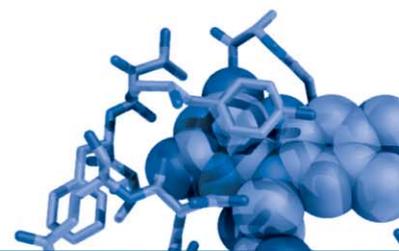


INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS

MEMORIA ANUAL 2011





Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

Memoria anual: año 2011

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

VIII Memoria anual: año 2011

Contenido

1. INTRODUCCIÓN	5
2. ESTRUCTURA DEL INSTITUTO	6
2.1. Organigrama y Gobierno	6
2.2. Personal. Contratación investigadores y técnicos.	9
3. RESUMEN DE ACTIVIDADES	10
4. INVESTIGACIÓN	21
4.1. Bioquímica y Biología Molecular y Celular	22
4.2. Biofísica	37
4.3. Física	41
4.4. Computación	50
5. GESTIÓN I+D	60
5.1. Apoyo y Gestión	60
5.2. Transferencia	62
6. Infraestructuras e instalaciones	65
6.1 Infraestructuras de Computación	65
6.2. Infraestructuras de Bioquímica	80

7. SERVICIOS CENTRALES	91
7.1. <i>Secretaría</i>	91
7.2. <i>Comunicación y Divulgación Científica</i>	91
8. ACTUACIONES	92
8.1. <i>Proyectos de investigación</i>	92
8.2. <i>Publicaciones Científicas</i>	102
8.3. <i>Tesis doctorales leídas en 2011</i>	115
8.4. <i>Otras actuaciones</i>	117

1. INTRODUCCIÓN

En este año 2011 que acaba se han producido importantes cambios en el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.

El año comenzó con la triste desaparición del que para todos nosotros será siempre una referencia: Jose Félix Saénz Lorenzo. Nuestro director siempre veló por el desarrollo y consolidación del Instituto, que marcó su vida profesional estos años. Puso los cimientos, señaló una forma de trabajo seria, eficaz, creando tranquilidad donde había problemas, haciendo visible al BIFI en todos los ámbitos de la ciencia y la sociedad.

Los cambios y avances durante este año son debidos sin duda a su ejemplo, a su herencia, producto de su trabajo, ánimo y dedicación.

Hemos celebrado elecciones a Director en el comienzo de 2011. Fue un proceso abierto, un saludable ejercicio democrático y que ha concluido con un Instituto más compacto y sólido. Este proceso fue guiado de forma ejemplar por Milagros Medina, que ejerció de directora en la etapa electoral.

Se creó un nuevo equipo de Gobierno y se ha perfilado un poco más la estructura y organigrama, donde hemos fijado las líneas de investigación, los servicios transversales y los servicios centrales.

Fruto de todo ello hemos podido adaptarnos a los cambios que se producen en nuestro entorno; cambios en la situación económica, en líneas de investigación, en las relaciones con empresas, cambios institucionales, etc. El BIFI se ha mostrado flexible, con aspectos novedosos como la participación de investigadores de otras instituciones nacionales y extranjeras, con respuestas rápidas a las necesidades de otros grupos de investigación o a las demandas tecnológicas de las empresas. Nuestra vocación es la de crear, ampliar y fomentar, colaboraciones de excelencia con todos aquellos grupos con los que podamos crear sinergias con el trabajo conjunto.

Hemos crecido en proyectos de investigación, en personal de investigación, técnico y de apoyo, en productividad científica y en proyección social.

Finalmente la Fundación Ibercivis se ha constituido y comenzará en 2012 su actividad independiente. La Fundación es ciertamente un spin-off de nuestro Instituto.

En esta memoria pueden verse los detalles de todo lo esbozado anteriormente. Este año ha sido pues un periodo de avance y mejora, producto sin duda del excelente trabajo de todas las personas que forman parte de este gran proyecto.

2. ESTRUCTURA DEL INSTITUTO

2.1. Organigrama y Gobierno

- Se celebró el **Consejo ordinario** del Instituto el 2 de febrero bajo la dirección de Milagros Medina, en el que se aprobaron las actuaciones realizadas y los proyectos más importantes a llevar a cabo a lo largo de 2011. El Equipo de Gobierno ha realizado siete reuniones formales a lo largo del año.
- El 2 de febrero se realizó un consejo extraordinario con motivo de la elección del nuevo director del BIFI, siendo elegido Alfonso Tarancón Lafita.

Organigrama BIFI

Los órganos estatutarios del BIFI son el **Director, el Subdirector, el Secretario y el Consejo del Instituto**. Javier Sancho ocupa el cargo de Subdirector del Instituto y Yamir Moreno el de profesor Secretario.

Se ha constituido el equipo de Gobierno, al que pertenece un responsable de las áreas de investigación y de los Servicios Transversales.

Una de las primeras tareas elaboradas desde el Equipo de Gobierno ha sido la definición de un nuevo organigrama, basado en los cambios producidos en los últimos tiempos.

En el organigrama figuran principalmente tres categorías:

1. Área de investigación

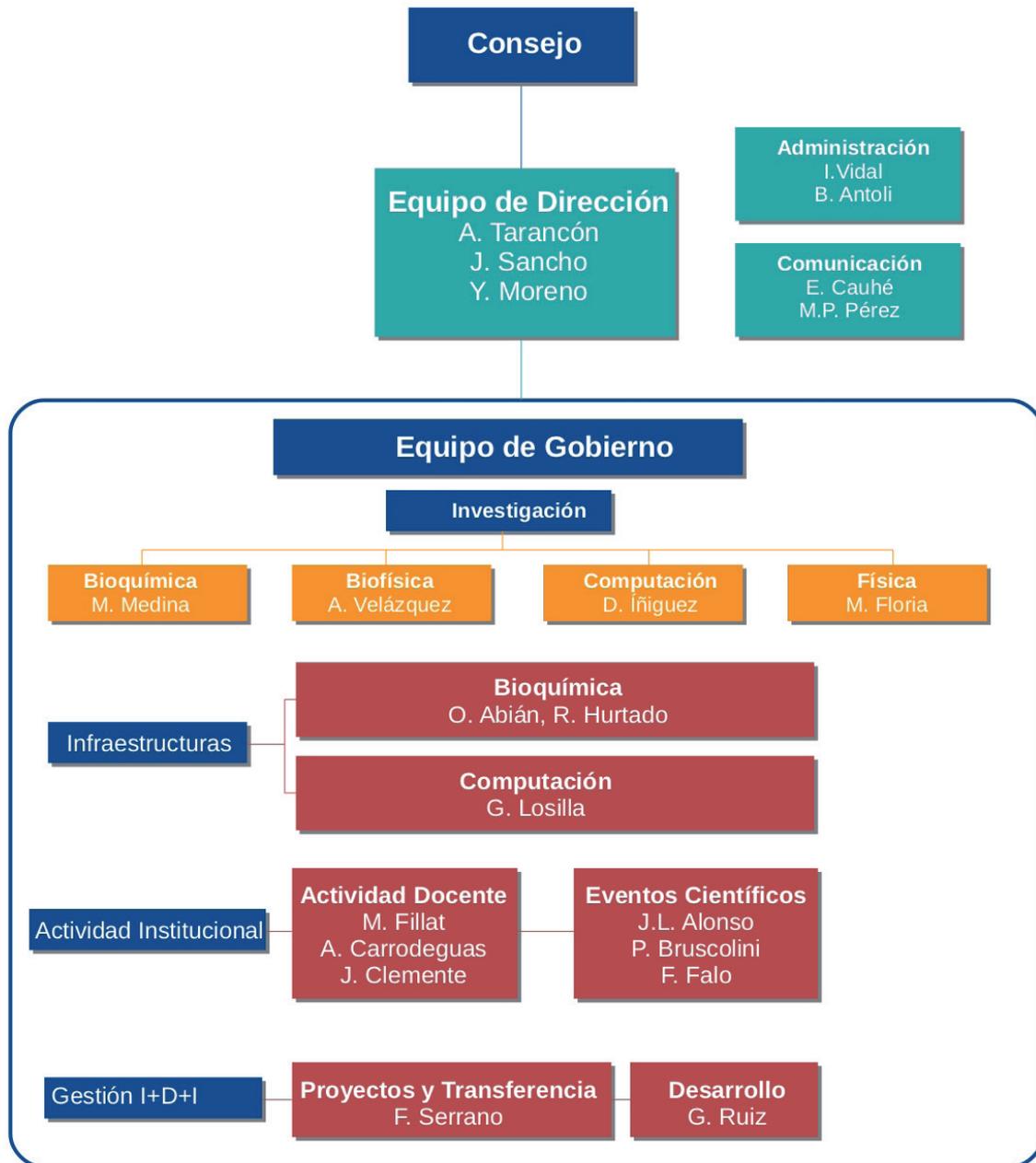
Bioquímica y Biología Molecular
Biofísica
Física
Computación

2. Servicios transversales

Infraestructuras
Actividades Institucionales
Gestión I+D

3. Servicios Centrales

Administración
Comunicación y Divulgación



Nuevo organigrama del BIFI

Estructura del instituto

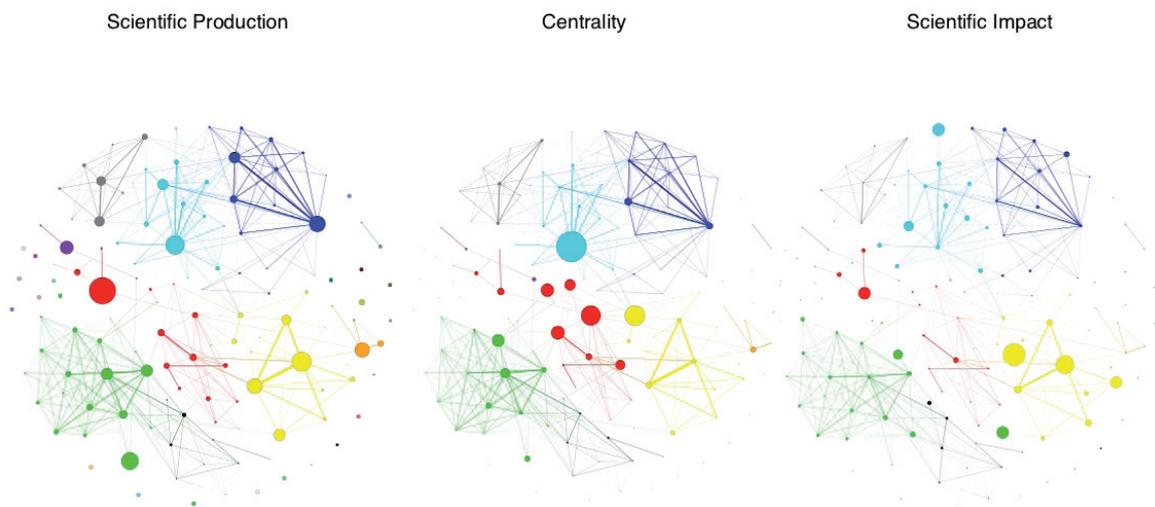
Durante este año se ha creado un nuevo **Gabinete de Comunicación y Divulgación Científica**, dirigido por Elisa Cauhé y con una técnica de apoyo, María Pilar Pérez, dan servicio a todo el Instituto. Desde este gabinete se transfiere la información generada en el instituto a diferentes ámbitos como empresas, centros de investigación, instituciones, educación, medios y sociedad. Sus principales labores son dar soporte a la realización de eventos científicos, congresos, colaboraciones, convenios, contenidos de páginas web, notas de prensa, actuación con los diferentes medios de comunicación, edición de material de imagen corporativa, social media, elaboración de planes de comunicación.

2.2. Personal. Contratación investigadores y técnicos.

- Investigadores ARAID: Alberto Castro, Ramón Hurtado, David Iñiguez y Adrián Velazquez, y disponemos de cuatro investigadores del programa ARAID.
- Pablo Echenique, investigador del CSIC adscrito al BIFI, en virtud del Convenio de Unidad Asociada al Rocasolano, Olga Abián del IACS desarrolla en el BIFI sus investigaciones científicas. Con el programa Juan de la Cierva Angelo Rosa y como investigadores postdocs en fusión del CIEMAT están Luca Rossi y Maxim Tereschenko. Alejandro Rivero colabora en el proyecto Ibercivis.
- Técnicos en Computación: **cuatro técnicos ingenieros informáticos** cofinanciados con diversos proyectos del MICINN, del Gobierno Autónomo y del CIEMAT.
- Técnicos en Bioquímica: dos técnicos cofinanciados por el MICINN y la Universidad de Zaragoza y becarios de los distintos sistemas, algunos de ellos ligados a proyectos públicos o con empresas.
- Isabel Vidal continúa como Jefa de Negociado y Beratriz Antolí como administrativo del BIFI y técnica en innovación, sostenida con fondos propios.
- En abril fueron concedidas las **ayudas BIFI de iniciación a la investigación**. Se concedieron dos ayudas para las áreas de Bioquímica y Biofísica: Violeta Calvo Sein-Echaluze y Jesús Navarro Dominguez; y otras dos ayudas para las áreas de Física y Computación: Jorge A. Jover Galtier y Eduardo Monroy Pérez.
- Técnicos de I+D+i: 13 técnicos con cargo a proyectos regionales, nacionales y especialmente Europeos (FPVII e Intereg).

3. RESUMEN DE ACTIVIDADES

El Grupo de Redes y Sistemas Complejos ha completado un estudio con el objetivo de medir la evolución de las colaboraciones científicas del Instituto. Con este fin, se recogieron los datos



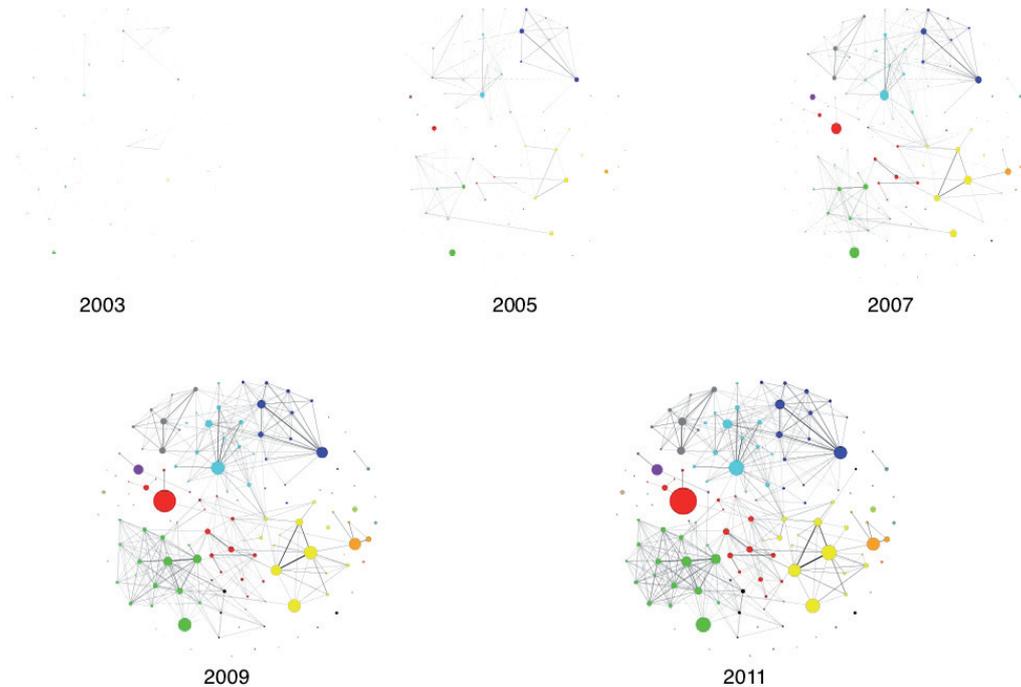
Collaboration Network @BIFI, 2003-2011. Nodes represent researchers from BIFI. Links are established whenever two authors have published a paper together. The size of the nodes is proportional to: the total number of papers in the period analyzed (scientific production); the betweenness centrality of the nodes -i.e., how often a node is in the shortest paths between other vertices- (centrality); and the average number of citations per paper (scientific

correspondientes a las publicaciones de los miembros del BIFI en el período comprendido entre el 2003 y el 2011, incluyendo el número de citas recibidas por cada artículo (sólo se consideraron las revistas que aparecen en el ISI Web of Science). Con estos datos, se construyeron las redes de colaboración que se muestran en las las siguientes figuras. En las mismas, cada nodo corresponde a un investigador del BIFI, mientras que los enlaces representan la existencia de una publicación científica conjunta entre los nodos conectados.

En esta figura se mide tres índices diferentes: la producción científica, la centralidad y el impacto científico. En cada uno de los paneles, el tamaño del nodo es proporcional a la correspondiente métrica. Así, la producción científica se mide como el número de artículos publicados por cada investigador en el período analizado, mientras que el impacto es el número medio de citas por publicación de cada

autor. La centralidad es una medida de cuánto contribuye cada nodo a la cohesión de la red: a mayor centralidad, mayor es la importancia del nodo para que la red se mantenga conexas. Como se aprecia, los nodos de mayor centralidad

En esta otra se muestra la evolución de las redes de colaboración y la sinergia entre diferentes grupos de investigación en el período 2003-2011. En las etapas muy iniciales del BIFI (año 2003), se aprecia que el número



Evolution of the Collaboration Network @BIFI. Nodes represent researchers from BIFI. Links are established whenever two authors have published a paper together. The size of the nodes is proportional to the total number of papers in the period analyzed. © J. Borge-Holthoefer & Y. Moreno

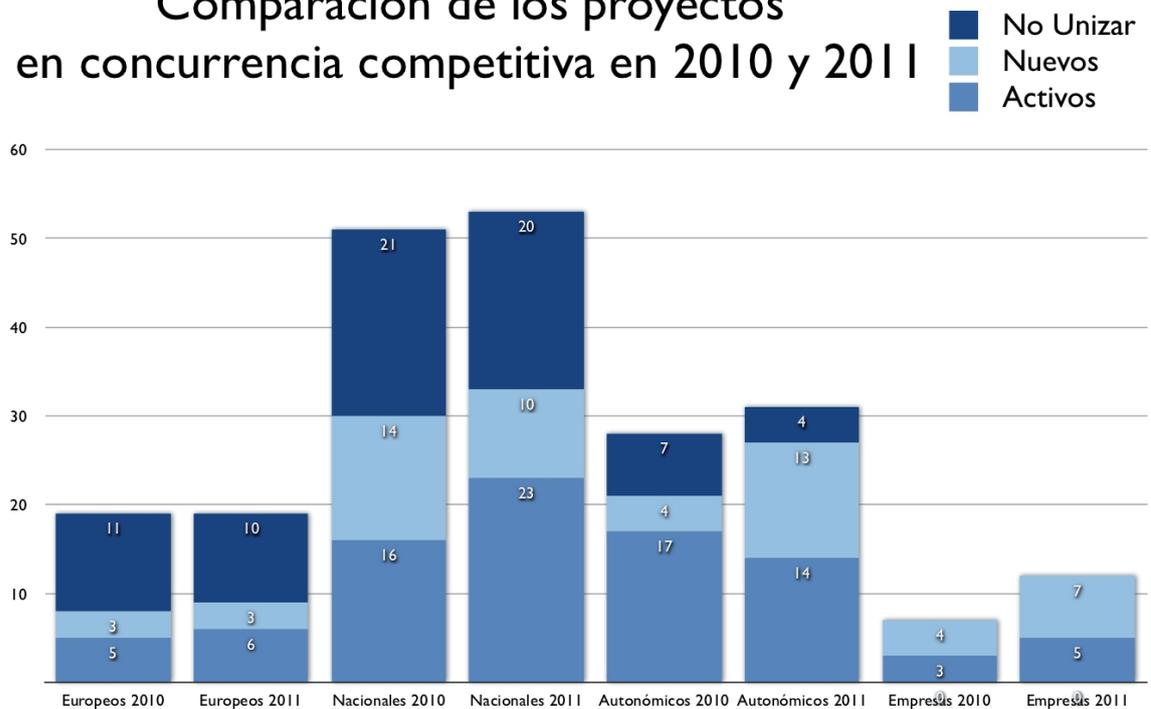
son precisamente aquellos en la “periferia” de cada comunidad (identificadas por diferentes colores). Es también interesante señalar que estas comunidades han sido obtenidas con un algoritmo de detección que no contiene información alguna sobre la estructura de los diferentes grupos de investigación del BIFI. Sin embargo, el algoritmo es capaz de diferenciar a estos grupos basándose en la red y los patrones de colaboración existentes.

de colaboraciones entre los miembros del mismo era muy escasa. Sin embargo, con el paso del tiempo y, en especial a partir del 2009, es evidente que las interacciones entre los diferentes grupos del Instituto han cristalizado en numerosos artículos de investigación conjuntos. Esta sinergia entre grupos, que era uno de los objetivos iniciales del BIFI, se ha logrado a tenor de los resultados representados en las figuras.

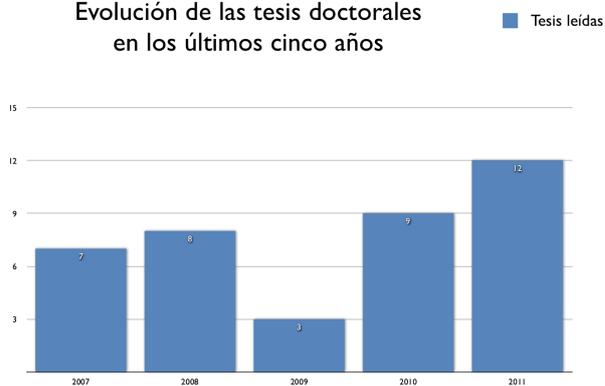
Resumen de actividades

A continuación mostramos unas gráficas en las que se puede observar la evolución en los últimos años de los proyectos concedidos al Bifi, de los artículos que han publicado los miembros del instituto y de las tesis doctorales que han sido leídas.

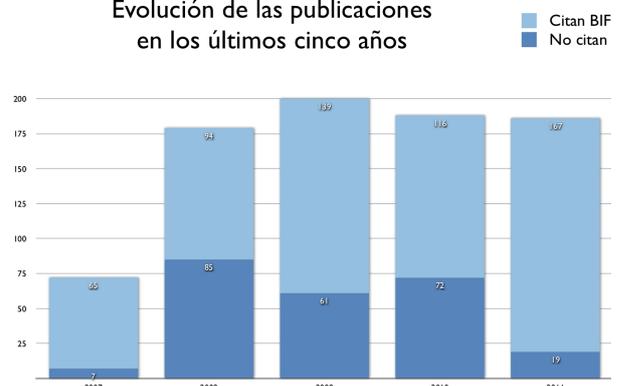
Comparación de los proyectos en concurrencia competitiva en 2010 y 2011



Evolución de las tesis doctorales en los últimos cinco años



Evolución de las publicaciones en los últimos cinco años



Convenios y relaciones con otros centros y empresas.

Sigue en marcha el Convenio con HP, "Observatorio Tecnológico HP": ubicado en el Edificio del BIFI y equipado por HP, y cuyo objetivo es permitir a los alumnos de la Unizar (principalmente en último año de carrera o doctorado), familiarizarse, aprender y trabajar con algunas de las últimas tecnologías de HP, desarrollando Proyectos Fin de Carrera ("PFC") o trabajos académicamente dirigidos. Este Observatorio también podrá ser utilizado como centro de demostraciones que permita dar a conocer a las empresas de la región, tanto las soluciones de HP como las capacidades y conocimientos de la Universidad y sus alumnos. Este año se han comenzado dos proyectos fin de carrera y en 2012 se espera lanzar ocho nuevos proyectos.

Sigue en marcha el 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.

El congreso se realizó bajo el nombre: "Taller Bilateral BIFI-CEAC en Física, Bioquímica y Computación", bajo las ayudas ACI-PROMOCIONA recibidas en 2009. El congreso de varios días de duración tuvo como principal objetivo ofrecer a los investigadores, técnicos y resto de miembros de los grupos de investigación, la oportunidad de compartir sus trabajos y experiencias, dando lugar a nuevas colaboraciones en diversas temáticas.



Como resultado, al congreso realizado en el CEAC asistieron más de 60 personas de diferentes centros de investigación de Cuba como el CEAC, el Centro de Inmunología Molecular, la Universidad de Ciencias Informáticas, Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología, del Consejo de Estado, del CENPALAB, del CENATAV, de la Facultad de Biología de la Universidad de la Habana, y del CITMA.

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.

Resumen de actividades

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.

Seguimos encabezamos la iniciativa **Piregrid** aprobada en Intereg IV en la que participan más de ocho entidades de ambos lados del Pirineo.

Durante el 2011 el **ZCAM** ha seguido desarrollado su actividad bajo la dirección de su director Michel Mareschal. Durante el 2010 dimos apoyo y colaboración desde el BIFI, en 2011 han trabajado con personal técnico y administrativo propio. 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. Se han seguido realizado conferencias y tutoriales. Todos ellos han contado con una fuerte participación del BIFI.

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 oferta de tecnologías.

Para el BIFI el año 2011 ha supuesto un hito en su expansión en el mundo empresarial y social. Se ha participado en numerosos foros de empresas, como las jornadas de NEOCOM, HP Cloud Summit. Y se ha contactado con instituciones de distinta naturaleza como Adidas, ENDESA IDIA, AREX, Tecnar, La Melee, Microsoft, CETVI-ITA, Technopark, CAAR, INZA, Cachirulo Valley, ARC, Scien Analytics o el Medialab del MIT.

Colaboramos con numerosas empresas españolas y extranjeras en el marco de los proyectos, en particular de los 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, Gabilos Software, Cierzo Development, Schnell Software, TEDx...

Contratos con empresas

Los grupos de investigación han tramitado durante este año una serie de patentes. La línea de investigación de "Estudios en Microcistinas y su tecnología" han llevado a cabo un contrato de

licencia de Know-how entre la Universidad de Zaragoza y la empresa Zeu-Inmunotec, S.L. Primera manifestación: que en el ámbito de la actividad investigadora desarrollada en la Universidad de Zaragoza y bajo la dirección de la profesora Dra. María Luisa Peleato Sánchez, se han llevado a cabo investigaciones que han dado lugar a determinados conocimientos específicos y secretos, concretamente a un Desarrollo de un test enzimático de inhibición de fosfatasa para la detención de microcistinas.

Proyectos intramurales

Con el objetivo de potenciar la colaboración entre diferentes grupos del Instituto, de modo que se fomene la investigación interdisciplinar, durante 2011 el BIFI ha lanzado una convocatoria de proyectos Intramurales.

La solicitud debía ser realizada por al menos dos grupos de investigación de áreas diferentes y tener como objetivo el arranque de nuevos proyectos colaborativos.

Con expectativas de generar nuevos proyectos competitivos y con financiación externa en un futuro inmediato.

La convocatoria fue un éxito, con 11 proyectos financiados de todas las áreas del Instituto. A continuación mostramos la resolución de proyectos **intramurales BIFI 2011**.

TÍTULO	INVESTIGADORES
Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad	Jose Alberto Carrodegua David Iñiguez
Herramienta Colaborativa para la obtención de datos de movilidad urbana	Yamir Moreno David Iñiguez
Modelación de los cambios conformacionales inducidos por la unión de los sustratos riboflavina y ATP al módulo riboflavina quinasa de la FAD sintetasa de <i>Corynebacterium ammoniagenes</i> (CaFADS)	Milagros Medina Pierpaolo Bruscolini
Showroom del BIFI	Jose Alberto Carrodegua David Iñiguez
Interacciones proteína-proteína implicadas en cáncer pancreático	Adrian Velázquez Jose Luis Neira
Desarrollo de un modelo de mecánica estadística para la predicción de estabilidad y cinética de proteínas	Pierpaolo Bruscolini Javier Sancho Adrian Velazquez
Función de la O-fucosilación en proteínas mediante estudios computacionales y bioquímicos	Ramon Hurtado Inmaculada Yruela Bruno Contreras
Caracterización Estructural de Complejos Ab Inhibidor y diseño de nuevos inhibidores de utilidad diagnóstica	Javier Sancho M ^a Angeles Jimenez Douglas Laurents
Fur (Ferric uptake regulator) como diana terapéutica frente a microorganismos patógenos	Javier Sancho Teresa Bes
Búsqueda de nuevos agentes terapéuticos contra <i>Streptococcus pneumoniae</i>	Javier Sancho Margarita Menendez
Regulación de genes en Cianobacterias	Fernando Faló Mari Fillat

Resumen de actividades

Feder-CeSAR

A finales de 2011 se resolvió la nueva convocatoria de fondos FEDER para infraestructura científica, resultando aceptado el equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón, proyecto propuesto por el BIFI con el apoyo de otros centros e institutos de la Universidad de Zaragoza.

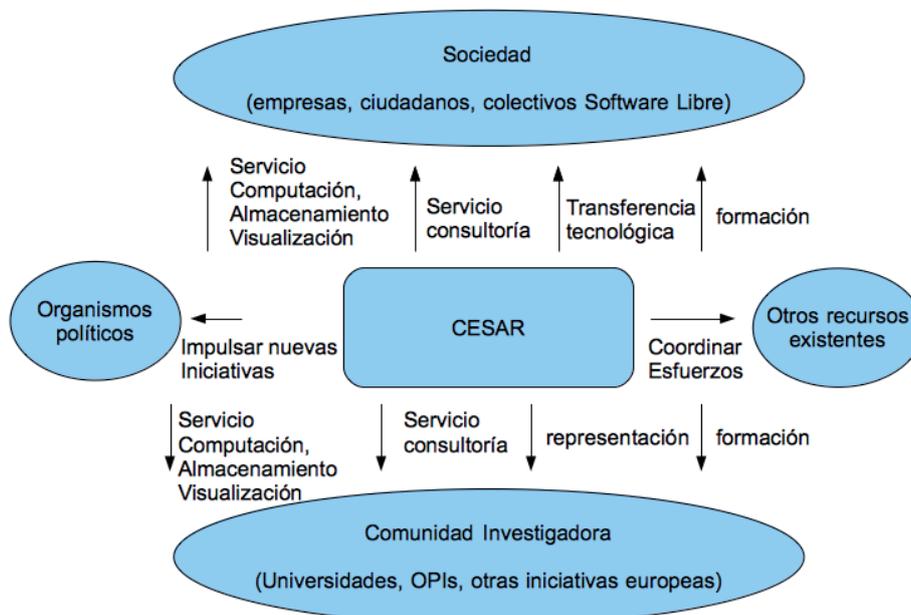
El Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAR) nace con la idea de convertirse en la herramienta que permita vertebrar los recursos computacionales en la comunidad de Aragón. La estructura del centro se compone de 3 áreas de trabajo diferenciadas: supercomputación, visualización y ciencia ciudadana.

Los principales objetivos que se fijado el CeSAR son:

- Dotar de potencia de cálculo y almacenamiento a los investigadores
- Transferir tecnología al tejido empresarial
- Divulgar la ciencia y la tecnología

El proyecto FEDER de infraestructura científica concedido, cubre el equipamiento inicial del centro y alcanza los 2 millones de euros. Incluye financiación para adquirir varios sistemas de cálculo masivo, así como el equipamiento de 3 laboratorios de visualización y los servicios transversales.

CeSAR nace con la vocación de convertirse en un centro de referencia europea en supercomputación, visualización y ciencia ciudadana, ofreciendo servicios TIC punteros dirigidos al mundo de la investigación científica, las empresas y la ciudadanía en general.



Fundación Ibercivis

El 14 de noviembre de 2011 se firmó en Madrid la constitución de la Fundación Ibercivis, en la que participaron el Ministerio de Ciencia e Innovación, el Gobierno de Aragón, CSIC, Ciemat, Red.es, Fundación Ikerbasque, Fundación Zaragoza Ciudad del Conocimiento y la Universidad de Zaragoza. La creación de esta Fundación constituye un paso importante para la consolidación del proyecto a nivel nacional.



Creación de la red social Feelicity

Durante este año desde el área de Gestión I+D+i se ha llevado a cabo la aplicación Feelicity, es una red social que permite localizar y compartir los lugares más felices para los usuarios dentro de la ciudad de Zaragoza y de otros lugares del mundo.

Tanto la red social como su aplicación para smartphones ha sido desarrollada con la ayuda del equipo organizador de TEDxZaragoza, una iniciativa que reunió el 5 de noviembre de 2011 en Zaragoza a científicos, innovadores, artistas y pensadores para reflexionar sobre 'El futuro de la felicidad'. Los ponentes transmitieron una idea alrededor del tema de la felicidad.

