos logrado termalizar hasta retículos de tamaño 32 y calcular la temperatura crítica y los exponentes críticos con gran precisión.

El punto mas 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.

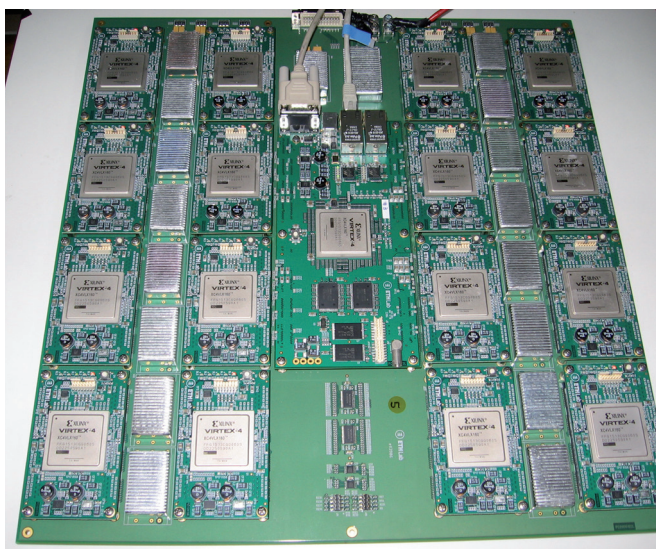
Se ha conseguido desarrollar implementaciones de algoritmos de Parallel Tempering dentro de la lógica reconfigurable de Janus, utilizando microprocesadores embebidos en hardware que solamente se utilizaba para comunicación y no para cálculo.

Se ha desarrollado una versión que permite la paralelización de hasta 16 FPGA para poder realizar simulaciones de retículos de tamaños hasta ahora inalcanzables para Janus. Esto nos permitirá en un futuro muy próximo pasar a simular retículos de tamaños tan grandes como 256.

Se han venido realizando las simulaciones necesarias para el estudio del comportamiento del sistema fuera del equilibrio, que da importantes informaciones acerca de la estructura del vacío del modelo.

También se ha comenzado con el estudio del comportamiento de sistemas para el modelo de Edward-Anderson en 4 dimensiones.

Para el correcto uso de la infraestructura se dispone de 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.



Vista del interior de la máquina Janus compuesta por FPGAs

Dentro de la convocatoria de Fondos FEDER para infraestructuras, se dispone 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 a utilizar (CPU, GPUs, FPGAs, ASIC...) como la topología de las conexiones, tipo y cantidad de memoria, etc.
- Diseñar la placa base y el modulo 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 o 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, Intel+FPGA, GPU+FPGA serán analizadas.

En este sentido, se ha establecido contacto con varios investigadores del panorama internacional para realizar estudios de eficiencia sobre algunas aplicaciones candidatas de ser portadas a la nueva generación de Janus, con el objetivo de facilitar la toma de decisiones respecto a las arquitecturas con las que se podría diseñar la nueva máquina.

Existe un problema adicional en el desarrollo del proyecto Janus II. Los grupos de investigación disponen de sus aplicaciones desarrolladas para or-

denadores 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 deben ser modificados, en la practica reescritos completamente, para adaptarse a su arquitectura. Este proceso, llamado Porting, es largo y complejo, y no puede ser llevado a cabo por el personal que desarrolla Janus II solo, 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.

Del mismo modo que en el estudio de eficiencia, se han establecido contactos y varias reuniones con grupos de investigadores de otros campos, para tratar de buscar colaboradores, usuarios, y aplicaciones susceptibles de ser portadas en la siguiente o en sucesivas generaciones de Janus.

2.1.6 LABORATORIO DE VISUALIZACIÓN Y REALIDAD AUMENTADA

Infraestructura propia

El laboratorio se ha trasladado a la Sala Multimedia del nuevo edificio. Este laboratorio contiene:

- Infraestructura de visualización estéreo pasivo (proyectores, filtros polarizados, pantalla que mantiene la polarización y gafas)
- Infraestructura de inmersión (cámaras infrarrojas, indicadores, altavoces, mando bluetooth wiimote y dispositivo Kinect)

El sistema completo permite visualizar en estéreo y posicionarse dentro de diversas escenas, en tiempo real o mediante un video. En el ordenador



se generan dos imágenes equivalentes, una para el ojo izquierdo y otra para el ojo derecho. Cada imagen se muestra con un proyector y se visualizan en la misma pantalla. La luz de la imagen izquierda pasa por un filtro polarizador, y la luz de la imagen derecha pasa por otro filtro polarizado ópticamente ortogonal al primero. Este sistema utiliza gafas con cristales de polarización circular: el ojo derecho ve la imagen creada para el ojo derecho y el ojo izquierdo su correspondiente. El sistema de posicionamiento óptico con 12 cámaras infrarrojas permite ubicar al usuario en la escena y junto con un mando bluetooth permite interactuar con la aplicación. También hay 6 altavoces situados alrededor del sistema que permite un sonido surround.

Materiales audiovisuales desarrollados

El BIFI ha desarrollado sus propios algoritmos de simulación y la aplicación de visualización junto con el CIEMAT. También se utilizan diversas aplicaciones software del mercado para visualizar las proteínas con las que el BIFI trabaja.

Dado que este sistema se ha trasladado a diversos eventos públicos, se han creado varios vídeos explicativos del sistema y de las investigaciones realizadas con él.

Tras el éxito del software en fusión se ha decidido abrir una nueva línea de desarrollo para divulgación de la física en institutos y colegios. De esta manera se pretende dar a conocer los procesos físicos de una manera más amigable, amena y divertida. Estas unidades didácticas permitirán interactuar con los elementos de la escena, cambiar valores y parámetros y hasta introducirse en ella.

Actualmente se están siguiendo dos líneas de desarrollo, una en 3D y otra en realidad aumentada.

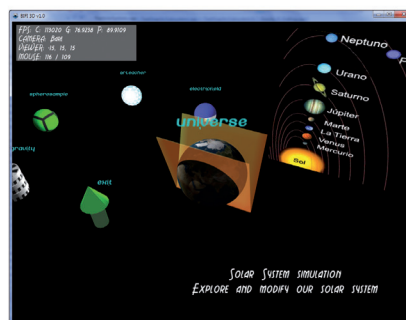
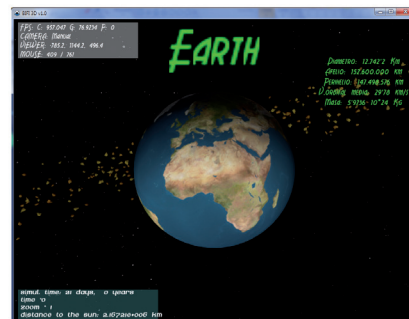
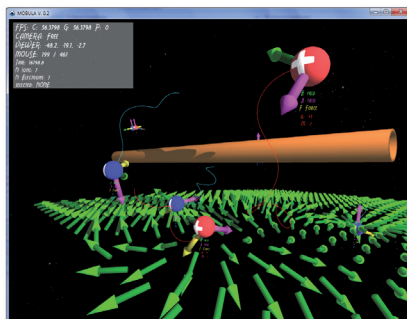
Las aplicaciones en 3D permiten ser ejecutadas en un ordenador de sobremesa en modo mono, con un par de proyectores en modo estéreo o añadirle inmersión con las cámaras de posicionamiento y el mando bluetooth en modo tracking. Ejemplos de aplicaciones son las siguientes:

- Aplicación de gravitación universal: representación del sistema solar, algoritmos de simulación de movimientos de los planetas, interacción para cambiar parámetros, modificar trayectorias, etc.

- Aplicación de campo eléctrico y magnético: representación de iones y electrones en el espacio, algoritmos de simulación de propiedades eléctricas y magnéticas, representación de vectores de fuerzas, valores de velocidad, carga y masa, posibilidad de modificar estos valores, representación de la malla de campo eléctrico, etc.

La Realidad Aumentada (RA) es el término usado para definir la aplicación de elementos virtuales superpuestas en imágenes reales obtenidas por una cámara. La diferencia sobre la realidad virtual, es que no se sustituye el mundo real, sino que se le añade información de interés al mismo.

Como una expansión al motor gráfico desarrollado para las aplicaciones en 3D, se han desarrollado herramientas que permiten la realización de aplicaciones didácticas basadas en Realidad Aumentada. Para ello se ha añadido al motor gráfico la capacidad de reconocimiento de marcadores con lo que se puede obtener la posición de objetos reales dentro de una imagen obtenida



con una cámara. También se ha añadido la capacidad de pasar de un punto en coordenadas de la



imagen (pixels) a sus coordenadas reales (sistema métrico), con lo que podemos obtener una descripción completa de los elementos señalados con marcadores dentro de la imagen.

Para una primera demo de las nuevas capacidades del motor gráfico, se están desarrollando simulaciones de experimentos científicos simples, sobre los cuales se podrá añadir información adicional para que se puedan explicar de forma más sencilla al público objetivo de los mismos (estudiantes de institutos de secundaria).

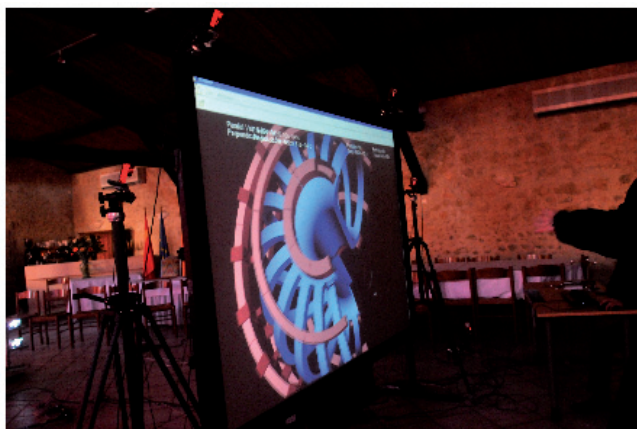
Para que estas unidades didácticas lleguen al mayor número de gente posible, se están desa-

rollando las diferentes aplicaciones para que el coste de instalación de las mismas sea el mínimo posible, por lo que se están usando webcams y ordenadores de gama media.

Demostraciones realizadas

A continuación enumeramos las demostraciones realizadas en 2010:

- Museo de la Ciencia de Terrasa, Expo Fusión 2010
- ITER Cadarache, 2009 y 2010. Se presentó la herramienta al Consejo de ITER en Cadarache y a S.M. Príncipe Alberto de Mónaco
- Visita del Consejero de Economía de la DGA, D. Alberto Larraz
- Numerosos workshops realizados en el Edificio I+D y visitas de Institutos de Educación Secundaria



2.1.7 OTROS

2.1.7.1 COLABORACIÓN CON EL CENTRO DE ESTUDIOS AVANZADOS DE CUBA (CEAC)

La colaboración hispano-cubana por parte del BIFI (Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos) y del CEAC (Centro de Estudios Avanzados de Cuba) comenzó en el verano del 2009, con la visita de una delegación científica cubana a las instalaciones del BIFI. De esta reunión, y de los puntos comunes en investigación de ambos centros, surgió una colaboración que ha estado apoyada por el Ministerio de Ciencia e Innovación y la Universidad de Zaragoza.

Donación del clúster

En Enero de 2010, el BIFI donó al CEAC (a través de la Universidad de Zaragoza) un supercomputa-

dor de memoria distribuida formado por 32 nodos de cálculo, 2 servidores, 1 SAI 2.4KVA, 2 switches gigabit 48ports, 1 KVM, PDUs, rack y material de reparación. Este clúster donado se ha convertido en una de las infraestructuras de cálculo más potentes que actualmente hay en la isla de Cuba.

Curso de administración y mantenimiento de Clusters en el CEAC

En Junio de 2010, Guillermo Losilla y Arturo Giner del Área de Computación del BIFI se desplazaron a La Habana durante dos semanas para completar la instalación y puesta en marcha del equipamiento donado e impartir un curso de formación en administración de supercomputadores. A este



curso asistió personal técnico del CEAC y de otros centros interesados. El resultado fue muy satisfactorio compartiendo experiencias y uniendo posturas entre ambos centros.

Lanzamiento de una aplicación del CEAC en Ibercivis

Se trata de una excelente herramienta para que grupos científicos de Cuba con pocos recursos, puedan optar a una infraestructura potente y fiable. Por ello, en los próximos meses se va a estu-

diar el lanzamiento de una aplicación de Docking de proteínas, mediante simulaciones de dinámica molecular orientadas a estudiar la interacción de proteínas con membranas modelos. Todo esto tiene una importancia práctica potencial ya que es la base del posible desarrollo de productos con diversos propósitos terapéuticos. La proteína objeto del estudio se denomina StII y las membranas están constituidas por mezclas de dipalmitoilfosfatidilcolina, colesterol y esfingomielina. Para ello, se ha adaptado la librería GROMACS al entorno de Ibercivis. Esta investigación ayudará a comprender mejor el mecanismo de interacción atendiendo a parámetros como los principales aminoácidos que intervienen, el grado de penetración de las membranas, la variación de la estructura secundaria en el tiempo, así como cambios en las propiedades de las membranas modelos.

Congreso de Bioquímica y computación

Personal del BIFI se desplazará a La Habana para participar en un Congreso de carácter Internacional. Se trata de personal del área de Bioquímica, Computación y Física de Sistemas Complejos. Se contará con actividades de divulgación a través del proyecto Ibercivis que tendrán como público objetivo centros de Educación Secundaria, Centros de Investigación y Universidades. Esta actuación se llevará a cabo en marzo de 2011.

Visita del embajador cubano

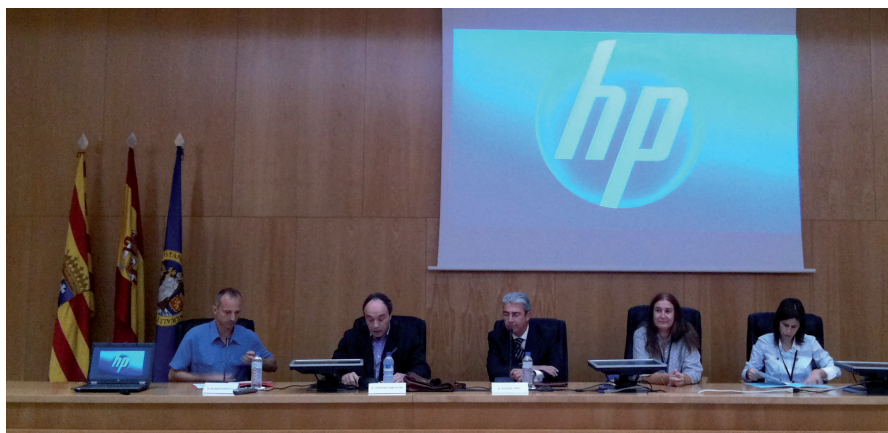
El embajador y su esposa visitaron Zaragoza el 20 de octubre de 2010, donde fueron recibidos por el rector y el consejo de dirección de la Universidad de Zaragoza en el Paraninfo, junto con la ex-consejera de Ciencia, Tecnología y Universidad,

Pilar Ventura, así como la profesora de la Facultad de Artes y Letras de la Universidad de la Habana, Ana María González. Comparecieron en rueda de prensa y se celebró una recepción oficial en la sala Pilar Sinués, con representación de profesores y de estudiantes con vinculación con Cuba, para un intercambio de experiencias. La recepción concluyó con una visita guiada por el Paraninfo.

2.1.7.2 OBSERVATORIO TECNOLÓGICO HP



El 6 de julio de 2010, el rector de la Universidad de Zaragoza, Manuel López Pérez, y el presidente y consejero delegado de Hewlett-Packard, José Antonio de Paz, firmaron el convenio de colaboración para crear un Observatorio Tecnológico HP en Aragón. Está situado en la actualidad en las instalaciones del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos, dirigido por el profesor Alfonso Tarancón en representación del BIFI y por Joaquín Ezpeleta como Director del Departamento de Informática e Ingeniería de Sistemas del Centro Politécnico Superior.



El Observatorio Tecnológico HP permite a los estudiantes de la Universidad de Zaragoza familiarizarse, aprender y trabajar con algunas de las últimas tecnologías de Hewlett-Packard a través de la realización de Proyectos Fin de Carrera sobre soluciones de HP, mediante el apoyo tecnológico de la Universidad de Zaragoza con equipamiento informático.

En septiembre de 2010 se hizo una presentación a los alumnos de Ingeniería para explicar los proyectos ofertados y se creó la página web del Observatorio HP donde se publican los proyectos ofertados y otra información relativa al Observatorio.

Esta iniciativa favorece un mayor acercamiento de la Universidad de Zaragoza a las últimas tecnologías de HP, al acercar a sus alumnos productos líderes a nivel mundial en el sector de las Tecnologías de la Información y de la Comunicación (TIC).

Mas información: www.bifi.es/observatorio

2.1.7.3 CURSO DE VERANO EN JACA

Del 5 al 8 de Julio de 2010, en el marco de los cursos de verano de la Universidad de Zaragoza, el BIFI organizó en Jaca el "Curso Aplicado de Computación Avanzada". El curso tuvo un notable



éxito, dando una visión general sobre las técnicas usadas en la computación aplicadas al mundo científico (e-ciencia) y al mundo empresarial y de la innovación, así como ofreciendo sendos talleres prácticos sobre clustering y tecnologías Grid.

2.1.7.4 LABORATORIO VIRTUAL DE FUSIÓN

Como parte de la colaboración LNF (Laboratorio Nacional de Fusión) entre el CIEMAT y el BIFI, se ha desarrollado una web (<http://www.bifi-ciemat.es>) de difusión de conocimientos científicos relacionados con la fusión.

En ella se pueden ejecutar aplicaciones de diferentes dispositivos de fusión en forma de applets. De este modo, se acerca a todo el mundo la posibilidad de observar estos complejos fenómenos físicos, cambiando diferentes parámetros y viendo su diferente evolución.



2.2 Laboratorios de Bioquímica, Biofísica Biología Molecular, Biología Celular y Cristalografía

¿Qué hacemos?

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, ácidos nucleicos y pequeñas moléculas orgánicas mediante cromatografía líquida utilizando columnas de intercambio iónico, afinidad, exclusión molecular y de fase reversa. Ensayos enzimáticos, estructurales y funcionales con proteínas y ácidos nucleicos.
- **Biofísica de moléculas biológicas:** Caracterización de la estabilidad de proteínas, de la interacción proteína-proteína y proteína-ligando y de la función de proteínas.
- **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 o proteínas de interés tecnológico.
- **Cristalografía:** Obtención de estructuras cristalográficas de proteínas: generación de cristales, análisis de los mismos mediante difracción de rayos X, procesamiento de los datos obtenidos y resolución de estructuras moleculares.

¿Quiénes somos?

Miembros trabajando en el laboratorio:



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



¿Qué nuevas personas han sido contratadas?

Personal investigador incorporado durante 2010

Durante el 2010 nuevos investigadores contratados se han incorporado al Laboratorio:

- Raquel Villanueva, técnico de laboratorio (a través de una Ayuda de Contratación Técnicos de Apoyo de la Universidad de Zaragoza).
- Celia Conesa, investigador contratado a través del proyecto PAMER.

Como becarios que han empezado su tesis doctoral durante el año 2010:

- Erandi Lira Navarrete (beca financiada por la empresa Bruker)
- Jessika Valero González (beca FPI con cargo a proyecto)
- Juan E. Martínez Oliván (beca con cargo a proyecto)
- Emilio Lamazares y Juan J. Galano Frutos (beca Banco Santander)
- María R. Pérez Gracia, Renzo Torreblanca González y Ana Sanchez Azqueta (becas FPI)
- Ángela Fernández Otal, David Hernández Hernández, Irene Gregorio Sánchez, Alicia García, Verónica Tomey Mur, Silvia Baquedano, Alejandro Usón (beneficiarios de la beca de iniciación a la investigación del BIFI)

¿Quiénes nos visitan? ¿A quién visitamos?

Estancias de investigadores durante 2010:

Durante el 2010 se han iniciado nuevas colaboraciones y se han fortalecido las ya establecidas con grupos de investigación tanto nacionales como extranjeros. Se han llevado a cabo tanto visitas

de investigadores a nuestras instalaciones como estancias de miembros del BIFI en otros centros.

VISITANTES:

Rafael Ruiz (CIPF, Valencia)

Silvia Prado (CIPF, Valencia)

Rosa Doménech (UMH Elche, Alicante)

Pilar Alfonso (IACS Universidad de Zaragoza, Zaragoza)

Maria Joao Moreno (U. Coimbra, Portugal)

Patricia Martins (U. Coimbra, Portugal)

Antonio Díaz Quintana (U. de Sevilla-Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis del CSIC, Sevilla)

Aitor Hernandez-Ortega (Centro de Investigaciones Biológicas, Madrid)

Laura Ledesma (Universidad Pablo Olavide, Sevilla)

Jose Francisco Pérez Llerena (Servicio Gallego de Salud- INIBIC, Inst. Investigación Biomédica de a Coruña)

ESTANCIAS:

Ana Sánchez-Azqueta: Universidad Nacional de Rosario. Argentina Septiembre 2010-Noviembre 2010

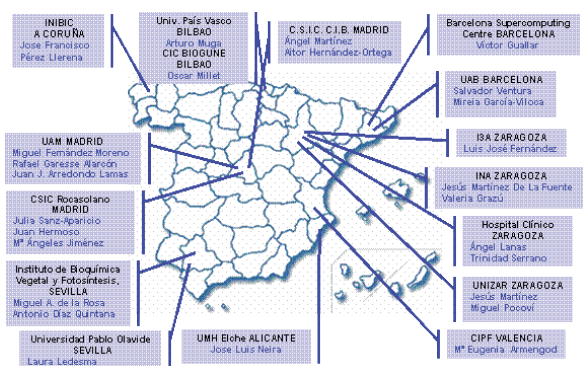
Isaías Lans: Universidad Autónoma de Barcelona. Departamento de Química Física Marzo 2010

Sonia Susana Arilla Luna: Institute Pasteur. Paris. Septiembre 2010-Noviembre 2010

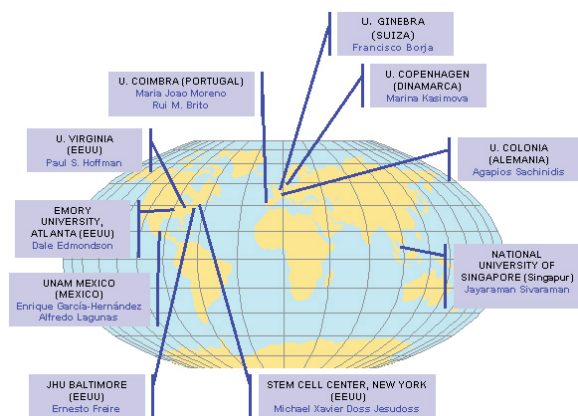
Laura López: Centre National de la Recherche Scientifique. Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale, Toulouse (France) Octubre-Noviembre 2010

¿Con quién colaboramos?