Actualmente ya hay registrados unos 500 usuarios en Feelicity y este número continúa creciendo. No sólo se han geo-posicionado momentos felices en Zaragoza y otros lugares de la península,

también los hay fuera de España, en países como Estados Unidos, México, Venezuela, Perú, Chile o Italia, entre otros.



Además se creó una aplicación para smartphone y todos sus usuarios pueden descargar aplicación de Feelicity para compartir al instante con otras personas sus momentos felices. Con este programa se podrán difundir, a través del teléfono móvil, fotos, vídeos y comentarios. Además, la aplicación permite localizar la ubicación del

Resumen de actividades

usuario para que, automáticamente, el lugar quede registrado con una estrella en el 'mapa de a felicidad'.

A través de esta red social, el BIFI quiere estudiar la felicidad y su relación con otros elementos de la vida cotidiana y de la ciudad.

Estudio sobre el movimiento 15 M

En el mes de mayo se presentó en el BIFI un estudio sobre la propagación del movimiento 15 M en las redes sociales, en concreto en twitter.

En la Naturaleza y en la Sociedad humana, la información se propaga de maneras muy diferentes. El cómo se propaga tiene una extraordinaria importancia tanto para la propia existencia de la vida como para entender diferentes dinámicas sociales. Desde el BIFI nos hemos preguntado cómo ha sido el proceso de propagación de la información en torno al movimiento 15M, si es o no similar a otros procesos y si pudo haber sido predicho.

El estudio realizado en colaboración con Cierzo Development ha tenido como objetivo investigar, por una parte, las propiedades estadísticas de la información difundida y por otra, cómo son los patrones de conexión entre aquellos que propagan y reciben dicha información.

El estudio comprende el periodo de tiempo entre el 25 de abril y el 26 de mayo de 2011. A partir de las 70 palabras clave relacionadas con el movimiento 15M, se han rastreado todos los mensajes intercambiados entre usuarios que contenían, al menos, una de éstas. En total se han detectado y utilizado 581.749 mensajes provenientes de 87.569 usuarios. Los datos aquí analizados representan un tercio aproximadamente de todos los mensajes y posts generados en el mundo. A partir de estos datos, se espera contar con nuevas fuentes y colaboraciones para profundizar aun más en el estudio de este tipo de redes complejas.

A través de herramientas computacionales y de la teoría de redes complejas, en la que el BIFI es una referencia mundial, se han analizado y relacionado las palabras clave que se han ido creando a través de una popular Red Social. Nonosvamos o democraciarealya, fueron las primeras que se crearon, a las cuales le siguió un más genérico 15M, haciendo referencia a la fecha de la primera concentración. Posteriormente, la movilización de personas en la Puerta



del Sol de Madrid dio lugar a acampadasol, y ésta pronto fue seguida por otras en toda la geografía española, las cuales dieron lugar a acampadabcn, acampadavlc, acampadagranada, acampadazgz, acampadabilbao y un largo etc..., para llegar finalmente a globalcamp.

Poder obtener la suficiente cantidad de datos estadísticos con tiempo real es una oportunidad única. Otros eventos de seguimiento masivo -como los deportivos- tienden a estar demasiado concentrados en unas pocas horas, y temas con una estadística grande suelen ser de variación lenta. El 15m es una situación ideal para estudiar la formación de redes y las dinámicas de propagación que tienen lugar en ellas. Al ser una dinámica social online, podemos extraer información que luego se podrá extrapolar a otras redes similares de las que no se pueden obtener datos directos.

Más información en la página web:
<http://15m.bifi.es>

Propuesta de máster universitario

Recientemente se ha solicitado una propuesta de máster universitario bajo el título "Master Universitario en Biotecnología y Biocomputación".

La Biotecnología está entrando en una fase de desarrollo y uso generalizado de modelos cuantitativos que resulta necesaria para poder desarrollar plenamente sus potencialidades. Es por ello que desde el Bifi se vió necesario y oportuno formar a un colectivo de biotecnólogos con sólida preparación en modelización biotecnológica. Para conseguirlo, en este Máster ofrecemos al estudiante una formación multidisciplinar que integra conocimientos,

técnicas experimentales y habilidades de los campos de la biotecnología, la biocomputación y el modelado físico.

Los **objetivos específicos** del Máster son:

- Proporcionar al alumno una formación avanzada en el estudio de la biología de sistemas y sus aplicaciones mediante técnicas experimentales de laboratorio y métodos computacionales.
- Proporcionar al alumno una formación avanzada en las técnicas experimentales y computacionales de vanguardia para investigación aplicada en campos como el desarrollo racional de nuevos fármacos o la optimización funcional de biomoléculas.
- Proporcionar al alumno los conocimientos necesarios a nivel biofísico y computacional para el desarrollo y análisis de modelos biológicos in silico.
- Proporcionar al estudiante las habilidades de comunicación necesarias para transmitir los conocimientos adquiridos tanto a nivel de especialista como de divulgación.
- Capacitar al alumno tanto para incorporarse al mercado laboral como para la realización de una actividad especializada de investigación.

Experimento Dilema del Prisionero

1230 alumnos de 42 colegios de Aragón participaron el 20 de diciembre de 2011 en el mayor experimento socio-económico online realizado hasta la fecha. Este experimento, llevado a cabo por la Fundación Ibercivis y el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos en colaboración con la Universidad Carlos III de Madrid, se basó en el dilema del

Resumen de actividades

prisionero para estudiar como surge la cooperación en la sociedad.

En el edificio Zaragoza Activa se celebró un acto público convirtiéndolo en un centro de monitorización en vivo del experimento, en el que también participaron alumnos del I.E.S. La Azucarera jugando en tiempo real.

El día posterior al experimento y una vez

analizados los primeros resultados, se hizo el acto de la entrega de premios a nivel colectivo y se dieron a conocer las primeras conclusiones sobre el estudio.

Se ha podido comprobar en estos primeros análisis que en ciertos parámetros si hay diferencias en cuanto al nivel de cooperación, por ejemplo en relación al sexo de los participantes, colaboran más las chicas que los chicos, las chicas cooperaron un 10% más que los chicos. También se ha observado una notoria diferencia según el tipo de bachillerato que están estudiando, superando en un 4% el nivel de cooperación los estudiantes del humanístico y Ciencias de la Salud al Científico tecnológico.

Sin embargo, no se han observado diferencias considerables en cuanto al número de miembros en la familia, si son hijos únicos o con más hermanos; ni según la geografía, si son del medio rural o urbano. En ambos casos los valores han sido muy similares.

En términos globales, se ha observado que el porcentaje de cooperación entre todos los participantes, ha sido de un 35%, aproximadamente uno de cada tres alumnos ha cooperado.

Los resultados parecen confirmar que la estructura de la red de interacción influye en el nivel medio de cooperación, es decir, se han distinguido niveles de cooperación distintos en la red regular, en la que todos los usuarios están conectados con el mismo número de compañeros/vecinos y la heterogénea, llamadas "libre de escala", en las que algunas personas están muy conectadas, es decir con muchos vecinos, y otras lo están muy poco.

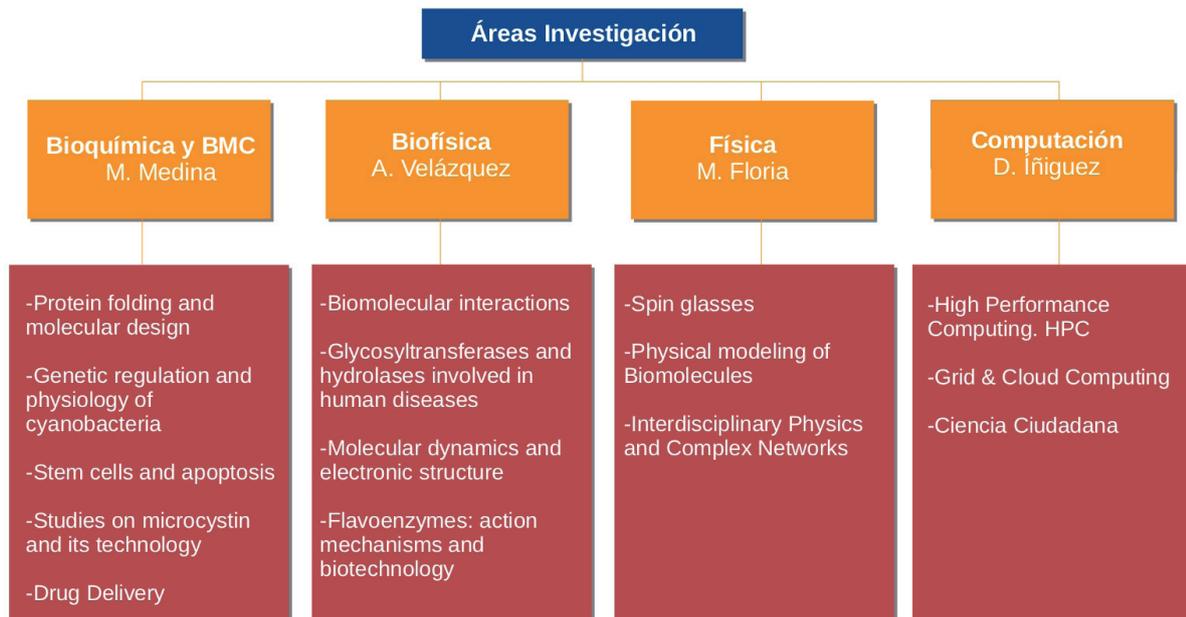
Los investigadores responsables del experimento, siguen trabajando con los datos para analizarlos detalladamente y con ello poder obtener más resultados, que darán lugar a distintas publicaciones en revistas científicas.



4. INVESTIGACIÓN

Áreas de investigación

La investigación del BIFI se estructura en cuatro áreas de investigación con sus correspondientes coordinadores responsables, esta estructura ha sido aprobada durante el año 2011. Cada una de éstas áreas tiene a su vez una línea o grupo de investigación. 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.



4.1. Bioquímica y Biología Molecular y Celular

En el área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular se ha estado trabajando con el objetivo de comprender y controlar los procesos biológicos dependientes de proteínas a un nivel molecular y celular, para poder actuar sobre ellos con fines biotecnológicos y/o biomédicos. Dentro de esta área hay distintos grupos de trabajo.

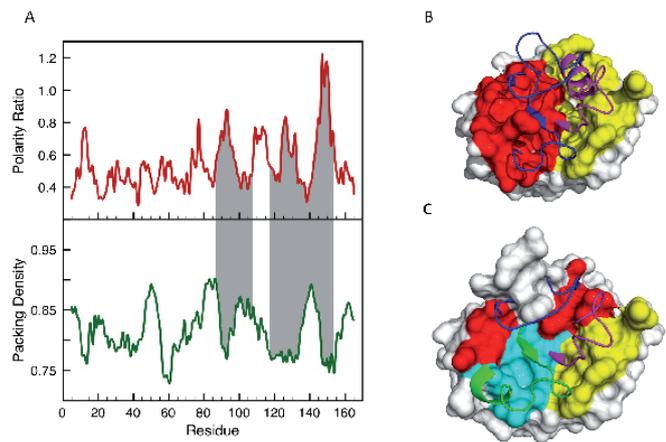


Protein Folding and molecular design

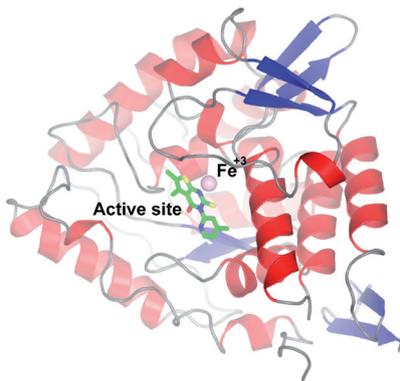
En computación, nuestro trabajo se ha centrado en desarrollar un algoritmo de análisis que identifica, en estructuras de proteínas, las regiones inestables susceptibles de desacoplarse del resto de la proteína y constituir las regiones

desestructuradas de los intermediarios de plegamiento de equilibrio y cinéticos. También hemos desarrollado, en colaboración con el grupo del Prof. Ventura (UAB) un algoritmo capaz de analizar proteomas completos e identificar proteínas priónicas mediante una función de puntuación de su potencial priónico. Además hemos avanzado en la implementación de un proceso de cálculo electrostático que predice el efecto estabilizante o destabilizante de mutaciones electrostáticas en proteínas.

En la parte biomédica, hemos completado el descubrimiento de compuestos que inducen selectivamente apoptosis en células madre, hemos analizado las causas moleculares del comportamiento diferencial de enzimas utilizadas en terapias de reemplazamiento enzimático, y hemos profundizado en la comprensión de mutaciones



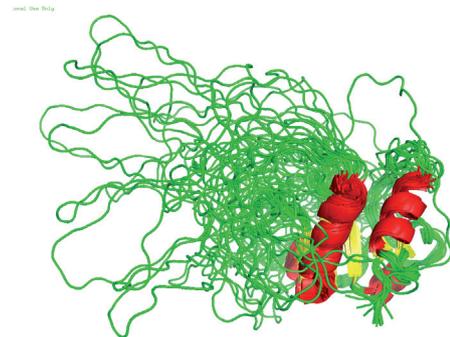
A: Identificación de las regiones inestables de apoflavodoxina (1FTG) mediante análisis de polaridad y empaquetamiento interfacial. B. Regiones inestables reales. C. Regiones inestables predichas



Estructura del complejo entre Fenilalanina hidroxilasa y una chaperona farmacológica descubierta por cribado experimental

relacionadas con resistencia a antibióticos. Así mismo hemos resuelto la estructura tridimensional de una diana proteica clave de la fenilcetonuria unida a su chaperona farmacológica y hemos iniciado diversos programas de cribado para el descubrimiento de nuevas chaperonas farmacológicas frente a distintas dianas. Finalmente hemos presentado dos nuevas solicitudes de patentes de potenciales fármacos para evitar la agregación del péptido beta-amiloide con posible utilidad en la enfermedad de Alzheimer.

En estabilidad y plegamiento de proteínas, hemos evaluado una nueva estrategia de estabilización mutacional de proteínas, hemos resuelto la estructura tridimensional de un intermediario de equilibrio y hemos aclarado el mecanismo de reconocimiento proteína-cofactor en el modelo apoflavodoxina-FMN.



Estructura del mutante F98N de apoflavodoxina, modelo estable del intermediario de equilibrio de la desnaturalización térmica

Genetic regulation and physiology of cyanobacteria

Las proteínas Fur (ferric uptake regulator) constituyen una superfamilia de reguladores transcripcionales que contiene el motivo HHXHXXCXXC y que engloba a diversos subtipos que se han especializado en la respuesta a diferentes tipos de estrés. En cianobacterias el regulador FurA es esencial para la célula y además de la secuencia canónica HHXHXXCXXC, presenta varios motivos CXXC muy conservados, próximos al extremo C-terminal y que podrían actuar detectando el estado redox de la célula y/o paliando directamente los efectos de un exceso eventual de radicales libres. En este sentido, hemos observado que el estado redox de los tioles de FurA es crucial en la interacción con el DNA y que la sobreexpresión de esta proteína confiere tolerancia al estrés oxidativo. Otra característica de FurA de cianobacterias es que forma un complejo estable con hemo y esta interacción afecta a la capacidad del regulador para unirse al DNA.

En la estirpe filamentosa fijadora de nitrógeno Anabaena, FurA es una proteína extraordinariamente abundante para tratarse exclusivamente de un regulador. Además, la expresión de FurA está fuertemente inducida en los heterocistos, células especializadas donde se produce la fijación de nitrógeno en un entorno microaeróbico.

Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular

El interés general del grupo es relacionar datos estructurales y funcionales para comprender mejor el mecanismo de actuación de Fur. Uno de nuestros intereses es estudiar el papel de las cisteínas y la unión a hemo, que creemos de gran importancia en la regulación de la fotosíntesis y el metabolismo del heterocisto, donde FurA-hemo podría jugar un papel relevante en el transporte de oxígeno y la neutralización de radicales libres.

Entre nuestros intereses se encuentran

1. Conocer el mecanismo de actuación de las cisteínas como mediadoras de la respuesta redox en FurA.
2. Caracterizar la funcionalidad de FurA como sensor basado en su interacción con hemo
3. Analizar el efecto de la sobreexpresión de FurA en Anabaena.
4. Aportar datos sobre las funciones de FurA en el heterocisto.

Studies on microcystin and its technology

Las cianobacterias producen una amplia variedad de metabolitos secundarios conocidos como cianotoxinas que tienen efectos tóxicos en los eucariotas. Entre las cianotoxinas, hay un grupo de hepatoxinas muy potentes llamadas microcistinas. Varios géneros de cianobacterias como *Microcystis*, *Anabaena*, *Planktothrix* y *Nostoc* pueden producir el heptapéptido cíclico de síntesis no ribosomal que llamamos microcistina. Las microcistinas son potentes inhibidores de una proteína fosfatasa 1 y 2A de eucariotas. Los estudios de la regulación de la expresión de los genes responsables de la síntesis de las microcistinas se han llevado cabo en los ecosistemas locales y en el laboratorio, estudiando el efecto de los parámetros ambientales en la producción de toxinas. En la naturaleza, las floraciones pueden ser impredeciblemente tóxicas o no tóxicas, de un año a otro, e incluso bajo condiciones de laboratorio, los resultados son muy variables. En nuestro grupo hemos estudiado los efectos de factores ambientales como la intensidad de la luz, temperatura, nitrógeno, fósforo y metales traza en la producción de microcistinas. Pretendemos responder a dos preguntas abiertas sobre las microcistinas: 1) la regulación de la expresión de los genes implicados en la síntesis de la microcistina, y los factores ambientales que afectan a la toxicidad de las poblaciones de cianobacterias, y 2) el papel fisiológico de esta toxina. Nuestra cepa modelo es *Microcystis aeruginosa* PCC7806

Factores que afectan la síntesis de Microcistina

Los resultados sugieren que la disponibilidad de hierro es un factor clave y parece ser un factor determinante en la expresión del grupo de genes implicados en la síntesis de microcistinas (*mcy* operón). (Martín, et al.2006a), y la regulación de este proceso puede estar mediada por Fur, que se une en las regiones promotoras del operón *mcy* (Martin-Luna 2006b). Estos resultados están corroborados por el hecho de que la deficiencia de hierro provoca una disminución del transcrito

del gen *mcyD*, medida por RT-PCR a tiempo real (Sevilla et al. 2008).

El exceso de nitrato, uno de los factores de la eutrofización, promueve el crecimiento, pero no la síntesis de microcistina ni la expresión de *mcyD*, medida también por RT-PCR a tiempo real (Sevilla et al, 2010)

La síntesis de microcistina requiere luz. Tanto en oscuridad como utilizando bloqueos de la cadena de transporte fotosintética, *mcyD* y la microcistina disminuyen (Sevilla et al. 2011)

Sin embargo, el estrés oxidativo no induce la síntesis de microcistina, y por el contrario se produce en estas condiciones una disminución de la toxina, correlativa a una disminución de la transcripción del *mcyD*

Papel de las Microcistinas en las Cianobacterias Productoras

Según nuestros resultados:

- Las microcistinas pueden unirse a las proteínas
- La microcistina-LR se puede unir algunos metales. Experimentos EPR indicó que las microcistinas complejo con Cu y Fe 3 +, sugiriendo un posible papel como sideroforos.

Tecnología de Microcistinas

En colaboración con la empresa Zeu-Inmunotec (<http://www.zeu-inmunotec.com/index.php?leng=ingles>), hemos desarrollado un sencillo, rápido bioensayo que se comercializa como un kit de cuantificación de microcistinas. El ensayo es para la detección de microcistinas y nodularinas en el agua. Se basa en el mecanismo

de acción de microcistinas inactivando la proteína fosfatasa PP2A. Por tanto, es un bioensayo in vitro que cuantifica la toxicidad de todas las MCs presentes en la muestra y el rango de detección está diseñado en torno a lo contemplado por la legislación española como valor máximo (1 µg / L, la OMS, 1998).

En estos momentos, trabajamos en la liberación de la microcistina ligada a matrices biológicas, y en la producción de distintos estandar para fines analíticos.

Stem cells and apoptosis

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

Apoptosis

PSAP/Mtch1

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

Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular

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). Publicaciones más recientes han implicado a Mch2 en el proceso de metástasis y en el metabolismo lipídico.

Hemos descubierto que Mtch1 posee dos isoformas proapoptóticas que se localizan en la membrana externa mitocondrial y que ambas poseen dos dominios independientes con actividad proapoptótica. Además, Mtch1 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 Mtch1 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 Mtch1 (estado de oligomerización) y las proteínas con las que interacciona. Por otro lado, estamos estudiando también cómo se regula la expresión de Mtch1 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. Hemos demostrado ya la implicación del factor de transcripción Egr-1 (early growth response protein 1) en la regulación transcripcional de Mtch1 (artículo en preparación).

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. El knockout, mediante elementos P, de este gen da lugar a larvas más pequeñas que el tipo silvestre, que mueren durante el estadio de pupa, indicando la importancia de esta proteína para el desarrollo normal de la mosca. Mediante interferencia de RNA hemos conseguido eliminar el mRNA de Mtch en células de mosca en cultivo, y estamos actualmente analizando los efectos de la eliminación de esta proteína en la célula.

Bcl-XL

Durante una serie de experimentos encaminados a la caracterización funcional de Mtch1, en donde hemos fusionado Mtch1 a fragmentos de otras proteínas, hemos descubierto la capacidad del dominio transmembrana de Bcl-XL para oligomerizar. Experimentos recientes de mutagénesis dirigida, crosslinking y electroforesis blue-native han demostrado la implicación de un nuevo dominio proteico, GXXXXG en esta oligomerización. Una proteína quimérica que incluye la proteína fluorescente roja fusionada al dominio transmembrana de Bcl-XL es capaz de proteger frente a la apoptosis inducida por estaurosporina, lo cual indica mecanismos de protección de Bcl-XL independientes de sus dominios BH3 y relacionados con su inserción en la membrana externa mitocondrial. La eliminación de cualquiera de las dos glicinas presentes en ese dominio elimina la capacidad de oligomerizar de esa región y también elimina la protección frente a la apoptosis (artículo en preparación).

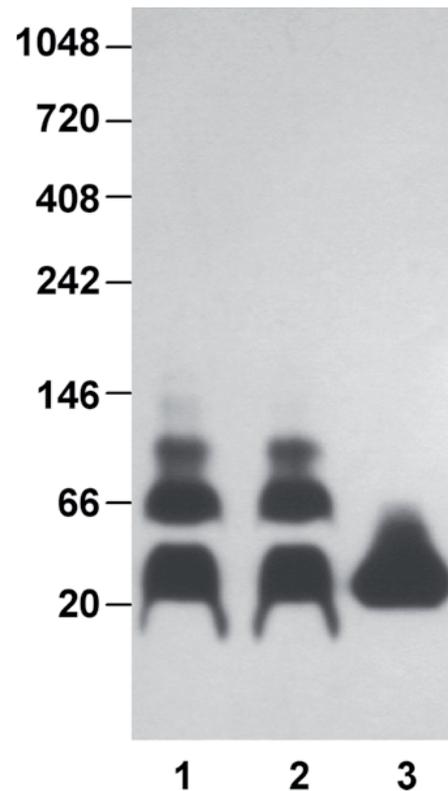
Curiosamente la misma secuencia de 6 aminoácidos está conservada en la región

equivalente de Bak, un miembro proapoptótico de la misma familia. Puesto que Bak utiliza ese dominio transmembrana para interactuar con VDAC2, manteniéndose así inactivo, estamos analizando el papel de ese dominio en el mantenimiento de Bak en forma inactiva, protegiendo por tanto a la célula de la muerte por apoptosis. Bak y Bcl-XL también interactúan entre sí y con otras proteínas, por lo que estamos ampliando nuestros estudios a diversas interacciones entre miembros de la familia de Bcl-2 y de estos con otras proteínas implicadas en muerte celular y en otros procesos celulares.

Células madre, terapia celular y medicina regenerativa

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

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



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.

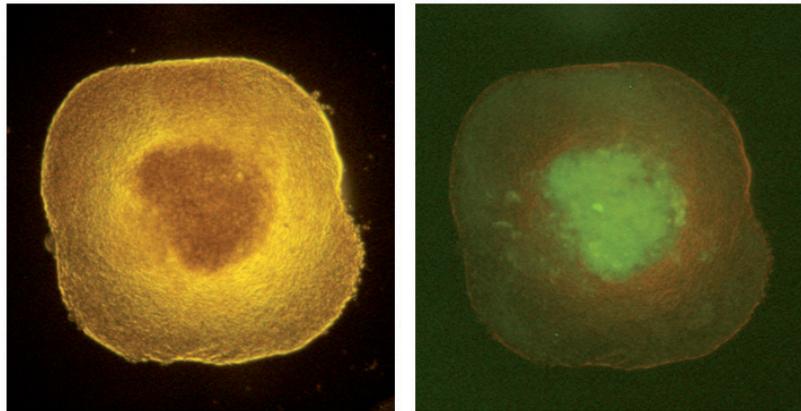
Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular

utilizado células madre embrionarias de ratón, y nos hemos centrado en su diferenciación a cardiomiocitos, considerando las aplicaciones clínicas del trasplante de cardiomiocitos generados in vitro. Las células madre que utilizamos, cedidas por un grupo de investigación de la Universidad de Colonia (Dr. Agapios Sachinidis), 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, y debido a las limitaciones técnicas para cuantificar la fluorescencia emitida por los cardiomiocitos diferenciados en un solo cuerpo embrioide en un formato de alta capacidad, nos hemos replanteado nuestro proyecto de cribado y hemos decidido enfocarlo hacia la identificación de compuestos inductores de diferenciación neural. Para hemos establecido una colaboración con la Dra. Nibedita Lenka (National Centre for Cell Science,

Pune University Campus, Maharashtra, India) quien nos facilitará una línea de células madre de ratón modificada genéticamente para expresar GFP bajo el control del promotor de la nestina, una proteína específica de neuronas.

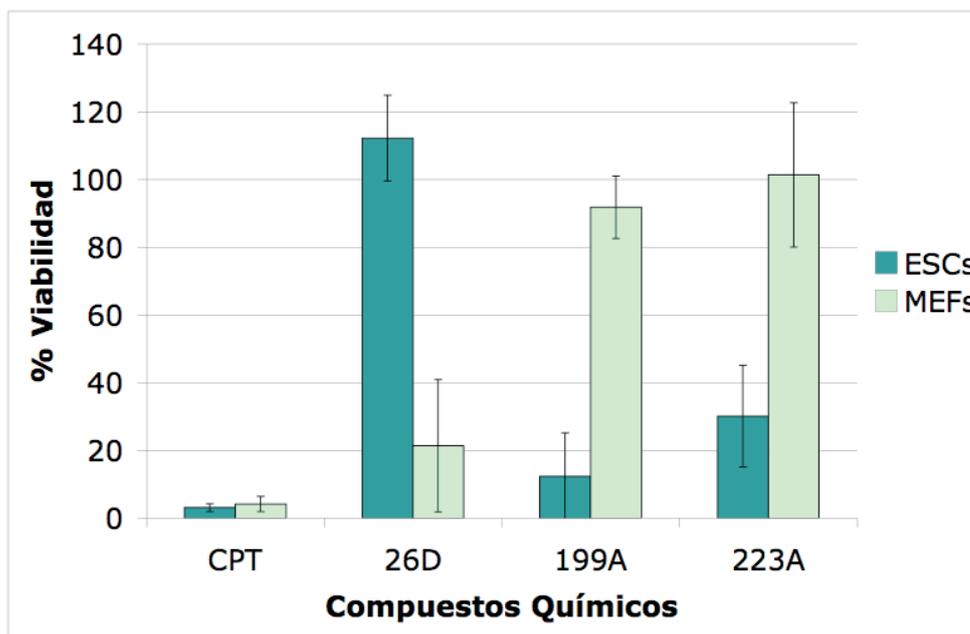
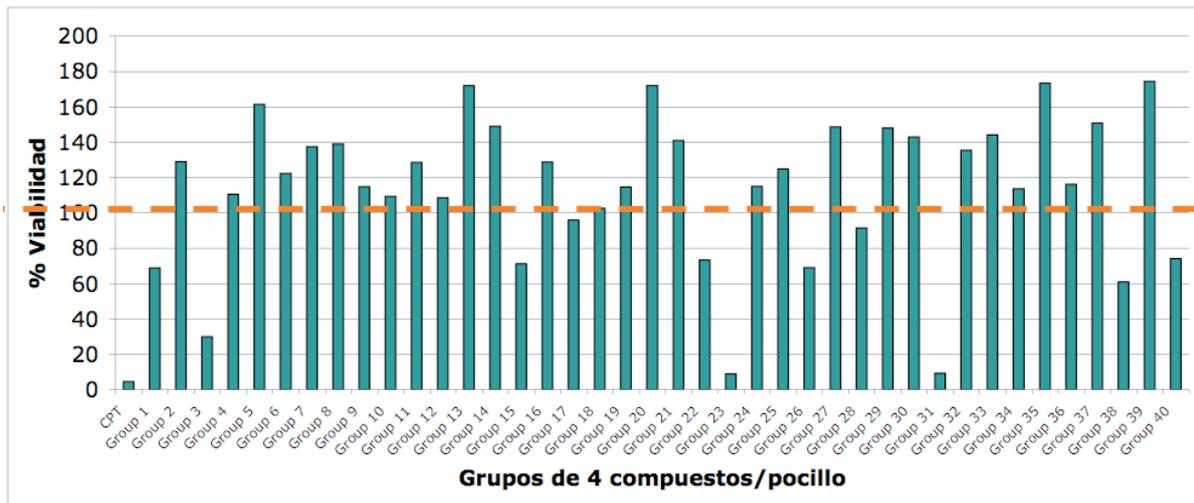
Respecto a la parte del proyecto relacionada con la muerte celular, hemos identificado compuestos químicos que matan selectivamente a células

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 una publicación y a una solicitud de patente. Hemos identificado también otros compuestos que inducen muerte celular en células madre y compuestos que aumentan su actividad metabólica y/o proliferación, y estamos analizando en detalle algunos de estos compuestos.



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.

En colaboración con Eduardo Romanos, de la Unidad de Valoración Funcional del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud, llevamos a cabo también estudios en ratones para comprobar el efecto de algunos compuestos en el crecimiento de teratomas inducidos por inducción subcutánea de células madre.



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).

Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular

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

Además del investigador principal, José A. Carrodegua, en el grupo ha trabajado una investigadora postdoctoral financiada por el Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (I+CS) y por el BIFI, la Dra. Celia Conesa, quien ha trabajado en el proyecto de diferenciación y apoptosis en células madre. Junto a ella, ha trabajado Verónica Tomey, quien ha finalizado un Máster trabajando en este proyecto. Actualmente continúa esta línea de investigación otra estudiante de Máster, Patricia Martínez, y un estudiante de doctorado, Alan Vígueras. En el proyecto de PSAP trabajan Angélica Ospina Correa, quien defenderá su tesis doctoral en breve, inicialmente financiada por el Banco Santander/Universidad de Zaragoza y posteriormente por el BIFI 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. Hemos comenzado una colaboración con la Dra. Nibedita Lenka, de India, como se ha indicado anteriormente. Colaboramos también con Eduardo Romanos, de la Unidad de Valoración Funcional del I+CS, en lo relativo a ensayos de compuestos en ratones y con Alba de Martino, en la Unidad de Anatomía Patológica del I+CS.

Colaboramos también con los Dres. Luis Fernández e Ignacio Ochoa, 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.

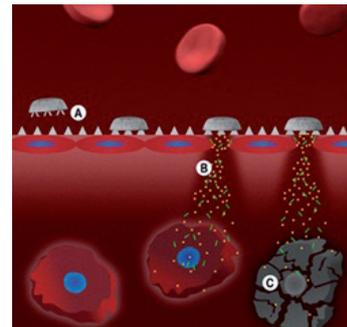
Drug Delivery

Drug delivery es el método o proceso de administración de un compuesto farmacológico para alcanzar un efecto terapéutico en humanos o animales. Las tecnologías de drug delivery modifican el perfil de liberación del fármaco (absorción, distribución, y eliminación) en beneficio de la mejora de su eficacia y seguridad, además de evitar inconvenientes a los pacientes y hacer más cómodo su utilización. La liberación de las drogas puede basarse en difusión, degradación, y mecanismos de afinidad. Las rutas de administración más comunes incluyen preferentemente las vías no invasivas como peroral (a través de la boca), tópica (piel), transmucosal (nasal, bucal/sublingual, vaginal, ocular y rectal) y rutas de inhalación.



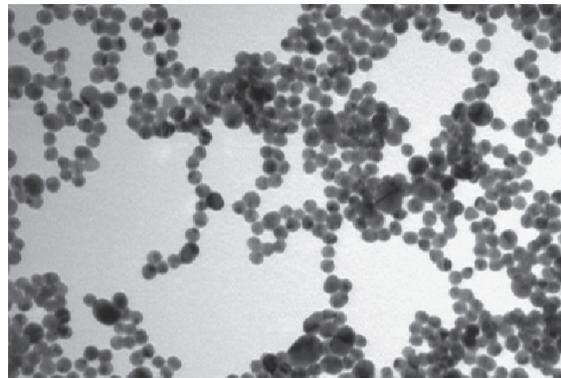
Muchos medicamentos como péptidos, proteínas, anticuerpos, vacunas y drogas basadas en genes, generalmente no pueden ser utilizados utilizando estas rutas ya que pueden ser susceptibles de degradación enzimática o puede que no sean incorporadas al sistema circulatorio a una concentración terapéuticamente efectiva debido a su tamaño molecular y carga. Por esta razón muchos fármacos basados en proteínas y péptidos han de ser distribuidos mediante inyección (por ejemplo, muchas inmunizaciones en las que han de liberarse proteínas).

Los esfuerzos actuales en el área de drug delivery incluyen el desarrollo de liberación dirigida en el que el fármaco sólo es activo en una zona concreta del cuerpo (por ejemplo, tejido cancerígeno) y las formulaciones son de liberación sostenida en las que el fármaco se libera durante un cierto periodo de tiempo de manera controlada.

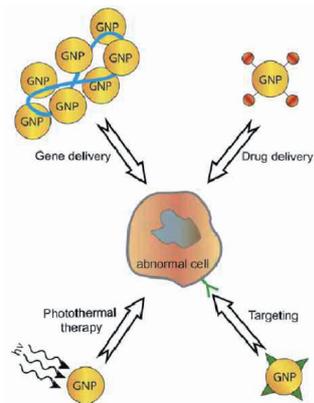


Para alcanzar una eficiente liberación dirigida, el sistema diseñado debe evitar los mecanismos de sistema de defensa del paciente y llegar a su pretendido sitio de acción. Tipos de formulaciones de liberación sostenida incluyen liposomas, microesferas cargadas biodegradables y polímeros conjugados con fármacos.

En este sentido, las nanopartículas (NP) en biomedicina representan una tecnología prometedora para el transporte y liberación de fármacos. Hay muchas posibilidades de funcionalización de la superficie de las NP y gracias a esta versatilidad, se pueden desarrollar diferentes estrategias para incluir fármacos en ellas (permitiendo a las NP ir mayoritariamente al lugar de acción.)



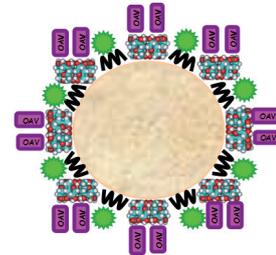
Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular



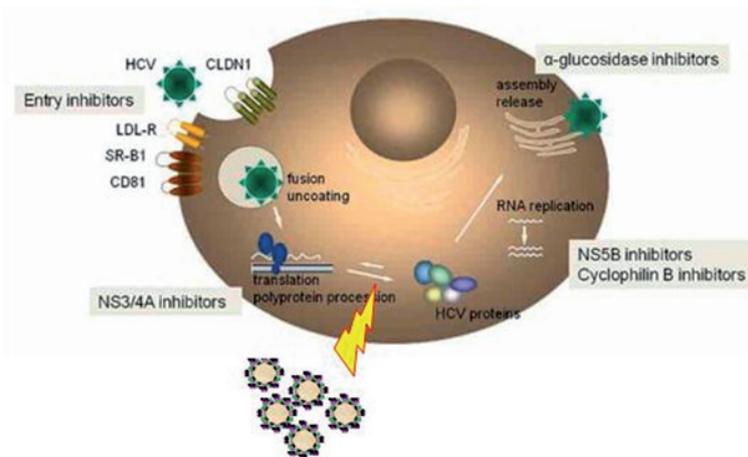
El actual proyecto que se lleva a cabo en esta línea de investigación, representa una nueva estrategia para incluir algunos compuestos antivirales efectivos frente al virus de la hepatitis C, previamente desarrollados en este grupo, mediante el uso de partículas de oro funcionalizadas (AuNP). Estas AuNPs pueden reconocer selectivamente a las células infectadas donde el fármaco debe ser liberado preferentemente.

De esta manera los efectos adversos debidos a la distribución sistémica se verán reducidos y compuestos activos in vitro que no lo sean in vivo dada su deficiente absorción

o internalización, podrán utilizarse como fármacos utilizando este sistema.



AuNPs serán modificadas utilizando algunas moléculas que puedan unir fármacos actuando así como "cestas portadoras". Los mecanismos de unión están dirigidos por el comportamiento hidrofóbico del fármaco y no está basado en una reacción concreta, con lo que sólo debe de optimizarse el tamaño de esta "cesta portadora". Esta es la razón por la que se puede considerar como una estrategia general válida para muchos tipos de compuestos. En trabajos previos realizados en el grupo, se identificaron varios compuestos (OAV) que inhibían eficientemente a una reconocida diana terapéutica del virus de la hepatitis C (VHC), la proteasa NS3 y que son susceptibles de ser incluidos en las AuNPs.

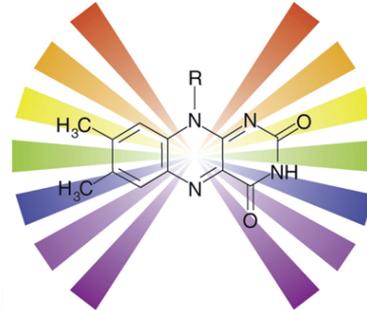


Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology

El mantenimiento de las funciones celulares depende de diversas rutas metabólicas que implican procesos de oxido-reducción mediados por proteínas, enzimas y coenzimas. Las flavoproteínas son componentes comunes de estas cadenas en todo tipo de organismos debido a su capacidad única

para conectar procesos de dos electrones con procesos de un único electrón. Su cofactor, FMN o FAD, es un agente redox que al unirse a la proteína puede existir en tres estados: oxidado (quinona), reducido por un electrón (semiquinona), y reducido por dos electrones (hidroquinona). Su versatilidad in vivo sólo puede entenderse considerando las flavoproteínas como un todo, ya que sólo actúan como cofactores

- Producción de energía
- Reacciones de óxido-reducción
- Emisión de luz
- Biodegradación
- Oxigenación
- Otras reacciones no redox

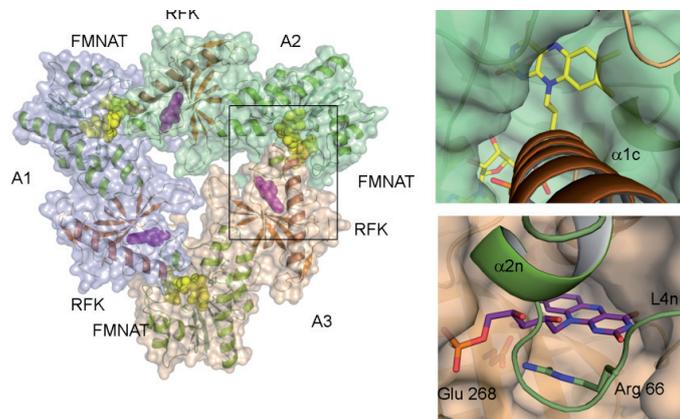


- Remodelación de la cromatina
- Reparación del DNA
- Apoptosis
- Plegamiento de proteínas
- Detoxificación
- Desarrollo neuronal
- Biosíntesis

eficientes cuando su reactividad se ajusta en el entorno proteico. Por tanto, los procesos mediados por flavoproteínas son altamente específicos con respecto a las parejas redox y a las reacciones en que participan, pudiendo considerarse las flavoproteínas sofisticados instrumentos moleculares que utilizan el reconocimiento molecular para controlar procesos de oxido-reducción. El objetivo de nuestro grupo es incrementar la utilización de flavoproteínas como herramientas biotecnológicas o terapéuticas. Ello requiere comprender los factores que les proporcionan su versatilidad, así como los mecanismos de los procesos en que participan. Para ello, combinamos el uso de herramientas de bioquímica y biofísica clásicas con métodos teóricos en la investigación de varios sistemas dependientes de flavoenzimas.

Biosíntesis de cofactores flavínicos: la FAD sintetasa de procariontas como potencial diana farmacológica

La riboflavina (RF, Vitamina B2) es de novo sintetizada por plantas, levaduras y bacterias, pero su captación es esencial para la nutrición humana y la alimentación animal. Todos los organismos son capaces de transformarla, primero en FMN y luego en FAD, por la acción secuencial dos actividades: una ATP:riboflavina quinasa (RFK) y una ATP:FMN adenililtransferasa (FMNAT). Sin embargo, mientras que los eucariotas utilizan dos enzimas diferentes para la producción de FMN y FAD, los procariontas dependen de una única



Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular

enzima bifuncional, la FAD sintetasa (FADS). La deficiencia de estas actividades impide el ensamblaje de flavoproteínas esenciales, causando acumulación de las apoproteínas que son incapaces de realizar sus funciones biológicas. Cambios en los niveles de estas actividades causan diversas alteraciones celulares, sugiriendo que estas proteínas están también involucradas en diversas funciones celulares. Así; pacientes con esclerosis lateral amiotrófica presentan una disminución considerable de la expresión de ambas proteínas; la sobreexpresión de RFK incrementa el nivel de FMN, FAD y glutatión, la actividad antioxidante en la célula y la supervivencia de células de cáncer de próstata; y, la RFK interviene en procesos de transducción de señales en la defensa celular dependiente factor de necrosis tumoral. Se han identificado características moleculares diferenciales entre los componentes enzimáticos implicados en la producción de FMN y FAD en procariotas y eucariotas. Esto ha convertido a la FADS en una potencial diana terapéutica, y su inhibición selectiva aparece como un posible tratamiento de enfermedades producidas por patógenos. La primera etapa en la exploración de esta posibilidad consiste en comprender la relación estructura-función estas enzimas, pero especialmente en la procariota. En esta línea, utilizamos la FADS de *Corynebacterium ammoniagenes* como modelo de patógeno. Hemos constatado la falta de homología entre el módulo de la FADS responsable de la actividad FMNAT y las enzimas monofuncional en mamíferos. Nuestros datos más recientes apuntan a que la FADS requiere una reorganización estructural mucho más compleja del módulo RFK que la proteína de mamíferos para catalizar esta actividad. Finalmente, hemos descrito una organización cuaternaria de la FADS de *Corynebacterium ammoniagenes* posiblemente implicada en la homeostasis de las flavinas en células procariotas.

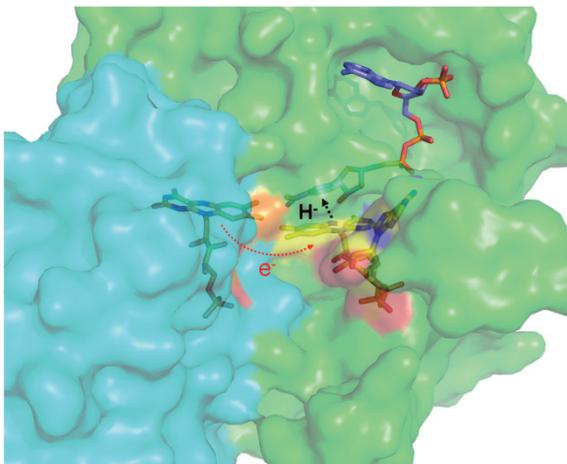
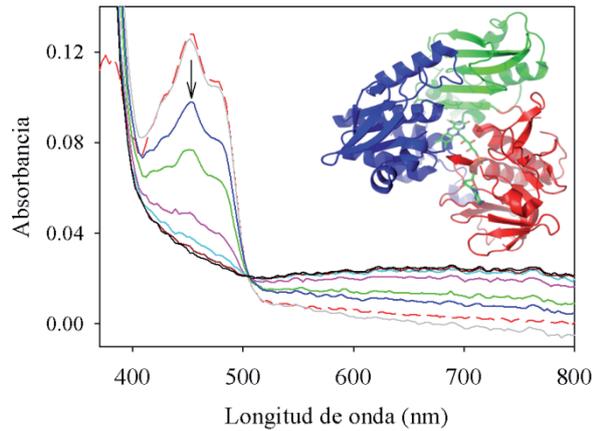
El factor de inducción de apoptosis (AIF)

Los organismos multicelulares han desarrollado unos complejos mecanismos con objeto de eliminar células potencialmente peligrosas, la apoptosis. La desregulación por supresión de este mecanismo está implicada en un número importante de procesos cancerígenos. En la regulación de este proceso están involucradas una familia de cisteín proteasas (caspasas), pero también aparece un mecanismo alternativo que implica al factor de inducción de apoptosis (AIF). AIF es una flavoenzima mitocondrial presente en todos los reinos primarios que comparte homología con diferentes reductasas. En mitocondrias intactas, AIF presenta una actividad NADH-reductasa a través de su cofactor FAD que también se ha relacionado con la estabilidad de los complejos I y III de la fosforilación oxidativa. Sin embargo, no está claro ni su papel como reductasa, ni el mecanismo por el que genera estabilidad en los complejos mitocondriales. Por otro lado, cuando la mitocondria reciben un estímulo apoptótico, AIF se transloca al núcleo, donde produce cromatinolisis. Existe cierta controversia sobre la relación entre estas dos funciones de AIF, ya que su estado redox influencia su conformación y, por extensión, su función pro-apoptótica. Por tanto, el estudio de su actividad reductasa a nivel molecular resulta clave para entender sus funciones. El interés en el diseño de nuevas terapias para modular moléculas claves que participan en apoptosis independiente de caspasas ha aumentado en los últimos años, convirtiendo a AIF en una potencial diana para tratar algunos trastornos patológicos en los que provoca un defecto o exceso de apoptosis. Ya que una de las posibilidades de modulación de la función pro-

apoptótica de AIF es regular su actividad redox, nuestra investigación en AIF humana pretende dar respuestas a varias de las preguntas relacionadas con los mecanismos moleculares ligados a los procesos de oxido-reducción en los que AIF participa en mitocondrias y núcleos.

Transformación de energía dependiente de flavoproteínas en fotosíntesis

Durante la fotosíntesis, la energía luminosa se convierte en energía química mediante el empleo de una cadena de transferencia de electrones donde intervienen varias proteínas y que requiere de la producción de una serie de interacciones moleculares transitorias de vida corta. En esta cadena, el fotosistema I (PSI) cede electrones a la ferredoxin (Fd) y, a continuación, dos moléculas de Fd transfieren estos electrones, uno por uno, a la flavoenzima ferredoxina-NADP⁺ reductasa (FNR) que los utiliza para catalizar la reducción de NADP⁺. En deficiencia de hierro, algunas algas y cianobacterias, como *Anabaena*, sintetizan otra flavoproteína, flavodoxina (Fld), que sustituye a Fd. El crecimiento de dichos organismos está limitado por la disponibilidad de hierro en muchas partes de los océanos, confiriendo a esta cadena un papel central en productividad global fotosintética. Aunque la principal función biológica de este sistema es la producción de poder reductor en forma de NADPH, in vivo el proceso es reversible. Por otro lado, aunque la función fotosintética fue la primera relacionada con la FNR, flavoproteínas con actividad FNR se han descrito en cloroplastos, bacterias fototrópicas y heterotróficas, mitocondrias de animales y levaduras, y apicoplastos. Por tanto, el estudio del flujo de electrones en sentido fotosintético y no fotosintético en *Anabaena* fue elegido por nuestro grupo como modelo para comprender los



parámetros que determinan el mecanismo catalítico en enzimas de la familia de la FNR. En los últimos años, hemos contribuido a describir las características estructurales que determinan los aspectos claves de los mecanismos de interacción y transferencia de electrones entre los componentes de esta cadena. Actualmente, estamos prestando especial atención al estudio de la transferencia de hidruro entre FNR y el coenzima. A pesar de estar disponibles diferentes estructuras cristalográficas para la interacción FNR:NADP⁺, ninguna de ellas refleja el complejo catalíticamente competente. Recientemente, la combinación

Investigación / Bioquímica y Biología Molecular y Celular

de simulaciones de dinámica molecular QM/MM con estudios experimentales nos ha permitido producir un modelo estructural de este complejo. El amplio conocimiento de este sistema también nos permite su utilización en el rediseño de las funciones de las proteínas implicadas. Comprender cómo el entorno proteico modula el potencial de reducción de la flavina nos ha permitido producir flavoproteínas con propiedades de oxido-reducción "a la carta". Por otro lado, uno de los retos más interesantes es el cambio de la especificidad de una enzima por el coenzima, donde la utilización como modelo de la FNR de Anabaena ha producido resultados interesantes.

Colaboraciones en otros sistemas dependientes de flavoenzimas

NADPH-flavodoxina (ferredoxina) reductasas (FPR) de bacterias: En colaboración con los grupos del Dr. E. Ceccarelli y N. Cortez, de la Universidad Nacional de Rosario, Argentina, estamos llevando a cabo un estudio comparativo de enzimas bacterianas y fotosintéticas. En muchas bacterias, estas enzimas son esenciales o están implicadas en la respuesta al estrés oxidativo y, por tanto, pueden ser dianas para el tratamiento de infecciones causadas por patógenos.

Oxidasa: la aril-alcohol oxidasa: En colaboración con el grupo del Dr. Martínez, Centro de Investigaciones Biológicas, CSIC, Madrid, estamos caracterizando exhaustiva a nivel químico y molecular el mecanismo de la flavoenzima extracelular oxidasa aril-alcohol. Esta enzima está implicada en la degradación de lignina, un proceso fundamental para el reciclaje del carbono fijado en los ecosistemas terrestres.

Una cadena de transferencia de electrones dependiente de flavoproteínas regula la biodegradación de tetralina: En colaboración con F. Reyes, Universidad Pablo Olavide, Sevilla, estamos describiendo el funcionamiento de la cadena de transferencia de electrones en la que participa ThnY, un flavoenzima activadora de la expresión de genes implicados en la biodegradación de tetralina.

Miembros del grupo durante 2011

Milagros Medina, Catedrática de Universidad
Marta Martínez, Profesora Titular de Universidad
Patricia Ferreira, Profesora Ayudante Doctor
Carlos Gómez-Moreno, Catedrático de Universidad
Ana Serrano, Técnico Especialista
Beatriz Herguedas, Becaria Predoctoral
Isaías Lans, Becario Predoctoral
Sonia Arilla, Becaria Predoctoral
Ana Sánchez, Becaria Predoctoral
Raquel Villanueva, Becaria Predoctoral

4.2. Biofísica

El propósito principal de esta área es el estudio estructural y funcional de proteínas con relevancia médica o tecnológica, con el objetivo de desarrollar compuestos moduladores de función. Dentro de esta área existen varios grupos de trabajo, a continuación se hace una descripción de cada uno de ellos.

Glycosyltransferases and hydrolases involved in human diseases

En este grupo se usa como herramienta principal la cristalografía de rayos X (usada para resolver la estructura tridimensional de proteínas) complementada con enzimología, estudios de inhibición enzimática, etc, para estudiar los procesos moleculares de enzimas involucradas en la síntesis, modificación y degradación de glicoconjugados, oligo y polisacáridos (Hurtado-Guerrero R et al, *Biochemical Journal*, 2010; Hurtado-Guerrero R et al, *Journal of Biological Chemistry*, 2009; Hurtado-Guerrero R et al, *Current Opinion in Structural Biology*, 2008; Hurtado-Guerrero R et al, *EMBO J*, 2008).



Durante este año se ha trabajado en proyectos tan diversos como la glicosilación de Notch, descubrimiento de compuestos frente a glicosiltransferasas esenciales en patógenos fúngicos y el estudio de glicosiltransferas involucradas en distrofías musculares. También se ha estudiado las coordenadas de reacción para elucidar el mecanismo catalítico y de esta manera desarrollar nuevas estrategias para el desarrollo de fármacos con fines terapéuticos.

Parte de estos proyectos son en colaboración con grupos de síntesis orgánica (Dr Pedro Merino y Tomás Tejero) y grupos de bioquímica (Dr Javier Arroyo y Lourdes Planelles)

Molecular Dynamics and Electronic Structure

En el grupo de "Molecular Dynamics and Electronic Structure" se han estudiado desde un gran número de ángulos las teorías físicas y químicas, así como los métodos numéricos asociados, que permiten el estudio teórico de sistemas moleculares con poder predictivo y alta precisión. Entre la gran multitud de líneas perseguidas por los miembros del grupo, cabe destacar las siguientes: Análisis teóricos y cálculo numérico con DFT de sistemas moleculares de interés en ciencia de materiales y catálisis. Fundamentos y aplicación a moléculas y nanoestructuras de métodos basados en TDDFT, con especial

Investigación / Biofísica

interés en la respuesta a irradiación por láseres de gran intensidad. Combinación de TDDFT con la teoría cuántica de control óptimo para preparar estados de la materia con valores concretos de ciertas propiedades. Estudio y diseño de nuevos métodos de dinámica molecular mixta clásico-cuántica, con especial énfasis en sistemas moleculares abiertos, y sus propiedades de equilibrio, así como su comportamiento dinámico y el uso de las herramientas de la mecánica cuántica geométrica para el análisis de este tipo de problemas. Estudio de anomalías en mecánica cuántica no relativista en los teoremas del virial, de Hellmann-Feynman, y otras identidades entre valores esperados. Cálculos de química cuántica de alta precisión en péptidos y su difusión mediante principios de datos abiertos, en formatos comunes y semánticamente enriquecidos. Estudio de la imposición de ligaduras en sistemas moleculares y su influencia en las propiedades de equilibrio de los mismos. Análisis de transporte electrónico en circuitos mesoscópicos utilizando métodos de mecánica cuántica.

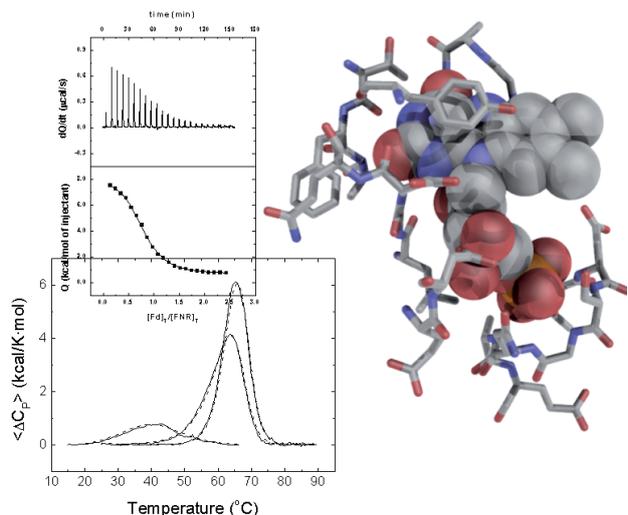
Biomolecular interactions

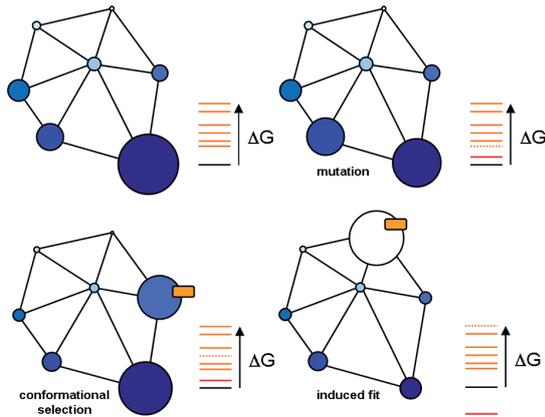
En esta línea de investigación consideramos tres aspectos, tanto básicos como aplicados, relacionados con moléculas biológicas:

- Estudio biofísico (paisaje conformacional, interacciones, función) de dianas farmacológicas mediante técnicas espectroscópicas y calorimétricas.
- Desarrollo de metodologías experimentales para el estudio de interacciones en biomoléculas.
- Identificación de compuestos bioactivos capaces de modular la función de dianas farmacológicas.

La **caracterización biofísica** de una proteína proporciona:

Información sobre el paisaje conformacional. El paisaje conformacional está constituido por el conjunto de estados conformacionales, estructural y energéticamente distinguibles, que son accesibles y están poblados de forma significativa. La distribución de las moléculas de proteína sobre estos estados conformacionales depende de las condiciones ambientales (temperatura, pH, fuerza iónica, etc.) así como de la interacción con otras biomoléculas. Además, cada estado puede presentar unas características funcionales propias. De este modo, a través de cambios en las variables ambientales y de señales bioquímicas (presencia de biomoléculas interaccionantes) se regula la conformación y la función de una determinada proteína. Esta conexión entre conformación y función constituye la base



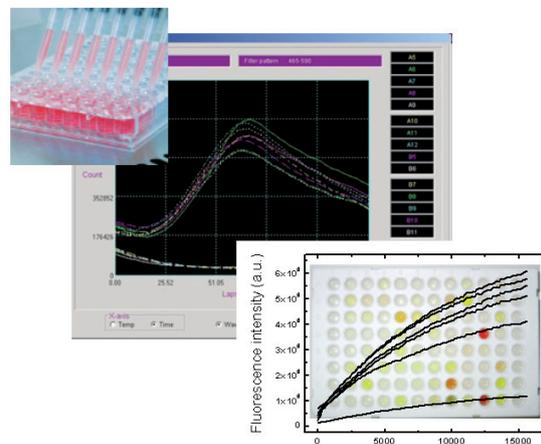
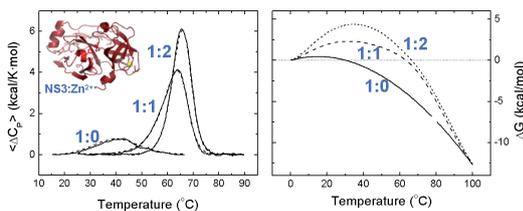


del comportamiento alostérico en proteínas: modulación y control de la conformación de una proteína (y, por tanto, de su función) mediante interacción con otras biomoléculas (iones, cofactores, inhibidores, etc.).

Información sobre función, regulación y evolución. Todas la biomoléculas ejercen una función fisiológica y dicha función siempre implica la interacción con otras biomoléculas. Asimismo, la regulación de dicha función se realiza mediante la interacción con diferentes biomoléculas. Por tanto, el estudio detallado (estructural y energético) de las interacciones de una biomolécula es fundamental para la comprensión de su función y su regulación. Y también proporciona información sobre aspectos evolutivos: la estabilización inducida por mutaciones e interacciones de estados conformacionales y funcionales alternativos poco poblados puede dar lugar a nuevas funciones en proteínas.

Información sobre las bases moleculares y energéticas de una enfermedad. La estabilización, inducida por mutaciones o interacciones, de estados parcialmente o completamente desplegados alternativos al estado nativo en una proteína puede conducir a la inactivación y/o degradación de dicha proteína, o a la formación de agregados tóxicos. El estudio biofísico de su paisaje conformacional aporta información sobre estados parcialmente desplegados que pueden ser relevantes desde el punto de vista funcional y regulador.

Información para la identificación y desarrollo de compuestos bioactivos. Tanto si se trata de una enfermedad infecciosa, en la que la inactivación de una proteína clave en el ciclo de vida del patógeno mediante un inhibidor representa una vía terapéutica, como de una enfermedad genética o metabólica, en la que la inactivación de una actividad aumentada de una proteína mediante un inhibidor o el rescate de una actividad deficiente de una proteína mediante una chaperona farmacológica representan dos vías terapéuticas, es necesario modular y controlar la actividad de una determinada proteína. Para ello es imprescindible identificar compuestos químicos, preferiblemente de

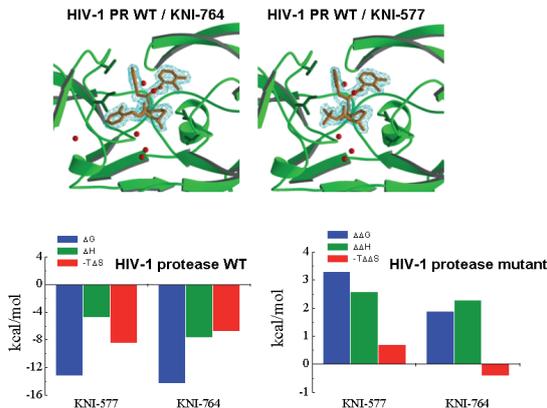


Investigación / Biofísica

bajo peso molecular, que: 1) sean capaces de interactuar con dicha proteína; 2) ejerzan una función reguladora adecuada sobre la proteína; 3) no interaccionen significativamente con otras proteínas, minimizando efectos tóxicos y secundarios; y 4) presenten buen perfil farmacocinético.

En relación a los puntos 1-3, el estudio biofísico de una diana farmacológica proporciona información relevante.

Información para la optimización de compuestos bioactivos (afinidad, selectividad, cambios conformacionales inducidos,...). El estudio biofísico de interacciones en proteínas proporciona información sobre las interacciones interatómicas relevantes (enlaces de hidrógeno, van der Waals, electrostáticas, hidrofóbicas) en las interacciones en proteínas. El reparto de la energía de Gibbs de interacción en sus



contribuciones entálpica y entrópica es un balance de dichas interacciones, ya que estos dos términos son reflejo de diferentes tipos de interacciones, específicas y no específicas. Por tanto, no sólo la afinidad de unión, sino también la disección termodinámica de la energética de interacción es relevante para conocer el

modo de interacción y abordar la optimización de parámetros tales como la afinidad y la selectividad de unión en proteínas.

Los **fenómenos cooperativos** son inherentes al comportamiento de las biomoléculas. Se pueden distinguir diferentes tipos o niveles de cooperatividad en biomoléculas, que al mismo tiempo están profundamente interrelacionados:

- **Estabilidad estructural intrínseca**

Paisaje conformacional y estabilidad intrínseca

Proteínas intrínsecamente estructuradas vs. desestructuradas

- **Acoplamiento entre plegamiento e interacción**

Cambios conformacionales acoplados a interacciones

Estabilización inducida por interacciones con ligandos

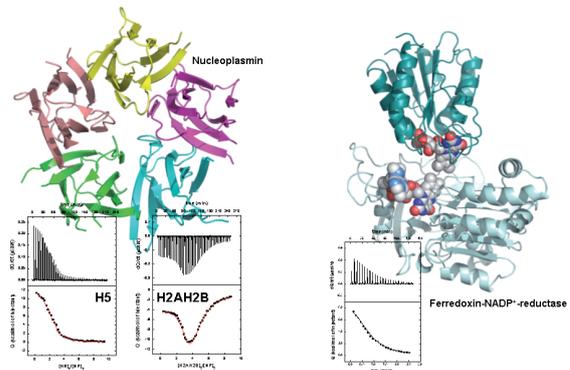
Acoplamiento fuerte y débil entre plegamiento e interacción

Ajuste inducido y selección conformacional

- **Cooperatividad de interacción**

Cooperatividad homotrópica

Cooperatividad heterotrópica



4.3. Física

Dentro del área de Física se han estudiado las siguientes líneas: materiales complejos y fusión nuclear, Redes Complejas y sociedad, Física de sistemas biológicos y Transporte y computación cuánticos.



Interdisciplinary Physics and Complex Networks

Los miembros o investigadores vinculados a la línea de investigación son, actualmente: Y. Moreno, L. M. Floría, J. G. Gardeñes, A. Arenas, A. Díaz-Guilera, A. Sánchez, J. Borge, J. Sanz, E. Cozzo, C. Gracia-Lázaro, A. Cardillo, P. Piedrahita y S. Meloni. Además, desde Septiembre de 2011 y hasta Agosto de 2012 tendremos como profesor visitante a Chengyi Xia, de la Universidad Tianjin, en China.

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:

1. Análisis de la topología de redes reales en sistemas biológicos.
2. Sistemas dinámicos no lineales acoplados a estructuras complejas para la modelación de procesos emergentes.
3. Procesos de transporte y difusión con aplicaciones en redes y tecnologías de comunicaciones.
4. Dinámica de propagación de virus y rumores explorando la analogía entre procesos tecnológicos y biológicos.

Investigación / Física

5. Fenómenos de sincronización en sistemas físicos y biológicos.
6. Surgimiento de efectos colectivos y cooperación en sistemas biológicos y fundamentalmente en entornos sociales.
7. Diferentes procesos y algoritmos de optimización.
8. Dinámica y estructura de sistemas y redes sociales online.