Colaboraciones con centros nacionales durante 2010:



Colaboraciones con centros internacionales durante 2010:



Nueva sede del BIFI: organización de los laboratorios y distribución de equipos

El traslado de nuestro instituto al nuevo edificio se llevó a cabo durante el mes de febrero de 2010. Los laboratorios en el Edificio I+D se distribuyeron según técnicas y equipos. De esta forma se pretende que todos los investigadores puedan hacer

uso cómodamente de las instalaciones y que la distribución del espacio sea más eficaz.

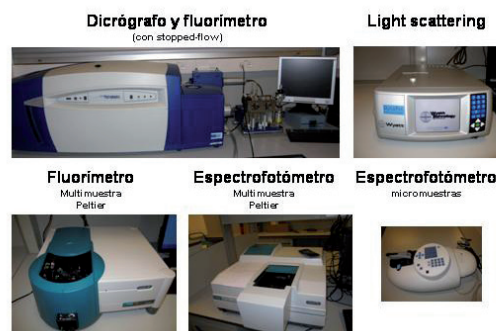
La sección de Biofísica, Bioquímica y Biología Molecular y Celular del BIFI está organizada en laboratorios dedicados a aplicaciones específicas, distribuidos en la planta baja del bloque 2 y en la planta segunda del bloque 1 del nuevo Edificio I+D (según los planos que se muestran a continuación).

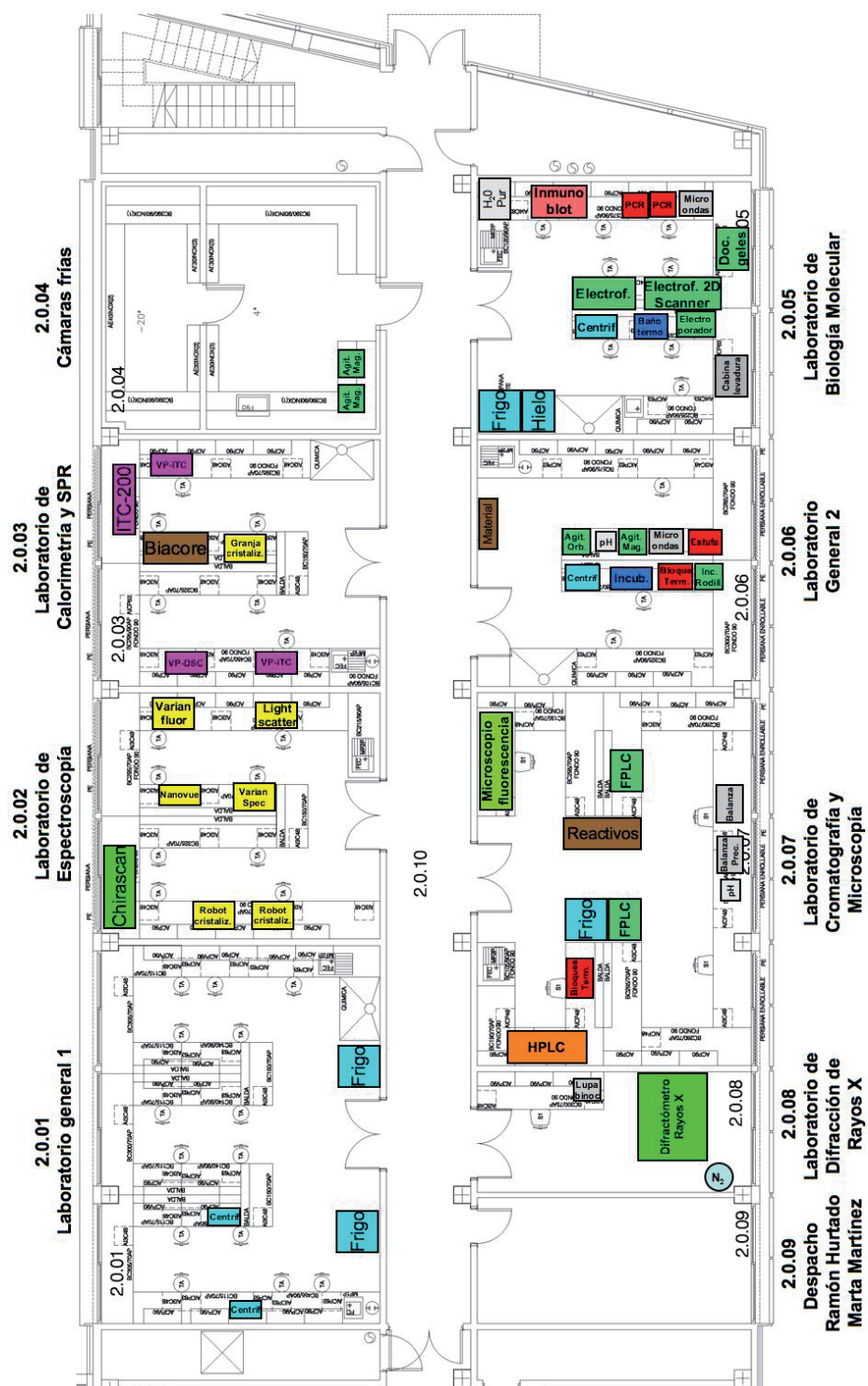
En la planta baja se localizan los siguientes laboratorios:

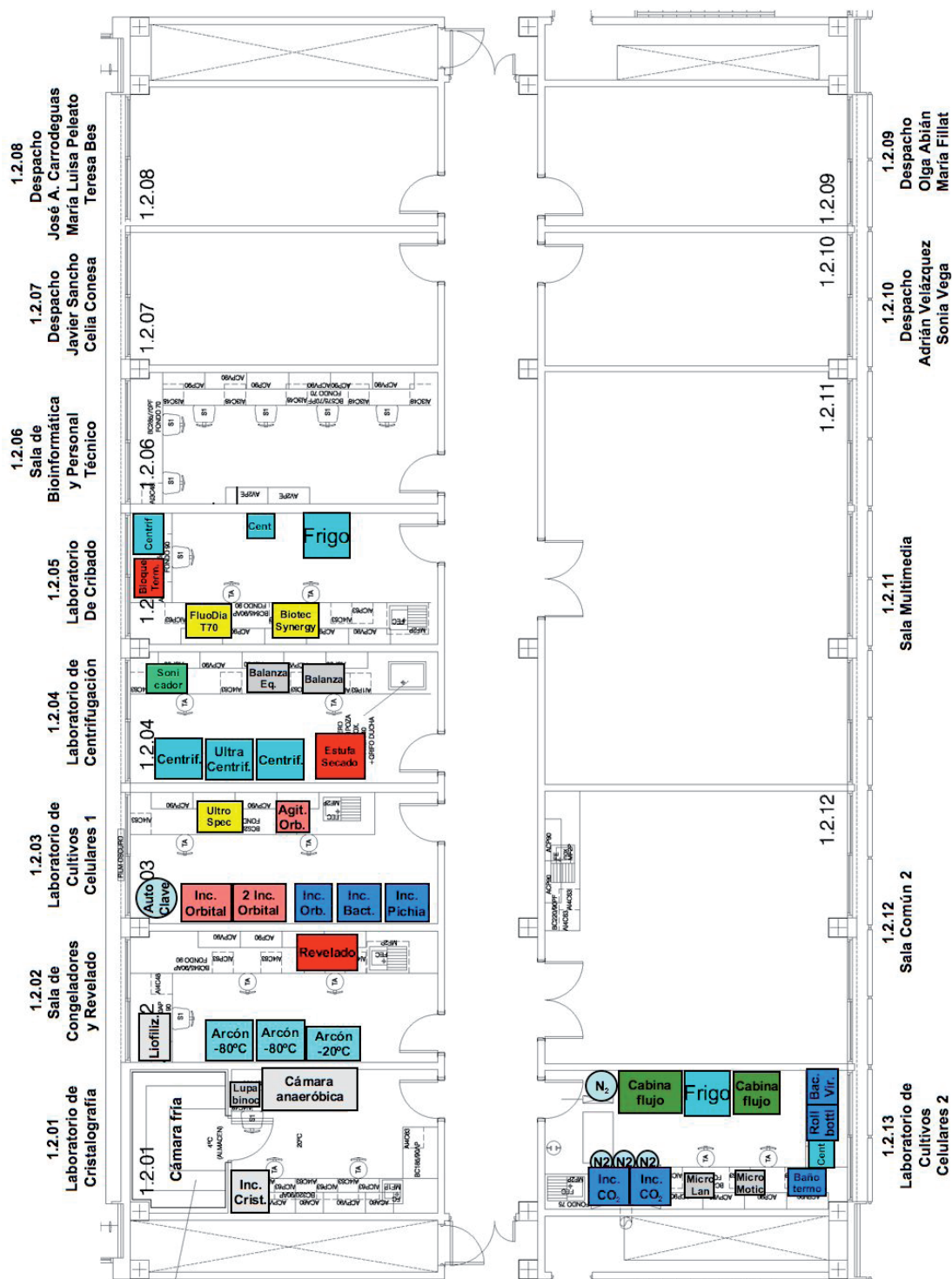
Dos laboratorios generales. El mayor de ellos, **Laboratorio General 1 (2.0.01)** admite 12 puestos de trabajo, incluyendo en cada puesto una mesa de oficina y una poyata alta para experimentación. Incluye puestos informáticos para varios usuarios e instrumentación de laboratorio como **microcentrifugas, frigoríficos/congeladores y cabina de seguridad química**. En este laboratorio trabajan principalmente estudiantes predoctorales.

El **Laboratorio de Espectroscopia (2.0.02)** incluye diversos equipos de vanguardia, algunos de ellos adquiridos durante 2010. Aquí se localizan:

- **Espectropolarímetro y espectrofotómetro de fluorescencia Chirscan (Applied Photophysics)** con control preciso de la temperatura mediante un módulo Peltier y que permite caracterizar la estructura de proteínas y estudiar







la estabilidad estructural y sus interacciones con otras biomoléculas, tanto en ensayos de equilibrio como cinéticos (mediante un módulo de stopped-flow) mediante dicróismo circular y fluorescencia.

- **Espectrofotómetro UV/visible Cary 100 BIO (Varian)** con módulo para 6 muestras, permitiendo un control preciso de la temperatura en el formato de cuatro muestras mediante un módulo Peltier.



- **Espectrofotómetro NanoVue (GE Healthcare)**, que permite la medida de muestras en volúmenes pequeños.

- **Espectrofotómetro de fluorescencia Cary Eclipse (Varian)**, con dos monocromadores (excitación y emisión), polarizador y módulos intercambiables para una muestra, cuatro o placas multipocillo de hasta 384 muestras, permitiendo un control preciso de la temperatura en el formato de cuatro muestras mediante un módulo Peltier. Permite caracterizar la estructura de proteínas y estudiar la estabilidad estructural y sus interacciones con otras biomoléculas, tanto en ensayos de equilibrio como cinéticos. Este aparato permite también análisis de alta capacidad utilizando marcadores fluorescentes en células vivas, permitiendo, por ejemplo, el cribado de colecciones de compuestos químicos para la identificación de aquellos que inducen muerte celular, diferenciación, etc.

- **Equipo de light scattering Dynapro Nanostar (Wyatt)** que permite determinar el radio hidrodinámico y la masa molecular de proteínas en disolución y su aplicación en ensayos de desnaturación de proteínas y su interacción con otras biomoléculas, así como en ensayos de oligomerización/agregación.

realización de proteínas y su interacción con otras biomoléculas, así como en ensayos de oligomerización/agregación.

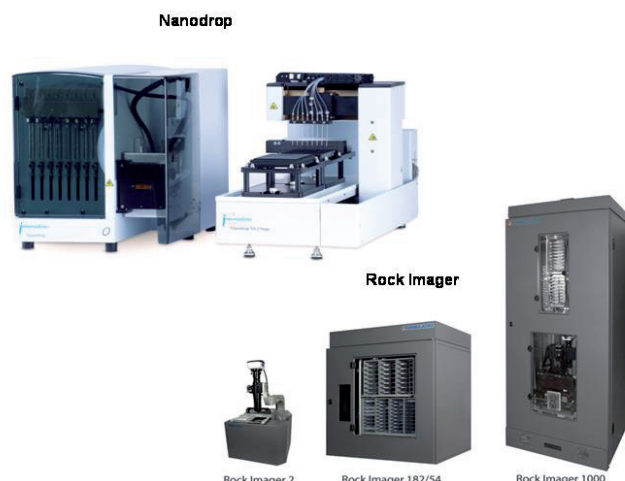
- **Sistemas automáticos de dispensación de líquidos para cristalización de macromoléculas y sistema de gestión y visualización de placas**, los cuales permiten hacer cribados de cientos a miles de condiciones de cristalización de proteínas en distintos formatos (gotas sentadas, colgantes, etc) de forma automática y rápida, y posteriormente el mantenimiento de dichas condiciones con la proteína y/o complejos a temperatura constante.

En concreto se dispone de los siguientes equipos:

A/ Sistema de dispensación de volúmenes en el rango de mililitros a microlitros, modelo PERKIN ELMER JANUS MINI 8 puntas. Adaptable a diferentes modelos de placas de cristalización.

B/ Sistema de dispensación de líquidos en el rango de mililitros a nanolitros, modelo INNOVADYNE NANODROP II. Este sistema se adapta a los formatos de placas tipo "deep well", "linbro" y también a las de 96, 384 y 1536 pocillos

C/ Sistema de almacenamiento de placas y análisis de imagen de las gotas de cristalización, mode-



lo FORMULATRIX ROCK IMAGER 182. Esta unidad almacena hasta 182 placas de diferentes formatos y dispone de un sistema antivibración y de un sistema de enfriamiento Peltier que mantiene la temperatura interior constante respecto de la temperatura ambiental. Su sistema de visionado de las gotas puede programarse para recoger imágenes cada cierto tiempo y así observar la evolución de las mismas y eventualmente la aparición de cristales en alguna de ellas.

D/ Dos estereomicroscopios, modelo LEICA. Con estas lupas se consigue ampliar las gotas de cristalización 80 veces. Una de ellas dispone además de una cámara de fotos y de un ordenador con programa de gestión de imágenes.

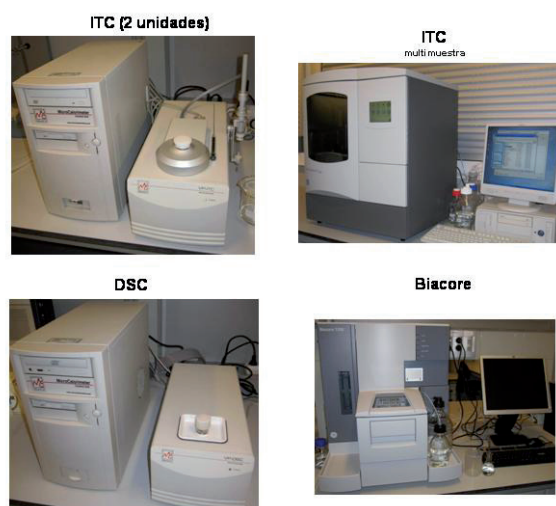
El **Laboratorio de Calorimetría y SPR** (2.0.03) incluye:

- **Calorímetros isotérmicos de titulación VP-ITC (MicroCal, GE Healthcare)** que permiten estudiar la energética de interacción entre biomoléculas. Ésta es la única técnica biofísica que



proporciona un estudio termodinámico completo (afinidad, entalpía y entropía de unión) de la interacción entre moléculas biológicas.

- **Calorímetro automatizado de titulación AUTO-ITC200 (MicroCal, GE Healthcare)** que permite realizar ensayos de interacción entre biomoléculas de forma programada sin intervención del usuario. Además, permite reducir considerablemente la cantidad de muestra necesaria y el tiempo experimental. Ésta es la única técnica biofísica que proporciona un estudio termodinámico completo (afinidad, entalpía y



entropía de unión) de la interacción entre moléculas biológicas.

- **Calorímetro diferencial de barrido VP-DSC (MicroCal, GE Healthcare)** que permite estudiar la energética de estabilidad estructural de proteínas mediante ensayos de desnaturalización térmica. Esta es la única técnica biofísica que proporciona un estudio termodinámico completo (energía de Gibbs, entalpía y entropía de desplegamiento) de la estabilidad estructural de macromoléculas biológicas.
- **Equipo de resonancia de plasmones superficiales Biacore T200 (GE Healthcare)** que permite estudiar cinéticamente y en equilibrio interacciones entre biomoléculas mediante in-

movilización en chips funcionalizados y sin necesidad de marcaje, mediante la determinación de constantes cinéticas de asociación y disociación.

- **Cabina de seguridad química.**

Las **cámaras frías** (2.0.04) permiten, además de



almacenar muestras a 4°C o a -20°C, la realización de experimentos que deben realizarse en frío, como la purificación de proteínas o su separación y análisis mediante algunas técnicas electroforéticas y cromatográficas.

En el **Laboratorio de Biología Molecular** (2.0.05) se localizan:

- **Dos termocicladores para PCR.**
- **Equipos para electroforesis de proteínas y ácidos nucleicos.**
- **Equipos para inmunoblot.**
- **Sistema de electroforesis 2D**, con isoelectroenfoque y electroforesis desnaturalizante.

Estas técnicas permiten el estudio de proteínas y ácidos nucleicos basándose en su tamaño/forma y carga eléctrica. El sistema de electroforesis 2D permite la realización de experimentos en el campo de la proteómica.



- Un **electroporador**. Permite la transfección de células eucariotas y la transformación de procariontes con ácidos nucleicos.
- Un **sistema de purificación de agua Elix 3** (Millipore) y un **sistema de ultra-purificación de agua MilliQ Reference** (Millipore).
- **Máquina de hielo**
- **Cabina para manipulación de levaduras**
- **Cabina de seguridad química.**

En el **Laboratorio General 2** (2.0.06) se localizan:

- **Agitador orbital.**
- **pHmetro.**
- **Horno microondas.**
- **Centrifuga de sobremesa refrigerada.**
- **Estufa termostaticada.**
- **Bloque térmico.**



- Incubador de rodillos.
- Cabina de seguridad química.

En este laboratorio realizan parte de su trabajo algunos investigadores senior del BIFI.

En el **Laboratorio de Cromatografía y Microscopía** (2.0.07) se localizan:

- **Equipos de cromatografía líquida de alta resolución, un HPLC y dos FPLC**, que permiten el análisis y la separación de diversas moléculas basándose en parámetros físico-químicos como el tamaño, la forma, la carga o la interacción con distintos tipos de moléculas.
- **Microscopio invertido de fluorescencia automatizado Leica**



DMI6000B, con sistema de célula viva. Este equipo permite análisis multidimensional 6D (tres dimensiones espaciales, tiempo, distintas posiciones en la muestra y distintos tipos de iluminación, con luz visible o fluorescencia). Incluye un sistema de células viva para time lapse microscopy y un sistema de luz estructurada que permite semiconfocalidad (planos focales más limpios, permitiendo la reconstrucción 3D a partir de distintos planos focales). También incluye un sistema de cambio de filtros de alta velocidad y el sistema dual view para realizar estudios de interacciones moleculares in situ mediante FRET. Incluye el software Metamorph, que permite una gran variedad de análisis, incluyendo identificación y seguimiento de partículas, conteo, medidas de intensidad, etc.

- **Dos balanzas electrónicas de precisión**
- **pHmetro**

En el **Laboratorio de Difracción de Rayos X** (2.0.08) se localizan:

- **Difractómetro de Rayos X modelo X8 Prospector** (Bruker), dotado de una microfuelle y un detector Axiom. Desde su reciente instalación, completada en Junio de 2010, se ha utilizado ya para resolver una nueva estructura cristalográfica y se están analizando cristales de otras proteínas.
- **Lupa binocular.**
- **Contenedores de nitrógeno líquido, con pieza de autollenado.**



En la planta segunda se localizan los siguientes laboratorios:

En el **Laboratorio de Cristalografía (1.2.01)** se lleva a cabo la cristalización de proteínas, disponiendo de:

- **Cámara termotatizada** para cristalizaciones a distintas temperaturas (generalmente a 18° C).
- **Cámara anaeróbica**, instalada en 2010, que permite trabajar con proteínas en ambientes reductores e incluso cristalizarlas en distintos estados de reducción.
- **Cámara fría**, para almacenar reactivos y realizar ensayos de cristalización a 4° C.



La **Sala de Congeladores y Revelado (1.2.02)**. En esta sala se localizan:

- **Dos congeladores de -80°C** para almacenaje de muestras.



- **Arcón congelador de -20°C.**
- **Liofilizador.**
- **Sistema de revelado fotográfico.** Esta sala se puede mantener en oscuridad total para usarse también como sala de revelado fotográfico.

El **Laboratorio de Cultivos Celulares 1 (1.2.03)** está dedicado al cultivo de bacterias, levaduras y células de insecto (para expresión de proteínas usando baculovirus). En esta sala se localizan:

- **Cuatro incubadores orbitales termotatizados.**
- **Incubador orbital de sobremesa.**
- **Dos estufas de incubación termotatizadas**
- **Autoclave**, para esterilizar por calor medios de cultivo y el material de vidrio y plástico utilizado en experimentación.
- **Espectrofotómetro visible/ultravioleta Ultrospec 6300 (GE Healthcare)** para medidas espectrofotométricas relacionadas con el cultivo celular.



El **Laboratorio de Centrifugación (1.2.04)** incluye:

- **Centrifuga Avanti J-E (Beckman).**
- **Centrifuga Avanti J-26XP (Beckman)**, que permiten la centrifugación de volúmenes grandes de muestras.

- **Ultracentrífuga Optima L-100 XP (Beckman)**, que alcanza más de 800000 g, e incluye un rotor de ángulo fijo y uno basculante.



- **Balanza de brazos** para equilibrado de muestras para centrifugación.
- **Balanza electrónica.**
- **Sonicador**, para disrupción de células mediante ultrasonidos.

El **Laboratorio de Cribado** (1.2.04) incluye:

- **Lector multimodo para placas multipocillo Synergy HT (Biotek)**, que funciona como espectrofotómetro, fluorímetro y luminómetro y admite placas de distinto número de pocillos.
- **Fluorímetro FluoDia T70 (PTI)**, con sistema de control de temperatura, para placas multipocillo. Ambos equipos se usan intensivamente en cribados de quimiotecas para identificar compuestos bioactivos.



- **Centrífuga** para placas multipocillo

En la **Sala de Bioinformática y Personal Técnico** (1.2.01) se localizan estaciones de trabajo para resolución y análisis de estructuras de proteínas, entre otras técnicas, y se loca-

liza también personal técnico de los laboratorios de biofísica, bioquímica y biología molecular y celular.

El **Laboratorio de Cultivos Celulares 2** (1.2.13) se dedica al cultivo de células eucariotas, principalmente de mamíferos (humanos y ratón). Incluye:

- **Dos cabinas de flujo laminar.**
- **Dos incubadores con control de la temperatura y concentración de CO₂.**
- **Dos microscopios invertidos.**
- **Centrífuga de sobremesa.**
- **Baño termostatzado.**
- **Estufa termostatzada para células de insecto** (baculovirus).
- **Incubador para roller-bottles** (crecimiento a gran escala de células eucariotas).
- **Cuatro contenedores de nitrógeno líquido** para almacenaje de células eucariotas.



2.3 Nuevo edificio

Durante el mes de febrero se ha producido el traslado del BIFI al nuevo edificio del campus del ACTUR. Dicho traslado nos ha producido una serie de gastos e inversiones en pequeñas infraestructuras investigadoras y elementos de acoplamiento en las instalaciones de computación por un importe global de unos 70.000€ que hemos financiado mediante un convenio con Ibercaja.

PEQUEÑO EQUIPAMIENTO

BIOQUÍMICA, BIOFÍSICA, BIOLOGÍA MOLECULAR Y BIOLOGÍA CELULAR Y CRISTALOGRAFÍA

	EUROS
Sistema para la producción de Agua MilliQ	8.800
Lavadora	400
Estufas de Cultivo Celular	3.300
Recipientes aislantes vacío	2.600
Incubador	1.200
6 Ordenadores	5.000
Centrífuga para cultivos	2.300
Roller Bottle (cultivo de células de mamíferos)	2.000
Sistema de Revelado	1.700
Agitador orbital pequeño	2.800
Inyector automático para el sistema de cromatografía de alta presión (HPLC)	16.000
Adaptación de poyatas de laboratorio	2.000
Total	47.300

PEQUEÑO EQUIPAMIENTO

COMPUTACIÓN

	EUROS
Sistemas de alimentación	8.900
Sistemas de alimentación	7.200
Acondicionamiento sala 3D	6.400
Cableado, conexiones	1.100
Mobiliario laboratorio	800
Plataforma metálica. Piezas de aluminio.	1.000
Proyector 3D gafas	770
Ordenador	700
Total	26.870

3. INVESTIGACIÓN

3.1 Organigrama de Investigación

DIRECTOR

Subdirectora y 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 Génica
- Biología Molecular y Cristalografía
- Computación y Supercomputación

3.2 Grupos de Investigación

Los miembros del BIFI participan mayoritariamente en cinco grupos de Investigación de la DGA tres de excelencia y dos consolidados.

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

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

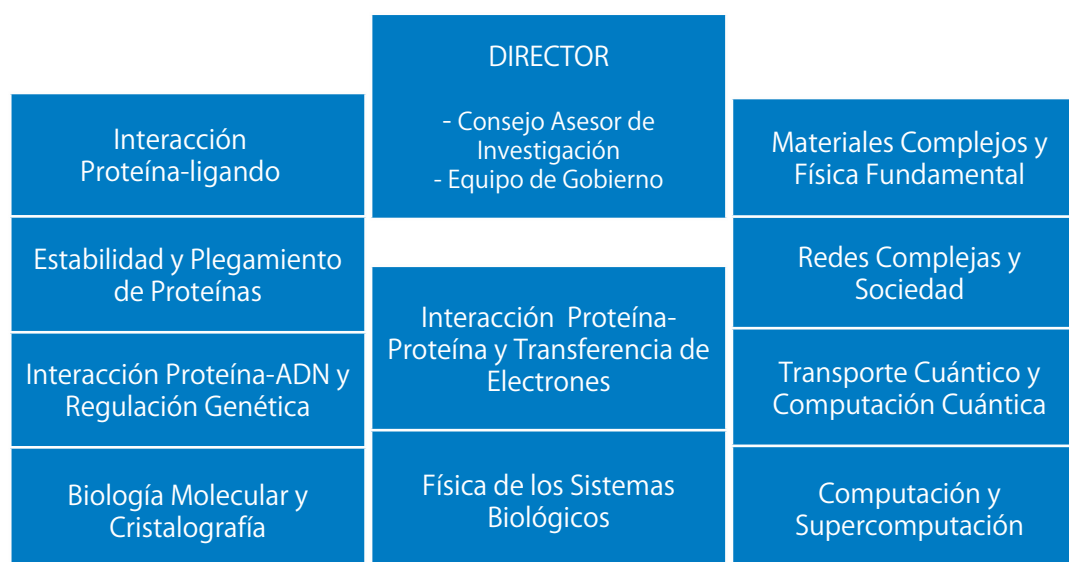
Investigador principal: Alfonso Tarancón (BIFI-UZ)

Entidades participantes: BIFI (Universidad de Zaragoza)

Título: Grupo de Física Estadística y No Lineal.

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.

Investigador principal: L. Mario Flórida



Título: Grupo de Biología Estructural y Funcional (B18)

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Investigador principal: Carlos Gómez-Moreno

Título: Grupo "Protein Targets"

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Investigador principal: Javier Sancho

Título: Grupo de Bioflora B39

Entidad financiadora: Gobierno de Aragón –
Entidades participantes: Universidad de Zaragoza,
Instituto Pirenaico de Ecología (CSIC).

Investigador responsable: Pilar 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 (Bolonía). 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 dis-

tribuye 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 ha 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 cuántico 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 que 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. Manzo, J. Borge, J. Poncela, J. Sanz, E. Cozzo, C. Gracia-Lázaro 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:

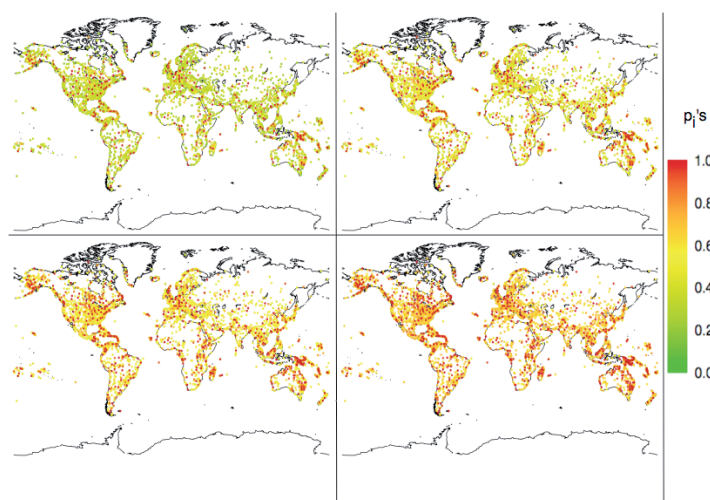
1. Hemos caracterizado redes reales en sistemas biológicos y sus patrones topológicos. En particular, en colaboración con investigadores del grupo de Mycobacterias de la Universidad de Zaragoza y del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud, hemos construido y caracterizado la red de proteínas a través 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.

Durante este año se ha continuado prestando especial atención 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 implementando, además, nuevos mecanismos para tener en cuenta el efecto de los cambios en el comportamiento de la población en presencia de una epidemia.

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. Nuestro grupo de investigación organizó la IV Conferencia Internacional del BIFI (BIFI 2010, Networks: a framework for cross-disciplinary applications).

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 historia de la Universidad de Zaragoza con más de 1205 citas, el primero de los últimos 15 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 3 Tesis Doctorales, dos de ellas dedicada en su totalidad al tema (2 defendidas con éxito en Diciembre de 2006 y una en Octubre de 2010). 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, cuya lectura pública será en Marzo de 2011.

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 EU-METSAT (Darmstadt, Alemania), José Luiz 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 2010, 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 está compuesto por cuatro diferentes grupos de investigación (tres en Zaragoza y uno en Madrid), con intereses complementarios. Los miembros del BIFI 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), Ángel 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), Rafael Tapia-Rojo (estudiante de Licenciatura)..
- Pierpaolo Bruscolini (Profesor Contratado Doctor, Universidad de Zaragoza), 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, fluores-

cencia, 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.

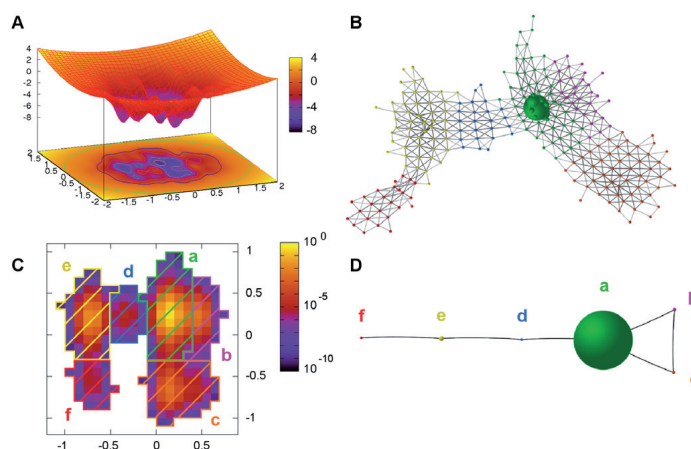
Las actividades de investigación en este sector se desarrollan a lo largo de varias líneas, con diferentes detalles de descripción y enfoque, cuyo mínimo denominador común es el uso de técnicas propias de la física y química teórica y de la mecánica estadística, y un uso masivo de los recursos de computación 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 y en la Dinámica de Ehrenfest, que representa el método más simple para el estudio de los intercambios no adiabáticos de energía entre electrones y núcleos, y es paradigma para

otros otros métodos. En particular: 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)



SSD algorithm applied to a synthetic funnel-like potential. (A) 2D funnel-like potential. (B) A stochastic trajectory is translated into a CMN where 6 sets of nodes (corresponding to different color) are the result of the SSD algorithm. (C) Recovering the spatial coordinates, the stationary probabilities of each node are shown in color code. The 6 basins detected are represented as color striped regions. (D) A coarse-grained CMN is built where new nodes take the role of

d) estudio de la relación entre la dinámica microscópica y la dinámica macroscópica entre cuencas dinámicas, con aplicación a pequeños polipeptidos y DNA (Falo, Prada-Gracia); ;

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 la 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, Faccin, Falo, Rey).

g) estudio de la dinámica del ADN, con modelos mesoscópicos (Peyrard-Bishop-Dauxois) con aplicación al estudio de la secuencias de promotores (Falo, Mazo, Tapia);

h) interpretación de espectros de masa MS/MS para la caracterización de proteínas (Bruscolini, Faccin).

i) estudio de motores moleculares. Estudio de la interacción entre kinesinas y de "tug-of-war". Estudio del motor de traslocación de DNA en el virus phi29. (Falo, Mazo);

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") en las que participan 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. Asimismo, 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 Zaragoza, 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 pro-



teasa 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 compe-

titivos (bloqueando el sitio de unión del sustrato) o como inhibidores alostéricos (bloqueando el sitio de unión de la proteína NS4A).

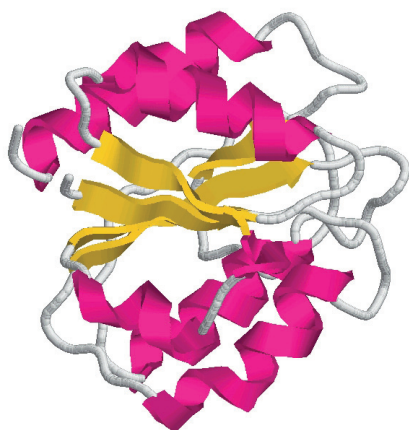
Cribado y Diseño de Ligandos de Proteínas e Inhibidores.

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 fenilcetonuria), 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).

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 desestabiliza 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.

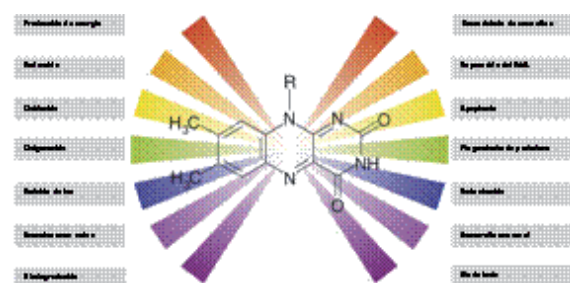


Cooperatividad de Unión en Proteínas.

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 sustratos, en colaboración con la Dra. Milagros Me-

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

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.

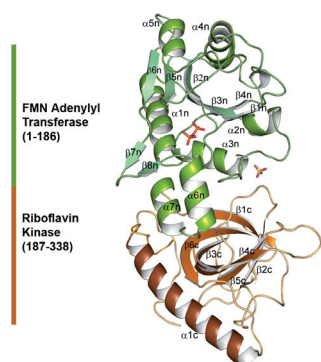
La FAD sintetasa (FADS)

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 adenililación.



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 adenililtransferasa (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 trimeros 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.

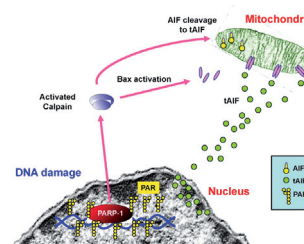


El estudio de las actividades RFK y FMNAT ha despertado en los últimos años un notable auge en mamíferos, levaduras e incluso plantas, revelando características estructurales y funcionales diferenciales, y convirtiendo a la FADS procariótica en una potencial diana terapéutica. Su inhibi-

ción 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 abordando 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

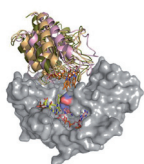


identificar qué podría ser el aceptor de electrones de AIF, conocer si la función redox está vinculada a la apoptosis e identificar compuestos que modulen su actividad.

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.

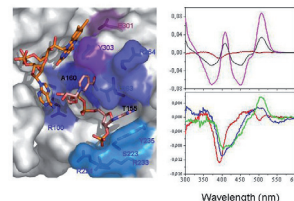
La cadena de transporte de electrones fotosintética. Durante la fotosíntesis, la ferredoxina (Fd) recibe electrones del Fotosistema I (PSI), para cederlos a la FNR que reduce NADP+ a NADPH. Se establece una cadena de transporte electrónico mediante la formación de un complejo ternario de vida transitoria, 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.

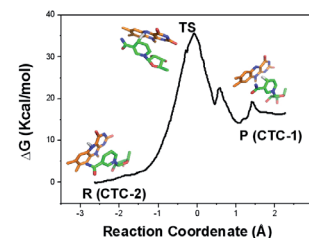
El mecanismo de reducción de FNR por NADPH ha sido estudiado como modelo para el estudio del mecanismo catalítico de enzimas de su familia. Los parámetros cinéticos y de interacción para el proceso en ambos sentidos se han determinado en diferentes condiciones para el enzima nativo y

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 emparedan 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.

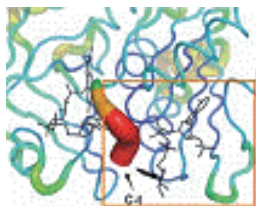
Por el momento, el estudio se ha realizado mediante técnicas computacionales para el mutante Tyr303Ser con NADP+, a partir de una estructura cristalina que localiza los anillos reactivos en una posición sugerida como la reactiva. Además, de obtener información sobre la dinámica



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

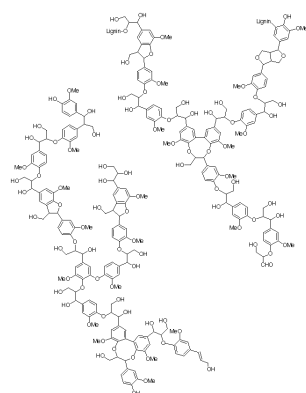
reacciones biosintéticas donde la velocidad es poco crítica. Estas FPRs presentan diferencias estructurales con respecto a las plastidicas en su extremo C-terminal y en la interacción con el FAD.



Su estudio comparativo con las FNRs plastidicas 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 plastidicas. 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.

Oxidazas: el sistema de la aril-alcohol oxidasa de *Pleurotus eryngii*

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 peroxidazas, diferentes tipos de oxidazas que proporcionan el H_2O_2 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 O_2 a H_2O_2 . Esto ocurre a través de un proceso de transferencia de hidruro en el cual los enlaces O-H y C-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 génica (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 modifican-

do postraduccionalmente 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)

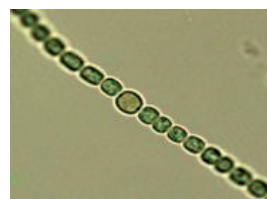
Las proteínas de la familia Fur (ferric uptake regulator) son reguladores globales de la transcripción en procariotas. En bacterias heterótrofas, Fur se encarga de mantener la homeostasis de hierro, está implicada en procesos de patogenicidad y es una proteína esencial en los mecanismos de adaptación 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.

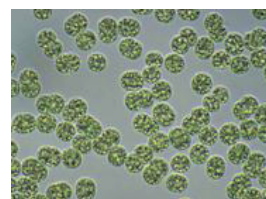
Identificación y caracterización de proteínas Fur en cianobacterias.

Para ello se han tomado como modelos la cianobacteria filamentosa 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 han encontrado varios parálogos Fur en la misma cianobacteria, que se agrupan en cuatro clados diferentes, que probablemente desempeñan distintas funciones.



Anabaena sp. PCC 7120



Microcystis aeruginosa PCC 6803

Estudio de la interacción Fur-DNA

El modo de actuación propuesto para Fur es el de un represor clásico que utiliza Fe^{2+} como corepresor 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 interven-

ción 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 informa-

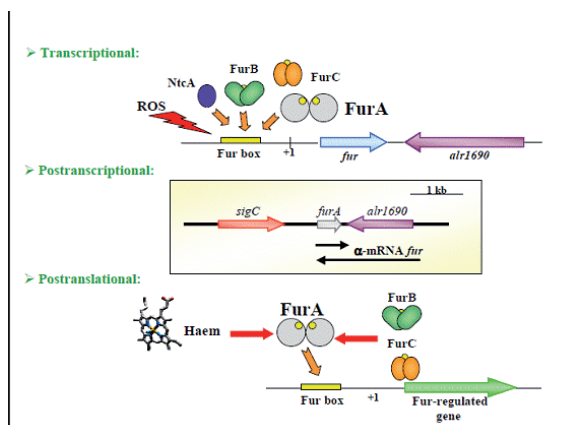


Figura 1 Regulación de FurA en *Anabaena* sp. PCC 7120

ción 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

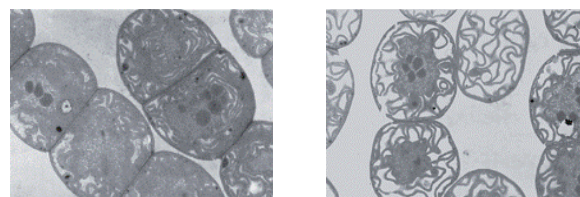


Figura 2 Ultraestructura de *Anabaena* sp. PCC 7120 (izquierda) y del mutante de delección *alr1690-furA* (derecha).

la cianobacteria (Figura 2).

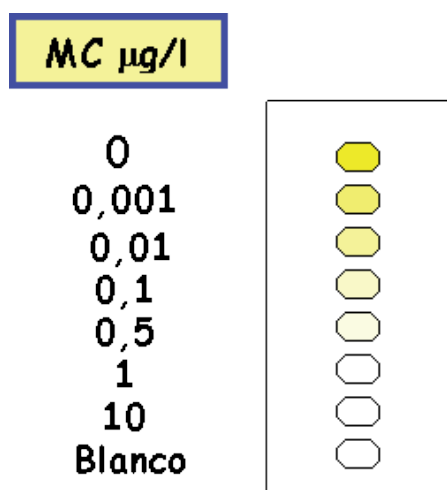
Aplicaciones biotecnológicas de péptidos producidos por cianobacterias (coordinadora: María Luisa Peleato)

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
- Destrucción 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.

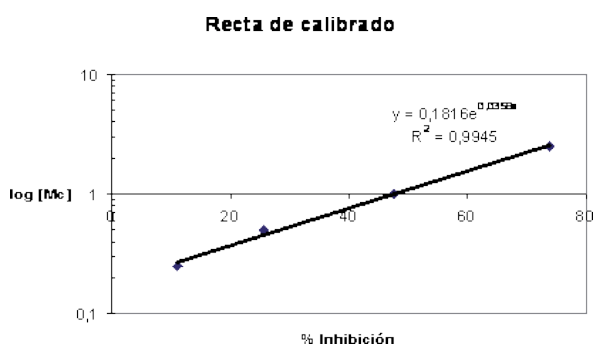
El producto desarrollado se basa en la propia toxicidad de los péptidos, que inhiben a protein-fosfatases de eucariotas. Se trata de un bioensayo in vitro, y tiene la ventaja frente a otras opciones, de no mostrar falsos negativos, y detectar la toxicidad de las muestras inequívocamente. Los falsos positivos 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 legisla-



Placa 96 pocillos

ción 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 está 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 Molecular y Celular

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

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

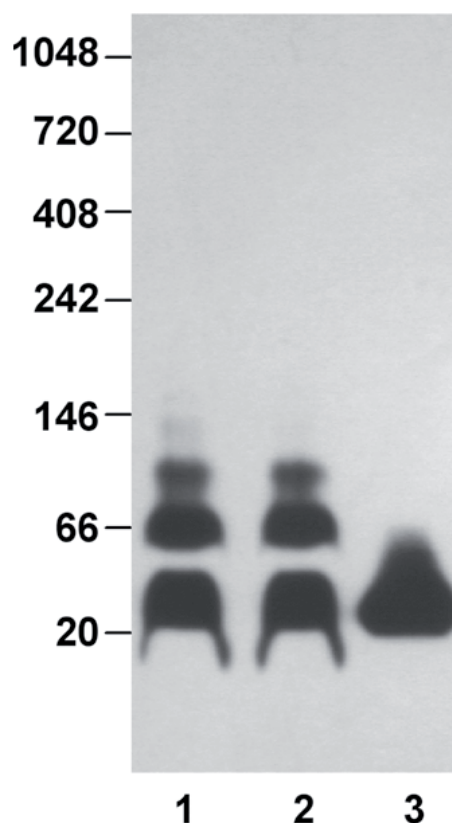
con la presenilina 1, proteasa implicada en la enfermedad de Alzheimer, y posteriormente se describieron su actividad proapoptótica y su localización mitocondrial. Mimp/Mtch2 se identificó primero como una proteína cuya expresión se induce al ser activado el receptor Met por su ligando HGF/SF (hepatocyte 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 determinar la estructura cuaternaria de PSAP (estado de oligomerización) y las proteínas con las que interacciona. Por otro lado, estamos estudiando también cómo se regula la expresión de PSAP y de Mtch2. Para ello hemos analizado la expresión de luciferasa bajo el control de diversas regiones de los promotores de ambas proteínas, identificando regiones necesarias para su expresión y para su inhibición, y factores de transcripción candidatos a regular la expresión de estas proteínas. También colaboramos con dos grupos de investigación de la Universidad Autónoma de Madrid para determinar el efecto de la eliminación en *Drosophila* del único miembro de la subfamilia de proteínas Mtch en este organismo.