Específicamente, las principales tareas desarrolladas han sido las siguientes:

- 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.
- 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. Actualmente estamos estudiando la relación entre características topológicas y medidas de influencia dinámicas,

con especial interés en su aplicación al estudio de redes sociales online.

- 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).
- 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.
- 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

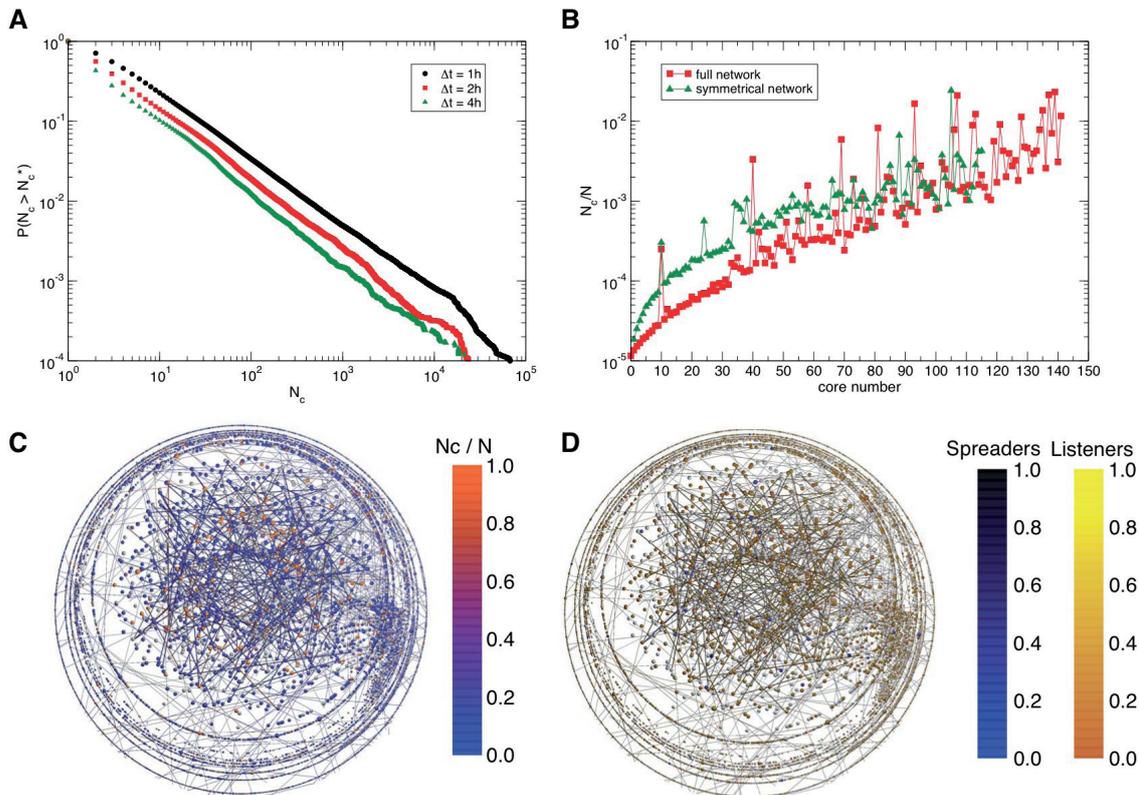
múltiples aplicaciones en sociología (dinámicas de consenso y formación de opiniones) y biología. En particular, se ha investigado la red cortical del gato y cómo la dinámica de sincronización puede revelar aspectos topológicos novedosos. También hemos demostrado analítica y numéricamente la posibilidad de una transición de fase de primer orden en redes de osciladores de fase cuyas características dinámicas están correlacionadas con las topológicas.

- Se continúan explorando la aplicación y el desarrollo de diferentes técnicas analíticas.
- 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.
- Al hilo de la experiencia adquirida en modelos teóricos de interacción social, se han estudiado redes reales de comunicación, construidas a partir de datos procedentes de conocidas redes sociales online. El análisis de tales redes nos han permitido observar la emergencia real de fenómenos críticos, así como comprender mejor los mecanismos de propagación de la información que rigen la actividad en estos sistemas. Para ello se han desarrollado algoritmos ad hoc, tanto en lo referente a la captura de datos como a su análisis.

De todos los trabajos realizados, a continuación destacamos tres de ellos, ya sea por su relevancia científica o porque han sido fruto de la colaboración con otras áreas y grupos del BIFI:

1. 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 y cómo influyen los cambios de comportamiento de la población en la evolución de la misma. Actualmente se continúa trabajando en esta línea para refinar aún más nuestros modelos implementando, además, nuevos mecanismos que tengan en cuenta la posibilidad de que diferentes enfermedades interactúen entre sí.

2. En un contexto internacional de desasosiego económico, social y político, nuestro grupo ha iniciado una línea de investigación que pretende comprender cómo las herramientas de la Web 2.0, y en especial las redes sociales, facilitan el intercambio y la formación de opiniones entre individuos. Los eventos ocurridos mayo de 2011 en España, vertebrados alrededor de la red de Twitter, han permitido al grupo no sólo estudiar un sistema social complejo real --lo cual ya es en sí mismo un avance-- sino un sistema sometido a tensiones y cambios bruscos, como consecuencia de los



sucesos acaecidos en esas semanas. Fruto de esta oportunidad se han establecido nuevas colaboraciones interdisciplinares con universidades de primer nivel internacional (Oxford, M.I.T.). Así, hemos podido determinar cómo operan los mecanismos de "reclutamiento" mediante usuarios políticamente concienciados repartidos en toda la topología y los mecanismos de centralización y difusión de la información mediante usuarios "clave" ubicados en el núcleo mejor conectado de la red, capaces de distribuir información que alcance a todo el sistema de forma eficiente y rápida (ver Figura adjunta). El acceso a datos reales multiplica los temas de investigación relevantes, que el grupo pretende continuar abordando a lo largo del 2012.

3. Aunque los resultados definitivos todavía no se han obtenido, quisiéramos mencionar por su complejidad técnica y organizativa y porque involucró a varios equipos del BIFI, el desarrollo de un experimento científico para estudiar la emergencia de la cooperación en sistemas sociales y que ha contado con la participación de 1229 estudiantes de 42 colegios e Institutos de todo Aragón. El experimento se llevó a cabo con éxito el pasado 20 de Diciembre de 2011. Este experimento, es el mayor realizado hasta el momento a gran escala y en tiempo real en el ámbito de juegos evolutivos. El estudio parte de la hipótesis de que la estructura de la población determina el nivel de cooperación entre sus individuos, para lo cual los estudiantes se han enfrentado a un modelo que es prototipo de

conflicto social, conocido como El Dilema del Prisionero. Precisamente, en este juego se pone de manifiesto que el mayor beneficio para las personas que interactúan se produce cuando ambas colaboran, pero si una colabora y otra no, ésta última tiene más beneficio. Esto, en ocasiones, activa la posibilidad de aprovecharse de la colaboración de los demás. Pero si esta tendencia se extiende, al final, nadie coopera y, por tanto, nadie obtiene beneficios. La trascendencia de este experimento es su realización a tiempo real a lo largo de tres horas entre alumnos de centros distribuidos por toda la geografía aragonesa. Además ha contado con una alta participación, ya que, hasta el momento, los mayores resultados existentes han sido obtenidos por la Universidad Carlos III de Madrid (169 participantes). Con la realización de este experimento, hemos conseguido tres objetivos: involucrar a la ciudadanía en la resolución de problemas científicos de primer nivel, divulgar la ciencia en tiempo real usando las últimas tecnologías y formas de divulgación y, ya desde el punto de vista meramente científico, dar un paso significativo para resolver un problema de investigación abierto desde hace más de 150 años.

Los resultados obtenidos a lo largo de este período se traducen en la publicación de numerosos artículos científicos (ver publicaciones). Los miembros del equipo también han sido "referees" en la evaluación de trabajos, de proyectos de investigación y de numerosas revistas especializadas. Además, las actividades del grupo han tenido eco en la prensa (tanto escrita como audiovisual) a lo largo de todo el año 2011, apareciendo en numerosas notas y reseñas de prensa. 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 artículo más citado de la historia de la Universidad de Zaragoza con más de 1500 citas, 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 4 Tesis Doctorales. 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.

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, dentro de esta línea, Ricardo López-Ruiz lleva adelante su investigación sobre Complejidad Estadística y Econofísica en colaboración con diversos investigadores: Jaime Sañudo de la Univ. de Extremadura, Xavier Calbet de EUMETSAT (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

Investigación / Física

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 2011, diferentes trabajos han sido publicados en las siguientes áreas:

- (i) Sistemas multi-agente en econofísica.
- (ii) Modelos biológicos y económicos con mappings.
- (iii) Ciclos límite en osciladores no-lineales.
- (iv) Complejidad estadística en gases y sistemas cuánticos.

Además, estas actividades han tenido eco en la prensa a lo largo de todo el año 2011, apareciendo en diversas notas de prensa, incluyendo un artículo de divulgación en la revista Investigación y Ciencia, versión española de Scientific American. También hay que mencionar que una de nuestras publicaciones en Open Access (R. López-Ruiz and J.R. Sánchez, Complexity and Stochastic Synchronization in Coupled Map Lattices and Cellular Automata, STOCHASTIC CONTROL, C. Myers (Ed.), Ch. 4, pp. 59-79, Sciyo Books, 2010) ha recibido hasta la fecha más de 4000 descargas, y que otra publicación (R. López-Ruiz, J. Sañudo, E. Romera and X. Calbet, Statistical Complexity and Fisher-Shannon Information: Applications, STATISTICAL COMPLEXITY, K.D. Sen (Ed.), Ch. 4, pp. 65-127, Springer Books, 2011) forma parte de un monográfico de la editorial Springer sobre el tema Complejidad Estadística, lo cual es una prueba objetiva de que la visibilidad de nuestros resultados está ya consolidada y directamente ya son parte del cuerpo del conocimiento y una referencia en nuestro campo de trabajo.

Physical modeling of biomolecules.

El grupo de Modelado Físico de Biomoléculas se articula en torno a tres grupos de investigación:

Grupo de Antonio Rey (Universidad Complutense de Madrid).

Se han usado simulaciones moleculares y modelos "coarse-graining" para explorar los procesos de plegamiento de proteínas. Diseñando estos modelos para analizar aspectos estructurales termodinámicos y cinéticos del proceso. La parte más importante en este diseño es el potencial de interacción que produce la estructura plegada. En este último año, se han estado utilizando potenciales basados en la estructura nativa. Se consideran los contactos presentes en la estructura nativa para definir las interacciones atractivas a lo largo de la simulación. En diferentes modelos, se han combinado estas interacciones con los potenciales de campo medio para tener en cuenta la secuencia química de la proteína, o con interacciones de enlace de hidrógeno en el "backbone" de la proteína.

Se han utilizado principalmente simulaciones de Monte Carlo con la técnica de "parallel tempering" sobre estos modelos, con en fin de analizar la transición térmica entre los estados plegado y desplegado. El trabajo contiene un fuerte componente metodológico, mediante la disección de los

diferentes aspectos físicos y matemáticos que participan en la simulación de los modelos. De esta manera, hemos sido capaces de crear modelos que se pueden utilizar para aprender sobre los procesos de plegamiento de proteínas en diferentes sistemas interesantes: plegamiento de dos estados y "downhill"; proteínas con intermediarios termodinámicos; proteínas anudadas; proteínas sometidas a presión, o la competencia entre el plegamiento de proteínas y agregación.

Grupo de Pierpaolo Bruscolini (BIFI).

Nuestro enfoque es el de la aplicación de modelos "coarse-graining" y métodos de la mecánica estadística al diseño de proteínas, el problema del plegamiento de proteínas, y a la secuenciación de las mismas, buscando el mejor equilibrio entre la precisión cuantitativa de las predicciones (que aumenta con la complejidad del modelo) y la viabilidad en términos de coste y tiempo de computación (que disminuye con la sencillez del método).

En este marco, nos hemos acercado al problema de plegamiento de proteínas con los modelos de redes ("Gaussian Network Models") y modelos binarios como el propuesto por Finkelstein y colaboradores (PNAS, 96,11299, 1999) y especialmente el propuesto por Wako y Saito y rediscutido por Muñoz y Eaton (WSME, Wako, Saito, J.Phys.Soc.Japan, 44,1931,1978; Muñoz, Eaton PNAS, 96,11311,1999), por el que existe una solución exacta (PRL, 88, 258101, 2002). En particular, se ha desarrollado este último modelo para proporcionar una descripción cuantitativa de los datos calorimétricos experimentales, y se está trabajando hacia la generalización del mismo, para ajustar los datos de diferentes técnicas experimentales.

Hemos abordado el diseño de proteínas como un proceso de optimización, manteniendo fijo el "backbone", sobre la elección de los aminoácidos y sus rotámeros a lo largo de la secuencia de la proteína. Nuestros resultados sugieren que es importante tener en cuenta la entropía para el diseño óptimo de secuencias, y que esas secuencias optimizadas con respecto a la energía libre no puede ser previstas fácilmente por simple inspección la lista ordenada de las secuencias optimizadas de acuerdo a la energía. Estamos interesados en perfeccionar el método, utilizando los diferentes campos de fuerza de la energía de los rotámeros.

En cuanto a la secuenciación de proteínas se refiere, estamos interesados en la secuenciación "de novo" por espectrometría de masas. Hemos propuesto un nuevo algoritmo, T-NovoMS, que se basa en la aplicación de la secuencia de un péptido a la termodinámica de un sistema unidimensional, con el espectro experimental MSMS actuando como un campo externo.

Grupo de Fernando Falo (Facultad de Ciencias):

Utilizamos modelos mesoscópicos a distintas escalas para tratar diversos sistemas biológicos:

- Transporte mediante motores moleculares. Hemos investigado el transporte de cargos mediante equipos de múltiples motores procesivos (kinesinas y dineínas). Nuestro trabajo se ha centrado en el estudio de la influencia de las interacciones entre motores en los distintos procesos. También hemos analizado este efecto en la competencia entre motores de distinta polaridad ("tug-of-war").
- Traslocación de polímeros; el paso de polímeros a través de membranas es un

Investigación / Física

fenómeno importante tanto desde el punto de vista biológico como tecnológico. Estamos desarrollando modelos de translocación que funcionan mediante fuerzas dependientes del tiempo (deterministas o estocásticas) que simulan un motor molecular. Proponemos aplicar estos modelos al problema de empaquetamiento del DNA en bacteriófagos.

- Interacción proteína-DNA. Hemos desarrollado un modelo mesoscópico de desnaturalización del DNA (Phys. Rev. E, 82, 031916 (2010)) basándonos en los modelos de Peyrard-Bishop-Dauxois. A partir de este modelo se ha propuesto un potencial de interacción proteína-DNA que permite localizar los sitios de unión y regulación en promotores.

El estudio de todos estos modelos se realiza de forma exhaustiva mediante técnicas de simulación numérica, principalmente mediante dinámica molecular de Langevin.

Spin glasses

El grupo de "Spin Glasses", coordinado por Alfonso Tarancón Lafita, se encarga del estudio teórico de los vidrios de espín, paradigma de los sistemas complejos. El grupo lo componen investigadores de varias universidades: de la Universidad de Zaragoza participan Alfonso Tarancón Lafita, Denis Navarro, David Iñiguez, Marco Guidetti, Sergio Pérez Gaviro, José Miguel Gil Narvi3n, Jorge Monforte Garc3a y Raquel 3lvarez Ba3os. De la Universidad Complutense de Madrid, Antonio Mu3oz-Sudupe, Luis Antonio Fern3ndez, V3ctor Mart3n-Mayor, David Yllanes Mosquera y Beatriz Seoane Bartolom3. De La Universidad de Extremadura (Badajoz), Juan Jes3s Ru3z Lorenzo y Antonio Gordillo Guerrero. De la Universidad "La Sapienza" de

Roma, Giorgio Parisi, Enzo Marinari y Andrea Maiorano. Y de la Universidad de Ferrara, Raffaele Tripiccion, Fabio Schifano y Filippo Mantovani.

En las simulaciones llevadas a cabo se hace uso del modelo de Edwards-Anderson, modelo que de forma simple integra inteligentemente los dos ingredientes fundamentales inherentes a estos sistemas: la aleatoriedad y la frustraci3n. Mediante simulaciones de tipo Monte Carlo, que permiten actualizar los espines, se hace evolucionar el sistema.

Dichos estudios se realizan tanto fuera del equilibrio como en equilibrio, en el punto cr3tico y en la fase de baja temperatura (fase "spin glass"), necesitando un elevado n3mero de muestras y diferentes tama3os de ret3culo lo suficientemente grandes para tratar de evitar los efectos de tama3o finito. Esto conlleva una demanda muy elevada de tiempo de computaci3n. S3lo clusters de ordenadores como "Marenostrium" (Barcelona) o "Caesaraugusta" (Zaragoza) pertenecientes a la RES (Red Espa3ola de Supercomputaci3n), "Terminus" (Bifi, Zaragoza) o superordenadores como Janus (Bifi, Zaragoza) son capaces de satisfacer tal demanda de CPU.

Gracias a los clusters del Bifi y Caesaraugusta, se han estudiado las propiedades cr3ticas del modelo de Heisenberg-Edwards-Anderson en tres dimensiones, en presencia de una anisotrop3a. Observando el comportamiento de las fluctuaciones sample a sample de la distribuci3n de la probabilidad del overlap, se ha ampliado el estudio en equilibrio del modelo de Ising-Edwards-Anderson en equilibrio a baja temperatura, usando los datos en equilibrio de una campaa anterior de Janus. Tamb3en se ha finalizado la campaa de Janus dedicada al

estudio del modelo de Ising-Edwards-Anderson en cuatro dimensiones en presencia de un campo magnético externo, obteniendo resultados de gran impacto que esperamos sean publicados en Nature Physics. Asimismo se está finalizando actualmente otra de las campañas de Janus, dedicada al estudio del modelo anterior, esta vez en tres dimensiones. Actualmente se está comenzando una nueva campaña de simulación del modelo de Ising-Edwards-Anderson para reproducir el protocolo experimental de temperaturas conocido como "dip-experiment exchange temperature protocol".

4.4. Computación

El área de computación del Bifi cuenta con líneas de investigación donde se trabaja con diversos paradigmas emergentes en computación: HPC, GRID, Computación Voluntaria. A continuación detallamos lo destacado en cada una de ellas durante el año 2011.

High Performance Computing. HPC

El grupo HPC ("High Performance Computing") del BIFI se dedica principalmente a las siguientes tareas:

- Investigación en Computación de Altas Prestaciones. El grupo participa en proyectos de investigación nacionales y europeos que estudian las nuevas tendencias y tecnologías alrededor del mundo de la supercomputación.
- Mantenimiento y soporte de las infraestructuras de supercomputación del BIFI. El personal del grupo cuenta con una larga experiencia en la gestión (operación, monitorización, contabilidad...) y soporte a usuarios de grandes sistemas de cálculo, así como en el diseño y mantenimiento de CPDs. Actualmente gestionamos 2 CPDs (200m² en total) y 2 grandes sistemas de cálculo: TERMINUS y CAESARAUGUSTA.
- Ofrecer un servicio de cálculo y almacenamiento para investigadores del Instituto y externos. Los sistemas de cálculo que gestionamos ofrecen anualmente varios millones de horas de cálculo y cientos de terabytes de almacenamiento, tanto a los investigadores del BIFI y sus colaboradores, como a usuarios externos a través de la Red Española de Supercomputación y del programa Hosted Clusters.
- Otros servicios: porting, optimización y paralelización de aplicaciones. Como servicio adicional al soporte básico ofrecido en el uso de nuestros supercomputadores, colaboramos con nuestros usuarios para ayudarles a migrar y hacer más eficientes sus códigos en el entorno HPC.
- Formación y divulgación. El grupo participa activamente en este tipo de actividades, impartiendo cursos y tutoriales, dirigiendo PFCs, tutorando prácticas en empresa, gestionando visitas guiadas a nuestras instalaciones...



Responsable y miembros

Responsable: Guillermo Losilla Anadón
Miembros: Arturo Giner Gracia
Javier Alcázar Luque
Pedro García Martínez

Proyectos

- **Red Española de Supercomputación**

A finales de 2006, la Universidad de Zaragoza se unió a la Red Española de Supercomputación (RES), albergando CAESARAUGUSTA, uno de los 8 supercomputadores distribuidos por España con núcleo en MareNostrum (BSC-CNS) y conectados a través de enlaces de alta velocidad, que busca dar respuesta a las crecientes necesidades de computación de la investigación en España. CAESARAUGUSTA se encuentra instalado en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza y es gestionado por el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI). Junto con el resto de superordenadores que forman la RES, está catalogado por el MICINN como "Instalación Científica y Tecnológica Singular" (ICTS).

CAESARAUGUSTA provee cerca de 4 millones de horas de CPU anualmente, que se reparten en periodos cuatrimestrales entre las actividades de investigación solicitantes. Además de brindar un servicio de cálculo de primer nivel a la comunidad científica española, en el marco de la RES se realizan actividades de formación y divulgación (jornadas de usuarios, workshops, seminarios técnicos y científicos...) así como proyectos internos de coordinación y de mejora de la infraestructura.

Más información: <http://www.res.es>

- **SCC-Computing**

SCC-Computing ("Strategic Collaboration with China on super-computing based on Tianhe-1A") es un proyecto europeo FP7 que persigue establecer una colaboración estratégica con China en el desarrollo de la próxima generación de supercomputadores más allá de Tianhe-1A (el más potente del mundo en la lista del top500 de Noviembre de 2010).

El objetivo del proyecto es explorar las nuevas tendencias en computación y buscar ideas innovadoras para: (i) lanzar nuevas propuestas en el marco del EU-FP8 y los Programas Nacionales Chinos como el 863, 973 y la Chinese Natural Science Foundation; (ii) producir influyentes inputs para la planificación estratégica de los programas de investigación de la Unión Europea y China; (iii) establecer una colaboración en investigación a largo plazo entre Europa y China.

El BIFI participa en el proyecto aportando una batería de tareas de cálculo típicas, que permitan la evaluación de la arquitectura de Tianhe-1A, tratando de identificar limitaciones y nuevas oportunidades tanto desde el punto de vista de las aplicaciones como desde el de la arquitectura de computadores.

Más información: <http://mts.tju.edu.cn/>

Investigación / Computación

Grid & Cloud Computing

El grupo de Computación Grid se dedica principalmente a las siguientes tareas:

- Investigación en Computación Distribuida:
 - Participación en proyectos nacionales e internacionales de temática grid y en foros de discusión de integración de estas tecnologías desde la investigación hacia la empresa.
- Mantenimiento y soporte de las infraestructuras AraGrid y PireGrid , que entre ambas cuentan con más de 2000 cores de cálculo y alrededor de 100 TB de almacenamiento.
 - Éstas infraestructuras no sólo proveen recursos a investigadores aragoneses, sino que sirven de banco de pruebas para PYMES de España-Francia, que quieren adoptar estas tecnologías en su modelo de negocio.
 - Además proveen recursos compartidos con las iniciativas Ibergrid (España-Portugal) y con la iniciativa Grid más grande a nivel mundial , EGI (European Grid Initiative), en la cual tenemos el papel de proveer los recursos centrales de la VO de FUSION, así como dar soporte técnico a dicha comunidad a nivel internacional.
- Dado que el uso de una infraestructura grid es algo complejo al inicio, damos soporte y orientación en la adaptación necesaria para que las aplicaciones funcionen en este entorno distribuido.
- Formación y divulgación. El grupo participa activamente en este tipo de actividades, impartiendo cursos, organizando charlas y reuniones con empresas, así como la difusión en todos y cada uno de los proyectos en los que participa.

Responsable y miembros

Responsable: Rubén Vallés
Miembros: Jaime Ibar
Patricia Santos

Proyectos

AraGrid

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

Esta red sirve para dar servicio de cálculo a los investigadores, acercar las empresas a esta tecnología.

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 Facultad de Ciencias (Zaragoza-Campus San Francisco), EPSH en Huesca y EUPT en Teruel.

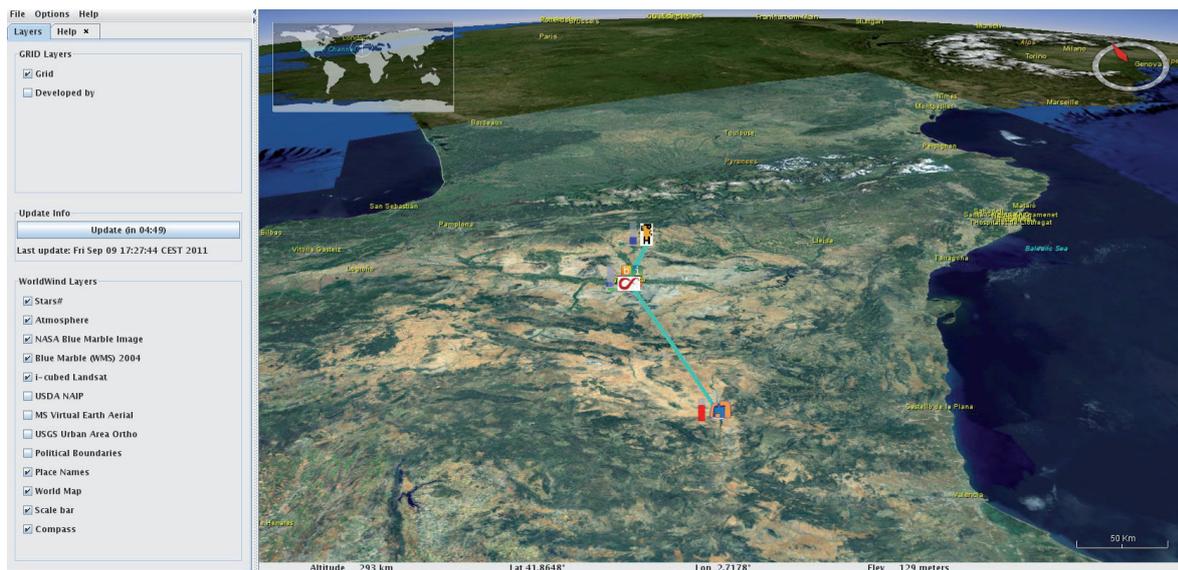
Cada uno de los nodos dispone de aproximadamente 480 cores de cálculo para un total de unos 2000 en toda la infraestructura, así como un total de unos 100TB de almacenamiento distribuido.

La infraestructura se encuentra completamente funcional desde Abril 2011 y une sus recursos a 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>



Acto de presentación de AraGrid en Teruel (3 Mayo 2011)



Mapa de recursos AraGrid

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).

Investigación / Computación



PireGrid presenta colaboraciones grid y tecnologías cloud en el casino de Toulouse



PireGrid participa en el Foro de Proyectos de la CTP en Toulouse

Durante 2011 la colaboración con empresas ha sido muy activa, destacando colaboraciones con varias PYMES de la zona de Aragón, Pau y Toulouse de donde son los principales socios técnicos del proyecto. Se han celebrado charlas y reuniones explicando las tecnologías grid, así como incluyendo las tecnologías cloud al nuevo catálogo de recursos por su creciente demanda empresarial. En este último punto, el BIFI realiza la labor de colaboración inicial para salvar ese salto de acceso a las nuevas tecnologías.

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 pueden ser el Cloud Computing, redes de supercomputación, recursos de computación voluntaria 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 IBERGRID, 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.

SCI-BUS (Scientific gateway Based User Support)

El proyecto SCI-BUS trata de ayudar a la e-ciencia creando una metodología de adaptación de portales científicos para el uso sencillo de sus aplicaciones, basado en la familia de portales de propósito general gUSE/WS-PGRADE portal .

Estos nuevos gateways adaptados permitirán a los científicos centrarse en su trabajo, pudiendo utilizar recursos de computación distribuida de muy diferente índole , sin tener que conocer en detalle cada una de las plataformas que están utilizando en cada momento.

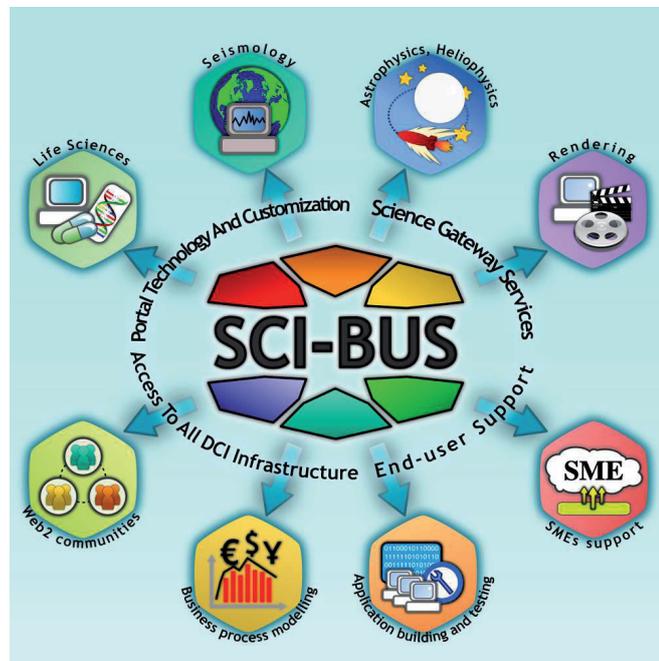
El proyecto proveerá servicio a través de diferentes portales, a comunidades de usuarios de muy diferente perfil, así como a diversas comunidades de usuarios y NGIs. Permitirá el acceso unificado e integrado a diversas plataformas d computación distribuida como pueden ser clusters, grids, desktop grids, clouds, etc...

El proyecto SCI-BUS proveerá también un repositorio de portlets para la comunidad de usuarios, así como un repositorio de aplicaciones. Esta tecnología será también utilizada por el proyecto para crear diversos portales específicamente adaptados a unas determinadas comunidades de usuarios.

El BIFI tiene como principal tarea realizar la difusión general del proyecto, así como el desarrollo de uno de los portales para dar acceso a las PYMES a los recursos cloud, así como proveer parte de su infraestructura de producción para la ejecución de las aplicaciones.

Colaboraciones

En el área de Grid se ha promovido un número de colaboraciones con PYMES a raíz principalmente del proyecto PireGrid, que también han dado lugar a varios cheques tecnológicos.



Ciencia Ciudadana. Ibercivis

Aplicaciones y desarrollo

Ibercivis ha seguido desarrollándose y consolidándose como plataforma de computación voluntaria con el lanzamiento de dos nuevas aplicaciones: Soluvel, lanzada en julio y Mr. Wilson, la primera aplicación que a la vez que se basa en los ordenadores de los usuarios para realizar los cálculos científicos, ofrece la posibilidad de aportar mejoras al código a todos los ciudadanos. Esta aplicación es por lo tanto la primera aplicación de Ibercivis que además de basarse en la computación voluntaria puede calificarse de aplicación de ciencia ciudadana, donde la verdadera aplicación de los ciudadanos participantes no son sus máquinas sino sus conocimientos.

En total han sido 10.000.000 de horas de CPU las aportadas por Ibercivis para sus aplicaciones en 2011, con una cifra de participación que roza los 30.000 usuarios, con una media constante de unos 3000 conectados diariamente.

En la parte de desarrollo se está trabajando en la realización de la nueva web de Ibercivis, dirigida por el equipo portugués con participación del equipo de desarrollo del BIFI. La nueva web que será lanzada el próximo año busca mayor escalabilidad, mejorar la gestión de los idiomas y reestructurar el contenido.

También se está trabajando en el desarrollo de una nueva plataforma para albergar proyectos de ciencia ciudadana.

Responsable y miembros

Responsable: Juan José Molinero
Miembros: Patricia Santos
FranciscoSanz

Proyectos

Ibercivis ha seguido participando en 2011 en proyectos Europeos: desde junio de 2010 participa en Edgi y Degisco, dos proyectos de interconexión de Grids, Desktop Grids y Cloud a nivel europeo y en el que Ibercivis es el máximo representante de la Computación voluntaria en Península Ibérica y Latinoamérica.

Un nuevo proyecto concedido en 2011, Global Excursión, en el que también participa Ibercivis, apuesta por la divulgación de la ciencia a la sociedad ya que este proyecto trata de acercar a los ciudadanos la ciencia a través de e-infraestructuras para poder ver en tiempo real el proceso de investigación que se está llevando a cabo en las diferentes áreas que abarca el proyecto.
<http://www.globalexursion-project.eu/>

Divulgación y comunicación

En el área de divulgación de Ibercivis se han realizado numerosas actividades a lo largo de 2011:

Boletín mensual: Durante el año 2011 se ha publicado entrevistas a cada uno de los investigadores para exponer sus avances, su experiencia con el proyecto Ibercivis y describir más a fondo en qué consisten sus trabajos y cómo los ciudadanos les ayudan a investigar.