Durante una serie de experimentos encaminados a la caracterización funcional de PSAP, en don-

de hemos fusionado PSAP a fragmentos de otras proteínas, hemos descubierto la capacidad del dominio transmembrana de Bcl-XL para oligomerizar. Este dato aporta nueva información sobre el papel de los distintos dominios funcionales de proteínas de la familia de Bcl-2 en la regulación de la apoptosis.



Electroforesis Blue-Native seguida de western blot para demostrar el papel de un fragmento de Bcl-XL en la oligomerización de, en este caso, la proteína fluorescente roja monomérica. Oligómeros en los carriles 1 y 2 y monómero en el carril 3.

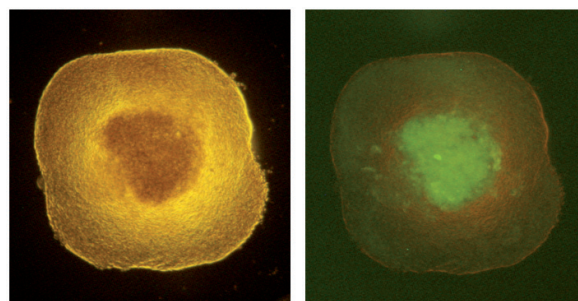
Células madre, terapia celular y medicina regenerativa

El estudio de la diferenciación de células madre a tipos celulares concretos es esencial para la uti-

lización 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.

Una parte de esta línea de investigación está enfocada a la identificación de compuestos químicos, mediante cribado funcional de quimiotecas, que inducen diferenciación celular específica a partir de células madre, y otra parte se centra en identificar compuestos que inducen muerte celular, principalmente por apoptosis, de forma específica en células madre. Hasta el momento hemos utilizado células madre embrionarias de ratón, y nos hemos centrado en su diferenciación a cardiomiocitos, considerando las aplicaciones clínicas del transplante de cardiomiocitos generados *in vitro*. Las células madre que utilizamos, cedidas por un grupo de investigación de la Universidad de Colonia, con quienes colaboramos, expresan la proteína fluorescente verde (GFP) bajo el control del promotor de la cadena pesada de la miosina

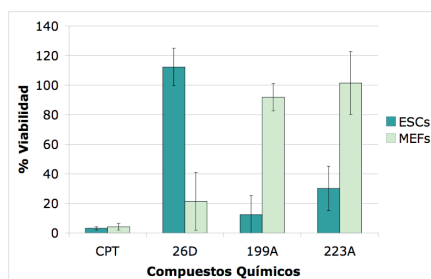
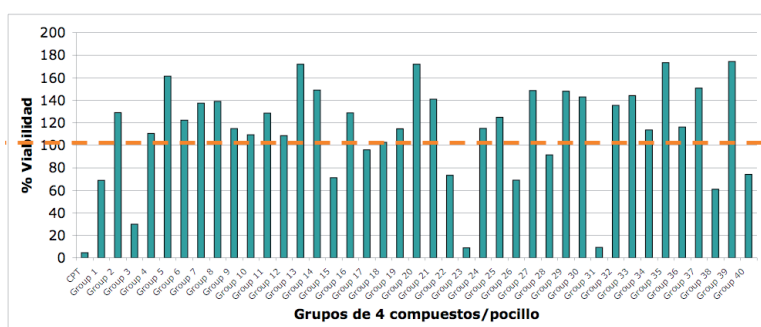
alfa, una proteína específica de cardiomiocitos. Al diferenciarse a cardiomiocitos expresan GFP, lo cual facilita su identificación mediante microscopía de fluorescencia y su cuantificación mediante fluorimetría. Puesto que la diferenciación a cardiomiocitos requiere de la formación de cuerpos embrioides (agregados celulares esféricos), hemos puesto a punto su formación y diferenciación en placas multipocillo, para adaptarlas a un sistema de cribado de alta capacidad. No obstante, para compensar algunas de las limitaciones en la cuantificación de la GFP, hemos generado dos líneas celulares nuevas, que expresan dos luciferasas secretadas específicamente en cardiomiocitos. Esto permite una cuantificación más precisa y con mayor sensibilidad de la diferenciación mediante análisis del medio de cultivo celular, permitiendo varios ensayos durante el curso de un mismo experimento.



Cuerpos embrioides formados y diferenciados en placas multipocillo. A la izquierda, imagen en campo claro. A la derecha, imagen con fluorescencia para mostrar los cardiomiocitos, de color verde.

Respecto a la parte del proyecto relacionada con la muerte celular, hemos identificado compuestos químicos que matan selectivamente a células madre embrionarias de ratón, y no a fibroblastos embrionarios. Estos mismos compuestos han sido probados por colaboradores nuestros, del Masonic Medical Research Laboratory de Nueva York, en células madre humanas inducidas pluripotentes (iPS, células madre pluripotentes generadas por desdiferenciación de células somáticas) confirmando su efectividad también en células madre

humanas. Curiosamente, estos compuestos también son efectivos contra varias líneas celulares de origen tumoral. Estos datos han dado lugar a la preparación de un manuscrito enviado a la revista *Stem Cell Reviews and Reports*, que ha sido revisado, sugiriéndose pequeños cambios, así como una solicitud de patente en preparación. Hemos identificado también otros compuestos que inducen muerte celular en células madre y compuestos que aumentan su actividad metabólica y/o proliferación, cuyo estudio estamos comenzando.



Efecto de compuestos químicos en viabilidad de células madre y fibroblastos. En el panel superior, ejemplo de cribado inicial usando cuatro compuestos por pocillo y células madre. En el panel inferior, ejemplo de cribado secundario con compuestos individuales usando células madre (ESCs) y fibroblastos (MEFs).

Esperamos en breve comenzar a usar células madre embrionarias e iPS humanas en el BIFI, para ello contamos ya con la aprobación del Comité Ético de Investigación Clínica de Aragón (CEICA) y estamos pendientes de obtener la aprobación de la Comisión de Garantías para la Donación y Utilización de Células y Tejidos Humanos, del Instituto de Salud Carlos III.

Hemos comenzado también ensayos en ratones, mediante los cuales pretendemos comprobar la eficiencia de los compuestos identificados en la inhibición de la formación de teratomas en ratones, previamente inducidos mediante inoculación subcutánea de células madre. Este trabajo se realiza en colaboración con Eduardo Romanos, de la Unidad de Valoración Funcional del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud.

La diferenciación de células madre de forma eficiente in vitro, el control de su potencial teratogénico 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 diversas terapias basadas en la utilización de células madre.

El grupo de investigación

El grupo está actualmente formado por cinco 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 Coneja, quien trabaja en el proyecto de diferenciación y apoptosis en células madre. Junto a ella, trabaja Verónica Tomey, estudiante de Máster y becaria de Iniciación a la Investigación del BIFI. En el proyecto de PSAP trabajan Angélica Ospina Correa, becaria predoctoral del Banco Santander/Universidad de Zaragoza y María Alejandra Nelo Bazán, estudiante predoctoral con una beca de la Fundación Ayacucho de Venezuela.

En el proyecto de células madre, colaboramos con un grupo de investigación de la Universidad de Colonia, dirigido por el Dr. Agapios Sachinidis en el Instituto de Neurofisiología, y con los Dres. Michael Xavier Doss y Charles Antzelevitch del Stem Cell Center, Masonic Medical Research Laboratory, Utica, New York. También colaboramos con la Dra. María Monsalve, del CNIC. Colaboramos también con Eduardo Romanos, de la Unidad de

Valoración Funcional del I+CS, en lo relativo a ensayos de compuestos en ratones.

Recientemente hemos comenzado a colaborar con el Dr. Luis Fernández, del I3A, en un proyecto encaminado al diseño de microchips para cultivo celular con técnicas de microfluídica. Pretendemos aplicar estos microchips en nuestro proyecto de diferenciación y muerte de células madre y ampliar su utilización a proyectos con similares requerimientos.

En el proyecto de PSAP, colaboramos con los Dres. Rafael Garesse, Miguel Fernández Moreno y Juan Arredondo, en el Departamento de Bioquímica de la Facultad de Medicina de la UAM y el Instituto de Investigaciones Biomédicas del CSIC.

Colaboramos además con un grupo del Departamento de Producción Animal de la Facultad de Veterinaria, de la Universidad de Zaragoza, dirigido por el Dr. Pascual López Buesa, en un proyecto relacionado con la mejora de la calidad de la carne, utilizando diversas técnicas de biología molecular para identificar genotipos de interés en producción porcina.

Financiación

El grupo dispone de financiación del MICINN y del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (I+CS), a través del Programa Aragonés de Medicina Regenerativa (PAMER).

Productividad

El grupo ha participado en dos artículos publicados en revistas internacionales en 2010, ha obtenido dos patentes, y se están terminando experimentos para completar otro artículo ya revisado. Asimismo hemos enviado a publicar nuestro primer artículo sobre células madre, ya preparado, dependiendo del progreso de la solicitud de patente relacionada con ese trabajo. Hemos reali-

zado también varias presentaciones, en ambos campos de investigación (PSAP y células madre) en congresos nacionales e internacionales.

3.4 Investigación. Proyectos de investigación.

EUROPEOS

Con gestión 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) (Subcontratación)

Entidad Financiadora: UE (FP VII)

Duración: 2008- 2010

Investigador Principal: Peter Kacsuk (subcontrato Zaragoza: Alfonso Tarancón)

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

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

Duración: 2008 - 2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: EDGI, European Desktop Grid Initiative

Entidad Financiadora: UE 7º Programa Marco Ref 261556

Duración: 1/6/2010 - 30/5/2012

Investigador Principal: Peter Kacsuk (IP en Zaragoza: Alfonso Tarancón)

Título: DEGISCO, Desktop Grids for International Scientific Cooperation

Entidad Financiadora: UE 7º Programa Marco Ref 261561

Duración: 1/6/2010 - 30/5/2012

Investigador Principal: Robert Lovas (IP en Zaragoza: Alfonso Tarancón)

Título: EGI-Inspire, European Grid Infrastructure
Entidad Financiadora: UE 7º Programa Marco Ref 261323

Duración: 1/4/2010 - 31/3/2014

Investigador Principal: Steven Newhouse (IP en Zaragoza: Alfonso Tarancón)

Con gestión externa:

Título: Plasmonic components and devices.

Entidad Financiadora: UE (COST Action MP0803).

Duración: 2008 - 2012

Investigador Principal: Olivier Martin (IP en Zaragoza: Luis Martín Moreno)

Título: Plasmon Innovative Sensing in the Infra-red.

Entidad Financiadora: UE (STREP-FP7-ICT-2009-4).

Duración: 2010 - 2012

Investigador Principal: Ross Stanley (IP en Zaragoza: Luis Martín Moreno)

Título: Physics of Cooperation and Conflict.

Entidad Financiadora: Unión Europea (COST Actions).

Duración: 1/09/2008 hasta 31/08/20011.

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: 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

Título: COST action of "Self-assembled guanosine structures for molecular electronic devices"

Entidad Financiadora: European Union. MPNS Action MP0802

Duración: 21/11/2008 - 15/06/2012

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

Título: e-I3 ETSF

Entidad Financiadora: European Union. INFRA-2007-1.2.2 "ETSF" 211956

Duración: 1/01/2008 - 30/06/11

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

Título: Thermal management with carbon nanotube architectures (THEMA)

Entidad Financiadora: 228539. European Commission's 7th Framework Programme FP7-NMP-2008-SMALL-2

Duración: 1/01/10 - 31/12/12

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

PROYECTOS INTERNACIONALES (NO UE)

Con gestión en Zaragoza

Título: Protein aggregation in neurodegenerative diseases: from basic science to therapies

Entidad Financiadora: COMMUNAUTÉ DE TRAVAIL DES PYRÉNÉES

Duración: 2010 - 2012

Investigador Principal: Marie-Lise Maddelein (IP del grupo español: Javier Sancho)

Título: Omni-data, Metodologías y Herramientas para el procesamiento distribuido y manipulación interactiva de grandes volúmenes de datos

Entidad Financiadora: Aquitania-Aragón

Duración: 1/4/2010-31/12/2010

Investigador Principal: Rafael Tolosana (IP Zaragoza: Alfonso Tarancón)

Con gestión externa:

Título: Asymptotic theory of outstanding observations in sequences of random variables
Entidad Financiadora: CONYCI (Comisión Nacional de Ciencia y Tecnología de Chile) Ministerio de Educación y Ciencia FONDECYT 1090216
Duración: 15/3/2009 - 15/3/2011
Investigador Principal: Raúl Gouet
Participantes del BIFI: F. Javier López, Gerardo Sanz.

Título: Polymer based hybrid nanomaterials for photovoltaics: Improving efficiency by theoretical Modeling - POLYPHEMO
Entidad Financiadora: Instituto Italiano di Tecnologia
Duración: 1/05/10 - 30/04/13
Investigador Principal: Angel Rubio Secades

Título: Understanding cohesive forces in Nanosystems
Entidad Financiadora: Australian Research Council. DP1096240
Duración: 1/01/10 - 31/12/12
Investigador Principal: Angel Rubio Secades

NACIONALES

Con gestión en Zaragoza:

Título: Flavoproteínas y flavoenzimas: transformación de energía y dianas farmacológicas
Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia BIO2007-65890-C02-01
Duración: Diciembre 2007 - Diciembre 2010
Investigador Principal: Dr. Milagros Medina

Título: Cooperación Hispano-Cubana en temáticas de Computación Avanzada.
Entidad Financiadora: MICINN. Subprograma Fomento de la Cooperación Científica Internacional. Programa Nacional de Internacionalización de la I+D. ACI2009-1027
Duración: 1/10/2009-31/12/2011
Investigador Principal: Alfonso Tarancón Lafita

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

Título: Modelos Estocásticos y aplicaciones
Entidad Financiadora: MICINN. MTM2010-15972.
Duración: 01/01/2011-31/12/2013
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: "Nanopartículas multifuncionales para el transporte y liberación selectiva de fármacos frente al virus de la hepatitis C (VHC)" PI10/00186
Entidad Financiadora: Instituto de Salud Carlos III
Duración: Desde: 2011 hasta: 2013
Investigador Principal: Olga Abian Franco

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: Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes.

Entidad Financiadora: MICINN. FIS2009-13364-C02-01

Duración: 1/1/2010 – 31/12/2012

Investigador Principal: Pierpaolo Bruscolini

Título: Evolucion multigenomica de las graminneas templadas (Pooideae, Poaceae). Biogeografía y filogeografía de especies modelo de pooideas (Festuca, Anthoxanthum s.l, Brachypodium, Bromus) en el viejo mundo

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología - CICYT. (CGL2009-12955-C02-01)

Duración: 2010-2012

Investigador Principal: P. Catalán

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

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

Entidad Financiadora: MICINN FIS2009-12648-C03-02

Duración: 2010-2012

Investigador Principal: Alfonso Tarancon Lafita

Título: IBERCIVIS: a volunteer computing platform for Science

Entidad Financiadora: MICINN Ref: AIC10-D-000603

Duración: 01/10/2010- 01/10/2011

Investigador Principal: A. Tarancón

Título: Dinámica y Estructura de Sistemas Complejos .

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. (FIS200801240).

Duración: 2009- 2011.

Investigador Principal: Juan José Mazo Torres.

Título: Estudio de Fusión por Confinamiento Magnético en IBERCIVIS

Entidad Financiadora: 164-40 Convenio BIFI-CIEMAT

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: IBERCIVIS: Plataforma de investigación basada en la computación voluntaria

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación Ref: TIN2010-08975-E

Duración: 2010-2011

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: IBERCIVIS: ciencia, sociedad y educación.

Entidad Financiadora: FECYT Ref: FCT-10-1614

Duración: 25/03/2010- 30/06/2011

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Regulación de la actividad de proteínas proapoptóticas mitocondriales

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. BFU2009-11800.

Duración: 2010

Investigador Principal: José Alberto Carrodegas Villar

Título: Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (BFU2010-19451)

Duración: 2010-2013

Investigador Principal: Adrián Velázquez Campoy

Título: Calorímetro isotérmico de titulación automatizado de alta sensibilidad

Entidad Financiadora: Diputación General de

Aragón y Ministerio de Educación y Ciencia (Proyecto de Infraestructuras Científico-Tecnológicas MEC UNZA08-4E-009)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: José Félix Sáenz Lorenzo

Título: Sistema robotizado para automatización del proceso de cristalización de macromoléculas biológicas

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón y Ministerio de Educación y Ciencia (Proyecto de Infraestructuras Científico-Tecnológicas MEC UNZA08-4E-017)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: José Félix Sáenz Lorenzo

Título: Equipo para análisis y cuantificación de interacciones moleculares mediante resonancia de plasmones superficiales

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón y Ministerio de Educación y Ciencia (Proyecto de Infraestructuras Científico-Tecnológicas MEC UNZA08-4E-021)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: José Félix Sáenz Lorenzo

Título: Sistema de análisis de fluorescencia

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón y Ministerio de Educación y Ciencia (Proyecto de Infraestructuras Científico-Tecnológicas MEC UNZA08-4E-022)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: José Félix Sáenz Lorenzo

Título: Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica. BIO2010-14983

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: 2010 - 2013

Investigador Principal: Milagros Medina

Título: Estabilidad conformacional de proteínas: principios generales, análisis estabilidad función del r-LDL y búsqueda de nuevas chaperonas farmacológicas.

Entidad Financiadora: MICINN

Duración: 2011-2014

Investigador Principal: Javier Sancho

Título: Biotecnología de la Interacciones Beneficiosas Planta Microorganismo.

Entidad Financiadora: VIII Red Temática. Subprograma de Acciones Complementarias. MICINN (BIO20009-05735-E)

Duración: 10/2009-09/2012

Investigador Principal: Jesús González López
Participante del BIFI: María Fillat Castejón

Título: Plasmónica: Propiedades de scattering y fenómenos no-lineales.

Entidad Financiadora: MICINN (MAT2008-06609-C02-01)

Duración: 2008 - 2011

Investigador Principal: Luis Martín Moreno

Título: Transducción de señales redox mediadas por FurA (ferric uptake regulator) en cianobacterias. Consecuencias en la fotosíntesis y la fijación de nitrógeno.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: 01/01/2010 - 31/12/2012

Investigador Principal: María F. Fillat Castejón

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: 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).

Participantes del BIFI: Angel Sánchez, F. Javier López, Fernando Plo, Gerardo Sanz..

Título: Modelos físicos para la simulación de tránsitos conformacionales en proteínas

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación – Dirección General de Investigación. FIS2009 – 13364 – C02 - 02

Duración: 01/01/2010 – 31/12/2012

Investigador Principal: Antonio Rey Gayo

Título: Nanociencia Molecular

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Consolider CSD2007-00010

Duración: 2007-2011

Investigador Principal: Eugenio Coronado Miralles

Participante del BIFI: Antonio Rey Gayo

Título: Studying protein holding and aggregation with coarse-grained computational models

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Acciones Integradas hispano-lusas (HP2008-0065)

Duración: 2009 – 2010

Investigador Principal: 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: 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-DGICYT. MTM2007-63772.

Duración: 2008 - 2010.

Investigador Principal: Juan Carlos Jorge Ulecia.

Participante del BIFI: José Luis Lopez García

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: "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: Física estadística, teoría y simulación de sistemas complejos, y sus aplicaciones multidisciplinarias

Entidad Financiadora: MICINN-FEDER, FIS2009-08451 (subprograma FIS)

Duración: 2009-2012

Investigador Principal: J. Marro

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: Red Biotecnológica de materiales lignocelulósicos: retos moleculares, enzimáticos y químicos para su aplicación industrial y medioambiental. BIO2009-07866-E

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: 2010

Investigador Principal: Gloria Caminal Saperas

Participante del BIFI: Milagros Medina y Patricia Ferreira

Título: Influencia de los flujos globales y su topología sobre el transporte en plasmas turbulentos.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Referencia: ENE2009-07247 (subprograma FTN).

Duración: 01/01/2010 – 31/12/2012.

Investigador Principal: Iván Calvo Rubio (Asociación EURATOM-CIEMAT para Fusión).

Título: (ACI-promociona) "Desarrollo de la Vicepresidencia Científica de la ETSF"

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. ACI2009-1036

Duración: 1/12/09 - 1/12/11

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

Título: Fancynano "Frontier Applications of Theoretical Spectroscopy: Nanostructures and Complex Systems"

Entidad Financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. FIS2007-65702-C02-01

Duración: 1/10/07 - 31/12/10

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

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: 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

AUTONÓMICOS

Con gestión en Zaragoza:

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 Excelencia Biología Estructural (B18)

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2008 - 2011

Investigador Principal: Dr. Carlos Gómez-Moreno

Título: Ibercivis (Plataforma nacional de computación.)

Entidad Financiadora: Ibercaja, DGA, DPZ, Ayto. Zaragoza. Fondos Propios

Duración: 2007- Indeterminado

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

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: Biología de Sistemas de Mycobacterium Tuberculosis

Entidad Financiadora: DGA

Duración: 2008-2010

Investigador Principal: Yamir Moreno

Título: Desarrollo racional de compuestos bioactivos frente a cinco enfermedades humanas

Entidad Financiadora: DGA

Duración: 2009 - : 2010

Investigador Principal: Javier Sancho Sanz

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.

Entidad Financiadora: Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud. PIPAMER09-13.

Duración: 2010

Investigador Principal: José Alberto Carrodegas Villar

Título: Protein Targets.

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón. Grupo consolidado. B-89.

Duración: 2010

Investigador Principal: Javier Sancho Sanz

Título: Grupo consolidado de investigación de la Comunidad Autónoma de Aragón. (E-22).

Entidad Financiadora: Gobierno de Aragón. Departamento de Educación y Ciencia.

Duración: 2003-2010

Investigador Principal: Gerardo Sanz

Título: Cheque Tecnológico Schnell

Entidad Financiadora: Araid - DGA Ref:

Duración: 01/01/2010-31/12/2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Apoyo Contratación técnico Aragrid

Entidad Financiadora: DGA PTA13/10

Duración: 2011-2012

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

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 Comparti-
da 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: Red Española de Supercomputación Cae-
saraugusta BSC

Entidad Financiadora: DGA Convenio 16434

Duración: 2008-2011

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Con gestión externa:

Título: Métodos asintóticos y numéricos para
problemas de perturbación singular y aplicacio-
nes.

Entidad Financiadora: Gobierno de Navarra.
Ref 2008/2301.

Duración: 1/7/2008 - 30/6/2010.

Investigador Principal: José Luis Lopez Garcia..

Título: Análisis Asintótico y Numérico de Proble-
mas 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: Modelos fisicomatemáticos de procesos
cooperativos en el cerebro y sus aplicaciones en
biología, neurociencia y computación

Entidad Financiadora: Junta de Andalucía,
FQM-01505 ("Proyectos de Excelencia")

Duración: 2007-2010

Investigador Principal: Joaquin Marro

Título: Modelización y simulación de sistemas
complejos (MODELICO)

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid
(S2009/ESP-1691)

Duración: 1/01/2010 – 31/12/2013

Investigador Principal: Enrique Lomba

Participante del BIFI: Angel Sánchez

Título: inanoGUNE. ETORTEK 2008 and 2009

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco. IE08-
225 and IE09-243

Duración: 1/01/08 - 31/12/11

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

Título: Simulación de Nanoestructuras, Biomolé-
culas y sistemas complejos de interés tecnológi-
co: técnicas espectroscópicas

Entidad Financiadora: Gobierno Vasco. IT-319-
07

Duración: 1/01/07 - 31/12/12

Investigador Principal: Angel Rubio Secades

Título: Química a Alta Presión

Entidad Financiadora: Comunidad de Madrid
(ref. S2009/PPQ-1551)

Duración: 2010 – 2013

Investigador Principal: Valentín García Baonza

Participante del BIFI: Antonio Rey

UNIVERSIDADES**Con gestión en Zaragoza:**

Título: Estancias de Investigadores de Excelencia.

Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza. Código: 225279

Duración: 2010

Investigador Principal: Víctor Arturo Gopar Sánchez

Título: Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Inhibidores competitivos, alostéricos y bases moleculares de la resistencia a fármacos

Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza. (UZ2009-BIO-05)

Duración: 2010

Investigador Principal: Adrián Velázquez Campoy

Con gestión externa:

Título: Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas

Entidad Financiadora: UCM - Banco Santander - Ref: 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: Implementación de estudios "in vivo" e "in vitro" de compuestos antiinfecciosos efectivos frente a *Helicobacter pylori* y el Virus de la Hepatitis C (VHC)

Entidad Financiadora: Instituto Carlos III

Duración: 2008-2011

Investigador Principal: Olga Abián Franco

Título: Desarrollo de inhibidores contra la infección de *Helicobacter pylori*

Entidad Financiadora: Genoma España

Duración: 2009 - 2010

Investigador Principal: Javier Sancho

Título: HpKO

Entidad Financiadora: Genoma España Innocash

Duración: 2010-2011

Investigador Principal: Javier Sancho

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

Entidad Financiadora: Plebionic S.L. 2009/0349

Duración: 1/01/2009-31/12/2010

Investigador Principal: Javier Sancho

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

Título: Observatorio tecnológico con Hewlett-Packard

Entidad Financiadora: Hewlett-Packard

Duración: 6/7/2010-31/12/2011

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Título: Estudio de distribuciones estadísticas

Entidad Financiadora: STL (OTRI)

Duración: 2009-2010

Investigador Principal: Alfonso Tarancón

Con gestión externa:

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: Creación de una base de datos online de resultados de química cuántica en péptidos

Entidad Financiadora: Consejo Superior de Investigaciones Científicas, 200980I064

Duración: 1/01/2010 - 31/12/2010

Investigador Principal: Pablo Echenique

Título: PRIN 2008

Entidad Financiadora: Ministero dell'Istruzione dell'Università e della Ricerca.

Duración: 04/12/2008 – 21/03/2012

Investigador Principal: Giorgio Parisi

Participante del BIFI: Sergio Perez Gaviro

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 2010 (que citan expresamente al BIFI, 116)

1. Abbasbandy S., López J.L., López-Ruiz R. The Homotopy Analysis Method and the Liénard Equation. International Journal of Computer Mathematics 2010

2. Abian O., Vega S., Neira J.L., Velazquez-Campoy A. Conformational Stability of Hepatitis C

Virus NS3 Protease. Biophysical Journal 2010 99:3811-3820

3. Abrunheiro L., Camarinha M., Clemente-Gallardo J. Minimum force optimal control of the spherical free rigid body. Control 2010: 9th Portuguese Conference on Automatic Control, Special session in honor of Fatima Silva-Leite, P77, 2010

4. Aguado-Llera D., Goormaghtigh E., De Geest N., Quan X.J., Prieto A., Hassan B.A., Gómez J., Neira, J.L. The Basic Helix-Loop-Helix Region of Human Neurogenin 1 is a Monomeric Natively Unfolded Protein which Forms a "Fuzzy" Complex upon DNA Binding. Biochemistry 2010 49:1577-1589

5. Aguado-Llera D., Oyenarte I., Martínez-Cruz L.A., Neira, J.L. The CBS Domain Protein MJ0729 of Methanocaldococcus jannaschii Binds DNA. FEBS Letters 2010 584:4485-4489

6. Alías M., Ayuso-Tejedor S., Fernández-Recio J., Cativiela C., Sancho J. Helix propensities of conformationally restricted amino acids. Non-natural substitutes for helix breaking proline and helix forming alanine. Organic and Biomolecular Chemistry 2010 8:788-792

7. Alonso J.L., Castro A., Echenique P., Polo V., Rubio A., Zueco D. Ab initio molecular dynamics on the electronic Boltzmann equilibrium distribution. New Journal of Physics 12:083064

8. Alvarez-Baños R., Cruz A., Fernandez L.A., Gil-Narvion J.M., Gordillo-Guerrero A., Guidetti M., Maiorano A., Mantovani F., Marinari E., Martin-Mayor V., Monforte-Garcia J., Munoz-Sudupe A., Navarro D., Parisi G., Perez-Gavira S., Ruiz-Lorenzo J.J., Schifano S.F., Seoane B., Tarancon A., Tripiccone R., Yllanes D. Nature of the spin-glass phase at experimental length scales. Journal of Statistical Mechanics 2010 P06026

9. Alvarez-Baños R., Cruz A., Fernandez L.A., Gil-Narvion J.M., Gordillo-Guerrero A., Guidetti M.,

Maiorano A., Mantovani F., Marinari E., Martin-Mayor V., Monforte-Garcia J., Munoz Sudupe A., Navarro D., Parisi G., Perez-Gaviro S., Ruiz-Lorenzo J.J., Schifano S.F., Seoane B., Tarancon A., Tripiccion R., Yllanes D. Static versus dynamic heterogeneities in the D=3 Edwards-Anderson-Ising spin glass. *Physical Review Letters* 2010 105:177202

10. Alvarez-Baños R., Cruz A., Fernandez L.A., Gordillo-Guerrero A., Gil-Narvion J.M., Guidetti M., Maiorano A., Mantovani F., Marinari E., Martin-Mayor V., Monforte-Garcia J., Munoz-Sudupe A., Navarro D., Parisi G., Perez-Gaviro S., Ruiz-Lorenzo J.J., Seoane B., Schifano S.F., Tarancon A., Tripiccion R., Yllanes D. Critical Behavior of Three-Dimensional Disordered Potts Models with Many States. *Journal of Statistical Mechanics* 2010 P05002

11. Alvarez-Estrada R.F. Expressing complementarity and the x-p commutation relation through further quantum inequalities. *European Journal of Physics* 2010 31:407-418

12. Aniello P., Clemente-Gallardo J., Marmo G., Volkert G. Classical Tensors and Quantum Entanglement I: Pure States. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 2010 7:485-503

13. Arias-Moreno X., Cuesta-Lopez S., Millet O., Sancho J., Velazquez-Campoy A. Thermodynamics of Protein-Cation Interaction: Ca²⁺ and Mg²⁺ Binding to the Fifth Binding Module of the LDL Receptor. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* 2010 78:950-961

14. Asorey M., Cariñena J.F., Clemente-Gallardo J., Martínez E. XVIII Fall Workshop on Geometry and Physics American Institute of Physics, AIP Conference Proceedings 2010 1260

15. Avarvari N., Kiracki K., Llusar R., Polo V., Sorribes I., Vicent C. Hybrid Organic/Inorganic Complexes Based on Electroactive Tetrathiafulvalene-Functionalized Diphosphanes Tethered to

C3-Symmetrized Mo₃Q₄ (Q=S,Se) Clusters. *Inorganic Chemistry* 2010 49:1894-1904

16. Ayuso-Tejedor S., Abian O., Sancho J. Underexposed residues and protein stabilization. *Protein Engineering, Design and Selection* 2010 24:171-177

17. Ayuso-Tejedor S., Espinosa-Angarica V., Bueno M., Campos L.A., Abian O., Bernadó P., Sancho J., Jimenez M.A. Design and structure of a protein folding intermediate: A hint into dynamical regions of proteins. *Journal of Molecular Biology* 2010 400:922-934

18. Ayuso-Tejedor S., Nishikori S., Okuno T., Ogura T., Sancho J. FtsH cleavage of non-native conformations of proteins. *Journal of Structural Biology* 2010 171:117-124

19. Becker N.B., Rosa A., Everaers R. The radial distribution function of worm-like chains. *European Physical Journal E* 2010 32:53-69

20. Borge-Holthoefer J., Moreno Y., Arenas A. Topological vs. Dynamical Robustness in a Lexical Network. *International Journal of Bifurcation and Chaos* 2010

21. Bouzat S., Falo F. Influence of direct motor-motor interaction in models for cargo transport by a single team of motors. *Physical Biology* 2010 7:046009

22. Bravo J., Neira J.L. Folding and Unfolding of Proteins Involved in Pancreatic Cancer: A Layman Guide. *The Scientific World Journal* 2010 10:1612-1633

23. Burgos C., Moreno C., Carrodegua J. A., Barcelona J. A., Tarrafeta L., López-Buesa, P. The effects of trimming on loin composition from pigs fed a modified diet. *Fleischwirtschaft International* 2010 5:62-66

24. Burgos C., Moreno C., Carrodegua J.A., Barcelona J.A., Tarrafeta L., López-Buesa, P. The influence of diet, sex, IGF2 and RYR1 genotypes, and anatomical location on pork loin composition. *Journal of Food Composition and Analysis* 2010 23:307-313
25. Bustos A., Castejón F., Fernández A., García J., Martín-Mayor V., Tarancón A., Velasco J.L. 3D features of ion collisional Transport in ITER. *Nuclear Fusion* 2010 50:125007
26. Bustos A., Castejón F., Fernández L.A., García J., Martín-Mayor V., Reynolds J.M., Seki R., Velasco J.L. Impact of 3D features on ion collisional transport in ITER. *Nuclear Fusion* 2010
27. Calvo I., Cuchi J.C., Esteve J.G., Falceto F. Generalized Central Limit Theorem and Renormalization Group. *Journal of Statistical Physics* 2010 141:409
28. Calvo I., Falceto F., Zambon M. Deformation of Dirac structures along isotropic subbundles. *Reports on Mathematical Physics* 2010 65:259
29. Cammarota C., Cavagna A., Giardina I., Gradenigo G., Grigera T.S., Parisi G., Verrocchio P. Phase-Separation Perspective on Dynamic Heterogeneities in Glass-Forming Liquids. *Physical Review Letters* 2010 105:055703
30. Cappa A., López-Bruna D., Castejón F., Ochando M., Medina F., Vazquez-Poletti J.L., Tereshchenko M., Ascasibar E. Calculated evolution of the Electron Bernstein Wave heating deposition profile under NBI conditions in TJ-II plasmas. 36th EPS Conference on Plasma Physics 2010
31. Cappa A., López-Bruna D., Castejón F., Ochando M.A., Vázquez-Poletti J.L., Medina F., Ascasibar E., Reynolds J.M., Tereshchenko M. Dynamic simulation of the Electron Bernstein Wave heating under NBI conditions in TJ-II plasmas. *Contributions to Plasma Physics* 2010 50
32. Cardillo A., Gómez-Gardeñes J., Vilone D., Sánchez A. Coevolution of strategies and update rules in complex Prisoner's Dilemma networks. *New Journal of Physics* 2010 12:103034
33. Cebrián R., Maqueda M., Neira J.L., Valdivia E., Martínez-Bueno M., Montalbán-López, M. Insights into the Functionality of the Putative Residues Involved in Enterocin AS-48 Circularization. *Applied and Environmental Microbiology* 2010 76:7268-7276
34. Contreras-Moreira B., Sancho J., Espinosa-Angrica V. Comparison of DNA-binding across protein superfamilies. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* 2010 78:52-62 (2010)
35. Crupi V., Guella G., Majolino D., Mancini I., Rossi B., Stancanelli R., Venuti V., Verrocchio P., Viliani G. T-dependence of the vibrational dynamics of IBP/diME-beta-CD in solid state: A FT-IR spectral and quantum chemical study. *Journal of Molecular Structure* 2010 972:75-80
36. Crupi V., Majolino D., Venuti V., Guella G., Mancini I., Rossi B., Verrocchio P., Viliani G., Stancanelli R. Temperature Effect on the Vibrational Dynamics of Cyclodextrin Inclusion Complexes: Investigation by FTIR-ATR Spectroscopy and Numerical Simulation. *Journal of Physical Chemistry A* 2010 114:6811-6817
37. Domenech R., Abian O., Bocanegra R., Correa J., Sousa-Herves A., Riguera R., Mateu M.G., Fernandez-Megia E., Velazquez-Campoy A., Neira J.L. Dendrimers as Potential Inhibitors of the Dimerization of the Capsid Protein of HIV-1. *Biomacromolecules* 2010 11:2069-2078
38. Escalona-Morán M., Cosenza M.G., López-Ruiz R., García P. Complexity and Nontrivial Collective Behavior in Electroencephalographic Signals. *International Journal of Bifurcation and Chaos* 2010 20: 1723-1729

39. Esteban L., Sanz G., Borque A. A step by step algorithm for combining diagnostic tests. *Journal of Applied Statistics* 2010
40. Falceto F., Gopar V.A. Conductance through quantum wires with Levy-type disorder: universal statistics in anomalous quantum transport. *Europhysics Letters-EPL* 2010
41. Fernandez L.A., Martin-Mayor V., Parisi G., Seoane B. Spin glasses on the hypercube. *Physical Review B* 2010 81:134403
42. Fernandez L.A., Martin-Mayor V., Seoane B., Verrocchio P. Separation and fractionation of order and disorder in highly polydisperse systems *Physical Review E* 2010 82:021501
43. Ferreira P., Hernández-Ortega A., Herguedas B., Rencoret J., Gutiérrez A., Martínez M.J., Jiménez-Barbero J., Medina M., Martínez A.T. Kinetic and chemical characterization of aldehyde oxidation by fungal aryl-alcohol oxidase. *Biochemical Journal* 2010 425:585-593
44. Fiasconaro A., Mazo J.J., Falo F. Translocation time of periodically forced polymer chains. *Physical Review E* 2010 82:031803
45. Fiasconaro A., Mazo J.J., Falo F. Translocation time of periodically forced polymer chain. *Physical Review E* 2010 82:031803
46. Fillat, M.F. Fur (ferric uptake regulation) proteins in cyanobacteria. In *Biometals: Molecular Structures, Binding Properties and Applications*, NOVA Science Publishers, 2010, pp. 139-162
47. Fosco C., Laruelle A., Sánchez A. Turnout intention and social networks. *Advances in Complex Systems* 2010
48. Frago S., Lans I., Navarro J.A., Hervás M., Edmondson D.E., De la Rosa M.A., Gómez-Moreno C., Mayhew S.G., Medina M. Dual role of FMN in Flavodoxin function: electron transfer cofactor and modulation of the protein-protein interaction surface. *Biochimica Biophysica Acta – Bioenergetics* 2010 1797:262–271
49. García-Regaña J.M., Castejón F., Cappa A., Marushchenko N.B., Tereshchenko M. Comparison of different models for EBCD calculation in the TJ-II Stellarator. *Plasma Physics and Controlled Fusion* 2010 52:065007
50. Gómez S., Arenas A., Borge-Holthoefer J., Meloni S., Moreno Y. Discrete-time Markov chain approach to contact-based disease spreading in complex networks. *Europhysics Letters* 2010 89:38009
51. Gomez-Gardenes J., Moreno Y., Arenas A. Evolution of Microscopic and Mesoscopic Synchronized Patterns in Complex Networks. *Chaos* 2010
52. Gomez-Gardenes J., Zamora-López G., Moreno Y., Arenas A. From Modular to Centralized Organization of Synchronization in Functional Areas of the Cat Cerebral Cortex. *PLoS One* 2010 5:e12313
53. González A., Bes M.T., Barja F., Peleato M.L., Fillat M.F. Overexpression of FurA induces morphological and physiological changes in *Anabaena* sp. PCC 7120. *Plant and Cell Physiology* 2010 51:1900-1914
54. González A., Bes M.T., Peleato M.L., Fillat M.F. Overexpression of Fur affects heterocysts differentiation in *Anabaena* sp. PCC 7120. In *Biological Nitrogen Fixation and Plant-Associated Microorganisms*, SEFIN, 2010, pp. 95-96
55. Gopar V.A., Molina R.A. Controlling conductance statistics of quantum wires by driving ac fields. *Physical Review B* 2010 81:195415
56. Gouet R, López F.J., Sanz G. Central Limit Theorem for the number of near records. *Communications in Statistics - Theory and Methods* 2010

57. Gouet R., López F.J., Sanz G. Limit theorems for the counting process of near-records. *Journal of Statistical Planning and Inference* 2010
58. Gouet R., López F.J., Sanz G. On records-like observations: Asymptotic analysis using martingale tools. In *Modern Mathematical tools and techniques in capturing complexity*, Springer Series in Synergetics, Springer, 2010
59. Grazú V., López-Gallego F., Montes T., Abian O., González R., Hermoso J., García J.L., Mateo C., Guisán, J.M. Promotion of Multipoint Covalent Immobilization Through Different Regions of Genetically Modified Penicillin G acylase from *E. coli*. *Process Biochemistry* 2010 45:390–398
60. Grujic J., Fosco C., Araújo L., Cuesta J.A., Sánchez A. Social experiments in the mesoscale: Humans playing a spatial Prisoner's Dilemma. *PLoS ONE* 2010 5:e13749
61. Guerra B, Poncela J., Gomez-Gardeñes J., Latora V., Moreno Y. Dynamical Organization towards Consensus in the Axelrod Model on Complex Networks. *Physical Review E* 2010 81:056105
62. Guerra B., Gómez-Gardeñes J. Annealed and Mean-field formulations of disease dynamics on static and adaptive networks. *Physical Review E* 2010 82:035101
63. Guerra B., Gómez-Gardeñes J. Coevolution of strategies and update rules in the Prisoner's Dilemma game on complex networks. *New Journal of Physics* 2010 9:184
64. Herguedas B., Martínez-Júlvez M., Frago S., Medina M., Hermoso J.A. Oligomeric state in the crystal structure of modular FAD synthetase provides insights into its sequential catalysis in prokaryotes. *Journal of Molecular Biology* 2010 400:218-230
65. Hernández J.A., Alonso I., Pellicer S., Peleato M.L., Cases R., Strasser R.J., Barja F., 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. *Journal of Plant Physiology* 2010 167:430-437
66. Hernández-Ortega A., Martínez A.T., Ferreira P., Medina M., Borrell K., V. Guallar. Unraveling the catalysis mechanisms of Aryl-alcohol oxidase and related GMC oxidoreductases. In *Oxidative Enzymes as Sustainable Industrial Biocatalysts*, 2010, pp. 47-52
67. Iovanna J.L., Neira J.L. Pancreatic Cancer: Molecular, Biochemical, Chemopreventive, and Therapeutic Aspects. *The Scientific World Journal* 2010 10:1967-1970
68. Lans I., Peregrina J.R., Medina M., Garcia-Viloca M., Gonzalez A., Lluch J.M. The mechanism of the hydride transfer between *Anabaena* Tyr-303Ser FNRrd/FNRox and NADP⁺/H. A combined pre-steady-state kinetic/ensemble-averaged transition state theory with multidimensional tunneling study. *Journal of Physical Chemistry B* 2010 114:3368-3379
69. Larriva M., Prieto L., Bruscolini P., Rey A. A simple simulation model can reproduce the thermodynamic folding intermediate of apoflavodoxin. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* 2010 78:73–82
70. Llusar R., Polo V., Velez E., Vicent C. Sulfur-Based Redox Reactions in Mo3S7 and Mo3S4 Clusters Bearing Halide and 1,2-Dithiolene Ligands: a Mass Spectrometric and Density Functional Theory Study. *Inorganic Chemistry* 49:8045–8055
71. López-Bruna D., Reynolds J.M., Cappa A., Martinell J., García J., Gutiérrez-Tapia C. Programas periféricos de ASTRA para el TJ-II. *Informes Técnicos Ciemat* 2010 1201
72. López-Bruna D., Romero J.A., López-Fraguas A., Reynolds J.M., Blanco E., Estrada T., Ochando M.A., Jiménez-Gómez R., Bondarenko O., Tafalla