- **Vídeo amiloide**, realizado por los investigadores de Amiloide, muestra el proceso de desarrollo de los fármacos y cómo es necesaria la capacidad de cálculo para poder realizar diferentes investigaciones.

<http://vimeo.com/24572213>

- **Social Media:** Ibercivis tiene presencia en Facebook, Tuenti y Twitter donde cuenta con numerosos fans, amigos, seguidores. En el caso de Facebook cuenta con más de 1000 seguidores.

Boletín mensual Ibercivis Abril 2011

Fusión

Una estrella en tu ordenador

Biografía



Francisco Castejón

Nació el 2 de julio de 1961 en Muncbrega (Zaragoza). Doctor en Física por la Universidad Complutense de Madrid, actualmente trabaja en el Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT.

Entrevista

Explicanos en qué consiste la aplicación de Fusión.

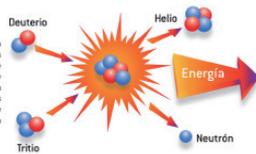
La fusión es una serie de reacciones nucleares de las que esperamos obtener energía prácticamente limpia, económica e inagotable. La fusión consistiría en unir núcleos ligeros para dar lugar a núcleos más pesados con desprendimiento de energía. El problema es que la materia estaría a cientos de millones de grados de temperatura para que se produzcan fusiones y es imprescindible mantenerla confinada a esas temperaturas mediante campos magnéticos. Es en eso en lo que estamos trabajando, en estudiar cómo se comporta la materia a temperaturas tan altas sometida a intensos campos magnéticos.

¿Tiene la fusión alguna implicación con el medio ambiente?

Somos conscientes del problema del medio ambiente. Como seres humanos realizamos actividades como la producción, transporte y consumo de energía que muchas veces son muy agresivas con el medio y tenemos que trabajar en la búsqueda de fuentes de energía que sean más limpias y económicas. La fusión sería una fuente que permitiría un consumo razonable con impacto ambiental bajo.

¿Es segura la energía de fusión? ¿Evitaría riesgos como el escape radioactivo de la central nuclear de Fukushima?

Los reactores de fusión serán inherentemente seguros. Si el reactor se sale de sus parámetros de diseño, la reacción se parará por sí misma. Esta es



> Proceso típico de fusión de dos isótopos de hidrógeno.

Boletín de Ibercivis

Actualización de la web de Ibercivis, distribuyendo la sección de investigación en aplicaciones actuales y pasadas, con mayor actualización de noticias, publicación de contenidos como imágenes y vídeos.

Perfil de Twitter

<http://es-es.facebook.com/Ibercivis>
<http://twitter.com/?lang=es/Ibercivis#!/Ibercivis>

Perfil de Tuenti

Investigación / Computación

Espacios publicitarios Ibercaja y charla en Ibercaja Zentrum. Estas actividades patrocinadas por Ibercaja permitió acercar la ciencia y el proyecto Ibercivis a ciudadanos de Aragón. El vídeo está disponible en la web de Ibercivis.

Charlas a estudiantes: Ibercivis asistió en abril a Imaginática, la semana de la informática de la Universidad de Sevilla, donde se hizo una presentación de Ibercivis a estudiantes de la misma. También se presentó en la Feria de la Ciencia de Tenerife en noviembre, en la Universidad de La Laguna.



Presentación Ibercaja Zentrum

2º workshop Ibercivis. En septiembre de 2011 se realizó el 2º workshop de Ibercivis en el CIEMAT en Madrid donde se invitó a todo el personal investigador, desarrollador, de comunicación y de infraestructura a participar. El objetivo de la reunión fue buscar nuevas colaboraciones, sugerir nuevos proyectos e ideas de comunicación y solventar los problemas encontrados por los investigadores.

Nueva edición de Unidades didácticas, de las aplicaciones de Amiloide y Cuanticables. Se han enviado a diferentes centros de Argentina, Cuba, Extremadura, Madrid, País Vasco y a diferentes colegios de Zaragoza.

Difusión en Cuba. Ibercivis fue presentado en Cuba como plataforma de computación voluntaria en el taller bilateral Bifi-Ceac celebrado en la Habana en marzo de 2011. También se presentó en la Escuela Vocacional Vladimir Lenin, con un aforo de más de 200 estudiantes, en la Universidad de Ciencias Informáticas y en el Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Avanzadas (InSTEC).

Presentación en Citizen CyberScience Brazil. Nuestro colaborador en Brasil Francisco Brasileiro presentó Ibercivis en el congreso Brasil@home celebrado en Brasil en mayo de 2010.



Presentación en el colegio Vladimir Lenin

Experimento dilema del prisionero.

La fundación Ibercivis, en colaboración con el área de Física de Sistemas Complejos del BIFI y la Universidad Carlos III de Madrid realizaron un experimento en tiempo real con 1300 estudiantes de 42 institutos de la Comunidad de Aragón. El experimento estaba basado en el dilema del prisionero, en el que el beneficio que obtenían los chavales dependía del grado de cooperación que ofrecían.

Mientras se realizó el experimento se hizo una presentación del mismo y centro de monitorización y visualización de resultados en Zaragoza Activa.

Este experimento contó con la colaboración de el Gobierno de Aragón, el Ayuntamiento de Zaragoza, el programa Ciencia Viva, el Corte Inglés y el Patrocinio de HP e Ibercaja.

5. GESTIÓN I+D

5.1. Apoyo y Gestión

La Unidad de Gestión de Proyectos del BIFI da soporte a todos los miembros del instituto a la hora de concebir, redactar y solicitar nuevos proyectos de financiación y también impulsa la transmisión del conocimiento a la sociedad. Esta unidad está formada por dos técnicos especialistas en gestión de la innovación. Además, se colabora con los servicios propios de la Universidad de Zaragoza (OTRI, OPE, SGI, Red Aragón 7PM) junto con otros foros como Tecnoebro, INZA o INES.



Responsable y miembros

Responsable: Fermín Serrano

Miembro: Antonio Remírez de Ganuza

La consolidación de la Unidad de Gestión de Proyectos en 2011 responde a varias estrategias:

- Impulsar las relaciones con empresas y otras instituciones científicas, incluso con estudiantes. Para mejorar la transferencia de resultados se debe trabajar junto con el resto de servicios de la Universidad y participar en todas las plataformas y foros comunes de investigación y empresas. También se debe promover la generación de patentes y de empresas spin-off
- Aumentar la eficiencia en la gestión. Esto pasa por liberar a los investigadores de carga ineficiente para ellos. Toda la Universidad apuesta por una mayor eficiencia en la gestión y la coordinación de proyectos. Este objetivo está alineado con uno de tres requisitos de los Institutos Universitarios de Investigación, fijados por la DGA en 2006, donde se exige una eficiente estructura organizativa
- Aumentar la financiación externa en convocatorias públicas de competencia competitiva mediante la solicitud de proyectos para todas las áreas del BIFI

Para ello, las tareas que desarrolla la Unidad de Gestión de Proyectos del BIFI son:

- Detección de necesidades de financiación y capacidades de transferencia de cada grupo
- Detección de fuentes de financiación públicas y privadas, nacionales e internacionales

- Redacción y solicitud de nuevos proyectos colaborativos y su gestión posterior
- Protección de resultados, generación de patentes y promoción de creación de empresas spin off
- Información de la oferta científico y tecnológica de cada investigador y del catalogo de servicios a las empresas y a la sociedad general
- Respuesta a las demandas de innovación y colaboración abierta entre distintos agentes
- Interacción con otros promotores tecnológicos
- Representación del BIFI en plataformas comunes de investigación y empresas

En los últimos dos años, Fermín y Antonio han colaborado en conseguir unas cifras muy satisfactorias, resumidas en unos 20 proyectos concedidos (FP7, MICINN, FECYT, DGA, Cheque Tecnológico) que ascienden a unos 3 millones de euros. Se ha creado una red de contactos entre instituciones de investigación y empresas a nivel mundial. Hay que destacar el alto grado de aceptación de las propuestas presentadas, llegando a obtener un 75% de éxito en proyectos del 7º Programa Marco (3 proyectos aceptados de 4 presentados en 2011). Solo el área de computación del BIFI ha llegado a tener activos el 10% de los proyectos europeos de toda la Universidad de Zaragoza.

De cara a 2012 es vital poder mantener el ritmo de ayudas obtenidas tanto a nivel nacional como internacional. Y es el momento de aumentar la transferencia de resultados mediante la obtención de patentes, la creación de nuevas empresas spin-off y la generación de nuevos proyectos de innovación empresarial. Conseguir proyectos en convocatorias públicas con concurrencia competitiva no es fácil ni es labor de un día y, desafortunadamente, en estos momentos todavía es más complicado tanto en convocatorias públicas como privadas. Pero el BIFI cuenta con una excelencia investigadora de gran valor y debemos seguir encontrando las oportunidades adecuadas de financiación para cada proyecto, y volveremos a preparar nuevas solicitudes que muestren la calidad del trabajo que desarrollamos y del que queremos hacer para contribuir al crecimiento social de Aragón.

Gestión I+D

5.2. Transferencia

El grupo de transferencia y desarrollo es un grupo joven del área de computación del BIFI, formado principalmente también por jóvenes ingenieros en informática. En él se desarrollan tres tareas bien diferenciadas:

- Dar soporte a la investigación realizada en el instituto participando en el desarrollo de proyectos que requieren desarrollo de software. También se da soporte en cuanto a la mejora y optimización de programas ya realizados, así como consultoría para la recomendación de tecnologías, técnicas, etc. para el desarrollo de los mismos.
- Desarrollo de proyectos de colaboración con empresas en temáticas o líneas en las que el BIFI trabaja con el fin de aportar a sus productos y procesos un valor añadido y diferencial a través de la transferencia de los resultados de investigaciones obtenidos en el instituto.
- Investigación en sus propias líneas de trabajo de trabajo, como son el laboratorio de visualización 3D, el laboratorio de Realidad aumentada, el desarrollo de aplicaciones remotas, y el uso de tecnologías móviles con distintos fines que van desde la mejora de la educación hasta la optimización de procesos productivos.



Responsable y miembros

Responsable: Gonzalo Ruiz Manzanares
Miembros: Alfredo Ferrer Marco
Cristina Viñas Viñuales

Proyectos

- Portal BIFI-Ciemat: es un proyecto realizado en colaboración con Ciemat que consiste en un portal web para la simulación de diferentes escenarios físicos como son el reactor nuclear de fusión ITER o un sistema de cargas en un campo electromagnético. El papel desempeñado por el grupo ha sido el de corregir los problemas que existían en dicho portal, así como mejorar algunos aspectos del mismo como la compatibilidad, la visualización, etc.
- Web del grupo de redes complejas: el trabajo realizado por el grupo consistió en la creación de una web para el grupo COSNET basada en un CMS que facilitara la autogestión del mismo

- Estudio de la propagación del 15M en Twitter: en este proyecto el grupo apoyó en diferentes tareas relacionadas con el estudio como son la visualización del mismo, la creación de una web que recogiera toda su información, etc.
- Dilema del prisionero: a lo largo de este año se ha desarrollado una plataforma para la realización remota de experimentos colectivos para el estudio del comportamiento de las personas según la estructura de su organización.
- Optiweb: durante el comienzo del año 2011 se finalizó el proyecto realizado en colaboración con la empresa Schnell Software que mejoró las prestaciones de uno de sus productos utilizando la plataforma PireGRID.
- Escucha activa en entornos GRID y Cloud: realizado junto con la empresa Inycom, consistió en la adaptación de un motor de búsquedas y análisis semántico web a PireGRID para mejorar la productividad del mismo.
- Streets: el proyecto, consistente en una plataforma para la geoetiquetación de momentos y lugares, fue desarrollado a principios de año con el fin de que la gente participara activamente en un sistema proveyendo información que más tarde pudiera ser analizada científicamente.
- Feelicity: basada en Streets, es otra plataforma realizada junto con la gente de TEDxZaragoza para la geoetiquetación de momentos felices de las personas. Con dicha información se pretende estudiar qué factores influyen positivamente en la felicidad de las personas según los momentos etiquetados.
- Laboratorio de visualización 3D: en este proyecto se han desarrollado dos unidades didácticas para su utilización con fines educativos, se ha incorporado el dispositivo Kinect para el reconocimiento gestual, y gracias a este trabajo se van a comenzar dos proyectos nuevos con dos empresas el año próximo, y se han solicitado otros tantos.
- Realidad aumentada: este proyecto, desarrollado con fines educativos, está en pleno desarrollo. Consiste en la creación de una plataforma para la realización de experimentos físicos sencillos de forma remota con el fin de que los alumnos puedan comparar sus resultados calculados teóricamente con los reales.
- Otros: el grupo está comenzando a participar y desarrollar otros proyectos como son los dos intramurales que se le han concedido (Movilidad y Mejora de diagnósticos a través de reconocimiento de imágenes), el proyecto europeo SCIBUS, y la creación de una sala de control del instituto.

Participación y congresos del área de transferencia

- Participación en el simposio internacional llamado "Plasmas y fusión nuclear: ciencia básica y desarrollo tecnológico" organizado por la fundación Ramón Areces durante el 11 y el 12 de abril de 2011, aportando simulaciones dentro del reactor de fusión nuclear gracias al laboratorio de visualización 3D.

Gestión I+D

- Participación en la publicación "Structural and Dynamical Patterns on Online Social Networks: The Spanish May 15th Movement as a Case Study" publicada el 19 de agosto de 2011.
- Asistencia al II Workshop de Ibercivis realizado los días 13 y 14 de septiembre para dar apoyo en las tareas de soporte necesarias.
- Asistencia a las jornadas de networking en SIMO durante los días 4 y 5 de octubre de 2011 con reuniones con diferentes empresas del territorio nacional.
- Asistencia al Seminario Técnico de Visualización y Realidad Virtual que tuvo lugar los días 14 y 15 de diciembre en el que se realizó una charla sobre el trabajo realizado en estas líneas en el instituto.
- Charla en la clase de la asignatura "Programación Paralela" de Ingeniería Informática del Centro Politécnico Superior de Zaragoza con el título de "Empresas y Grid. Un caso de éxito: Schnell" realizada el día 15 de diciembre de 2011 para contar a los alumnos el trabajo realizado durante el desarrollo del proyecto Optiweb.

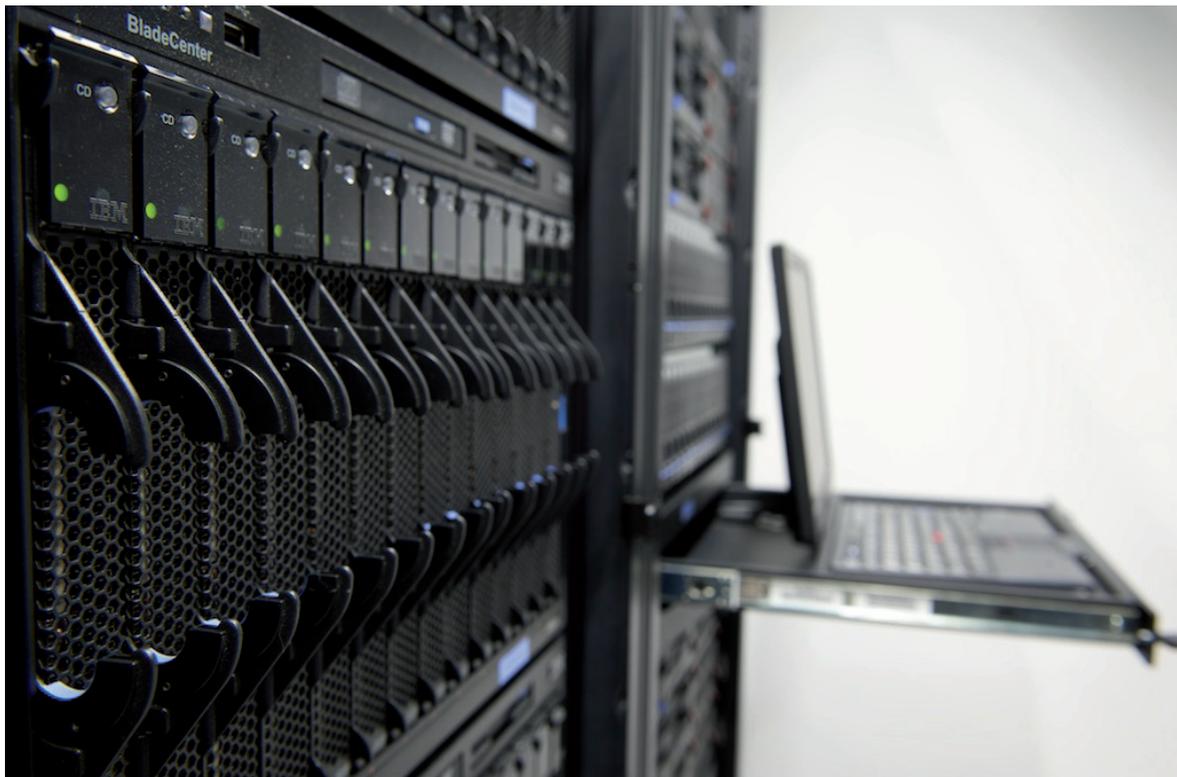
6. Infraestructuras e instalaciones

6.1 Infraestructuras de Computación

CAESARAUGUSTA

Durante 2011, 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.

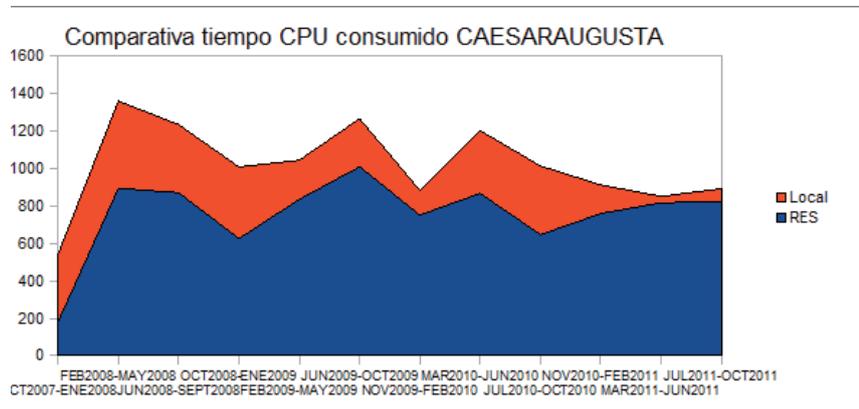


Infraestructuras e instalaciones

Durante 2011, en CAESARAUGUSTA se han computado 2.651.000 horas de CPU; 2.395.000 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 256.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité local (20% de tiempo restante).

El número de proyectos que hicieron uso de esta infraestructura a lo largo de este año fue de 30; 14 fueron asignados por el Comité de Acceso de la Red Española de Supercomputación y otros 16 fueron asignados por el Comité local. En concreto, en el área de "biomedicina y ciencias de la salud" se solicitaron 8, en "química, ciencia de materiales y tecnología" 8, en "matemáticas, física e ingeniería" 11 y en "astronomía, espacio y ciencias de la tierra" 3.

Además 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 Madrid).



Evolución de consumo de CPU

Como fruto de los proyectos internos llevados a cabo entre los miembros de la RES, el BIFI ha puesto en marcha una herramienta gráfica que trata de integrar los diversos tipos de información que se generan en la RES: usuarios y grupos asignados a cada nodo, disponibilidad y estado de los sistemas,



Imagen de la aplicación desarrollada

monitorización de la red, accounting... y provee un interfaz web que permite un acceso visual a la misma.

Este trabajo ha supuesto el Proyecto Fin de Carrera del estudiante de Ingeniería Informática Víctor Civitani Monzón titulado "Desarrollo de un

sistema de información para la Red Española de Supercomputación” y que fue exitosamente defendido el 18 de Mayo de 2011.

Durante este año también se han acometido una serie de mejoras en el CPD que alberga el supercomputador para mejorar la fiabilidad de las instalaciones y aumentar su eficiencia energética.

Estos trabajos se han realizado en colaboración con la Unidad de Ingeniería y Mantenimiento de la Universidad de Zaragoza y resumidamente han consistido en:

- Reparación de fugas en los circuitos de aire de la climatizadora principal
- Instalación de toberas para mejor encauzamiento del aire caliente expulsado por las traseras del computador
- Recolocación de las unidades exteriores de climatización para una mejor disipación del calor

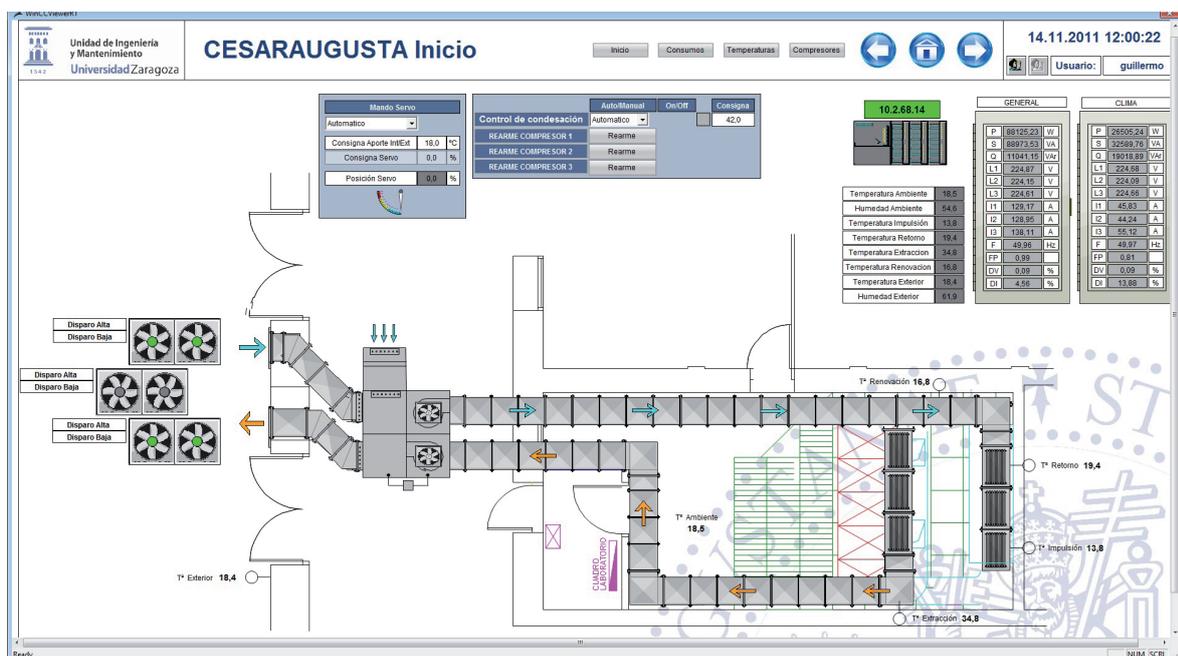
- Instalación de autómatas para la lectura de sensores térmicos y eléctricos para un mayor control de la instalación

- Despliegue de una aplicación web para visualizar el histórico y estado actual de temperaturas y consumos eléctricos medidos en el CPD así como configuración para el envío de alertas

- Instalación de una batería para añadir aporte de aire frío al circuito de impulsión utilizando los conductos de agua fría del sistema de climatización del edificio.

- Control automático para que la impulsión se realice con aporte del patio exterior o del pasillo de la facultad según su temperatura (aprovecha que la temperatura del pasillo es más baja durante los meses de verano)

- Adquisición de compresor exterior y ventilador de free-cooling como material de repuesto



Aplicación de monitorización del CPD

Infraestructuras e instalaciones

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

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 2,7 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 900 procesadores, todos de arquitectura de doble precisión ("em64t" = 64-bit).



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 Area de Supercomputación de la Red Española de eCiencia.



Más de 100 investigadores del BIFI o colaboradores suyos poseen cuenta en Terminus, donde durante 2011 han ejecutado 2,6 millones de horas de CPU.

Programa Hosted Clusters

Este año hemos continuado impulsando el 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.

Cabe destacar que más del 80% de los recursos integrados en Terminus pertenecen a Hosted Clusters. Al grupo de 6 hosted clusters

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 Rio 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 Rio Ebro
Mariano Escobedo, Edificio I+D
50018 Zaragoza
hosted.clusters@bifi.es / http://bifi.es
Tel: (+34) 976762992
Fax: (+34) 976762990

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



existentes hasta ahora (BIOCOMPLEX, CONMAT, EEAD, JSS, MMT y RTN4) se acaba de incorporar un nuevo grupo de investigación del departamento de Química Física de la Universidad de Zaragoza (PLATON) con un servidor de 12 cores y 24GB de RAM, y existen conversaciones para la incorporación de otro grupo del Instituto de Nanociencia de Aragón.

Además de la incorporación de nuevos grupos, alguno de los ya existentes han realizado una ampliación de sus recursos en esta infraestructura. En concreto CONMAT ha aumentado su capacidad de computación en 144 cores y 1,1TB de memoria.

A continuación se muestra una tabla resumen de los hosted clusters que actualmente se encuentran alojados en Terminus:

Nombre	Investigador Principal	Departamento-Centro	#Cores	#RAM (Gbs)	consumidas 2011	GB Memoria usada
RTN4	Alfonso Tarancón	Física teórica- UNIZAR	124	124	1.544.986	138
BIFI		BIFI-UNIZAR	190	294	562.850	400
MMT	Milagros Media	Bioquímica y Biología Molecular y Celular-UNIZAR	68	68	210.655	37
CONMAT	Luis Martín Moreno	Física de la Materia Condensada-UNIZAR	412	2.229	94.172	422
BIOCOMPLEX	Pierpaolo Bruscolini	Física teórica- UNIZAR	40	40	88.986	15
PLATON	Carlos Lafuente	Química-Física- UNIZAR	12	24	1.390	3
EEAD	Javier Burguete	Estación Experimental Aula Dei-CSIC	16	16	999	1

Merece la pena destacar el alto nivel de uso de la cola SCRATCH con 287,000 horas de CPU en 2011. Esta cola posibilita un aprovechamiento más eficiente de los recursos de Terminus, permitiendo la entrada de jobs cortos (3h) con baja prioridad en recursos de hosted clusters (distintos al del usuario del job) que se encuentren ociosos.

Supercomputador Memoria Compartida

En Julio de 2011 se inició el proceso para la adquisición de un supercomputador de memoria compartida para computación científica de alto rendimiento. Este proyecto, financiado con fondos FEDER, busca adquirir una infraestructura de cálculo de memoria compartida que permita realizar

Infraestructuras e instalaciones

trabajos que necesitaran un paralelismo masivo, con un gran ancho de banda y una comunicación eficiente. Este tipo de problemas se dan en los campos de la Dinámica Molecular, la Química Cuántica, modelado de proteínas, simulación de materiales y otros sistemas complejos.

En estos momentos (final de 2011), el concurso ya se ha adjudicado y esperamos contar con esta nueva infraestructura en nuestro CPD durante el primer trimestre de 2012.

Equipamiento del grupo GRID

El BIFI participa en varios proyectos de investigación del Sexto y Séptimo Programa Marco de la Unión Europea relacionados con el desarrollo de las tecnologías GRID. En ellos el Instituto aporta infraestructura computacional, alojada también en nuestro Laboratorio de Supercomputación.

PIREGRID

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

Este proyecto consiste en la creación de una plataforma totalmente funcional de computación Grid en las regiones de Aragón, Navarra, Aquitaine y Midi-Pyrénées aprovechando el alto conocimiento de los socios tecnológicos que en él participan.

Descripción técnica:

- 32 nodos, 2 procesadores por nodo, 4 cores por procesador
- 256 cores
- 9 TB de almacenamiento
- <http://www.piregrid.eu>



Nodo del BIFI en PireGrid

ARAGRID

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

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 Facultad de Ciencias (Zaragoza-Campus San Francisco), la Escuela Politécnica Superior de Huesca (EPSH) en Huesca y la Escuela Universitaria Politécnica de Teruel (EUPT) en Teruel.

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

Descripción técnica:

- 2000 cores de cálculo aproximadamente
- 200 TB de almacenamiento
- 4 TB de RAM
- <http://www.aragrid.es>



Nodo de AraGrid en el BIFI



Nodo de AraGrid en la Facultad de Ciencias



Nodo de AraGrid en la Escuela Politécnica Superior de Huesca



Nodo de AraGrid en la Escuela Universitaria Politécnica de Teruel

Infraestructuras e instalaciones

NGI-Ibergrid

La Iniciativa Grid Nacional española (ES-NGI) es una actividad promovida desde el Ministerio de Ciencia e Innovación que pretende integrar recursos computacionales con el objetivo de crear una Infraestructura de computación virtual y distribuida, que utilizando la tecnología Grid, permita la interconexión de centros de recursos computacionales en España, así como su integración en la European Grid Infrastructure.

Mediante la compartición de estos recursos, y su gestión de forma conjunta y eficiente, se espera ofrecer un servicio de soporte computacional a los investigadores que redunde en la calidad de la I+D en España.

La actividad de ES-NGI está coordinada por el Consejo Superior de Investigaciones Científicas a través del grupo de Computación Avanzada y e-Ciencia del Instituto de Física de Cantabria

<http://ibergrid.eu>

<http://www.e-ciencia.es/ngi>

EGI - European Grid Infrastructure

El proyecto EGI-InSPIRE comenzó en 1 de Mayo de 2010, cofinanciado por la Comisión Europea durante 4 años, como una colaboración entre más de 50 instituciones en 40 países. Su misión es establecer una Infraestructura Grid Europea.

El proyecto se encuentra en una posición ideal para integrar las nuevas infraestructuras de computación distribuida (CDIS), como el cloud, supercomputación y desktop grids, en beneficio de las comunidades de usuarios dentro del Espacio Europeo de Investigación.



Nodo del BIFI en NGI-Ibergrid

Equipamiento grupo Ciencia Ciudadanía

IBERCIVIS

Ibercivis es un proyecto de computación ciudadana cuya infraestructura se encuentra distribuida en distintos centros de investigación en España, Portugal y próximamente en Brasil (actualmente cuenta con una infraestructura de pruebas) y Argentina.

ESPAÑA

- Zaragoza (BIFI)

Físicamente se cuenta con cuatro servidores del fabricante Supermicro. Cada uno de estos servidores dispone de 2 TB de disco duro y hasta 48 GB de RAM. Uno de estos servidores cuenta además con 6 discos SATA en RAID con un total de 2.5TB disponibles para la realización de Backups.

En estos servidores se encuentran alojadas (entre otras) las siguientes máquinas virtuales Ibercivis:

NOMBRE	FUNCIÓN
monitor.ibercivis.es	Monitorización de servicios
alfa.ibercivis.es	Entorno de pruebas
database.ibercivis.es	Master de la Base de datos de Ibercivis
scheduler.ibercivis.es	Scheduler, feeder y transitioner
webserver.ibercivis.es	Página web del proyecto
modulos.ibercivis.es	Servidor opensocial y esclavo de la BD
queue.ibercivis.es	queues middleware glite
build.ibercivis.es	maquina de compilación
alfasis1.ibercivis.es	Tesbed de producción
alfasis2.ibercivis.es	Tesbed de producción

Además se cuenta con otra máquina física para la compilación MAC.