- D., Herranz J., Ascasibar E., Vargas V.I., TJ-II Team. Magnetic resonances in ECR heated plasmas of the TJ-I I Helic. *Contributions Plasma Physics* 2010 50:600-604
73. Lopez-Redondo M.L., Contreras A., Marina A., Neira, J.L. The Regulatory Factor SipA is a Highly Stable Beta-li Class Protein with a SH3 Fold. *FEBS Letters* 2010 584:989-994
74. López-Ruiz R., Mancini H., Calbet X. A Statistical Measure of Complexity. In *Recent Advances in Generalized Information Measures and Statistics*, Bentham Science Books, 2010
75. López-Ruiz R., Sánchez J. Complexity and Stochastic Synchronization in Coupled Map Lattices and Cellular Automata. In *Stochastic Control*, Scio Books, 2010, pp. 59-79
76. Lopez-Ruiz R., Sañudo J. Evidence of Magic Numbers in Nuclei by Statistical Indicators. *Open Systems & Information Dynamics (OSID)* 2010 17:279-286
77. López-Ruiz R., Sañudo J., Romera E., Calbet X. Statistical Complexity and Fisher-Shannon Information: Applications. In *Statistical Complexity*, Springer Books, 2010
78. Lostao A., Peleato M.L., Gómez-Moreno C., Fillat M.F. Oligomerization properties of cyanobacterial FurA: Direct visualization by in situ atomic force microscopy under different redox conditions. *Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics* 2010 1804:1723-1729
79. Manshour P., Ghasemi F., Matsumoto T., Gómez J., Sahimi M., Peinke J., Pacheco A.F., Tabar M.R. Anomalous fluctuations of vertical velocity of Earth and their possible implications for earthquakes. *Physical Review E* 2010 82:036105
80. Martínez-Cruz L.A., Encinar J.A., Sevilla-Sierra P., Oyenarte I., Gómez-García I., Aguado-Llera D., García-Blanco F., Gómez J., Neira J.L. Nucleotide-Induced Conformational Transitions in the CBS Domain Protein MJ0729 of *Methanocaldococcus jannaschii*. *Protein Engineering, Design and Selection* 2010
81. Martínez-Julvez M., Abian O., Vega S., Medina M., Velazquez-Campoy A. Studying the Allosteric Energy Cycle by Isothermal Titration Calorimetry. In *Allostery: Methods and Protocols*, Methods in Molecular Biology 2010
82. Martínez-Pérez M.J., de Miguel R., Carbonera R., Martínez-Júlvez M., Lostao A., Piquer C., Gómez-Moreno C., Bartolomé J., Luis F. Size-dependent properties of Magnetoferritin. *Nanotechnology* 2010 21:465707
83. Mattarelli M., Gasperi G., Montagna M., Verrocchio P. Transparency and long-ranged fluctuations: The case of glass ceramics. *Physical Review B* 2010 82:094204
84. Mello P.A., Gopar V.A., Mendez-Bermudez J.A. Quantum Scattering and Transport in Classically Chaotic Cavities: An Overview of Old and New Results. In *Chaotic Systems, Theory and Applications*, Ed. World Scientific, 2010, pp. 191-206
85. Meloni S., Arenas A., Gómez S., Borge-Holthoefer J., Moreno Y. Modeling Epidemic Spreading in Complex Networks: Concurrency and Traffic. In *Handbook of Optimization in Complex Networks*, 2010
86. Meloni S., Gómez-Gardeñes J. Local Empathy provides Global minimization of Congestion in communication networks. *Physical Review E* 2010 82:056105
87. Membrado M., Pacheco A.F. Decrease of the atmospheric co-rotation with height. *European Journal of Physics* 2010 31:1013-1020
88. Mendez-Bermudez J.A., Gopar V.A., Varga I. Scattering and transport statistics at the metal-in-

sulator transition: A numerical study of the power-law banded random matrix model. *Physical Review B* 2010 82:125106

89. Moreno M.J., Bastos M., Velazquez-Campoy A. Partition of Amphiphilic Molecules to Lipid Bilayers by ITC. *Analytical Biochemistry* 2010 399:44-47

90. Neira J.L., Contreras L.M., Ruiz De Los Paños O., Sánchez-Hidalgo M., Martínez-Bueno M., Maqueda M., Rico M. Structural Characterization of the Natively Unfolded Enterocin EJ97. *Protein Engineering, Design and Selection* 2010 23:507-518

91. Pellicer S., Bes M.T., González A., Neira J.L., Peleato M.L., Fillat M.F. An optimized procedure for efficient purification of functional FurA (ferric uptake regulator) from *Anabaena* PCC 7120 based on mild guanidine hydrochloride treatment. *Process Biochemistry* 2010 45:292-296

92. Pellicer-Lostao C., López-Ruiz R. Chaotic Gas-like Model for Trading Markets. *Journal of Computational Science* 2010 1:24-32

93. Pellicer-Lostao C., López-Ruiz R. Transition from Exponential to Power Law Income Distributions in a Chaotic Market. *International Journal of Modern Physics C* 2010

94. Peregrina J.R., Sánchez-Azqueta A., Herguedas B., Martínez-Júlvez M., Medina M. Role of specific residues in charge transfer complex formation and hydride transfer between NADP⁺/H and Ferredoxin NADP⁺-reductase from *Anabaena* PCC 7119. *Biochimica Biophysica Acta – Bioenergetics* 2010 1797:1638-1646

95. Petretti S., Vanne Y.V., Saenz A., Castro A., Decleva P. Alignment-Dependent. Ionization of N-2, O-2, and CO2 in Intense Laser Fields. *Physical review Letters* 2010 104 22:223001

96. Poncela J, Gomez-Gardenes J., Floria L.M., Moreno Y. Growing Networks Driven by the Evo-

lutionary Prisoner's Dilemma Game. In *Handbook of Optimization in Complex Networks* 2010

97. Poncela J., Gomez-Gardeñes J., Floria L.M., Moreno Y. Cooperation in the Prisoner's Dilemma Game in Random Scale-Free Graphs. *International Journal of Bifurcation and Chaos* 2010 20:849-857

98. Pulido N.O., Salcedo G., Perez-Hernandez G., Jose-Núñez C., Velazquez-Campoy A., Garcia-Hernandez E. Energetic Effects of Magnesium in the Recognition of Adenosine Nucleotides by the F1-ATPase β Subunit. *Biochemistry* 2010 49:5258-5268

99. Reynolds J.M., López-Bruna D. Plasma drift-kinetic equation calculations in three-dimensional magnetic geometries. *Physics of Plasmas* 2010 17:072504

100. Roca C.P., Lozano S., Arenas A., Sánchez A. Topological traps control flow on real networks: The case of coordination failures. *PLoS ONE* 2010

101. Roca C.P., Sánchez A., Cuesta J.A. Individual strategy update and emergence of cooperation in social networks. *Journal of Mathematical Sociology* 2010

102. Rodríguez A.H., Moreno Y. Dyadic and Social Influence on the Axelrod Model with Clever Mass Media. In *Mass Media: Coverage, Objectivity and Changes*, Nova Publisher, 2010

103. Rodríguez A.H., Moreno Y. Effects of Mass Media action on the Axelrod Model with Social Influence. *Physical Review E* 2010 82:016111

104. Romero-Beviar M., Martínez-Rodríguez S., Prieto J., Goormaghtigh E., Ariz U., Martínez-Chantar M.L., Gómez J., Neira J.L. The N-Terminal Domain of the Enzyme I is a Monomeric Well-Folded Protein with a Low Conformational Stability and Residual Structure in the Unfolded State.

Protein Engineering, Design and Selection 2010 23:729-742

105. Rosa A., Becker N.B., Everaers R. Looping probabilities in model interphase chromosomes. *Biophysical Journal* 2010 98:2410-2419

106. Sanz J., Floria L.M., Moreno Y. Spreading of Persistent Infections in Heterogeneous Populations. *Physical Review E* 2010 81:056108

107. Scellato S., Fortuna L., Frasca M., Gómez-Gardeñes J., Latora V. Traffic optimization in Transport networks based on local routing. *European Physical Journal B* 2010 73:1434

108. Sevilla E., Martín-Luna B., Vela L., López-Gomollón S., Bes M.T., Fillat M.F., Peleato M.L. Microcystin-LR synthesis as response to nitrogen : transcriptional analysis of the *mcuD* gene in *Microcystis aeruginosa* PCC7806. *Ecotoxicology* 2010 19:1167-1173

109. Sevilla E., Vela L., Calvin V.M., Bes M.T., Fillat M.F., Peleato M.L. Development of technology for detection of microcystin-producing *Microcystis* in water bodies. In *Harmful Algae*, International Society for Harmful Algae, 2010, pp. 201-203

110. Stevens R.C., Sancho J., Martínez A. Rescue of misfolded proteins and stabilization by small molecules. *Methods in Molecular Biology* 2010 648:313-324

111. Taneva S.G., Moro F., Velázquez-Campoy A., Muga A. Energetics of Nucleotide-Induced DnaK Conformational States. *Biochemistry* 2010 49:1338-1345

112. Tapia-Rojó R., Mazo J.J., Falo F. Thermal and mechanical properties of a DNA model with salvation barrier. *Physical Review E* 2010 82:031916

113. Tapia-Rojó R., Mazo J.J., Falo F. Thermal and mechanical properties of a DNA model with solvation barrier. *Physical Review E* 2010 82:031916

114. Tejedor A., Gómez J.B., Pacheco A.F. Hierarchical model of distributed seismicity. *Physical Review E* 2010 82:016118

115. Traverso J., López-Jaramillo F.J., Serrato A.J., Ortega-Muñoz M., Aguado-Llera D., Sahrawy M., Santoyo-González F., Neira J.L., Chueca A. Evidence of Non-Functional Redundancy between Two Pea H-Type Thioredoxins by Specificity and Stability Studies. *Journal of Plant Physiology* 2010 167:423-429

116. Yruela I., Arilla S., Medina M., Contreras B. Evolutionary divergence of chloroplast FAD synthetase proteins. *BMC Evolutionary Biology* 2010 10:311

Artículos publicados por miembros del BIFI (no citan expresamente al BIFI, 72)

1. Álvarez-Estrada R.F. Brownian Motion, Quantum Corrections and a Generalization of the Hermite Polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 2010 233:1453-1461

2. Ascasíbar E., Estrada T., Liniers M., Ochando M., Tabarés F.L., Tafalla D., Guasp J., Jiménez-Gómez R., Castejón F., López-Bruna D., López-Fraguas A., Pastor I., Cappa A., Fuentes C., Fontdecaba J.M., TJ-II Team. Global energy confinement studies in TJ-II NBI plasmas. *Contribution to Plasma Physics* 2010 50:594

3. Barrera L., de la Luna E., Fignini L., Beurskens M.N.A., Brix M., Castejón F., de Vries P.C., Farina D., Kempenaars M., Lomas P., Mailloux J., Nunes I., Solano E., JET-EFDA Contributors. Inboard and outboard electron temperature profile measurements in JET using ECE diagnostics. *Plasma Physics and Controlled Fusion* 2010 52:085010

4. Barrila J., Gabelli S.B., Bacha U., Amzel L.M., Freire E. Mutation of Asn28 disrupts the dimerization and enzymatic activity of SARS 3CL(pro). *Biochemistry* 2010 49:4308-4317

5. Brower E.T., Schön A., Freire E. Naturally occurring variability in the envelope glycoprotein of HIV-1 and development of cell entry inhibitors. *Biochemistry* 2010 49:2359-2367
6. Bueno M., Temiz N.A., Camacho C.J. Novel modulation factor quantifies the role of water molecules in protein interactions. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* 2010 78:3226-3234
7. Caughman J.B.O., Fernández A., Cappa A., Castejón F., García-Regaña J.M., Rassmussen D.A., Wilgen J.B. Initial Electron Bernstein Wave Emission Measurements on the TJ-II Stellarator. *Fusion Science and Technology* 2010 57:41
8. De Franciscis S., Torres J.J., Marro J. Unstable Dynamics, Nonequilibrium Phases, and Criticality in Networked Excitable Media. *Physical Review E* 2010 82:041105
9. De Genst E.J., Guillems T., Wellens J., O'Day E.M., Waudby C.A., Meehan S., Dumoulin M., Hsu S.T., Cremades N., Verschueren K.H., Pardon E., Wyns L., Steyaert J., Christodoulou J., Dobson C.M. Structure and properties of a complex of α -synuclein and a single-domain camelid antibody. *Journal of Molecular Biology* 2010 402:326-343
10. Dhulesia A., Cremades N., Kumita J.R., Hsu S.T., Mossuto M.F., Dumoulin M., Nietlispach D., Akke M., Salvatella X., Dobson C.M. Local cooperativity in an amyloidogenic state of human lysozyme observed at atomic resolution. *Journal of the American Chemical Society* 2010 132: 15580-15588
11. Enciso M., Rey A. A refined hydrogen bond potential for flexible protein models. *Journal of Chemical Physics* 2010 132:235102
12. Fajardo O.Y., Mazo J.J. Effects of surface disorder and temperature on atomic friction. *Physical Review B* 2010 82:035435
13. Fiasconaro A., Mazo J.J., Spagnolo B. Noise-induced enhancement of stability in a metastable system with damping. *Physical Review E* 2010 82:041120
14. García-Vidal F.J., Martín-Moreno L., Ebbesen T.W., Kuipers L. Light passing through subwavelength apertures. *Review of Modern Physics* 2010 82:729-787
15. Gómez-Iglesias A., Castejón F., Vega-Rodríguez M.A. Novel Algorithm for Stellarator Optimisation Using Metaheuristics. *Journal of Computational Physics* 2010
16. Gómez-Iglesias A., Vega-Rodríguez M.A., Castejón F., Cárdenas-Montes M., Stozka R. Distributed and Asynchronous Bees Algorithm: A New Swarm Algorithm Adapted to Distributed Computing to Solve Large-Scale Problems. *MIT Journal* 2010
17. Hurtado-Guerrero R., Zusman T., Pathak S., Ibrahim A.F., Shepherd S., Prescott A., Segal G., van Aalten D.M. Molecular mechanism of elongation factor 1A inhibition by a *Legionella pneumophila* glycosyltransferase. *Biochemical Journal* 2010 426:281-292
18. Jeyaratnaganathan N., Højlund K., Kroustrup J.P., Larsen J.F., Bjerre M., Levin K., Beck-Nielsen H., Frago S., Hassan A.B., Flyvbjerg A., Frystyk J. Circulating levels of insulin-like growth factor-II/ mannose-6-phosphate receptor in obesity and type 2 diabetes. *Growth Hormone IGF Research* 2010 20:185-191
19. Jiménez-Gómez R., Konies A., Ascasibar E., Castejón F., Estrada T., Eliseev L., Melnikov A., Jiménez J.A., Pretty D., Jiménez-Rey D., Pedrosa M.A., de Bustos A., Yamamoto S. Alfvén eigenmodes measured in the TJ-II stellarator. *Nuclear Fusion* 2010
20. Johnson S., Marro J., Torres J.J. Evolving Networks and the Development of Neural Systems.

Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2010 P03003

21. Johnson S., Torres J.J., Marro J., Munoz M.A. Why are so Many Networks Disassortative? AIP Proceedings 2010

22. Johnson S., Torres J.J., Marro J., Muñoz M.A. Entropic Origin of Dissortativity in Complex Networks. Physical Review Letters 2010 104:108702

23. Johnson S., Torres J.J., Marro J., Muñoz M.A. Shannon Entropy and Degree Correlations in Networks. In Nonlinear Systems and Wavelet Analysis, WESEAS Press, 2010, pp.31-36

24. Kawasaki Y., Chufan E.E., Lafont V., Hidaka K., Kiso Y., Amzel L.M., Freire E. How much binding affinity can be gained by filling a cavity? Chemical Biology and Drug Design 2010 75:143-151

25. Ladbury J.E., Klebe G., Freire E. Adding calorimetric data to decision making in lead discovery: a hot tip. Nature Reviews in Drug Discovery 2010 9:23-27

26. Lee H.S., Contarino M., Umashankara M., Schön A., Freire E., Smith A.B. 3rd, Chaiken I.M., Penn L.S. Use of the quartz crystal microbalance to monitor ligand-induced conformational rearrangements in HIV-1 envelope protein gp120. Analytical and Bioanalytical Chemistry 2010 396:1143-1152

27. Littlejohn L., López J.L. Variation of parameters and solutions of composite products of linear differential equations. Journal of Mathematical Analysis and Applications 2010 369:658-670

28. López J.L. The Liouville-Neumann expansion in one-dimensional boundary value problems. Integral Transforms and Special Functions 2010 21:125-133

29. López J.L., Pagola P. Asymptotic expansions of Mellin convolution integrals: an oscillatory case.

Journal of Computational and Applied Mathematics 2010 233:1562-1569

30. López J.L., Pagola P. The confluent hypergeometric functions $M(a,b;z)$ and $U(a,b;z)$ for large b and z . Journal of Computational and Applied Mathematics 2010 233:1570-1576

31. López J.L., Perez E. Temme N. The error function in the study of singularly perturbed convection-diffusion problems with discontinuous boundary data. In Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2008, 2010, pp.105-110

32. López J.L., Temme N. Asymptotics and Numerics of Polynomials Used in Tricomi and Buchholz Expansions of Kummer Functions. Numerische Mathematik 2010 116:269-289

33. López J.L., Temme N. Large degree asymptotics of generalized Bernoulli and Euler polynomials. Journal of Mathematical Analysis and Applications 2010 363:197-208

34. Marro J. Los Estorninos de San Lorenzo - O Cómo Mejorar la Eficacia del Grupo. Revista de Física 2010

35. Martínez J.I., Yruela I., Picorel R., Alonso P.J. ^{1}H Hyperfine interactions in the Mn-Cluster of photosystem II in the S2 state detected by means of HYSCORE experiments. Journal of Physical Chemistry B 2010 114:15345-15353

36. Mazo J.J., Naranjo F., Zueco D. Nonequilibrium effects in the thermal switching of underdamped Josephson junctions. Physical Review B 2010 82:094505

37. Miura T., Hidaka K., Uemura T., Kashimoto K., Hori Y., Kawasaki Y., Ruben A.J., Freire E., Kimura T., Kiso Y. Improvement of both plasmeprin inhibitory activity and antimalarial activity by 2-aminoethylamino substitution. Bioorganic Medicinal Chemistry Letters 2010 20:4836-4839

38. Naganathan A.N., Li P., Perez-Jimenez R., Sanchez-Ruiz J.M., Muñoz V. Navigating the downhill protein folding regime via structural homologues. *Journal of the American Chemical Society* 2010 32:11183-11190
39. Narushima Y., Castejón F., Watanabe K.Y., Sakakibara S., Estrada T., Medina F., López-Bruna D., Yokoyama M., Ida K., LHD Experiment Group. Experimental Study of the Effect of Poloidal Flow on Stability of Magnetic Islands in LHD and TJ-II. *Contribution to Plasma Physics* 2010 50:529
40. Negri A., Rodríguez-Larrea D., Marco E., Jiménez-Ruiz A., Sánchez-Ruiz J.M., Gago F. Protein-protein interactions at an enzyme-substrate interface: characterization of transient reaction intermediates throughout a full catalytic cycle of *Escherichia coli* thioredoxin reductase. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* 2010 78:36-51
41. Nikitin A.Y., García-Vidal F.J., Martín-Moreno L. Surface Electromagnetic Field Radiated by a Subwavelength Hole in a Metal Film. *Physical Review Letters* 2010 105:073902
42. Pedrosa M.A., Hidalgo C., Silva C., Carreras B.A., Carralero D., Calvo I., TJ-II Team. Long-range correlations during plasma transitions in the TJ-II stellarator. *Contributions in Plasma Physics* 2010 50:507
43. Perez-Carrasco R., Sancho J.M. Fokker-Planck approach to molecular motors. *Europhysics Letters* 2010 91:60001
44. Perez-Carrasco R., Sancho J.M. Stochastic algorithms for discontinuous multiplicative white noise. *Physical Review E* 2010 81:032104
45. Perez-Carrasco R., Sancho J.M. Theoretical analysis of the F1-ATPase experimental data. *Biophysical Journal* 2010 98:2591-2600
46. Pey A.L., Rodríguez-Larrea D., Gavira J.A., García-Moreno B., Sanchez-Ruiz J.M. Modulation of buried ionizable groups in proteins with engineered surface charge. *Journal of the American Chemical Society* 2010 132:1218-1219
47. Pey A.L., Salido E., Sanchez-Ruiz J.M. Role of low native state kinetic stability and interaction of partially unfolded states with molecular chaperones in the mitochondrial protein mistargeting associated with primary hyperoxaluria. *Amino Acids* 2010
48. Pimentel M., Catalan P., Sahuquillo E. Morphological and molecular taxonomy of the annual diploids *Anthoxanthum aristatum* and *A-ovatum* (Poaceae) in the Iberian Peninsula. Evidence of introgression in natural populations. *Botanical Journal of the Linnean Society* 2010 164:53-71
49. Rodríguez-Larrea D., Perez-Jimenez R., Sanchez-Romero I., Delgado-Delgado A., Fernandez J.M., Sanchez-Ruiz J.M. Role of conservative mutations in protein multi-property adaptation. *Biochemical Journal* 2010 429:243-249
50. Rodríguez-Pascual M., Guasp J., Castejón-Magaña F., Rubio-Montero A.J., Martín-Llorente I., Mayo-García R. Improvements on the Fusion Code FAFNER2. *IEEE Transactions of Plasma Science* 2010 38:2102
51. Rodríguez-Pascual M., Scott B.D., Ribeiro T.T., Castejón-Magaña F., Mayo-García R. gGEM: A Gyrofluid Model to be Used on Distributed Platforms. *IEEE Transactions of Plasma Science* 2010 38:111
52. Rubio-Montero A.J., Castejón-Magaña F., Rodríguez-Pascual M.A., Montes-Prado E., Mayo-García R. Drift Kinetic Equation Solver for Grid (DKESG). *IEEE Transactions of Plasma Science* 2010 38:2093
53. Sánchez E., Kleiber R., Hatzky R., Soba A., Sáez X., Castejón F., Cela J.M. Linear and non-linear si-

- mulations using the EUTERPE gyrokinetic code. *IEEE Transactions of Plasma Science* 2010 38:2119
54. Sanchez-Ruiz J.M. Protein kinetic stability. *Biophysical Chemistry* 2010 148:1-15
55. Sancho J.M., Lacasta A.M. The rich phenomenology of Brownian particles in nonlinear potential landscapes. *European Physical Journal-ST* 2010 187:49-62
56. Sancristobal B., Sancho J.M., Garcia-Ojalvo J. Phase-response approach to firing-rate selectivity in neurons with subthreshold oscillators. *Physical Review E* 2010 82:041908
57. Sancristobal B., Sancho J.M., Garcia-Ojalvo J. Resonant propagation of spike trains in delay-coupled neural subthreshold oscillators. *European Physical Journal-ST* 2010 187:189-197
58. Segarra-Moragues J.G., Catalan P. The fewer and the better: prioritization of populations for conservation under limited resources, a genetic study with *Borderea pyrenaica* (Dioscoreaceae) in the Pyrenean National Park. *Genetica* 2010 138:363-376
59. Suarez M., Tortosa P., Garcia-Mira M.M., Rodríguez-Larrea D., Godoy-Ruiz R., Ibarra-Molero B., Sanchez-Ruiz J.M., Jaramillo A. Using multi-objective computational design to extend protein promiscuity. *Biophysical Chemistry* 2010 147:13-19
60. Tejero J., Biswas A., Haque M.M., Wang Z.Q., Hemann C., Varnado C.L., Novince Z., Hille R., Goodwin D.C., Stuehr D.J. Mesoheme-substitution reveals how heme electronic properties can influence the kinetic and catalytic parameters of neuronal NO synthase. *Biochemical Journal* 2010
61. Tejero J., Hannibal L., Mustovich A., Stuehr D.J. Surface charges and regulation of FMN to heme electron transfer in nitric-oxide synthase. *Journal of Biological Chemistry* 2010 285:27232-27240
62. Tejero J., Haque M.M., Durra D., Stuehr D.J. A bridging interaction allows calmodulin to activate NO synthase through a bi-modal mechanism. *Journal of Biological Chemistry* 2010 285:25941-25949
63. Tereshchenko M. General and applied aspects of a ray-based approach to the physics of inhomogeneous waves. *Prikladnaya Fizika (Applied Physics Reports)* 2010 4:5-13
64. Torres J.J., de Franciscis S., Johnson S., Marro J. Excitable Networks: Nonequilibrium Criticality and Optimum Topology. *International Journal of Bifurcation and Chaos* 2010 20:869-875
65. Torres J.J., Johnson S., Mejias J.F., de Franciscis S., Marro J. Nonequilibrium Behavior in Neural Networks: Criticality and Optimal Performance. In *Advances in Cognitive Neurodynamics*, Springer, 2010
66. Travasso R.D.M., Faisca P.F.N., Rey A. The protein folding transition state: Insights from kinetics and thermodynamics. *Journal of Chemical Physics* 2010 133:125102
67. Tsironis G.P., Ciudad A., Sancho J.M. Electrostatic analysis of charge interactions in proteins. *International Journal of Quantum Chemistry* 2010 110:233-241
68. Tur-Arlandis G., Rodríguez-Larrea D., Ibarra-Molero B., Sanchez-Ruiz J.M. Proteolytic scanning calorimetry: a novel methodology that probes the fundamental features of protein kinetic stability. *Biophysical Journal* 2010 98:L12-14
69. Umashankara M., McFadden K., Zentner I., Schön A., Rajagopal S., Tuzer F., Kuriakose S.A., Contarino M., Lalonde J., Freire E., Chaiken I. The active core in a triazole peptide dual-site antagonist of HIV-1 gp120. *ChemMedChem* 2010 5:1871-1879

70. Viruel J., Catalan P., Segarra-Moragues J.G. New Microsatellite Loci in the Dwarf Yams Dioscorea Group Epipetrum (Dioscoreaceae). American Journal of Botany 2010 97:E121-E123

71. Viruel J., Segarra-Moragues J.G., Perez-Collazos E., Villar L., Catalan, P. Systematic Revision of the Epipetrum Group of Dioscorea (Dioscoreaceae) Endemic to Chile. Systematic Botany 2010 35:40-63

72. Zhu J., Christensen J., Jung J., Martín-Moreno L., Yin X., Fok L., Zhang X., Garcia-Vidal F.J. A holey-structured metamaterial for acoustic deep-subwavelength imaging. Nature Physics 2010

3.6 Tesis doctorales leídas en 2010

A lo largo de 2010 se han leído las siguientes tesis doctorales:

Doctorando: Guillermina Goñi

Título: Flavodoxina de Anabaena PCC 7119: Un compromiso entre eficiencia y versatilidad en el transporte de electrones desde el Fotosistema I a la Ferredoxina-NADP⁺ reductasa.

Directores: Milagros Medina y Carlos Gómez-Moreno

Universidad de Zaragoza. Facultad de Ciencias
10 Septiembre 2010.

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Doctorando: Xavier Arias

Título: El módulo 5 del receptor de lipoproteínas de baja densidad: implicaciones mecanísticas de su estabilidad, plegamiento e interacciones moleculares

Director: Javier Sancho
UNIVERSIDAD: Zaragoza

FACULTAD: Ciencias

AÑO: 2010

Calificación: Sobresaliente cum laude

Doctorando: Antonio Gordillo-Guerrero

Título: Phase Transitions in Disordered Systems

Director: Juan Jesús Ruiz Lorenzo

Fecha y lugar de lectura: 15 de Enero de 2010.
Universidad de Extremadura

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Doctorando: Julia Poncela

Título: Evolutionary Games in Complex Topologies: Interplay between Structure and Dynamics

Directores de Tesis: Yamir Moreno, Luis Mario Floría, Jesus Gómez

Fecha y lugar: 20 de Octubre de 2010. Fac. de Ciencias, Universidad de Zaragoza.

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Doctorando: María Larriva Hormigos

Título: Estructura nativa y secuencia en el proceso de plegamiento de proteínas globulares

Director: Antonio Rey Gayo

Fecha y lugar: Universidad Complutense de Madrid. Julio, 2010.

Doctorando: Xavier Andrade

Título: Linear and non-linear response phenomena of molecular systems within time-dependent density functional theory

Director: Angel Rubio and Silvana Botti

Lugar y fecha: University of the Basque Country, San Sebastián, Spain

October 8, 2010., European Thesis. Calificación:

Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Doctorando: José Manuel García Regaña

Título: Propiedades de las ondas de Bernstein electrónicas en el stellarator TJ-II

Director: Francisco Castejón, CoDirector: Álvaro Cappa Ascasibar

Lugar y fecha: Departamento de Física Teórica I de la Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense de Madrid. 12 de noviembre de 2010

Calificación: Sobresaliente cum Laude.

Doctorando: Laura Barrera Orte

Título: Estudios de la temperatura en el borde

de plasmas en modo H y dinámica de ELMs con diagnósticos de ECE en el tokamak JET

Director: Francisco Castejón. **CoDirectora:** Elena de la Luna Gargantilla

Fecha: 12 de noviembre de 2010.

Calificación: Sobresaliente cum Laude.

Doctorando: Federico Foieri.

Título: Transporte cuantico en sistemas mesoscópicos con campos dependientes del tiempo y desorden

Directora: Liliana Arrachea

Lugar: Universidad de Buenos Aires. Argentina. En ella figura expresamente un agradecimiento al BIFI y a Ibercivis.

4. OTRAS ACTUACIONES

PONENCIAS Y COMUNICACIONES A CONGRESOS

Autores: Echenique, P.

Título: The canonical equilibrium of constrained models

Tipo de participación (poster o comunicación oral): Comunicación oral

Congreso: ZCAM workshop: Constraints in molecular simulation

Lugar de celebración: Zaragoza, España

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Sánchez, A.

Título: Nonlinear waves, fractional calculus, numerics and noise

Tipo de participación (póster o comunicación oral): (A conference in honor of the 60+1 birthday of Prof. Luis Vazquez)

Congreso: Redes sociales y emergencia de la cooperación.

Lugar de celebración: Almagro, Castilla-La Mancha. **Fecha:** Enero 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Sánchez, A.

Título: Modelling human interactions on networks: lessons learned from theoretical and experimental games.

Tipo de participación (póster o comunicación oral): Conferencia invitada en ESF-COST High-Level Research Conference

Congreso: ESF-COST High-Level Research Conference "Future Internet and Society: A Complex Systems Perspective"

Lugar de celebración: Acquafredda di Maratea, Italia **Fecha:** Octubre 2010

Menciona al BIFI: Sí.

Autores: Vilone, D., Sánchez, A., Gómez, J.

Título: Competition of updating dynamics in evolutionary game theory on networks: the Prisoner's Dilemma case.

TIPO DE PARTICIPACIÓN (póster o comunicación oral): Póster

Congreso: STATPHYS 24

Lugar de celebración: Cairns, Australia

Fecha: Julio de 2010

Menciona al BIFI: Sí.

Autores: Sánchez, A., Urbano, A., y Vila, J.E.

Título: Multidimensional connectivity and cooperation

Tipo de participación (póster o comunicación oral): Póster

Congreso: 1st Conference of the Chinese Game Theory and Experimental Economics Association.

Lugar de celebración: Beijing, China

Fecha: Agosto de 2010

Menciona al BIFI: Sí.

Autores: Sánchez, A., Urbano, A., y Vila, J.E.

Título: Multidimensional connectivity and cooperation

Tipo de participación (póster o comunicación oral): Conferencia invitada

Congreso: EGEO Workshop on Complexity, 5th Alhambra Experimental Workshop

Lugar de celebración: Granada, España

Fecha: Octubre de 2010

Menciona al BIFI: Sí.

Autores: Hernández, P., Muñoz-Herrera, M., y Sánchez, A.

Tipo de participación (póster o comunicación oral): Comunicación oral

Congreso: 2nd Annual UECE-Lisbon Meeting — Game Theory and Applications

Lugar de celebración: Lisboa, Portugal

Fecha: Noviembre de 2010

Menciona al BIFI: Sí.

Autores: Abrunheiro, L., Camarinha, M. and Clemente-Gallardo, J.

Título: Minimum force optimal control of the

spherical free rigid body

TIPO DE PARTICIPACIÓN (póster o comunicación oral): Conferencia invitada

Congreso: Control2010: 9th Portuguese Conference on Automatic Control

Lugar de celebración: Coimbra, Portugal

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Conesa C., Sancho J., Carrodegua J.A.

Título: A screening method for the identification of chemical compounds that induce specific cell differentiation or apoptotic death in mouse embryonic stem cells.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: BIFI 2010. IV International Congress Networks: A framework for crossdisciplinary applications.

Lugar de celebración: Zaragoza, España

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Conesa C., Sancho J., Carrodegua J.A.

Título: Identification of chemical compounds that induce apoptotic death in mouse embryonic stem cells.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: 3rd International Congress on Stem Cells and Tissue Formation

Lugar de celebración: Dresde, Alemania

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores/as: Conesa C.

Título: Adult, embryonic, and induced pluripotent stem cells for tissue regeneration

Tipo de participación: Asistente

Congreso: Stem cell meeting Cologne 2010

Lugar de celebración: Colonia, Alemania

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Sañudo J.

Título: Equilibrium Distributions in Open and Closed Statistical Systems

Tipo de participación: (póster o comunicación

oral): Comunicación oral

Congreso: 9th WSEAS International Conference on Non-Linear Analysis,

Non-linear Systems and Chaos (NOLAC '10)

Publicación: Non-Linear Systems and Wavelet Analysis, 15-19 (2010). ISSN: 1790-2769

Lugar de celebración: Kantaoui, Sousse (Tunisia)

Fecha: Mayo 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: López-Ruiz R. y Sañudo J.

Título: Statistical Complexity in Traveling Densities

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 9th WSEAS International Confer

Autores: R. López-Ruiz, J. Sañudo y X. Calbet. Conference on Non-Linear Analysis, Non-linear Systems and Chaos (NOLAC '10)

Publicación: Non-Linear Systems and Wavelet Analysis, 20-23 (2010). ISSN: 1790-2769

Lugar de celebración: Kantaoui, Sousse (Tunisia)

Fecha: Mayo 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Bocanegra, R., Rodríguez-Huete, A., Cavasotto, C. N., Neira, J.L. and Mateu, M. G.

Título: Inhibición del ensamblaje in vitro de la cápsida del virus de la inmunodeficiencia humana por péptidos que mimetizan interfaces de dimerización

Tipo de participación: Póster.

Congreso: VI Reunión de la Red Temática Nacional de Proteínas

Lugar de celebración: Madrid

Fecha: 2010

Autores: Aguado-Llera, D., De Geest, N., Hassam, B., Goormaghtigh, E., Gómez, J. and Neira, J. L.

Título: The basic helix-loop-helix region of human neurogenin 1 is a monomeric natively unfolded protein which folds upon binding to the e-boxes

Tipo de participación: Póster

Congreso: International Workshop on Understanding Transient Molecular Interactions in Biology

Lugar de celebración: Sevilla

Fecha: 2010.

Autores: Navarro, A., Encinar, J. A., Prieto, J., Gómez, J., Martínez-Cruz, A., Fernández-Ballester, G., Neira, J. L. and Ferrer-Montiel, A.

Título: Snapin is an oligomeric natively unfolded protein, which forms a "fuzzy", non-structured complex with snap-25

Congreso: IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: López-Pérez, M., Martínez-Gómez, A.I., Aguado-Llera, D., Martínez-Rodríguez, S. and Neira, J. L.

Título: Binding and stability of structural mimics of the phosphorylated species of the histidine phosphocarrier proteins of streptomyces coelicolor.

Congreso: IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: Rivero, A., Bustos, A., Marosi, A., Ferrer, D., Serrano F.

Título: ISDEP, a fusion application deployed in the EDGeS project.

Tipo de participación: Autor de paper y presentación/charla

Congreso: 3rd AlmereGrid Grid Experience Workshop & 4th EDGeS Grid training event & annual Gridforum.nl meeting

Publicación: http://www.edgesgrid.eu:8080/c/document_library/get_file?p_l_id=11065&folderId=11075&name=DLFE-1624.pdf

Autores: Rivero, A., Sanz, F., Simões, C., Brito, R.M., Ferrer, D., Palacios, J.

Título: Ibercivis, The First Two Years

Tipo de participación: Poster presentation.

Congreso: Ibergrid 4th

Publicación: Ibergrid 4th Iberian Grid Infrastructure Conference Proceedings

Autores: Cremades, N., Chen, A. Y., Orte, A., Sandal, M., Dunne, P., Aprile, F.A., Clarke, R., Bertoini, C.W., Dobson, C.M. and Klenerman D.

Título: Dynamic interconversion of oligomeric and fibrillar forms of alpha-synuclein **Tipo de participación:** Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysics Congress

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Si

Autores: Cremades, N., Chen, A.Y., Orte A., Sandal, M., Dobson, C.M. and Klenerman D.

Título: Direct Observation of Alpha-Synuclein Misfolding and Oligomerization at the Single-Molecule Level

Tipo de participación: Poster

Congreso: Gordon Conference: Protein Folding Dynamics

Lugar de celebración: Ventura, California (US)

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: No

Autores: Cremades N., Chen, A.Y., Orte, A., Sandal, M., Dunne, P., Aprile, F.A., Clarke, R., Bertoini, C.W., Dobson, C.M., and Klenerman, D.

Título: Dynamic interconversion of oligomeric and fibrillar forms of alpha-synuclein

Tipo de participación: Poster

Congreso: 10th HFSP Awardees Meeting

Lugar de celebración: Kovalam, Kerala, India

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: No

Autores: Cremades, N., Chen, A.Y., Orte, A., Sandal, M., Dunne, P., Aprile, F.A., Clarke, R., Bertoini, C.W., Dobson, C.M. and Klenerman D.

Título: Direct observation of structural reorganization in small alpha-synuclein oligomers required for fibril formation by single-molecule intermolecular FRET.

Tipo de participación: Poster

Congreso: Barcelona BioMed Conference: Intrinsically disordered proteins in biomedicine

Lugar de celebración: Barcelona, Spain

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: No

Autores: Lendel C., Carlos W. Bertoncini, Nunilo Cremades, Peter Damberg, Alfonso De Simone, Michele Vendruscolo, Lisa McConlogue, John Christodoulou, Dale Schenk, Geregly Toth, Christopher M. Dobson

Título: Structure based drug design for intrinsically unstructured proteins

Tipo de participación: Poster

Congreso: Joint EUROMAR 2010 and 17th ISMAR Conference

Lugar de celebración: Florence, Italy

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: No

AUTORES/AS: Bruscolini, P. y Naganathan A.

Título: Modeling the folding of gpW and alpha-spectrin SH3 domain: accurate information from a simple model.

Tipo de participación: poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: Julio 2010 **Menciona al BIFI:** Si

Autores: Pellicer-Lostao C., y López-Ruiz R.

Título: Networks of economic interactions driven by chaotic dynamics

TIPO DE PARTICIPACIÓN (póster o comunicación oral):

Congreso: IV BIFI International Conference. Networks: A framework for cross disciplinary applications

Lugar de celebración: Zaragoza, España

Fecha: Feb. 2010

Menciona al BIFI: Si

Autores: Sancho J.

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: 2nd International Conference on Drug Discovery and Therapy

LUGAR DE CELEBRACION: Dubai (UAE)

Fecha: 2010

Autores: Sancho J.

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: CPE Meeting: Three Decades of Protein Engineering: Impact on Structural Biology and Therapy

LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge (UK)

Fecha: 2010

Autores: Sancho J.

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: MINISYMPOSIUM: PROTEIN MISFOLDING AND CHAPERONES

LUGAR DE CELEBRACION: Toulouse (Francia)

Fecha: 2010

Autores: Littlejohn, L., López J. L. and Pérez E.

Título: Factorization of second-order linear differential equations and Liouville-Neumann expansions with examples on special functions.

Tipo de participación: COAUTOR.

Congreso: Functions and operators 2010 (Cracovia, Polonia) **Fecha:** June 2010

Autores: Ferreira C. and López J. L.

Título: Initial value problems for linear differential equations with a regular singular point.

Tipo de participación: COAUTOR.

Congreso: Functions and operators 2010 (Cracovia, Polonia) **Fecha:** June 2010

Autores: Littlejohn L. and López J. L.

Título: Solutions to composite products of linear differential equations.

Tipo de participación: PONENTE.

Congreso: Functions and operators 2010 (Cracovia, Polonia) **Fecha:** June 2010

Autores: López, J. L., Pérez E. and Temme, N.

Título: The use of multi-point Taylor expansions in one-dimensional boundary value problems.

Tipo de participación: PONENTE.

Congreso: I Jaen Conference on Approximation Theory(Ubeda) **Fecha:** July 2010

Autores: Lostao A, Peleato ML, Gómez-Moreno C and Fillat MF

Título: Direct monitorization of the oligomerization properties of proteins by in situ Atomic force microscopy: the case of the ferric uptake regulator FurA analyzed under different redox conditions in a physiological environment

Tipo de participación: Póster

Congreso: AFM Biomed Conference

Lugar de celebración: Red Island, Croatia

Fecha: Mayo 2010

Menciona al BIFI: SI

Autores: González A, Bes MT, Peleato ML and Fillat MF

Título: Overexpression of FurA affects heterocyst differentiation in Anabaena sp. PCC7120

Tipo de participación: Póster

Congreso: XIII National meeting of the Spanish Society of Nitrogen fixation and II Portuguese-Spanish Congress on Nitrogen fixation.

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: June 2010

Menciona al BIFI: SI

Autores: Lostao A, Peleato ML, González, A, Gómez-Moreno C and Fillat MF

Título: Direct visualization of the oligomerization properties of proteins by in situ Atomic Force Microscopy: the case of the ferric uptake regulator FurA analyzed under different redox conditions.

Tipo de participación: Oral presentation

Congreso: IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: Julio 2010

Menciona al BIFI: SI

Autores: Sánchez G., Kuniyoshi T.M., García Berna A., Goñi P., Clavel A., Peleato M.L. and Fillat M.F.

Título: Desarrollo de un método de detección de organismos patógenos y cianobacterias potencialmente tóxicas en amebas de vida libre

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIII Congreso de la Sociedad Española

de Bioquímica y Biología Molecular.

Lugar de celebración: Córdoba

Fecha: Septiembre 2010

Menciona al BIFI: SI

Autores: González A., Bes M.T., Peleato M.L. and Fillat M.F.

Título: Proteómica comparativa de una estirpe de sobreexpresión revela nuevas dianas del regulador FurA en Anabaena sp. PCC7120

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular.

Lugar de celebración: Córdoba

Fecha: Septiembre 2010

Menciona al BIFI: SI

Autores: Bes T., Pellicer S., González A., Martínez J.I., Peleato M.L. and Fillat M.F.

Título: Elucidación del sitio de unión a hemo en el regulador transcripcional FurA: contribución de cisteínas e histidinas

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular.

Lugar de celebración: Córdoba

Fecha: Septiembre 2010

Menciona al BIFI: SI

Autores: López Ruiz, R.

Tipo de participación: Comunic. Oral

Congreso: JPS-2010: Journées de Physique Statistique'

Lugar de celebración: Paris (France)

Fecha: Enero 2010

Autores: López Ruiz, R.

Tipo de participación: Coautor de Comunic. Oral

Congreso: IV BIFI International Conference

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: Febrero 2010

Autores: López Ruiz, R.

Tipo de participación: Organizador y Chairman

Congreso: NOLASC-2010: WSEAS International

Conference on NonLinear Systems, NonLinear Systems and Chaos

Lugar de celebración: Sousse (Tunisia)

Fecha: Mayo 2010

Autores: López Ruiz, R.

Tipo de participación: Comunic. Oral

Congreso: Congreso Nolineal 2010

Lugar de celebración: Cartagena (Murcia)

Fecha: Junio 2010

Autores: López Ruiz, R.

Tipo de participación: Coautor de Comunic. Oral

Congreso: NOLTA'2010

Lugar de celebración: Krakow (Poland) **Fecha:** Septiembre 2010

Autores: López Ruiz, R.

Tipo de participación: Comunic. Oral

Congreso: ECIT'2010

Lugar de celebración: Nant (France) **Fecha:** Septiembre 2010

Autores: López-Ruiz, R. and Sañudo, J.

Título: Statistical Complexity in Traveling Densities

Tipo de participación: Proceedings pp. 20-23

Congreso: 9th WSEAS International NOLASC'10 Conference

Lugar de celebración: (Sousse - Tunisia)

Fecha: 2010

Autores: López-Ruiz, R., Sañudo, J. and Calbet, X.