- Madrid:
 - **REDIRIS**: dbrediris.ibercivis.es: Reverse-proxy y slave de la BD
 - **CSIC**: dbcsic.ibercivis.es: Master de la Base de Datos
- Extremadura:
 - **CETA-CIEMAT**

Infraestructuras e instalaciones

Aquí se encuentra un host con 4 máquinas virtuales que comparten el disco duro mediante Lustre:

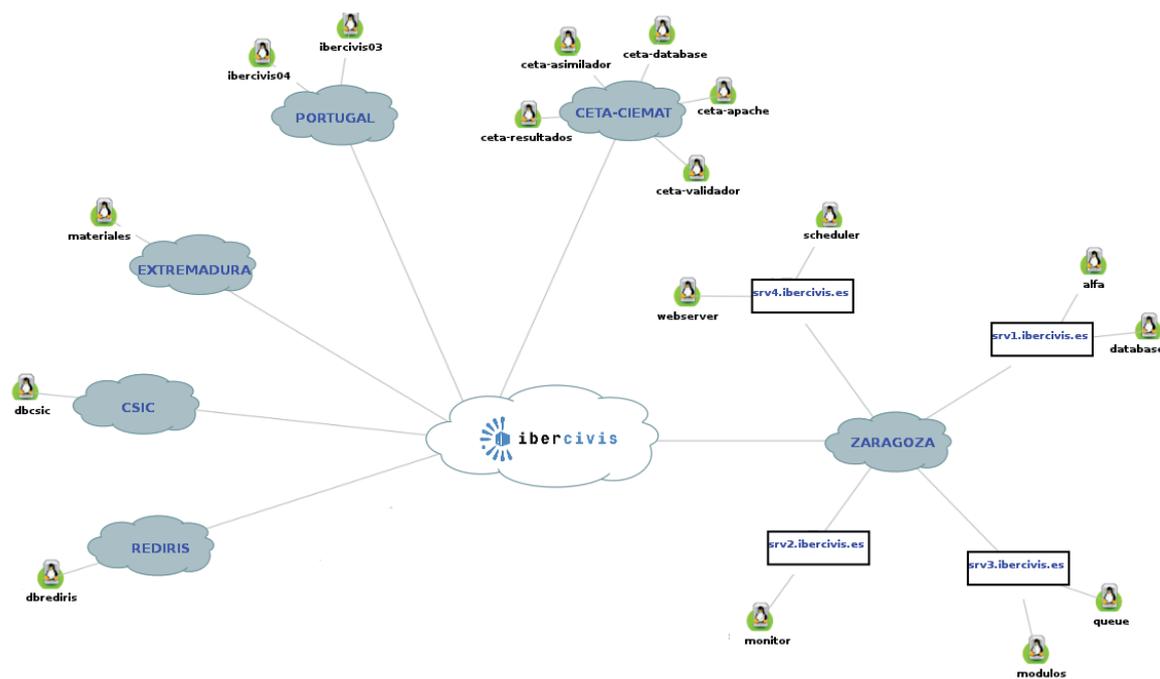
NOMBRE	FUNCIÓN
cetaapache-ibercivis.ceta-ciemat.es	Servidor de subida (por defecto)
validator-ibercivis.ceta-ciemat.es	Validador de aplicaciones
asimilator-ibercivis.ceta-ciemat.es	Asimilador de aplicaciones
resultados-ibercivis.ceta-ciemat.es	Servidor de descarga de resultados

PORTUGAL

Aquí hay dos máquinas que se ocupan de los servicios y aplicaciones portuguesas:

NOMBRE	FUNCIÓN
ibercivis03.fccn.pt	Scheduler y slave de la BD
ibercivis04.fccn.pt	Servicios para las aplicaciones portuguesas

En la siguiente figura se puede observar las distintas máquinas



Equipamiento grupo SPIN GLASSES

JANUS

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. Al adaptar su arquitectura al problema concreto permite simular a velocidades entre 1000 y 100.000 procesadores convencionales en el momento de su construcción. Esto ha supuesto un salto cualitativo en los resultados obtenidos.

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.

Janus está compuesto por 16 placas y 8 hosts internos, que controlan 2 de estas placas cada uno. Cada placa contiene 16 FPGA dedicadas a simulaciones (Simulation Processors SP) y 1 FPGA dedicada a comunicación (Input-Output Processor IOP).



Vista del interior de una placa de la máquina Janus compuesta por FPGAs

Además, para el correcto uso de la infraestructura se dispone de 5 hosts externos para gestionar, almacenar y analizar las ingentes cantidades de datos generados que es usado por todos los grupos de investigación. De estos hosts externos, 3 son máquinas de login con almacenamiento secundario, 1 host (jdata) es un sistema de almacenamiento masivo con redundancia (RAID 1+0 por hardware) y 1 último host (jana) pensado especialmente para analizar los datos generados. Como novedades del año 2011 podemos destacar que se ha añadido una nueva cabina externa de discos (jbod) al host jdata, también con un RAID 1+0 con lo que hemos aumentado en 18 TB (efectivos) nuestra capacidad de almacenamiento y la puesto en funcionamiento del host jana para análisis con 64 GB de memoria RAM.

JANUS II

Dentro de la convocatoria de Fondos FEDER para infraestructuras, se dispone financiación para la segunda generación de Janus, que llamaremos Janus II. Esta nueva máquina

Infraestructuras e instalaciones

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. Además el objetivo es aumentar la potencia de cálculo de Janus en un factor 100.

Esta nueva máquina estará constituida por SP (basados de nuevo en FPGA) conectados en una malla 3D, con conexión directa entre primeros vecinos, formando una interconexión toroidal en 3D. Cada placa de Janus II tendrá 16 SP conectados de la forma 8x8x1 en la malla 3D. Cada placa tendrá 16 conectores de entrada y otros 16 conectores de salida que conectarán sus SP con los de otras placas para conformar la malla 3D. Además el IOP será capaz de reconfigurar los SP.

Con el diseño básico ya realizado, durante el año 2012 se procederá a la elección de la empresa que construirá Janus II.

Equipamiento grupo transferencia

LABORATORIOS DE VISUALIZACIÓN Y REALIDAD AUMENTADA

Infraestructura propia

El laboratorio de visualización se encuentra en la Sala Multimedia del edificio, y contiene:

- Infraestructura de visualización estéreo pasivo (proyectores, filtros polarizados, pantalla que mantiene la polarización y gafas)
- Infraestructura de visualización estéreo activo (TV LED 46" 3D Samsung mas gafas activas)
- Infraestructura de inmersión e interacción (cámaras infrarrojos, indicadores, altavoces, mando bluetooth wiimote y dispositivo Kinect)

El sistema completo permite visualizar en estéreo y posicionarse dentro diversas escenas, en tiempo real o mediante un



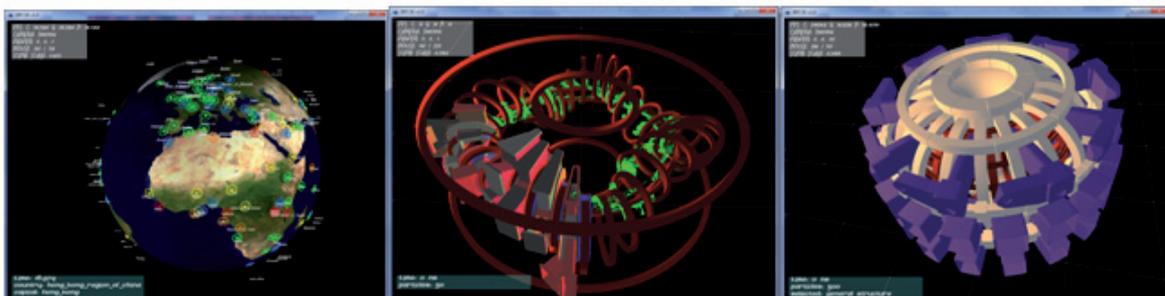
vídeo. En el ordenador se generan dos imágenes equivalentes, una para el ojo izquierdo y otra para el ojo derecho. Cada imagen se muestra con un proyector y se visualizan en la misma pantalla. La luz de la imagen izquierda pasa por un filtro polarizador, y la luz de la imagen derecha pasa por otro filtro 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 a un mando bluetooth permite interactuar con la aplicación. También hay 6 altavoces situados alrededor del sistema que permiten un sonido envolvente.

Como novedad se ha introducido un sistema de visualización estéreo activo (una tele 3D y gafas activas) y el sistema de posicionamiento Kinect, de menores dimensiones que las 12 cámaras infrarrojas. Este nuevo sistema permite su transporte de manera fácil y cómoda, y permite no tener que desmontar la sala si realiza a algún acto fuera del instituto.

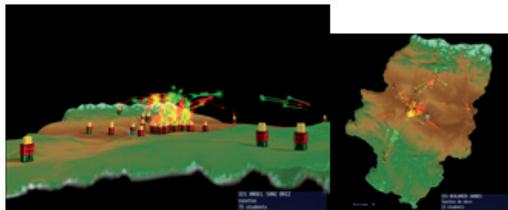
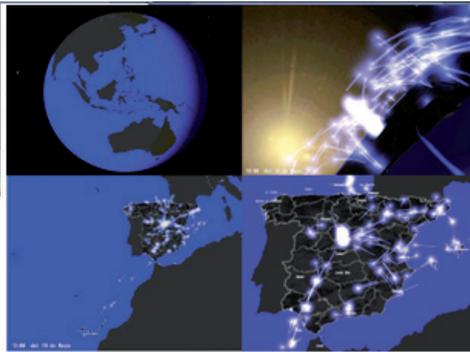
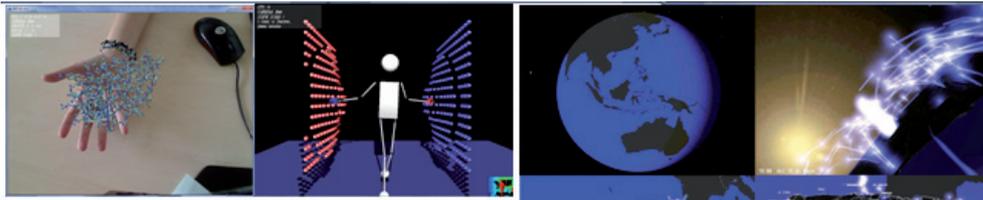
Materiales audiovisuales desarrollados

El BIFI ha desarrollado su propio entorno de desarrollo software que permite la creación de aplicaciones gráficas de manera sencilla. Durante finales del 2010 se crearon dos que integraban conceptos físicos básicos (una de gravitación universal, y otra de campo eléctrico y magnético). Este año el abanico de aplicaciones se ha ampliado siguiendo diferentes líneas de investigación del bifi. Así, se han desarrollado:

- Aplicación de Docking de proteínas: Se muestra la proteína NS3 causante de la enfermedad de la Hepatitis C, la misma proteína con el fármaco, y una visualización del estado de la enfermedad en la Tierra entre los años 1997 y 1999.
- Aplicación de Fusión: integración de las antiguas aplicaciones de fusión (TJ-II e ITER) en el entorno actual. Permite visualizar el modelo del reactor completo y sus diferentes partes, así como lanzar interactivamente una partícula, o hacer una simulación de miles de partículas.
- Aplicación de Realidad Aumentada: se ha integrado una librería de reconocimiento de fiducials y con ello se pretende que, a través de una webcam un alumno pueda visualizar diferentes modelos en 3d, como pueden ser una proteína o un modelo de un reactor.



Infraestructuras e instalaciones



- Aplicación de 15M: simulación de redes complejas. Esta aplicación permite la visualización de los mensajes intercambiados entre usuarios de twitter sobre el movimiento del 15 de Mayo aquí en España.
- Aplicación del Dilema del Prisionero: permite la visualización en tiempo real de las colaboraciones o no de los estudiantes en torno al juego del Dilema del prisionero, experimento realizado en diciembre del 2011.
- Aplicaciones específicas para la Kinect:
 - Creación de moléculas complejas de agua, dióxido de carbono y ácido sulfúrico a través de elementos básicos de oxígeno, hidrógeno, carbono y sulfuro. Se basa en realidad aumentada.
 - Interacción del usuario con dos mallas de átomos, una positiva y otra negativa, y reacción de la malla (atracción o repulsión) según los movimientos del usuario.

Realidad Aumentada

Realidad Aumentada (RA) es el termino 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 ampliación del laboratorio de visualización, se ha creado otro laboratorio de realidad aumentada que permite la simulación de diferentes escenarios físicos sencillos (actualmente un péndulo, un muelle con una carga y una caída libre). Dichos experimentos son realizados de forma totalmente automática



gracias a una serie de motores, controladores y sensores eléctricos, y gracias a una cámara web, se captan imágenes de ellos que permiten el análisis de los movimientos de los agentes que intervienen así como la superposición de resultados calculados teóricamente para comprobar su corrección. Este laboratorio está pensado con fines educativos principalmente, ya que este tipo de sistemas pueden ayudar mucho a la comprensión de estos problemas a estudiantes desde secundaria hasta licenciaturas.

El objetivo es que éste laboratorio sea accesible vía web para abaratar su coste lo máximo posible tanto para los centros de enseñanza como para el propio desarrollo del proyecto.

Demostraciones realizadas

A continuación enumeramos las demostraciones realizadas en 2011:

- Participación en el simposio internacional llamado "Plasmas y fusión nuclear: ciencia básica y desarrollo tecnológico" organizado por la fundación Ramón Areces durante el 11 y el 12 de abril de 2011, aportando simulaciones dentro del reactor de fusión nuclear gracias al laboratorio de visualización 3D.
- Asistencia al Seminario Técnico de Visualización y Realidad Virtual que tuvo lugar los días 14 y 15 de diciembre en el que se realizó una charla sobre el trabajo realizado en estas líneas en el instituto



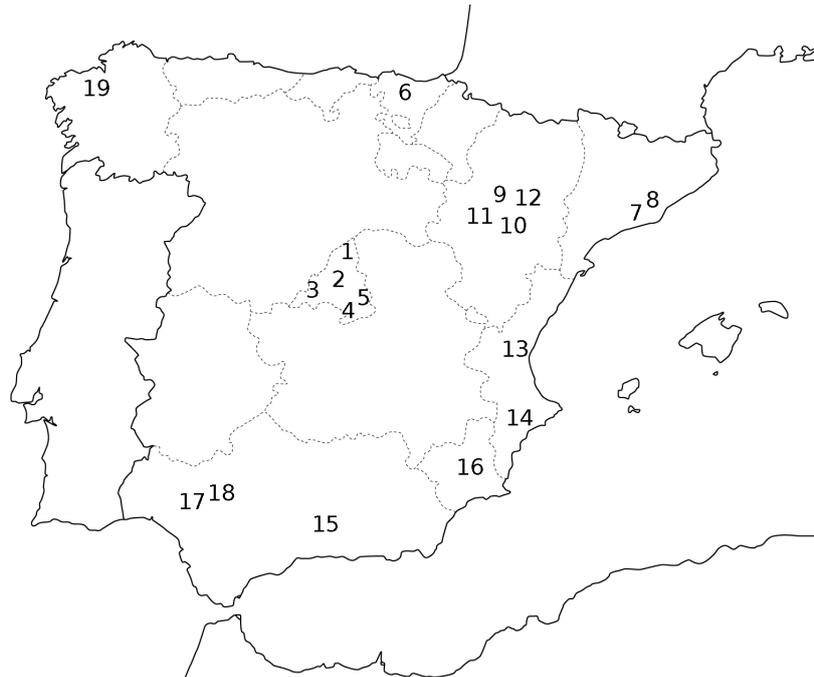
Infraestructuras e instalaciones

6.2. Infraestructuras de Bioquímica

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, procesado de los datos obtenidos y resolución de estructuras moleculares.

Colaboraciones con centros nacionales durante 2011



CENTRO	UBICACIÓN	INVESTIGADORES
1 CSIC CIB	MADRID	Ángel Martínez, Aitor Hernández-Ortega, Lourdes Planelles
2 UCM	MADRID	Javier Arroyo
3 CSIC ROCASOLANO	MADRID	Julia Sanz-Aparicio, Juan Hermoso, M ^a Angeles Jiménez
4 UAM	MADRID	Miguel Fernández Moreno, Rafael Garesse Alarcón, Juan J. Arredondo Lamas
5 CSIC Instituto de Catálisis	MADRID	Jose Miguel Palomo, Fernando López Gallego, José Manuel Guisán, M ^a Angeles Jiménez
6 Universidad País Vasco	PÁIS VASCO	Arturo Muga, M ^a Angeles Urbaneja, Oscar Millet
7 Barcelona Supercomputing Centre	BARCELONA	Víctor Guallar
8 UAB	BARCELONA	Salvador Ventura, Mireia García-Viloca, David Reverter
9 I3A	ZARAGOZA	Luis José Fernández
10 INA	ZARAGOZA	Jesús Martínez De La Fuente, Valeria Grazú, Ana Isabel Gracia Lostao
11 HOSPITAL CLÍNICO	ZARAGOZA	Ángel Lanas, Trinidad Serrano
12 UNIZAR	ZARAGOZA	Jesús Martínez, Miguel Pocoví, Pedro Merino, Tomas Tejero
13 CIPF	VALENCIA	M ^a Eugenia Armengod, Rafael Ruiz
14 UMH ELCHE	ALICANTE	Jose Luis Neira
15 Universidad de Granada	GRANADA	Antonio Entrena
16 Universidad de Murcia	MURCIA	Alvaro Sánchez Ferrer
17 Universidad Pablo Olavide	SEVILLA	Laura Ledesma, Francisca Reyes
18 Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis	SEVILLA	Miguel A. De la Rosa, Antonio Díaz Quintana
19 INIBIC	A CORUÑA	José Francisco Pérez Llerena

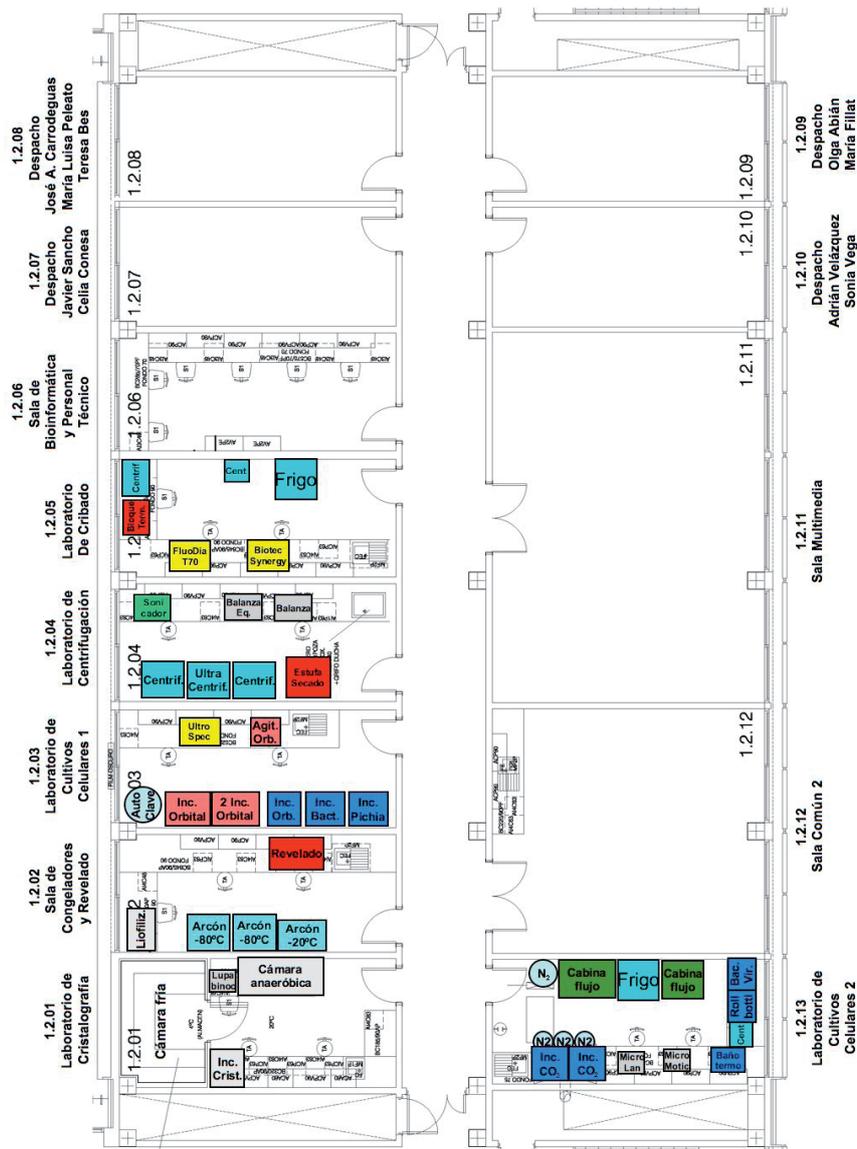
Infraestructuras e instalaciones

Colaboraciones con centros internacionales durante 2011



CENTRO	UBICACIÓN	INVESTIGADORES
1 Universidad de Coimbra	PORTUGAL	María Joao Moreno, Patricia Martins, Rui M. Brito, Catarina de Jesús
2 CRC París	FRANCIA	Santos Susín
3 Universidad Colonia	ALEMANIA	Agapios Sachinidis
4 Advanced Center for Treatment Research and Education in Cancer	INDIA	Tanuja Teni
5 Universidad Melbourne	AUSTRALIA	Santosh Panjkar
6 National University of Singapore	SINGAPUR	Jayaraman Sivaraman
7 Stemm Cell Center New York	EEUU	Michael Xavier Doss Jesudoss
8 Universidad Nacional de Rosario	ARGENTINA	Eduardo Ceccareli, Nestor Carrillo, Nestor Cortez
9 UNAM MEXICO	MEXICO	Enrique García-Hernández, Leslie Chávez, Alfredo Lagunas
10 JHU BALTIMORE	EEUU	Ernesto Freire
11 Universidad Virginia	EEUU	Paul S. Hoffman
12 Universidad New Hampshire	EEUU	Denis Chasteen
13 Universidad de Liverpool	REINO UNIDO	Jerry Turnbull
14 DOE Joint Genome Institute	EEUU	David E. Gilbert
15 Forest Products Laboratory	EEUU	Dan Cullen

Infraestructuras e instalaciones



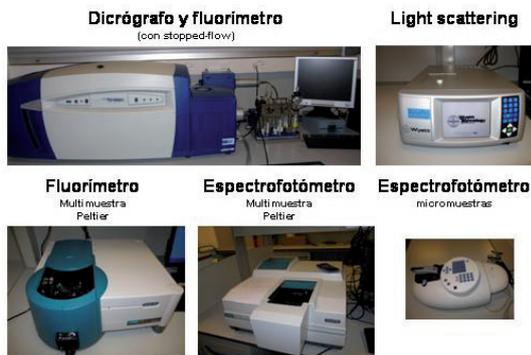
En la planta baja se localizan los siguientes laboratorios:

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 **microcentrífugas, frigoríficos/congeladores** y **cabina de seguridad química**. En este laboratorio trabajan principalmente estudiantes predoctorales.

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

- **Espectropolarímetro y espectrofotómetro de fluorescencia Chirascan (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 dicroísmo 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 desnaturalización 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

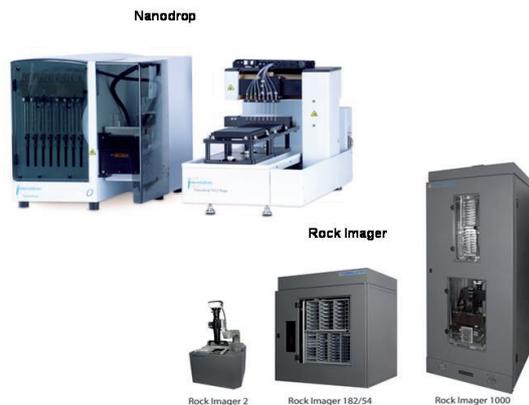
Infraestructuras e instalaciones

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, modelo 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 inmovilización 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.**

- **Centrífuga de sobremesa refrigerada.**



Infraestructuras e instalaciones

- Estufa termostatazada.
- 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, contaje, 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 instalación 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 termostatzada** 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 termostatzados.**
- **Incubador orbital de sobremesa.**
- **Dos estufas de incubación termostatzadas.**
- **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.



Infraestructuras e instalaciones

El Laboratorio de Centrifugación (1.2.04) incluye:

- **Centrífuga Avanti J-E (Beckman).**
- **Centrífuga 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 localiza 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.



7. SERVICIOS CENTRALES

En el BIFI existen unos servicios centrales para dar apoyo a todo el Instituto, formados por dos departamentos; Secretaría y Comunicación y Divulgación Científica.

7.1. Secretaría

Desde Secretaría se llevan a cabo todas las labores administrativas del Instituto. Está formado por Isabel Vidal como Jefa de Negociado y Beratriz Antolí como administrativo del BIFI y técnica en innovación.



7.2. Comunicación y Divulgación Científica

Desde el departamento de Comunicación y Divulgación Científica del BIFI se transfiere la información generada en el instituto a diferentes ámbitos como empresas, centros de investigación, instituciones, educación, medios y sociedad. Sus principales labores son dar soporte a la realización de eventos científicos, congresos, colaboraciones, convenios, contenidos de páginas web, notas de prensa, actuación con los diferentes medios de comunicación, edición de material de imagen corporativa, social media y elaboración de planes de comunicación, entre otros. Dicho departamento está formado por Elisa Cauhé como responsable y María Pilar Pérez.



8. ACTUACIONES

8.1. 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: 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)

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 Infrared.

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

Duración: 2010 - 2012

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

Título: Fundamental aspects of Quantum Field Theories

Entidad Financiadora: MICINN-INFN

Duración: 20 meses

Investigador principal: Manuel Asorey

Título: GLOBAL excursion - Extended Curriculum for Science Infrastructure Online

Entidad Financiadora: Comunidad Europea. 7º Programa Marco.

Duración: 2011 hasta: 2014

Investigador principal: Barbara Kieslinges (IP en Zaragoza: Alfonso Tarancón)

Título: SCI-BUS

Entidad Financiadora: UE 7º Programa Marco

Duración: 1/10/2011 hasta 30/08/2013

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

Con gestión externa:

Título: Physics of Cooperation and Conflict.

Entidad Financiadora: Unión Europea (COST Actions).

Duración: 1/09/2008 hasta 31/08/2011.

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

Título: Action for the science of complex systems and socially intelligent ICT (ASSYST).

Entidad Financiadora: 7 Programa Marco de la UE.

Duración: 1/1/2009 - 31/3/2012.

Investigador principal: Jeff Johnson (Angel Sánchez IP del grupo español).

Título: 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

Título: Resilience of Networks in Ecology and Economy (RESINEE).

Entidad Financiadora: ERA-Net Complexity.

Duración: 1/1/2011 hasta 31/12/2012.

Investigador principal: Angel Sánchez.

Proyectos internacionales (no UE)

Con gestión en Zaragoza

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

Entidad Financiadora: COMMUNAUTÉ DE TRAVAIL DES PYRÉNÉES

Duración: 2010 - 2012

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

Con gestión externa:

Título: Molecular Simulations In Biosystems and Material Science (SimBioMa)

Entidad Financiadora: European Science Foundation (Research Networking Programmes).

Duración: 01/05/2006 - 01/05/2011

Investigador principal: Berend Smit

Título: Asymptotic theory of outstanding observations in sequences of random variables

Entidad Financiadora: CONYCIT (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: Realidad Aumentada

Entidad Financiadora: FECYT Y LA CAIXA

Duración: 12 meses

Investigador principal: Milagros Medina

Actuaciones

Título: O-fucosilación de proteínas: buscando inhibidores para la leucemia linfática celular aguda y para la esclerosis múltiple. BFU2010-19504 (subprograma BMC)

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: Enero 2011 - Diciembre 2013

Investigador principal: Dr. Ramón Hurtado-Guerrero

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: Modelos Estocásticos y aplicaciones
Entidad Financiadora: MICINN. MTM2010-15972.

Duración: 01/01/2011-31/12/2013

Investigador principal: Gerardo 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: 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 gramineas 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 Tarancón 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: 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: 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: Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. BIO2010-14983

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. (BUF2010-16297)

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 (BIO2009-05735-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

Título: Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal (FIS2011-25167)

Entidad Financiadora: DGICYT (313.390 euros)

Duración: 2012-15

Investigador principal: Juan J. Mazo

Título: Bioavailability of amphiphilic ligands - Drugs and metabolites

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación (Proyectos de Movilidad - Acciones Integradas, PRI-AIBPT-2011-1025)

Duración: 2012-2013

Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy

Título: Ibercivis: cooperación hispano-portuguesa en computación voluntaria y ciencia ciudadana

Entidad Financiadora: ECiencia PORTUGAL. MICIN.(AIC-D-2011-0736)

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Ibercivis, computación voluntaria y ciencia ciudadana

Entidad Financiadora: ACCIONES COMPLEMENTARIAS. MICINN (TIN2011-13505-E)

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Equipamiento del centro de Supercomputación de Aragón (CeSAr)

Entidad Financiadora: INFRAESTRUCTURAS FEDER. MICINN (UNIZAR10-4E-564)

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Con gestión externa:

Título: Red Española de Física de sistemas fuera de equilibrio

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: 01/05/2009 - 01/05/2011

Director: Ignacio Pagonabarraga Mora

Tipo proyecto: PC - Proyecto de investigación competitivo

Actuaciones

Título: Desarrollo de Modelos de Propagación, Esquemas de Codificación y Algoritmos de Procesamiento Biomimético para las Señales Ultrasónicas de un Sistema de Posicionamiento Local en Espacios Extensos (LEMUR-UEx)

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Duración: 01/11/2009 - 31/10/2012

Investigador principal: Fernando J. Álvarez Franco

Título: Sistemas Complejos: Un enfoque Físico Estadístico a los

Medios Desordenados Y Granulares

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: 01/01/2011 - 31/12/2013

Investigador principal: Juan Jesús Ruiz Lorenzo

Título: Modelos Estocásticos Y Aplicaciones. Mtm2010-15972

Entidad Financiadora: MICINN

Duración: 2011-2013

Investigador principal: Gerardo Sanz Saiz

Título: Mtm2011-15044-E. The Pyrenees International Workshop And Summer School On Statistics, Probability And Operations Research, Sp0 2011

Entidad Financiadora: MICINN

Duración: 2011-2012

Investigador principal: Gerardo Sanz Saiz

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: 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 multi-disciplinarias

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: 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: 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

Título: Análisis Estructural, Optimización y Dinámica en Sistemas Reales con Estructura tipo Red.

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación

Duración: desde 2010 hasta 2012

Investigador principal: Miguel Romance (Universidad Rey Juan Carlos)

Título: Desarrollo de Modelos de Propagación, Esquemas de Codificación y Algoritmos de Procesamiento Biomimético para las Señales Ultrasónicas de un Sistema de Posicionamiento Local en Espacios Extensos (LEMUR-UJEX)

Referencia: TIN2009-14114-C04-04

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación.

Duración: 01/11/2009 - 31/10/2012

Investigador principal: Fernando J. Álvarez Franco

Autonómicos

Con gestión en Zaragoza:

Título: Grupo Consolidado DGA E-19 FÍSICA ESTADÍSTICA Y NO LINEAL

Entidad Financiadora: DGA

Duración: 2011

Investigador principal: Luis M. Floría

Título: Grupo Consolidado Protein Targets

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón

Entidades Participantes: Universidad de

Zaragoza

Duración: 2011

Investigador principal: Dr. Javier Sancho

Título: Grupo Consolidado Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

Entidad Financiadora: Diputación General de

Aragón

Actuaciones

Duración: 2011

Investigador principal: Dr. Alfonso Tarancón

Título: Grupo Consolidado Biología Estructural (B18)

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2011

Investigador principal: Dr. Carlos Gómez-Moreno

Título: Cheque tecnológico Inycom

Entidad Financiadora: ARAID - DGA

Duración: 01/01/2011-30/06/2011

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Cheque Tecnológico Cierzo

Entidad Financiadora: ARAID - DGA

Duración: 01/03/2011-30/09/2011

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Proteínas Mtch: regulación transcripcional en humanos y efectos fenotípicos del mutante en Drosophila.

Entidad Financiadora: Universidad de Zaragoza

Duración:2011

Investigador principal: José A. Carrodegua

Título: Genética química para la identificación de compuestos bioactivos que promueven diferenciación específica, proliferación o apoptosis en células madre.

Entidad Financiadora: Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud

Duración: 2011

Investigador principal: José A. Carrodegua

Título: Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad

Entidad Financiadora: Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.

Duración: 2011 hasta 2012

Investigador principal: José A. Carrodegua y David Iñiguez.

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: Ibercivis (Plataforma nacional de computación.)

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

Duración: 2007- Indeterminado

Investigador principal: Alfonso Tarancón

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 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: 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 Compartida BIFI-CECAM

Entidad Financiadora: MICINN-DGA-Feder UNZA08-4E-023

Duración: 2009-2012

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Acciones de soporte para el proyecto de Grid Regional ARAGRID

Entidad Financiadora: DGA PI065/08

Duración: Indefinida

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Técnico DGA Cluster Computación

Entidad Financiadora: Convenio DGA BSC

Duración: 2008-2011

Investigador principal: José Félix Sáenz

Título: Red Española de Supercomputación Caesaraugusta BSC

Entidad Financiadora: DGA Convenio 16434

Duración: 2008-2011

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Física Matemática y Teoría de Campos

Entidad Financiadora: DGA

Duración: 36 meses

Investigador principal: Manuel Fernández-Rañada

Título: Interacciones proteína-proteína implicadas en cáncer pancreático

Entidad Financiadora: Instituto de

Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (Proyectos Intramurales 2011)

Duración: 2011-2012

Investigador principal: José Luis Neira (Universidad Miguel Hernández, BIFI)

Título: Desarrollo de un modelo de mecánica estadística para la predicción de estabilidad y cinética de proteínas

Entidad Financiadora: Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (Proyectos Intramurales 2011)

Duración: 2011-2012

Investigador principal: Pierpaolo Bruscolini

Título: PATOLOGÍA DIGESTIVA B01

Entidad Financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2011

Investigador principal: Angel Lanas Arbeola

Título: Bases de datos de resultados computacionales en química y biología molecular. Línea "Jóvenes Investigadores 2010"

Entidad Financiadora: ARAID e Ibercaja

Duración: 27/12/2011 – 1/11/2012

Investigador principal: Pablo Echenique

Título: Personal Técnico Apoyo 2011

Entidad Financiadora: DGA

Técnico Janus

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Personal Técnico Apoyo 2011

Entidad Financiadora: DGA

Técnico Laboratorio Bioquímica

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Con gestión externa:

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

Actuaciones

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, Biomoléculas y sistemas complejos de interés tecnológico: 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: Herramienta colaborativa para la obtención de datos de movilidad urbana
Entidad Financiadora: BIFI
Duración: 6 meses
Investigador principal: Yamir Moreno y David Iñiguez

Título: Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad
Entidad Financiadora: BIFI
Duración: 6 meses
Investigador principal: José Alberto Carrodeguas y David Iñiguez interno del Bifi

Con gestión externa:

Título: Dinámica Fuera del Equilibrio del Modelo de Heisenberg Tridimensional en Presencia de un Campo Magnético
Entidad Financiadora: Universidad de Extremadura
Duración: 01/12/2010 - 31/11/2011
Referencia: ACCVII-08 (UEX)
Investigador principal: Antonio Gordillo Guerrero

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: HpKO
Entidad Financiadora: Genoma España Innocash
Duración: 2010-2011
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 –12/12/2012
Investigador principal: María F. Fillat Castejón

Título: Observatorio tecnológico con Hewlett-Packard
Entidad Financiadora: Hewlett-Packard
Duración: 6/7/2010-31/12/2011
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Con gestión externa:

Título: PRIN 2008

Entidad Financiadora: Ministerio de
Educación de Universidad e Investigación.

Duración: 04/12/2008 – 21/03/2012

Investigador principal: Giorgio Parisi
Participante del BIFI: Sergio Perez Gaviro

Actuaciones

8.2. 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 2011 (que citan expresamente al BIFI 165)

1. A.Cappa, D.Lopez-Bruna, F.Castejon, M.Ochando, J.L.Vazquez-Poletti, F.Medina, E.Ascasibar, J.M.Reynolds, M.Tereshchenko. Dynamic simulation of the electron Bernstein wave heating under NBI conditions in TJ-II plasmas. *Contributions to Plasma Physics*, 2011, Vol.51, No.1,83-91.
2. J.M.Garcia-Regana, A.Cappa, F.Castejon, J.B.O.Caughman, M.Tereshchenko, A.Ros, D.A.Rasmussen, J.B.Wilgen. Electron Bernstein waves emission in the TJ-II stellarator. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 2011, Vol.53, 065009,14.
3. M.Tereshchenko, F.Castejon, S.Pavlov, A.Cappa. Power-flow formulation of a ray approach to the modelling of inhomogeneous waves. *Physica Scripta*, 2011, Vol.84, 025401, 8.
4. M. Faccin, P. Bruscolini, A. Pelizzola. Analysis of the equilibrium and kinetics of the ankyrin repeat protein myotrophin. *Journal of Chemical Physics*. 134, 075102
5. P. Bruscolini, A. Naganathan. Quantitative Prediction of Protein Folding Behaviors from a Simple Statistical Model. *J. Am. Chem. Soc.* Volumen/Páginas: 133 (14), 5372–5379
6. J. Sánchez, A. Bustos, et al. Overview of TJ-II experiments, *Nucl. Fusion* 51, 9 (2011).
7. A. Bustos, F.Castejón, M. Osakabe, L.A. Fernández and V. Martin-Mayor, *Kinetic Simulations of Fast Ions in Stellarators*, *Nuclear Fusion* 51, 83040 (2011).
8. R. Jiménez-Gómez, A. Könies, E. Ascasíbar, F. Castejón, T. Estrada, L. G. Eliseev, A. V. Melnikov, J.A. Jiménez, D. G. Pretty, D. Jiménez-Rey, M.A. Pedrosa, A. de Bustos, S. Yamamoto, *Alfvén eigenmodes measured in the TJ-II stellarator*, *Nuclear Fusion* 51, 3 (2011).
9. C. Conesa, M. Xavier Doss, C. Antzelevitch, A. Sachinidis, J. Sancho and J. A. Carrodeguas. Identification of Specific Pluripotent Stem Cell Death-inducing Small Molecules by Chemical Screening. *Stem Cell Rev. Rep.* Publicado online. DOI:10.1007/s12015-011-9248-4
10. Ospina, A., Lagunas-Martinez, A., Pardo, J., and Carrodeguas J. A. Protein oligomerization mediated by the transmembrane carboxyl terminal domain of Bcl-XL. *FEBS Lett.* Volumen/ Páginas: 585/2935-2942
11. Martínez-Cruz, L.A., Encinar, J.A., Sevilla, P., Oyenarte, I., Gómez-García, I., Aguado-Llera, D., García-Blanco, F., Gómez, J. And Neira. J.L. Nucleotide-Induced Conformational Transitions in the CBS Domain Protein Mj0729 of *Methanocaldococcus Jannaschii*. A 24, 161-169 (2011) *Protein Engineering, Design and Selection*
12. Aguado-Llera, D., Martínez-Gómez, A. I., Prieto, J., Marenchino, M., Traverso, J. Gómez, J, Chueca, A. And Neira, J.L. The Conformational Stability and Biophysical Properties of the Eukaryotic Thioredoxins of *Pisum Sativum* are not Family-Conserved. A , E17068 (2011) *Plos One*
13. Soriano-Maldonado, P., Martínez-Gómez, A.I., Andújar-sánchez, M., Neira, J.L., Clemente-

- Jiménez, J.M., Las Heras-Vázquez, F.J., Rodríguez-Vico, F. and Martínez-Rodríguez, S. Biochemical and Mutational Studies of the *Bacillus cereus* cect 5050T formamidase support the existence of a c-e-e-k tetrad in several members of the nitrilase superfamily. *A* 77, 5761-5769 (2011) *Appl. Environ. Microbiol.*
14. Doménech, R., Bocanegra, R., Velázquez-Campoy, A. and Neira, J.L. The Isolated Major Homology Region of the HIV Capsid Protein is Mainly Unfolded in Solution and Binds to the Intact Protein. *A* 1814, 1269-1278 (2011) *Biochimica Biophysica Acta*
15. Doménech, R., Bocanegra, R., González-Muñiz, R., Gómez, J., Mateu, M.G. and Neira, J.L. Larger Helical Populations in Peptides Derived from the Dimerization Helix of the Capsid Protein of HIV-1 Results in Peptide Binding Toward Regions Other than the "Hotspot" Interface. *A* 12, 3252-3264 (2011) *Biomacromolecules*
16. Spínola-Amilibia, M., Rivera, J., Ortiz-Lombardía, M., Romero, A., Neira, J.L. and Bravo, J. the Structure of BRMS1 Nuclear Export Signal and SNX6 Interacting Region Reveals a Hexamer formed by Antiparallel Coiled Coils. *A* 411, 1114-1127 (2011) *Journal Molecular Biology*
17. Bocanegra, R., Nevot, M., Doménech, R., López, I., Abián, O., Rodríguez-Huete, A., Cavasotto, C.N., Velázquez-Campoy, A., Gómez, J., Martínez, M.Á., Neira, J.L. and Mateu MG. Rationally Designed Interfacial Peptides are Efficient in Vitro Inhibitors of HIV-1 Capsid Assembly with Antiviral Activity. *A* 2011 *Plos One*, e23877
18. Saelices, L., Galmozzi, C. V., Florencio, F. J., Muro-Pastor, M. L. and Neira, J. L. the Inactivating Factor of Glutamine Synthetase IF17 is an Intrinsically Disordered Protein, which Folds Upon Binding to its Target. *A* 2011 *biochemistry*, en prensa
19. S. Cuenda, N. R. Quintero y A. Sánchez. Sine-Gordon wobbles through Backlund transformations. *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 4, 1047-1056 (2011).
20. C. P. Roca, A. Sánchez y J. A. Cuesta. Individual strategy update and emergence of cooperation in social networks. *Journal of Mathematical Sociology*, in press (2011).
21. C. Fosco, A. Laruelle y A. Sánchez. Turnout intention and social networks. *Advances in Complex Systems* 14, 31-53 (2011).
22. J. Gómez-Gardeñes, M. Romance, R. Criado, D. Vilone y A. Sánchez. Evolutionary games defined at the network mesoscale: The Public Goods Game. *Chaos* 21, 016113 (2011).
23. J. Iranzo, J. Román y A. Sánchez. The Spatial Ultimatum game revisited. *Journal of Theoretical Biology* 278, 1-10 (2011).
24. D. Vilone, A. Sánchez y J. Gómez Gardeñes. Random topologies and the emergence of cooperation: the role of short-cuts. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P04019 (2011)
25. M. Starnini, A. Sánchez, J. Poncela y Y. Moreno. Coordination and growth: The Stag Hunt game on evolutionary networks. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P05008 (2011)
26. D. Vilone, A. Robledo and A. Sánchez. Chaos and unpredictability in evolutionary dynamics in discrete time. *Physical Review Letters* 107, 038101 (2011)
27. Disentangling Social and Group Heterogeneities: Public Goods Games on Complex Networks. Jesús Gómez Gardeñes,

Actuaciones

- Daniele Vilone Angel Sánchez. EPL 95, 68003 (2011).
28. P. Echenique, C. N. Cavasotto, and P. García-Risueño, "The canonical equilibrium of constrained molecular models", To be published in The European Physical Journal.
29. J. L. Alonso, A. Castro, P. Echenique, and A. Rubio, "On the combination of TDDFT with molecular dynamics: New developments", to be published in the book "Fundamentals of Time Dependent-Density Functional Theory", eds. M. A. L. Marques, N. Maitra, F. Nogueira, E. K. U. Gross, and A. Rubio, Springer-Verlag.
30. S. Adams, P. de Castro, P. Echenique, J. Estrada, M. D. Hanwell, P. Murray-Rust, P. Sherwood, J. Thomas, and J. Townsend, "The Quixote project: Collaborative and Open Quantum Chemistry data management in the Internet age", Journal of Cheminformatics 3 (2011) 38.
31. P. Echenique, C. N. Cavasotto, M. De Marco, P. García-Risueño and J. L. Alonso, "An exact expression to calculate the derivatives of position-dependent observables in molecular simulations with flexible constraints", PLoS one 6 (2011) e24563.
32. J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, J. C. Cuchí, P. Echenique, and F. Falceto, "Statistics and Nosé formalism for Ehrenfest dynamics", Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 44 (2011) 395004.
33. P. García-Risueño, P. Echenique, and J. L. Alonso, "Exact and efficient calculation of Lagrange multipliers in biological polymers with constrained bond lengths and bond angles: Proteins and nucleic acids as example cases", Journal of Computational Chemistry 32 (2011) 3039-3046.
34. Mur L., Allainguillaume J., Catalán P., Hasterok R., Jenkins G., Lesniewska K., Thomas I., Vogel J. 2011. Exploiting the Brachypodium Tool Box in cereal and grass research. New Phytologist 191: 334-347.
35. Segarra-Moragues JG, Catalan P. 2011. Characterization of microsatellite loci in *Festuca gautieri* (Poaceae) and transferability to *F. eskia* and *F. × picoeuropeana*. American Journal of Botany, AJB Primer Notes & Protocols in the Plant Sciences (e-published).
36. Catalán P, Müller J, Hasterok R, Jenkins G, Mur LAJ, Langdon T, Betekhtin A, Siwinska D, Pimentel M, López-Alvarez D. 2011. Evolution and taxonomic split of the model grass *Brachypodium distachyon* (L.) P. Beauv. Annals of Botany (e-published)
37. Viruel J, Catalan P, Segarra-Moragues JG. 2011. Disrupted phylogeographical microsatellite and cpDNA patterns indicate a vicariance rather than long-distance dispersal origin for the disjunct distribution of the Chilean endemic *Dioscorea biloba* (Dioscoreaceae) around the Atacama Desert. Journal of Biogeography (in press).
38. Catalán P. 2011. 23. *Festuca L.*, in Blanca G., Cabezudo B., Cueto M., Morales-Torres C., Salazar C. (eds.): Claves de la Flora Vasculare de Andalucía Oriental. pp. 128-133. Universidades de Granada, Almería, Jaen y Málaga. Granada.
39. Pérez-Collazos E., Catalán P. 2011. Capítulo 7: Genética de poblaciones. In: Moreno JC, Guzman D, Domínguez F. (eds). Biología de la conservación de *Vella pseudocytisus* subsp. *pau*, una planta amenazada en Aragón, pp. 163-185. Consejo de Protección de la Naturaleza en Aragón. Zaragoza.
40. Villar L., Segarra-Moragues JG, Minaya MA, Pérez-Collazos E, Viruel J, Catalán P. 2011. El

- valle del Ebro (yesos monegrinos) y territorios colindantes. In: Mota JF, Sánchez-Gomez P, Guirado JS (eds.): *Diversidad vegetal de las yeseras ibéricas. El reto de los archipiélagos edáficos para la conservación*, pp. 361-366. ADIF ? Mediterráneo Asesores Consultores. Almería.
41. Catalán P, Gonzalez-Candelas F. 2011. Técnicas y marcadores filogenéticos. In: Zardoya R, Vargas P (eds.): *El árbol de la vida: sistemática y evolución de los seres vivos*. Ed. Reverté. Madrid (in press).
42. Catalán P, Müller J. 2011. *Festuca L.*, in Zuloaga F. et al (eds.). *Flora de Argentina*. CONICET. Buenos Aires.
43. Martin-Luna B, Sevilla E, Gonzalez A, Bes MT, Fillat MF and Peleato ML. Expression of fur and its antisense a \square fur from *Microcystis aeruginosa* PCC7806 as response to light and oxidative stress. *J. Plant Physiol*, 168, 2244-2250 (2011)
44. Kuniyoshi TM, Gonzalez A, Lopez-Gomollon S, Valladares A, Bes MT, Fillat MF, Peleato ML. 2-oxoglutarate enhances NtcA binding activity to promoter regions of the microcystin synthesis gene cluster. *FEBS Lett*. 2011 Nov 3. [Epub ahead of print]
45. E. Sevilla, B. Martin-Luna, M. T. Bes, M. F. Fillat and M. L. Peleato. An active photosynthetic electron transfer chain required for mcyD transcription and microcystin synthesis in *Microcystis aeruginosa* PCC7806. *Ecotoxicology*, aceptado
46. X. Calbet, J. L. López and R. López-Ruiz. Equilibrium distributions in gas-like economic models: an analytical derivation. *A. Phys. Rev. E*. 83 n.3 2011
- 47.3. S. Abbasbandy, J.L. López and R. López-Ruiz. The homotopy analysis method and the Lionard equation. *A. Int. J. Comput. Math.* 88(1) 121-134. 2011.
48. J. L. López, R. López-Ruiz and X. Calbet. Exponential wealth distribution in a random market. A rigorous explanation. *A. J. Math. Anal. Appl.*
49. J. Sañudo, R. López-Ruiz. Statistical measures and magic numbers in metal clusters. *Physics Letters A*. 375 (2011) 1674-1676
50. R. López Ruiz y J. Sañudo. Shape of Traveling Densities with Extremum Statistical Complexity. *International Journal of Applied Mathematics & Statistics (IJAMAS)* 26(2012) 81-91
51. Á. Cappa, D. López-Bruna, F. Castejón, M. Ochando, F. Medina, J.L. Vázquez. Poletti, M. Tereshchenko, E. Ascasíbar. Calculated evolution of the Electron Bernstein Wave heating deposition profile under NBI conditions in TJ-II plasmas". *Contribution to Plasma Physics*, 51 (2011) 83.
52. I. Pastor, J. Guasp, R. Álvarez-Estrada, and F. Castejón. Monte Carlo approach to Thomson scattering in relativistic fusion plasmas with allowance for ultraintense laser radiation". *Nuclear Fusion* 51 (2011) 043011
53. J. M. García-Regaña, A. Cappa, F. Castejón, J B O Caughman², M. Tereshchenko, A Ros¹, D A Rasmussen² and J B Wilgen². Electron Bernstein waves emission in the TJ-II stellarator. *Plasma Physics and Controlled Fusion* 53 (2011) 065009
54. M. Tereshchenko, F. Castejón, S. Pavlov, and Á. Cappa. Power-flow formulation of a ray approach to the modeling of inhomogeneous waves. *Physics Scripta*, 84 (2011) 025401-02509.
55. A. Bustos, F. Castejón, M. Osakabe, L. A. Fernández, V. Martin-Mayor, J. Guasp. Kinetic

Actuaciones

- simulations of Fast ions in stellarators. *Nuclear Fusion*, 51 (2011) 083040 (10 pp).
56. J. Sánchez, M. Acedo, A. Alonso, J. Alonso, P. Alvarez, E. Ascasíbar, A. Baciero, R. Balbín, L. Barrera, E. Blanco, J. Botija, A. de Bustos, E. de la Cal, I. Calvo, A. Cappa, J. M. Carmona, D. Carralero, R. Carrasco, B. A. Carreras 1), F. Castejón, ..., G. Wolfers and B. Zurro. Overview of TJ-II experiments. *Nuclear Fusion* 51 (2011) 094022.
57. J.L. Velasco, A. Bustos, F. Castejón, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Tarancón. ISDEP: Integrator of Stochastic Differential Equations for Plasmas. Submitted to *Journal of Computational Physics*, 2011.
58. M.L.E., Romero, O., Abian, O., Freire D.M.G., Guisan J.M. and Palomo J.M. Site-specific glycosylation of *Candida antarctica* B lipase for improving stability, activity and selectivity Gutarra, *ChemCatChem*, 2011 (on line) 11 nov.
59. Abian, O, Alfonso, P., Velazquez-Campoy, A., Giraldo, P., Pocovi, M., and Sancho, J. Therapeutic strategies for Gaucher disease: miglustat (NB-DNJ) as a pharmacological chaperone for glucocerebrosidase and the different thermostability of velaglucerase alfa and imiglucerase. *Molecular Pharmaceutics*, 2011 Aceptado (on line) 3 nov.
60. Ayuso-Tejedor, S., Abián, O., Velázquez-Campoy A. and Sancho J. Mechanism of FMN binding to the apoflavodoxin from *Helicobacter pylori*. *Biochemistry*. 2011 Oct 11;50(40): 8703-11.
61. Pérez-Llarena, F.J., Kerff, F., Abián, O., Mallo, S., Fernández, M.C., Galleni, M., Sancho, J., and Bou, G. Distant and new mutations in CTX-M-1 β -lactamase affect cefotaxime hydrolysis. *Antimicrobial Agents and Chemotherapy (AAC)* 2011, 55(9):4361-8.
62. Arias-Moreno, X., Abian O., Vega, S., Sancho, J., and Velazquez-Campoy, A. Protein-cation interactions: Structural and thermodynamic aspects. *Current Protein and Peptide Science*, 2011, 12, 325-338.
63. Ayuso-Tejedor, S., Abian, O., Sancho, J. Polar underexposed residues and protein stabilization. *Protein Engineering, Design, and Selection (PEDS)* 2011, 24(1-2):171-7.
64. S. Sagasti, I. Yruela, M. Bernal, S. Frago, M. Medina and R. Picorell. The recombinant copper chaperone for the superoxide dismutase (CCS) from *Glycine max*. *Metallomics*, 3, 169-17. 2011.
65. A. Hernández-Ortega, K. Borrelli, P. Ferreira, M. Medina, A. T. Martínez and V. Guallar. Substrate diffusion and oxidation in the flavoenzyme Aryl-Alcohol Oxidase. *Biochem. J.*, 436, 341-350. 2011.
66. R. D. Ceccoli, N. E. Blanco, M. Medina and N. Carrillo. Stress response of transgenic tobacco plants expressing a cyanobacterial ferredoxin in chloroplasts. *Plant Mol. Biol.* 76, 535-544. 2011.
67. A. Hernández-Ortega, F. Lucas, P. Ferreira, M. Medina, Victor Guallar, and Angel T. Martínez. Modulating O₂ reactivity in a fungal flavoenzyme: involvement of aryl-alcohol oxidase Phe501 contiguous to catalytic histidine. *J. Biol. Chem.* 286, 41105-41114. 2011.
68. J. R. Peregrina, I. Lans and M. Medina. The transient catalytically-competent coenzyme allocation into the active site of *Anabaena* Ferredoxin NADP⁺-reductase. *Eur. Biophys. J.* 41, DOI: 10.1007/s00249-011-0704-5. 2012.
69. A. Hernández-Ortega, P. Ferreira and A. T. Martínez. Fungal aryl-alcohol oxidase: a

- peroxide-producing flavoenzyme involved in lignin degradation. *Applied Microbiology and Biotechnology*, en prensa. 2011
- 70.A. Serrano, and M. Medina. Revisiting the mechanism of interaction and electron transfer between Flavodoxin and Ferredoxin NADP+-reductase by fast kinetic methods with photodiode array detection. *Advances in Photosynthesis. Fundamental aspects*. ISBN:978-953-307-928-8. 2011 Najafpour, M.M. Intech. Rijeka, Croatia
- 71.M. Medina, A. Sánchez-Azqueta, I. Lans, M. Martínez-Júlvez. Ser80 in Anabaena Ferredoxin-NADP+ reductase contributes to stabilize the catalytically competent complex NADP+. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*.
- 72.C. Gómez-Moreno, C. Marcuello, R. De Miguel, M. Medina, M. Martínez-Júlvez, A. Lostao. Atomic Force Microscopy as a tool to understand the mechanostability of Ferredoxin-NADP+ reductase complexes with its protein partners. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*.
- 73.A. Serrano, B. Herguedas, S. Frago, S. Arilla-Luna, P. Ferreira, A. Velázquez-Campoy, M. Martínez-Júlvez, M. Medina, FMN and FAD biosynthesis in Prokaryotes: The FADS synthetase family. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*
- 74.A. Hernández-Ortega, P. Ferreira, P. Merino, M. Medina, V. Guallar, A.T. Martínez. Stereoselective hydride transfer mechanism in substrate oxidation by aryl-alcohol oxidase. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*
- 75.A. Hernández-Ortega, F. Lucas, P. Ferreira, M. Medina, V. Guallar, A.T. Martínez. Modulating flavin reoxidation in fungal aryl-alcohol oxidase: involvement of Phe501 contiguous to catalytic histidine. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*
- 76.P. Ferreira, R. Villanueva, A. Usón, M.D. Miramar, S. Susin, M.L. Peleato, M. Medina. Unraveling the role of the reductase activity of the human apoptosis inducing factor (hAIF) *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*
- 77.M. Martínez-Júlvez, O. Abian, S. Vega, M. Medina and A. Velázquez-Campoy. Studying the allosteric energy cycle by isothermal titration calorimetry. REF. LIBRO: *Methods in Molecular Biology*, vol. 796, 53-70. *Allostery: Methods and Protocols*. ISBN 978-1-61779-333-2. 2012. Aron W. Fenton. Springer Science+Business Media, LLC
- 78.V. Martin-Mayor and S. Perez-Gaviro. The three dimensional Heisenberg spin glass under a weak random anisotropy. *Phys. Rev. B. Phys. Rev. B* 84, 024419 (2011)
- 79.A. Fiasconaro, J. J. Mazo, F. Falo. Translocation of a polymer chain driven by a dichotomous noise. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiments* .p11002 (2011) [11pp].
- 80.S. Bouzat, F. Falo. Tug-of-war of molecular motors: the effects of uneven load sharing. *Physical Biology*. 8 066010 (2011) [11pp].
- 81.J. Gómez-Gardeñes, M. Romance, R. Criado, D. Vilone, A. Sánchez. Evolutionary games defined at the Network Mesoscale: The Public Goods game. *CHAOS*. 21, 016113
- 82.J. Gómez-Gardeñes, Y. Moreno, A. Arenas. Evolution of microscopic and mesoscopic synchronized patterns in complex networks. *CHAOS*. 21, 016105
- 83.R. Sinatra, J. Gómez-Gardeñes, R. Lambiotte, V. Nicosia, V. Latora. Optimal random walks in

Actuaciones

complex networks with limited information. *Physical Review E*. 83, 030103(R)

84.J. Gómez-Gardeñes, S. Gomez, A. Arenas, Y. Moreno. Explosive. Synchronization transitions in Scale-free networks. *Physical Review Letters*. 106, 128701

85.D. Vilone, A. Sánchez, J. Gómez-Gardeñes. Random topologies and the emergence of cooperation: The role of short-cuts. *Journal of Statistical Mechanics*. P04019

86.S. Gómez, J. Gómez-Gardeñes, Y. Moreno, A. Arenas. Nonperturbative heterogeneous mean-field approach to epidemic spreading in complex networks. *Physical Review E*. 84, 036105

87.J. Gómez-Gardeñes, D. Vilone, A. Sánchez. Disentangling Social and Group heterogeneities: Public Goods games on Complex Networks. *Europhysics Letters*. 95, 68003

88.S. Assenza, R. Gutierrez, J. Gómez-Gardeñes, V. Latora, S. Boccaletti. Emergence of structural patterns out of synchronization in networks with competitive interactions. *Nature Scientific Report*. 1, 99

89.R. Gutierrez, A. Amann, S. Assenza, J. Gómez-Gardeñes, V. Latora, S. Boccaletti. Emerging meso- and macro-scale structures from Synchronization of Adaptive Networks. *Physical Review Letters*. 107, 234103

90.Lira-Navarrete E, Valero-González J, Villanueva R, Martínez-Júlvez M, Tejero T, Merino P, Panjekar S, Hurtado-Guerrero Ramon. Structural insights into the mechanism of protein O-fucosylation. *PLoS ONE*, 6(9):e25365. 2011 IF:4.411

91.E. Wong, G. Vaaje-Kolstad, A. Ghosh, R. Hurtado-Guerrero, Peter V. Konarev, Adel F. M.

Ibrahim, Dmitri I. Svergun, Vincent G. H. Eijsink, Nabendu S. Chatterjee and Daan M. F. van Aalten. The *Vibrio cholerae* colonization 1 factor GbpA possesses a 2 modular structure that governs binding to different host 3 surfaces. *PLoS Pathogens*, in press 2011. IF:9.079

92.R. López-Ruiz. Statistical Chaos and Complexity ,Número especial de la revista IJAMAS,, Guest Editor-in-Chief,Int. J. of Applied Mathematics and Statistics, vol. 26, issue 2 (2012).(14 artículos realizados por 36 investigadores de 12 países distintos).

93.R. López-Ruiz, J. Sañudo, E. Romera and X. Calbet,Statistical Complexity and Fisher-Shannon Information. Applications, CHAPTER in the book STATISTICAL COMPLEXITY, K.D. Sen (Ed.), Ch. 4, pp. 65-127, Springer Books, Setember (2011).

94.S. Abbasbandy, J. L. López and R. López-Ruiz, The Homotopy Analysis Method and the Liénard Equation. *International Journal of Computer Mathematics* 88, 121-134 (2011).

95.C. Pellicer-Lostao and R. López-Ruiz, Transition from Exponential to Power Law Income Distributions in a Chaotic Market ,*International Journal of Modern Physics C* 22, 21-33 (2011).

96.J. Sañudo and R. López-Ruiz, Statistical Measures and Magic Numbers in Metal Clusters, *Physics Letters A* 375, 1674-1676 (2011).

97.X. Calbet, J.L. López and R. López-Ruiz, Equilibrium Distributions and Relaxation Times in Gas-like Economic Models: An Analytical Derivation, *Physical Review E* 83, 0360108(7) (2011).

98.R. López-Ruiz and C. Pellicer-Lostao,Modelos Matemáticos de la Riqueza, "Investigación y Ciencia", núm. 414, pp. 50-55, Marzo (2011).

99. R. López-Ruiz and E. Shivanian, The Maxwell velocity distribution, Artículo online en la wiki Sklogwiki sobre temas relacionados con la mecánica estadística, Julio (2011) .
100. R. López-Ruiz. Sobre la h-excelencia y el índice h, Publicado en 'El_LibrePensador.com', Setiembre (2011). También en 'RedCientífica.com', Noviembre (2011).
101. Gouet, R., F. Javier López, Sanz, G. Asymptotic normality for the number of records from general distributions. *Advances in Applied Probability*. 43, 422-436
102. Gouet, R., F. Javier López, Sanz, G. On r -record observations: asymptotic rates for the counting process and elements of maximum likelihood estimation. *TEST*. DOI: 10.1007/s11749-011-0242-6
103. Esteban LM, Sanz G and Borque A. A step-by-step algorithm for combining diagnostic tests. Volume 38, Issue 5, May 2011, pages 899-911. *Journal of Applied Statistics*. Volume 38, Issue 5, May 2011, pages 899-911
104. C. Pellicer-Lostao, R. López-Ruiz. Notions of Chaotic Cryptography: Sketch of a Chaos based Cryptosystem. *Cryptography / Book 2*. InTech. Volumen/Páginas: 30
105. P. García-Risueño, P. Echenique, and J. L. Alonso. Exact and efficient calculation of Lagrange multipliers in constrained biological polymers: Proteins and nucleic acids as example cases. *J Comp Chem*. Volumen/Páginas: 32 (2011) 3039–3046
106. P. Echenique, C. N. Cavasotto, M. De Marco, P. García-Risueño, and J. L. Alonso. An exact expression to calculate the derivatives of position-dependent observables in molecular simulations with flexible constraints. *PLoS ONE*. Volumen/Páginas: 6(9): e24563
107. R. Graña-Montes, N.S. de Groot, V. Castillo, J. Sancho, A. Velazquez-Campoy, S. Ventura. Contribution of Disulfide Bonds to Stability, Folding and Amyloid Fibril Formation: The PI3-SH3 Domain Case. *Antioxidants & Redox Signaling*. 2012 16:1-15 (publicado online en 2011)
108. M. Martínez-Julvez, O. Abian, S. Vega, M. Medina, A. Velazquez-Campoy. Studying the Allosteric Energy Cycle by Isothermal Titration Calorimetry. *Methods in Molecular Biology*. 2012 vol.796, pp.53-70 (publicado on-line en 2011)
109. O. Abián, P. Alfonso, A. Velazquez-Campoy, P. Giraldo, M. Pocovi, J. Sancho. Therapeutic Strategies for Gaucher Disease: Miglustat (NB-DNJ) as a Pharmacological Chaperone for Glucocerebrosidase and the Different Thermostability of Velaglucerase alfa and Imiglucerase. *Molecular Pharmaceutics* (publicado on-line en 2011)
110. A. Serrano, B. Herguedas, S. Frago, S. Arilla-Luna, P. Ferreira, I. Yruela, J.A. Hermoso, A. Velazquez-Campoy, M. Martínez-Julvez, M. Medina. FMN and FAD Biosynthesis in Prokaryotes: The FADS Synthetase Family. *Flavins and Flavoproteins 2011*
111. S. Ayuso-Tejedor, O. Abian, A. Velazquez-Campoy, J. Sancho. Mechanism of FMN Binding to the Apoflavodoxin from *Helicobacter pylori*. *Biochemistry*. 2011 50 8703-8711
112. R. Bocanegra, M. Nevot, R. Domenech, I. Lopez, O. Abian, A. Rodriguez-Huete, C.N. Cavasotto, A. Velazquez-Campoy, J. Gomez, M.A. Martinez, J.L. Neira, M.G. Mateu. Rationally Designed Interfacial Peptides are Efficient in vitro Inhibitors of HIV-1 Capsid Assembly with Antiviral Activity. *PLoS ONE*. 2011 6 e23877

Actuaciones

113. R. Domenech, R. Bocanegra, A. Velazquez-Campoy, J.L. Neira. The Isolated Major Homology Region of the HIV Capsid Protein is Mainly Unfolded in Solution and Binds to the Intact Protein. *Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics*. 2011 1814 1269-1278
114. B.N. Tran, L. Chen, Y. Liu, J. Wu, A. Velazquez-Campoy, J. Sivaraman, C.L. Hew. A Novel Histone H3 Binding Protein ORF158L from the Singapore Grouper Iridovirus (SGIV). *Journal of Virology*. 2011 85 9159-9166
115. M.R. Kasimova, A. Velazquez-Campoy, H.M. Nielsen. On the Temperature Dependence of Complex Formation Between Chitosan and Proteins. *Biomacromolecules*. 2011 12 2534-2543
116. E. Freire, Y. Kawasaki, A. Velazquez-Campoy, A. Schön. Characterisation of Ligand Binding by Calorimetry. *Biophysical Approaches Determining Ligand Binding to Biomolecular Targets: Detection, Measurement and Modelling* (Eds. A. Podjarny, A. Dejaergere, B. Kieffer). 2011 275-299
117. R.T. Shenoy, S. Thangamani, A. Velazquez-Campoy, H. Bow, J. Ling-Ding, J. Sivaraman. Structural Basis for Dual-Inhibition Mechanism of a Non-Classical Kazal-type Serine Protease Inhibitor from Horseshoe Crab in Complex with Subtilisin. *PLoS ONE*. 2011 6 e18838
118. X. Arias-Moreno, O. Abian, S. Vega, J. Sancho, A. Velazquez-Campoy. Protein-Cation Interactions: Structural and Thermodynamic Aspects. *Current Protein & Peptide Science*. 2011 12 325-33
119. S. Sagasti, I. Yruela, M. Bernal, S. Frago, M. Medina and R. Picorell. The recombinant copper chaperone for the superoxide dismutase (CCS) from *Glycine max*. *Metallomics*, 3, 169-175 2011. IF:3.592
120. A. Hernández-Ortega, K. Borrelli, P. Ferreira, M. Medina, A. T. Martínez and V. Guallar. Substrate diffusion and oxidation in the flavoenzyme Aryl-Alcohol Oxidase. *Biochem. J.*, 436, 341-350. 2011 IF:5.016
121. R. D. Ceccoli, N. E. Blanco, M. Medina and N. Carrillo. Stress response of transgenic tobacco plants expressing a cyanobacterial ferredoxin in chloroplasts. *Plant Mol. Biol.* 76, 535-544. IF:4.149
122. A. Hernández-Ortega, F. Lucas, P. Ferreira, M. Medina, V. Guallar, and A. T. Martínez. Modulating O₂ reactivity in a fungal flavoenzyme: involvement of aryl-alcohol oxidase Phe501 contiguous to catalytic histidine. *J. Biol. Chem.* DOI: 10.1074/jbc.M111.282467. IF:5.328
123. J. R. Peregrina, I. Lans and M. Medina. The transient catalytically-competent coenzyme allocation into the active site of *Anabaena* Ferredoxin NADP⁺-reductase. *Eur. Biophys. J.* 41, DOI: 10.1007/s00249-011-0704-5 IF:2.387
124. A. Hernández-Ortega, P. Ferreira and A. T. Martínez. Fungal aryl-alcohol oxidase: a peroxide-producing flavoenzyme involved in lignin degradation. *Applied Microbiology and Biotechnology*, en prensa IF:3.28
125. S. Gonzalez, J. Borge-Holthoefer, A. Rivero, and Y. Moreno, "The Dynamics of Protein Recruitment through an Online Network", *Scientific Reports*, in press.
126. E. Cozzo, J. Sanz, and Y. Moreno, "Dynamics of Biomolecular Networks". Chapter contribution to the *Encyclopedia of Molecular Cell Biology and Molecular Medicine*. in press, 2011.