Título: Equilibrium Distributions in Open and Closed Statistical Systems

Tipo de participación: Proceedings pp. 15-19

Congreso: 9th WSEAS International NOLASC'10 Conference

Lugar de celebración: (Sousse - Tunisia)

Fecha: 2010

Autores: Catalán, R.G. Garay, J. and López-Ruiz, R.

Título: Some Proofs on Statistical Magnitudes for Continuous Phenomena

Tipo de participación: Proceedings pp. 36-39

Congreso: 9th WSEAS International NOLASC'10 Conference

Lugar de celebración: (Sousse - Tunisia)

Fecha: 2010

Autores: Fournier-Prunaret, D. and López-Ruiz, R.

Título: Fractal Basins and Boundaries in 2D Maps Inspired in Discrete Population Models

Tipo de participación: Conference Proceedings, 4 pp.

Congreso: NOLTA'2010

Fecha: 2010

Autores: López-Ruiz, R.

Título: Exponential Wealth Distribution in Different Discrete Economic Models

Tipo de participación: Conf. Proceedings, to appear

Congreso: ECIT'10-ITERATION THEORY

Fecha: 2010

Autores: López-Bruna, D., Castejón, F., Reynolds, J. M. Sánchez, E. Velasco, J. L.

Título: Transport in helical systems

Tipo de participación: (poster o comunicación oral): Comunicación oral

Congreso: 2010 RFX-mod programme workshop

Lugar de celebración: Padua, Italia

Fecha: Febrero 2010

Menciona al BIFI: Sí

Autores: Gopar V. A.

Título: Statistical of orbital entanglement production in quantum-chaotic dots

Tipo de participación: poster

Congreso: Quantum Information Concepts for Condensed Matter Problems

Lugar de celebración: Dresden, Alemania

Fecha: 2010

Menciona al BIFI: Si

Autores: Gopar V. A.

Título: Quantum wires with Levy-Type disorder: universal statistics of conductance in anomalous quantum transport

Tipo de participación: conferenciante invitado
Congreso: 7th International Workshop on Disordered Systems
Lugar de celebración: Puebla, Mexico
Fecha: 2010
Menciona al BIFI: Si

Autores: Alvarez-Estrada, R. F., Calvo, G. F. y Serrano, H.
Título: Transfer Integral Technique for a Class of Linear Integral equations: Convergence and Applications to DNA
Tipo de participación: Presentacion oral
Congreso: Conferencia Internacional ICCAM 2010: 15th International Congress on Computational and Applied Mathematics
Lugar: Universidad de Lovaina, Belgica,
Fecha: Julio 2010

Autores: Alvarez-Estrada, R. F. y Calvo, G. F.
Título: Constrained Macromolecular Chains at Thermal Equilibrium: A Quantum-Mechanical Approach
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Workshop Internacional ZCAM "Constraints in Molecular Simulation"
Lugar: Universidad de Zaragoza-CSIC
Fecha: Septiembre 2010

Autores: Alvarez-Estrada, R. F.
Título: Classical Systems, Moments, Continued Fractions, Long Time Approximations and Irreversibility
Tipo de participación: Presentacion oral
Congreso: Workshop Internacional: 11th Granada Seminar on "Foundations of Non-equilibrium Statistical Mechanics" (organizado por Instituto Carlos I, Universidad de Granada)
Lugar: La Herradura, Costa Tropical de Granada
Fecha: Septiembre 2010

Autores: Seoane, B.
Título: Separation and fractionation of order and disorder in highlypolydisperse systems

Lugar: Universidad de Zaragoza
Fecha: Junio 2010

Autores: Martin-Mayor, V.
Título: Equilibrium vs. non-equilibrium in the 3D Ising spin-glass phase
Congreso: Statphys 24
Lugar: Cairns, Australia
Fecha: Julio 2010

Autores: Yllanes, D.
Título: Connected spatial correlation functions and the order parameter of the 3D Ising spin glass
Congreso: Statphys 24
Lugar: Cairns, Australia
Fecha: Julio 2010

Autores: Seoane, B.
Título: Spin glasses in the hypercube
Congreso: Statphys 24
Lugar: Cairns, Australia
Fecha: Julio 2010

Autores: Verrocchio, P.
Título: A thermodynamic route through the glass transition to solid phase/size separated states of colloids
Congreso: Statphys 24
Lugar: Cairns, Australia
Fecha: Julio 2010

Autores: Martin-Mayor, V.
Título: Monte Carlo simulation of (quasi) constrained ensembles
Congreso: Monte Carlo Algorithms in Statistical Physics
Lugar: University of Melbourne, Australia
Fecha: Julio 2010

Autores: Yllanes, D.
Título: The low temperature spin-glass phase: sample-dependent parallel tempering on the Janus computer
Congreso: Monte Carlo Algorithms in Statistical

Physics

Lugar: University of

Melbourne, Australia

Fecha: Julio 2010

Autores: Seoane, B.

Título: Effective potential study of hard-spheres crystallization

Congreso: Monte Carlo Algorithms in Statistical Physics

Lugar: University of Melbourne, Australia

Fecha: Julio 2010

Autores: Álvarez-Estrada, R. F.

Título: Classical Systems: moments, continued fractions, long time approximations and irreversibility

Congreso: 11th Granada Seminar on Computational and Statistical Physics

Lugar: La Herradura, España

Fecha: Septiembre 2010

Autores: García-Regaña, J. M., Cappa, A., Castejón, F., Caughman, J. B. Otereshchenko., M.

Título: Electron Bernstein Emission characterization in TJ-II

Tipo de participación: Poster P-4.327

Congreso: 37th EPS Plasma Physics Conference

Lugar: Dublín

Fecha: June 2010

Menciona BIFI: Sí

Autores: Rodríguez-Pascual, M., Rubio-Montero, A.J., Mayo, R., Llorente, I. M., Bustos, A., Castejón F.

Título: More efficient executions of Monte Carlo Fusion codes by means of Montera: the ISDEP use case

Tipo de participación:

Congreso: PDP 2011 - The 19th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-Based Computing

Lugar: Cyprus

Fecha: February 2011

Autores: Bustos, A., Castejón, F., Fernández, L.A., Martín-Mayor, V. M.

Título: Kinetic simulations of fast ions in stellarators

Tipo de participación:

Congreso: Osakabe 23th IAEA Fusion Conference

Lugar: Daejeon, Republic of Korea

Fecha: October 2010

Menciona BIFI: Sí

Autores: Bustos, A., Castejón, F., Fernández, L.A., Martín-Mayor, V. M.

Título: Fast Ion simulations in Stellarators

Tipo de participación:

Congreso: Osakabe 37th EPS Conference

Lugar: Dublin, Ireland

Fecha: June 2010

Menciona BIFI: Sí

Autores: Abian, O., Velazquez-Campoy, A.

Título: Evaluación In Vitro de Compuestos Inhibidores de la Proteasa NS3 del Virus de la Hepatitis C

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIII Congreso de la SEBBM

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Córdoba

Fecha: Septiembre 2010

Autores: Abian, O., Vega, S., Velazquez-Campoy, A.

Título: Conformational Landscape of Hepatitis C NS3 Protease

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: Julio 2010

Autores: Abian, O., Velazquez-Campoy A.

Título: Characterization of Novel Protease NS3 Inhibitors by Isothermal Titration Calorimetry

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical

Congress

Publicación: Abstract Book

LUGAR CELEBRACIÓN: Zaragoza

Fecha: Julio 2010

Autores: Abian, O., Vega, S., Neira, J.L., Velazquez-Campoy A.

Título: Paisaje Conformacional de la Proteasa NS3 del Virus de la Hepatitis C

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIII Congreso de la SEBBM

Publicación: Abstract Book

LUGAR CELEBRACIÓN: Córdoba

Fecha: Septiembre 2010

Autores: Medina M.

Título: Structural factors involved in coenzyme specificity and transient catalytically-competent allocation in the active site of Anabaena Ferredoxin NADP+-reductase.

Tipo de participación: Conferencia invitada.

Congreso: BIT's Inaugural Symposium on Enzymes and Biocatalysis

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Shanghai (China)

Fecha: April 2010

Autores: Medina M.

Título: Structural factors involved in the transient catalytically-competent coenzyme allocation in the active site of Anabaena Ferredoxin NADP+-reductase.

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: FEBS Workshop Understanding Transient Molecular Interactions in Biology

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Sevilla (Spain)

Fecha: Mayo 2010

Autores: Ferreira, P., Villanueva R., Miramar M.D., Susin S.A., Peleato M.L., and Medina M.

Título: Human apoptosis inducing factor (hAIF):kinetic characterization of its mitochondrial reaction with NADH

Tipo de participación: Comunicación oral P. Ferreira

Congreso: IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain) **Fecha:** Julio 2010

Autores: Ferreira, P., Hernández-Ortega, A., Herguedas, B., Rencoret, J., Gutiérrez A., Martínez, M.J., Jiménez-Barbero, J., Medina, M., Martínez A.T.

Título: Aldehyde oxidation by pleurotus aryl-alcohol oxidase involved in lignin biodegradation

Tipo de participación: Poster

Congreso: Lignobiotech One Symposium. 1st Symposium on biotechnology applied to lignocelluloses.

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Reims (France) **Fecha:** Marzo 2010

Autores: Ferreira, P., Villanueva, R., Miramar, M.D., Susin, S.A., Peleato M.L. and Medina M.

Título: A preliminary study of the oxidoreductase activity of human Apoptosis-inducing Factor (hAIF)

Tipo de participación: Poster

Congreso: FEBS Workshop Understanding Transient Molecular Interactions in Biology

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Sevilla (Spain)

Fecha: Mayo 2010

Autores: Sánchez-Azqueta, A., Musumeci, M., Ceccarelli, E., Medina M.

Título: Role of the FAD and NADP+/H binding regions of ferredoxin-NADP+ reductase in the catalytic efficiency of the hydride transfer process.

Tipo de participación: Poster

Congreso: FEBS Workshop Understanding Transient Molecular Interactions in Biology

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Sevilla (Spain)

Fecha: Mayo 2010

Autores: Arilla, S., Velázquez-Campoy, A., Medina M.

Título: The adenylylation site of C. Ammoniage-

nes FAD synthetase

Tipo de participación: Poster

Congreso: FEBS Workshop Understanding Transient Molecular Interactions in Biology

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Sevilla (Spain)

Fecha: Mayo 2010

Autores: Arilla, S., Velázquez-Campoy, A., Medina M.

Título: Notable residues for the correct location of flavins in the N-terminal domain of FAD synthetase from *C. ammoniagenes*

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Sánchez-Azqueta, A., Medina M.

Título: Involvement of ferredoxin-NADP⁺ reductase FAD and NADP⁺/H binding domains for optimal catalytic complex formation and hydride transfer efficiency

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Ferreira, P., Medina M.

Título: Kinetic characterization of mitochondrial NAD(P)H reactions

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Martínez, M., Herguedas, B., Medina M.

Título: Structural basis of the FMN midpoint reduction potential modulation in *Anabaena* Flavodoxin

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Herguedas, B., Martínez, M., Medina M.

Título: Structural rearrangements in the kinase module of FAD synthetase during catalysis

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Serrano, A., Velázquez-Campoy, A., Medina M.

Título: Characterization of the putative residues involved in the synthesis of FMN and FAD in FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Lans, I., Medina M.

Título: Modulation of the FMN electronic properties by the protein environment of *Anabaena* Flavodoxin

Tipo de participación: Poster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Julio 2010

Autores: Hernández-Ortega, A., Martínez, A.T., Ferreira, P., Medina, M., Borrelli, K., Guallar, V.

Título: Unraveling the catalysis mechanisms of aryl-alcohol oxidase and related GMC oxidoreductases

Tipo de participación: Poster

Congreso: Workshop on Oxidative Enzymes as Sustainable Industrial Biocatalysts (OESIB)

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Santiago de Compostela

Fecha: Septiembre 2010

Autores: Lluch, J.M., Lans, I., Peregrina, J.R., Medina, M., García-Viloca, M. and González-Lafont, À.

Título: 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 participación: Conferencia Invitada J.M. Lluch

Congreso: The XVth International Workshop on Quantum Atomic and Molecular Tunneling in Solids and other Condensed Phases (QAMTS 2010)

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Darmstadt (Germany)

Fecha: September 2010

Autores: Herguedas, B., Martínez-Júlvez, M., Frago, S., Medina, M., Hermoso J.A.

Título: The three-dimensional structure of the bifunctional FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes* reveals oligomeric assemblies

Tipo de participación: Poster

Congreso: OzBIO 2010. The Molecules of Life: From Discovery to Biotechnology

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Melbourne (Australia)

Fecha: Septiembre 2010

Autores: Lans I., Peregrina, J.R., Gonzalez-Lafont, A., Lluch, J.M., García-Viloca, M., Medina M.

Título: The catalytically-competent coenzyme allocation into the active site of Anabaena ferredoxin NADP⁺-reductase

Tipo de participación: Poster

Congreso: OzBIO 2010. The Molecules of Life: From Discovery to Biotechnology

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Melbourne (Australia)

Fecha: Septiembre 2010

Autores: Sánchez-Azqueta A., Herguedas, B., Martínez-Júlvez, M., Medina M.

Título: Crucial residues for FAD binding and efficient hydride transfer in Anabaena ferredoxin-NADP⁺ reductase

Tipo de participación: Poster

Congreso: 3rd Latin American Protein Society Meeting

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Salta (Argentina)

Fecha: Octubre 2010

Autores: Moro, F., Taneva, S.G., Velazquez-Campoy, A., Muga A.

Título: Energetics of Nucleotide-Induced DnaK Conformational States

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: Moreno, M.J., Bastos, M., Velazquez-Campoy A.

Título: Partition of Amphiphilic Molecules to Lipid Bilayers by ITC

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: Martinez, J.E., Arias-Moreno, X., Velazquez-Campoy, A., Sancho J.

Título: Internalization and releasing of Cholesterol in the Endosome: Stability and Importance of the Fourth and Fifth Binding Module of the LDL Receptor

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract.

Publicación: Abstract Book
LUGAR CELEBRACIÓN: Zaragoza
Fecha: 2010

Autores: Martins, P., Velazquez-Campoy, A., Vaz, W.L.C., Moreno M.J.

Título: Thermodynamics of Chlorpromazine Association with Lipid Bilayers

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: Jesus, C.S.H., Moniz, C.V.S., Cruz, P., Velazquez-Campoy, A., Brito R.M.M.

Título: Exploring the Structural and Energetic Determinants of Ligand Binding to Transthyretin: Searching Guidelines for the Rational Design of Therapeutic Drugs Against TTR Amyloidosis

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: Arilla-Luna, S.S., Velazquez-Campoy, A., Medina M.

Título: Notable Residues for the Correct Location of Flavins in the N-Terminal Domain of FAD Synthetase from *C. ammoniagenes*

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2010

Autores: Arilla-Luna, S.S., Velazquez-Campoy, A., Medina M.

Título: The Adenylation Site of *C. ammoniagenes* FAD Synthetase

Tipo de participación: Póster

Congreso: Workshop on Understanding Tran-

sient Molecular Interactions in Biology

Publicación: Abstract Book

Lugar de celebración: Sevilla

Fecha: 2010

Autores: Moreno, M.J., Bastos, M., Velazquez-Campoy A.

Título: Partition of Amphiphilic Molecules to Lipid Bilayers By ITC

Tipo de participación: Póster

Congreso: 54th Annual Meeting of the Biophysical Society

Publicación: Biophysical J. (Annual Meeting Abstracts) 98:80a

Lugar de celebración: San Francisco

Fecha: 2010

Autores: Moreno Y.

Tipo de participación: Organizador Principal de la Conferencia.

Congreso: BIFI 2010 International Conference: Networks, a framework for cross-disciplinary applications.

Lugar de celebración: Zaragoza, España.

Fecha: 2010.

Autores: Moreno Y.

Tipo de participación: Miembro de la Red Temática.

Congreso: II Workshop de la Red Temática: Dinámica y Fenómenos Colectivos en Sistemas Socio-Económicos.

Lugar de celebración: Valencia, España.

Fecha: 2010.

Autores: Moreno Y.

Tipo de participación: Organizador Principal de la Conferencia.

Congreso: Net-Works 2010 International Conference: From Theory to Applications of Complex Networked Systems.

Lugar de celebración: Zaragoza, España.

Fecha: 2010.

Autores: Moreno Y.

Título: Use and Misuse of Networks in Biology.

Tipo de participación: Conferencia Invitada.
Congreso: Complex Energy Landscapes: Computational and Statistical Methods for Soft Matter.
Lugar de celebración: Zaragoza, España.
Fecha: 2010.

Autores: Moreno Y.
Título: Recent Approaches to Epidemic Spreading in Complex Networks
Tipo de participación: Conferencia Invitada.
Congreso: New Frontiers in Complex Networks.
Lugar de celebración: Seoul, Korea.
Fecha: 2010.

Autores: Moreno Y.
Título: Robustness of Brain and Cognitive Networks
Tipo de participación: Conferencia Invitada.
Congreso: Workshop on Robustness of Complex Networks.
Lugar de celebración: Delft, The Netherlands.
Fecha: 2010.

Autores: Sanz, J., Navarro, J., Arbués, A., Martín, C., Marijuán P.C. y Moreno Y.
Título: The transcriptional regulatory network of *M. tuberculosis*
Tipo de participación: Poster
Congreso: BIFI IV Internacional congress: Networks: A framework for cross disciplinary applications
Lugar de celebración: Institute BIFI, University of Zaragoza
Fecha: 2010. **Menciona al BIFI:** Si

Autores: Sanz, J., Navarro, J., Arbués, A., Martín, C., Marijuán P.C. y Moreno Y.
Título: The transcriptional regulatory network of *M. tuberculosis*
Tipo de participación: Poster
Congreso: IV Spanish-portuguese Biophysical Congress
Lugar de celebración: Institute BIFI, University of Zaragoza
Fecha: 2010 **Menciona al BIFI:** Si

Autores: Sanz, J., Floría L.M. and Moreno Y.
Título: Spreading of persistent infections in heterogeneous populations
Tipo de participación: Poster
Congreso: IV Spanish-portuguese Biophysical Congress
Lugar de celebración: Institute BIFI, University of Zaragoza
Fecha: 2010. **Menciona al BIFI:** Si

Autores: Sanz, J., Navarro, J., Arbués, A., Martín, C., Marijuán P.C. y Moreno Y.
Título: The transcriptional regulatory network of *M. tuberculosis*.
Tipo de participación: Poster
Congreso: New Frontiers on complex networks: Statphys 24 satellite meeting.
Lugar de celebración: Seoul national University, Seoul, South Korea. **Fecha:** 2010. **Menciona al BIFI:** Si

Autores: Bouzat, S., Falo F.
Título: Transport of cargo by interacting molecular motors
Tipo de participación: Poster
Congreso: XXII Sitges Conference on Statistical Mechanics: "Energy Conversion: From Nanomachines to Renewable Sources"
Lugar: Sitges (Barcelona), Spain
Fecha: June 2010

Autores: Tapia-Rojo, R., Prada-Gracia D., Mazo, J.J. Falo F.
Título: A mesoscopic model for protein-DNA interaction?
Tipo de participación: Poster
Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress
Lugar: Zaragoza
Fecha: Julio 2010

Autores: Bouzat, S. Falo F.
Título: Models of coupled molecular motors
Tipo de participación: Poster
Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Lugar: Zaragoza

Fecha: Julio 2010

Autores: Fiasconaro, A., Mazo, J. J., Falo F.

Título: Simple models in polymer translocations

Tipo de participación: Oral presentada por AF

Congreso: IV Spanish-Portuguese Biophysical Congress

Lugar: Zaragoza

Fecha: Julio, 2010

Autor: Tarancón A.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 4th Iberian Grid Infrastructure

Fecha: 2010

Lugar: Braga, Portugal

ESTANCIAS DE INVESTIGADORES EXTERNOS

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

- Aitor Hernandez-Ortega, Centro de Investigaciones Biológicas, Madrid.
Enero 2010-Febrero 2010. Tutor Bifi: Patricia Ferreira
- Laura Ledesma, Universidad Pablo Olavide, Sevilla.
Abril 2010-Agosto 2010. Tutor Bifi: Milagros Medina

ESTANCIAS DE MIEMBROS DE NUESTRO INSTITUTO EN OTROS CENTROS

Ana Sánchez-Azqueta

Universidad Nacional de Rosario. Argentina

Septiembre 2010-Noviembre 2010

Isaias Lans

Universidad Autónoma de Barcelona. Departamento de Química Física

1 semana Marzo 2010

Sonia Susana Arilla Luna

Institute Pasteur. Paris

Septiembre 2010-Noviembre 2010

DISTINCIONES Y PREMIOS

Beatriz Herguedas. Becada por la IUBMB (International Union of Biochemistry and Molecular Biology) con una International Fellowship in the "Young Scientist Forum associated with the Oz-Bio2010 Conference", Melbourne, Septiembre 2010.

José Ramon Peregrina Bonilla ha sido galardonado en febrero de 2010 con el Premio Extraordinario de doctorado de la Universidad de Zaragoza 2008/09

Premio ECODES, Fundación Ecología y Desarrollo donde la propuesta de instalar Ibercivis en salas de usuarios de la Universidad y el uso por parte de investigadores fue premiada en la categoría Lucha contra el cambio climático.

CHARLAS Y CONFERENCIAS IMPARTIDAS EN OTRAS INSTITUCIONES

OTRA INFORMACIÓN RELEVANTE

Participamos en la Jornada técnica sobre fusión, 4 de marzo de 2010 en Tarrasa, en el marco de EXPO Fusión. Organizador: Fernando Carbajo (CIEMAT) en representación de la comunidad EURATOM. En el museo de la ciencia y de la técnica de Cataluña (Terrasa): en la que se inaugurará

la Exposición temporal de “Fusión Expo. Energía para el futuro”.

Estuvimos desde el día 3 hasta el domingo 7, realizando:

“Servicio de proyección en 3D para la exposición itinerante FUSIÓN”

Finalmente, quisiéramos mencionar que una de las publicaciones del grupo (S. Boccaletti, V. Latorra, Y. Moreno et al. Physics Reports 424, 175 (2006)) es actualmente el segundo artículo más citado de la historia de la Universidad de Zaragoza con más de 1205 citas, el primero de los últimos 15 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 2010.