127. J. Poncela, J. Gomez-Gardenes, L. M. Floria, and Y. Moreno, "Growing Networks Driven by the Evolutionary Prisoner's Dilemma Game". Chapter contribution to the Handbook of Optimization in Complex Networks. in press, 2011.
128. S. Meloni, A. Arenas, S. Gómez, J. Borge-Holthoefer, and Y. Moreno, "Modeling Epidemic Spreading in Complex Networks: Concurrency and Traffic". Chapter contribution to the Handbook of Optimization in Complex Networks, in press, 2011.
129. J. Sanz, L. M. Floria, and Y. Moreno, "Dynamics of Persistent Infections in Homogeneous Populations", International Journal of Bifurcation and Chaos, in press, 2011.
130. J. Borge-Holthoefer, Y. Moreno, and A. Arenas, "Topological vs. Dynamical Robustness in a Lexical Network". International Journal of Bifurcation and Chaos, in press, 2011.
131. C. Gracia-Lazaro, F. Quihandría, L. Hernandez, L. M. Floria, and Y. Moreno, "Co-evolutionary network approach to cultural dynamics controlled by intolerance", Physical Review E, in press (2011).
132. S. Gómez, J. Gomez-Gardenes, Y. Moreno, and A. Arenas, "Non-perturbative heterogeneous mean-field approach to epidemic spreading in complex networks", Physical Review E 84, 036105 (2011).
133. S. Meloni, N. Perra, A. Arenas, S. Gomez, Y. Moreno, and A. Vespignani, "Modeling Human Mobility Responses to the Large-scale Spreading of Infectious Diseases". Scientific Reports, 1, 62 (2011).
134. J. Borge-Holthoefer, A. Rivero, I. Garcia, E. Cauhe, A. Ferrer, D. Ferrer, D. Francos, D. Iñiguez, M. P. Perez, G. Ruiz, F. Sanz, F. Serrano, C. Viñas, A. Tarancon, and Y. Moreno, "Structural and Dynamical Patterns on Online Social Networks: the Spanish May 15th Movement as a case study". PLoS ONE, 6(8): e23883 (2011).
135. J. Borge-Holthoefer, Y. Moreno, and A. Arenas, "Modeling Abnormal Priming in Alzheimer's patients with a Free Association Network", PLoS ONE, 6(8): e22651 (2011).
136. J. Sanz, J. Navarro, A. Arbues, C. Martin, P. C. Marijuan, and Y. Moreno, "The Transcriptional Regulatory Network of Mycobacterium Tuberculosis". PLoS ONE, 6(7): e22178 (2011).
137. M. Starnini, A. Sánchez, J. Poncela, and Y. Moreno, "Coordination and Growth: The Stag Hunt Game on Evolutionary Networks". Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, P050008 (2011).
138. J. Poncela, J. Gomez-Gardenes, and Y. Moreno, "Cooperation in Scale-Free Networks with Limited Associative Capacities". Physical Review E, 83, 057101 (2011).
139. C. Gracia Lazaro, L. M. Floria, and Y. Moreno, "Selective Advantage of Tolerant Cultural Traits in the Axelrod-Schelling Model". Physical Review E, 83, 056103 (2011).
140. J. Gomez-Gardenes, Y. Moreno, and A. Arenas, "Evolution of Microscopic and Mesoscopic Synchronized Patterns in Complex Networks". Chaos, 21, 016105 (2011).
141. S. Gómez, A. Arenas, J. Borge-Holthoefer, S. Meloni, and Y. Moreno, "Probabilistic Framework for Epidemic Spreading in Complex Networks". International Journal of Complex Systems in Science, 1, 47-54 (2011).
142. Gouet, R., F. Javier López, Sanz, G. Asymptotic normality for the number of records

Actuaciones

from general distributions. *Advances in Applied Probability*. 43, 422-436

143. Gouet, R., F. Javier López, Sanz, G. Record observations: asymptotic rates for the counting process and elements of maximum likelihood estimation. *TEST*. DOI: 10.1007/s11749-011-0242-6

144. V. Martin-Mayor and S. Perez-Gaviro. The three dimensional Heisenberg spin glass under a weak random anisotropy. *Phys. Rev. B*, *VPhys. Rev. B* 84, 024419 (2011)

145. s. Johnson, J.J. Torres, JM and M.A. Muñoz. "ENTROPIC ORIGIN OF DISSORTATIVITY IN COMPLEX NETWORKS", *Physical Review Letters* 104, 108702 (4 pages) (2010)

146. S. de Franciscis, J.J. Torres and JM. "UNSTABLE DYNAMICS, NONEQUILIBRIUM PHASES, AND CRITICALITY IN NETWORKED EXCITABLE MEDIA", *Physical Review E* 82, 041105 (2010)

147. JM. "LOS ESTORNINOS DE SAN LORENZO —O CÓMO MEJORAR LA EFICACIA DEL GRUPO", *Revista de Física (RSEF)* 25 (2), 62-64 (2011)

148. J.J. Torres, JM and J.F. Mejías "CAN INTRINSIC NOISE INDUCE VARIOUS RESONANT PEAKS?", *New Journal of Physics* 13, 053014 (2011), 2009 IF = 3,31.

149. S. Johnson, JM and J.J. Torres "MECHANISM FOR ROBUST SHORT-TERM MEMORY WITHOUT SYNAPTIC LEARNING", submitted (2011); arXiv:1007.3122

150. PL Garrido, J Marro and F. de los Santos "NONEQUILIBRIUM STATISTICAL PHYSICS TODAY", editors, *AIP Conf. Proc.*, volume 1332, New York 2010 (también on-line).

151. Mateu, M.G. (2011). Virus engineering: functionalization and stabilization. *Protein Eng. Des.Sel.* 24, 53-63.

152. Ojosnegros, S., García-Arriaza, J., Escarmís, C., Manrubia, S.C., Perales, C., Arias, A., Mateu, M.G. and Domingo, E. (2011). Increase in the stability of infectious viral particles can drive evolution towards viral genome segmentation. *PLoS Genetics* 7(3): e1001344.

153. Martín-Acebes, M.A., Vázquez-Calvo, A., Rincón, V., Mateu, M.G. and Sobrino, F. (2011). J.Virol. A single amino acid substitution in the capsid of foot-and-mouth disease virus can increase acid resistance. *J.Virol.* 85, 2733-2740.

154. Rincón, V., Bocanegra, R., Rodríguez-Huete, A., Rivas, G. and Mateu, M.G. (2011). Effects of macromolecular crowding on the inhibition by small peptides of virus assembly and attachment to host cells. *Biophys.J.* 100, 738-746.

155. Bocanegra, R., Domenech, R., Nevot, M., Rodríguez-Huete, A., López, I., Fuertes, M.A., Cavasotto, C., Martínez, M.A., Neira, J.L. and Mateu, M.G. (2011). Rationally designed interfacial peptides are efficient in vitro inhibitors of HIV-1 capsid assembly with antiviral activity. *PLoS ONE.* 6, e23877.

156. Domenech, R., Bocanegra, R., González, R., Gómez, J., Mateu, M.G. and Neira, J.L. (2011). Larger helical populations in peptides derived from the dimerization helix of the capsid protein of HIV-1 results in peptide binding towards regions other than the hotspot interface. *Biomacromolecules* 12, 3252-3264.

157. Pérez, R., Castellanos, M., Rodríguez-Huete, A. and Mateu, M.G. (2011). Functional analysis of intersubunit interfaces within the

trimeric assembly intermediate of a parvovirus capsid. *J.Mol.Biol.* 413, 32-40.

158. Martínez-Martín, D., Carrasco, C., Pérez, R., Mateu, M.G., Carrascosa, J.L., Kiracofe, D., Raman, A., de Pablo, P.J. and Gómez-Herrero, J. (2011). Frequency modulation atomic force microscopy under physiological conditions: a new tool for Virology. *PLoS ONE*, en prensa.

159. K. Krieger, A. Castro, and E. K. U. Gross, "Optimization Schemes for Selective Molecular Cleavage with Tailored Ultrashort Laser Pulses", *Chem. Phys* 391, 50 (2011).

160. A. Castro and I. V. Tokatly, "Quantum Optimal Control Theory in the Linear Response Formalism, *Phys. Rev. A* 84, 033410 (2011).

161. D. Kammerlander, A. Castro, and M. A. L. Marques, "Optimal Control of the Electronic Current Density – An application to one- and two-dimensional one-electron systems", *Phys. Rev. A* 83, 043413 (2011).

No mencionan al BIFI

1. José L. López and Ester Pérez-Sinusía. The Liouville-Neumann expansion in singular eigenvalue problems. Clave: A. *Applied Mathematic Letters*.

2. J. L López and P. Pagola. A systematic "saddle point near a pole" asymptotic method with application to the Gauss Hypergeometric function. *A. Stud. Appl. Math.*

3. J. L López and P. Pagola. A family of integrals analytically solvable. Clave: A. *Int. J. Comput. Math.*

4. José L. López, Ester Pérez-Sinusía and Nico M. Temme. A three-point Taylor algorithm for three-point boundary value problems. Clave: A. *J. Differential Equations*.

5. J. L López and N. Temme. Large Degree Asymptotics of Generalized Bessel Polynomials. *J. Math. Anal. Appl.* 377(1)30-42. Fecha: 2011.

6. J.L. Velasco, K. Allmaier, A. López-Fraguas, C.D. Beidler, H. Maassberg, W. Kernbichler, F. Castejón, J.A. Jiménez. Calculation of the bootstrap current profile for the TJ-II stellarator. *Plasma Physics and Controlled Fusion* 53/115014

7. J. Sánchez,, J.L.Velasco ... y equipo del TJ-II Overview of TJ-II experiments. *Nuclear Fusion* 51 /094022

8. J.L. Velasco, F. Castejón. Study of the neoclassical radial electric field of the TJ-II flexible heliac. *Plasma Physics and Controlled Fusion*

aceptado

9. R. Jiménez-Gómez, A. Konies, E. Ascasíbar, F. Castejón, T. Estrada, L. Eliseev, A. Melnikov, J.A. Jiménez, D. Pretty, D. Jiménez-Rey, M. A. Pedrosa, A. de Bustos. and S. Yamamoto. "Alfvén eigenmodes measured in the TJ-II stellarator". *Nuclear Fusion*, 51 (2011) 033001

10. V.E. Moiseenko, V.L. Berezhnyj, V.N. Bondarenko, P.Ya. Burchenko, F. Castejón, V.V. Chechkin, V.Ya. Chernyshenko, M.B. Dreval, I.E. Garkusha, G.P. Glazunov, L.I. Grigor'eva, D. Hartmann, C. Hidalgo, R. Y. Narushima, F. Castejón, S. Sakakibara, K. Y. Watanabe, S. Ohdachi, Y. Suzuki, T. Estrada, F. Medina, D. López-Bruna, M. Yokoyama, M. Yoshinuma, K. Ida, S. Nishimura, LHD Experiment Group, and TJ-II Experiment Group. "Experimental Study of the Effect of Poloidal Flow on Stability of

Actuaciones

Magnetic Islands in LHD and TJ-II". Nuclear Fusion, 51 (2011) 083030.

11. Xavier Sáez, Alejandro Soba, Edilberto Sánchez, Ralf Kleiber, Francisco Castejón, José M. Cella. "Improvements of the Particle-In-Cell Code EUTERPE for Petascaling Machines". Computer Physics Communications. In press, 2011.

12. J.L. Velasco, K. Allmaier, A. Lopez-Fraguas, C.D. Beidler, H. Maassberg, W. Kernbichler, F. Castejón, J.A. Jiménez. "Calculation of the bootstrap current profile for the TJ-II stellarator". Plasma Physics and Controlled Fusion 53 (2011) 115014.

13. Antonio Gómez-Iglesias, Francisco Castejón, Miguel A. Vega-Rodríguez. "A Novel Algorithm for Stellarator Optimisation Using Metaheuristics". Submitted to Journal of Computational Physics, 2011.

14. Manuel Rodríguez-Pascual, Andrés Bustos, Francisco Castejón, Ignacio Martín Llorente, Rafael Mayo-García. "Simulations of NBI fast ions distribution in stellarators based on coupled Monte Carlo fueling and orbit Monte Carlo codes". Submitted to Journal of Computational Physics, 2011.

15. J. Sánchez, ..., J.L. Velasco ... y equipo del TJ-II. Overview of TJ-II experiments. Nuclear Fusion. 51 / 094022

16. J.L. Velasco, F. Castejón. Study of the neoclassical radial electric field of the TJ-II flexible heliac. Plasma Physics and Controlled Fusion. 54 / 015005

17. Félix I. Parra and Iván Calvo. Phase-space Lagrangian derivation of electrostatic gyrokinetics in general geometry. Plasma Physics and Controlled Fusion. 53 / 045001.

18. D. Carralero, I. Calvo, M. Shoji, B. A. Carreras, K. Ida, S. Ohdachi, S. Sakakibara, H. Yamada, and C. Hidalgo. Influence of β on the self-similarity properties of LHD edge fluctuations. Plasma Physics and Controlled Fusion. 53 / 095010.

19. J. Sánchez et al. Overview of TJ-II experiments. Nuclear Fusion. 51 / 094022.

8.3. Tesis doctorales leídas en 2011

A lo largo de 2011 se han leído las siguientes tesis doctorales:

Título: Proteínas dependientes de flavina: Biosíntesis de cofactores flavínicos y procesos de interacción y transferencia de electrones.

Doctorando: Ana Serrano

Director: Milagros Medina

Universidad: Universidad de Zaragoza.

FACULTAD/ESCUELA: Facultad de Ciencias

Fecha: 11 Marzo 2011

Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Título: Bases estructurales de la biosíntesis de cofactores flavínicos en procariontes y de la interacción y transferencia electrónica fotosintética

Doctorando: Beatriz Herguedas

Director: Milagros Medina, Marta Martínez Júlvez

Universidad: Universidad de Zaragoza.

FACULTAD/ESCUELA: Facultad de Ciencias

Fecha: 13 Mayo 2011.

Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Título: Ensamblaje in vitro de la cápsida del virus de la inmunodeficiencia humana, y su inhibición por péptidos diseñados racionalmente

Doctorando: Rebeca Bocanegra Rojo

Universidad: Universidad Autónoma de Madrid

Fecha: 22/7/2011

Título: "Análisis mutacional de propiedades estructurales y mecánicas del virus diminuto del ratón, y de sus implicaciones biológicas"

Doctorando: Milagros Castellanos Molina

Universidad: la Universidad Autónoma de Madrid

Fecha: 17/6/2011

Título: Analysis and Development of Algorithms for the Characterization of Biopolymers and Application to Protein Sequencing and Protein Folding

Doctorando: Mauro Faccin

Director: Pierpaolo Bruscolini

Universidad: Universidad de Zaragoza, Facultad de Ciencias

Fecha: 2011

Calificación: Sobresaliente cum laude

Título: Autómatas Celulares y Sismicidad

Doctorando: Alejandro Tejedor Cubero

Directores: Amalio Fernández- Pacheco Pérez y Javier Gómez Jiménez

Universidad: Zaragoza. Facultad: Ciencias

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: "Caracterización de Lámparas en continua para energía fotovoltaica"

Doctorando: Félix García Rosillo

Directores: Miguel Ángel Egido (Universidad Politécnica de Madrid) y Francisco Castejón (CIEMAT)

Universidad: Universidad Politécnica de Madrid. Facultad: Instituto de energía solar, Escuela de Ingenieros de Telecomunicación

Calificación: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

Título: "Application of metaheuristic techniques based on grid computing for the optimization of magnetic fusion devices"

Doctorando: Antonio Gómez Iglesias

Directores: Francisco Castejón Magaña (CIEMAT) y Miguel Ángel Vega Rodríguez (Universidad de Cáceres).

Universidad: Universidad de Extremadura. Facultad: Ingeniería Informática.

Calificación: Sobresaliente cum Laude por Unanimidad

Título: Improving simulation of biological molecules: refining mathematical, physical and computational tools

Doctorando: Pablo García-Risueño

Directores: José Luis Alonso, Pablo Echenique, Ángel Rubio

Universidad: Universidad de Zaragoza .

Facultad: Facultad de ciencias

Calificación: por confirmar

Actuaciones

Título: "Interplay between Network Topology and Dynamics in Neural Systems"

Doctorando: Samuel Johnson

Fecha: 9 May 2011

Calificación: cum laude

Título: "Study of Long-Range Correlations and Criticality in Neural Media and other Biological Systems"

Doctorando: Sebastiano de Franciscis

Fecha: 3 octubre 2011-12-26

Calificación: cum laude

Título: Complex Technological Networks: Structure, Dynamics and Algorithms

Doctorando: Sandro Meloni

Directores: Yamir Moreno & Stefano Panzieri

Universidad: Universidad de Roma III

Calificación: Summa Cum Laude

Título: "Paisajes de Energía Libre en Modelos de Biomoléculas"

Doctorando: Diego Prada Gracia.

Directores: Fernando Falo

Universidad: Zaragoza. Facultad: Ciencias

Calificación: Sobresaliente "cum Laude"

8.4. Otras actuaciones

Ponencias y comunicaciones a congresos

Participación oral

Autor: Carmen Pellicer-Lostao, Ricardo López-Ruiz

Título: Application of Chaotic Number Generators in Econophysics

Tipo de participación (poster o comunicación oral): oral

Congreso: International Conference on EconoPhysics

Lugar de celebración: Kavala Institute of Technology, Kavala, Greece

Fecha: 2-3 June 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: J. A. Carrodegas

Título: Stem cells and apoptosis.

Tipo de participación: Presentación oral / Organización del congreso.

Congreso: BIFI 2011: V National Conference

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2-4 febrero, 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: J. A. Carrodegas

Título: Multidimensional optical microscopy.

Tipo de participación: Presentación oral / Organización del congreso.

Congreso: BIFI 2011: V National Conference

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2-4 febrero, 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: Luis M. Floría

Título: Selective advantage of tolerant cultural traits

Tipo de participación: Oral

Congreso: Game Theory and Society

Lugar de celebración: ETH, Zurich (Suiza)

Fecha: July 27-30, 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: Luis M. Floría

Título: Dinámica Cultural e Intolerancia

Tipo de participación: Oral

Congreso: III Workshop Econosociofísica

Lugar de celebración: Burgos

Fecha: 13-15 Junio, 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: Angel Sánchez.

Título: Human behavior on networks: lessons and perspectives from game theory.

Conferencia invitada.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Φ -SOE (División de Física de Sistemas Socioeconómicos de la Sociedad Alemana de Física).

Lugar: Dresden, Alemania,

Fecha: 13 a 18 de marzo de 2011

Menciona al BIFI: si

Autor: Carlos P. Roca, Sergi Lozano, Alex Arenas y Angel Sánchez.

Título: Topological traps and coordination failures on real networks. Charla en Congreso

Tipo de participación: Oral

Congreso: Φ -SOE (División de Física de Sistemas Socioeconómicos de la Sociedad Alemana de Física).

Lugar: Dresden, Alemania

Fecha: 13 a 18 de marzo de 2011.

Autores: Jelena Grujic, José A. Cuesta y Angel Sánchez.

Título: Evolutionary dynamics and conditional cooperation in the iterated prisoner's dilemma.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Φ -SOE (División de Física de Sistemas Socioeconómicos de la Sociedad Alemana de Física).

Lugar: Dresden, Alemania

Fecha: 13 a 18 de marzo de 2011.

Actuaciones

Autores: Daniele Vilone, Jesús Gómez Gardeñes y Angel Sánchez.

Título: The role of short-cuts for the emergence of cooperation on random topologies.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Φ -SOE (División de Física de Sistemas Socioeconómicos de la Sociedad Alemana de Física).

Lugar: Dresden, Alemania

Fecha: 13 a 18 de marzo de 2011.

Autores: Jelena Grujic, Constanza Fosco, Lourdes Araújo, José A. Cuesta y Angel Sánchez.

Título: Prisoner's Dilemma on a sizeable network: An experiment with human subjects.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Charla en Física Estadística '11.

Lugar: Barcelona, Catalunya

Fecha: 2 a 4 de junio de 2011.

Autores: Daniele Vilone, Alberto Robledo y Angel Sánchez.

Título: Chaos and unpredictability in evolutionary dynamics in discrete time.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Física Estadística '11.

Lugar: Barcelona, Catalunya

Fecha: 2 a 4 de junio de 2011.

Autores: Jelena Grujic, Constanza Fosco, Lourdes Araújo, Antonio Cabrales, José A. Cuesta y Angel Sánchez.

Título: Prisoner's Dilemma on a sizeable network: Experiment and theory.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Game Theory and Society

Lugar: Zurich, Suiza

Fecha: 27 a 30 de julio de 2011.

Autores: Luis A. Martínez, José A. Cuesta y Angel Sánchez.

Título: Invasion dynamics in iterative games.

Tipo de participación: Oral

Congreso: Game Theory and Society

Lugar: Zurich, Suiza

Fecha: 27 a 30 de julio de 2011.

Autores: Luis A. Martínez, José A. Cuesta y Angel Sánchez.

Título: Emergence of responsive strategies in iterative games.

Tipo de participación: Oral

Congreso: European Conference on Complex Systems 2011 (ECCS'11)

Lugar: Viena, Austria

Fecha: 12 a 16 de septiembre de 2011.

Autores: J. Estrada, Y P. Echenique, From Databases in QC 2010, ZCAM, Sep 2010

Título: a brief history of Quixote, Debate session on STM research data management

Tipo de participación: Oral

Lugar: ZCAM, Zaragoza

Fecha: agosto 2011

Autores: P. Echenique,

Título: The Quixote Project: a pioneering work in managing Computational Chemistry research data, Debate session on STM research data management

Tipo de participación: Oral

Lugar: ZCAM, Zaragoza

Fecha: agosto 2011

Autores: P. Murray-Rust, J. Thomas, P. Echenique, J. Estrada, M. Hanwell, S. Adams, W. Phadungsukanan, Y L. Westerhoff,

Título: An Internet project to build a distributed Open Knowledgebase for quantum chemistry

Tipo de participación: Oral

Congreso: 241st ACS National Meeting & Exposition,

Lugar: Anaheim, California, USA.

Fecha: marzo 2011

Autores: P. Murray-Rust, J. Thomas, P. Echenique, M. Hanwell, W. Phadungsukanan, L. Westerhoff, T. Beke-Somfai, Y H. Rzepa

Título: Memex for computational chemistry

Tipo de participación: Oral

Congreso: 241st ACS National Meeting & Exposition

Lugar: Anaheim, California, USA.
Fecha: marzo 2011

Autores: Catalan P, Perez-Collazos E., Segarra-Moragues JG.

Título: Genética de la conservación, Unidades genéticas relevantes para la conservación, y categorías IUCN en plantas ibéricas amenazadas.

Tipo de participación: Ponencia invitada (comunicación oral)

Congreso: I Encuentro nacional de conservación genética de plantas.

Lugar de celebración: Las Palmas de Gran Canaria **Fecha:** 14/07/2011

Menciona al BIFI: No

Autores: Catalan P.

Título: Evolution and taxonomic split of the model grass *Brachypodium distachyon* (L.) P. Beauv.

Tipo de participación: Ponencia invitada (comunicación oral)

Congreso: I European *Brachypodium* Workshop

Lugar de celebración: Versailles

Fecha: 19-21/10/2011

Menciona al BIFI: Si

Autor: Carlos Gracia Lázaro

Título: Axelrod-Schelling Model: The paradigm of tolerance.

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

Congreso: Net-works 2011

Lugar de celebración: San Lorenzo del Escorial, Madrid.

Fecha: 26-28 Oct 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: A. Gordillo-Guerrero, R. Kenna, J.J. Ruiz-Lorenzo

Título: Study of the 3D Ising model using the Fisher zeros

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: BIFI2011

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 02/02/2011

Menciona al BIFI: si

Autor: L.A. Fernández, A. Gordillo-Guerrero, V. Martín Mayor, J.J. Ruiz-Lorenzo

Título: Characterizing a strong first order phase transition on a 3D diluted system

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: SigmaPhy2011

Lugar de celebración: Larnaka, Chipre

Fecha: 13/06/2011

Menciona al BIFI: si

Autor: A. Gordillo-Guerrero, R. Kenna, J.J. Ruiz-Lorenzo

Título: Complex temperature zeros in the partition function of the 3D Ising model

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Comphys11

Lugar de celebración: Leipzig, Alemania

Fecha: 24/11/2011

Menciona al BIFI: si

Autor: R. Tapia-Rojo, D. Prada-Gracia, J.J. Mazo, F. Falo.

Título: A mesoscopic model for DNA-protein interaction

Tipo de participación: oral presentada por FF

Congreso: BIFI2011: V National Conference "In Memoriam of José Félix Sáenz-Lorenzo"

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: 2-4 Febrero de 2011.

Menciona al BIFI: SI

Autor: Iván Calvo y Félix I. Parra

Título: Second-order gyrokinetics at long wave-lengths: the tokamak

radial electric field

Tipo de participación: Charla invitada.

Congreso: Gyrokinetics for ITER II.

Lugar de celebración: Wolfgang Pauli Institute, Viena, Austria

Fecha: 14 de abril de 2011.

Menciona al BIFI: No

Autor: Iván Calvo y Félix I. Parra.

Título: Adiabatic invariants and kinetic

Actuaciones

equations for fusion plasma turbulence.

Tipo de participación: Seminario.

Lugar de celebración: Universidad Complutense de Madrid.

Fecha: 25 de febrero de 2011.

Menciona al BIFI: No

Autor: Iván Calvo y Félix I. Parra.

Título: Adiabatic invariants and kinetic equations for fusion plasma turbulence.

Tipo de participación: Comunicación oral.

Congreso: V National Conference BIFI 2011.

Lugar de celebración: BIFI, Zaragoza.

Fecha: 2-4 de febrero de 2011.

Menciona al BIFI: No

Autor: Ramón Hurtado-Guerrero

Título: Glicosiltransferasas como novedosas dianas terapéuticas

Tipo de participación: Presentación Oral

Congreso: V National Conference BIFI 2011

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: 2-4 febrero, 2011

Autor: Santosh Panjikar

Título: S-SAD phasing of Protein O-fucosyltransferase 1 at a resolution of 2.6 Å in the monoclinic space group C2

Tipo de participación: Conferencia invitado.

Congreso: IUCR XXII International Congress

Lugar de celebración: Madrid (Spain)

Fecha: 22-29 agosto, 2011

Autor: Ramón Hurtado-Guerrero

Título: Molecular mechanism of glycosyltransferases

Tipo de participación: Invitado por la Unidad de Biofísica CSIC-UPV/EHU

Lugar de celebración: Bilbao (Spain)

Fecha: 30 noviembre, 2011

Autor: Ramón Hurtado-Guerrero

Título: Molecular mechanism of glycosyltransferases

Tipo de participación: CIC-BIOMAGUNE

Lugar de celebración: San Sebastián (Spain)

Fecha: 15 diciembre, 2011

Autor: Guillermo Losilla Anadón

Título: Computación en el BIFI: Infraestructuras, proyectos y servicios

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: V National Conference BIFI 2011

Lugar de celebración: BIFI, Zaragoza

Fecha: 4 Febrero 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: Guillermo Losilla Anadón

Título: HPC en el BIFI: Infraestructuras, proyectos y servicios

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Primer Taller Bilateral BIFI-CEAC

Lugar de celebración: CEAC, La Habana (Cuba)

Fecha: 15 Marzo 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: Guillermo Losilla Anadón

Título: Experiencias en cloud computing en el BIFI

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Primer Taller Bilateral BIFI-CEAC

Lugar de celebración: CEAC, La Habana (Cuba)

Fecha: 15 Marzo 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autores: J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, A. Arenas, Y. moreno

Título: Explosive Synchronization Transitions in Complex Networks

Tipo de participación: Charla

Congreso: V BIFI National Conference

Lugar de celebración: Universidad de Zaragoza, Zaragoza.

Fecha: Febrero 2011

Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, A. Arenas, Y. moreno

Título: Explosive Synchronization Transitions in Complex Networks

Tipo de participación: Charla Invitada

Congreso: Simposio Internacional "Física de los sistemas fuera de equilibrio"

Lugar de celebración: Universidad de Navarra,

Pamplona.
Fecha: Febrero 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes
Título: Una aplicación de la teoría de sincronización en redes complejas: Estudio de la organización de las interacciones cortico-corticales
Tipo de participación: Charla Invitada
Congreso: Ciclo "Vanguardia de la Neurociencia"
Lugar de celebración: Departamento de Anatomía, Histología y Neurociencia, Universidad Autónoma de Madrid.
Fecha: Marzo 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes
Título: The transition towards Synchronization in Complex Networks: Theory and Applications to Real Networks
Tipo de participación: Charla Invitada
Congreso: I Workshop Red temática IBERSYNC
Lugar de celebración: Universidad de Barcelona.
Fecha: Marzo 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes
Título: Maximal Entropy Random Walks in Complex Networks
Tipo de participación: Charla Invitada
Congreso: III Workshop MODELICO-CM
Lugar de celebración: Universidad Complutense de Madrid.
Fecha: Mayo 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, Y. Moreno, A. Arenas
Título: Explosive Synchronization in Complex Networks
Tipo de participación: Charla
Congreso: International Conference on Networks Science "NETSCI 2011"
Lugar de celebración: Central European

University, Budapest (Hungary).
Fecha: Junio 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes
Título: Redes de Colaboración
Tipo de participación: Charla (lección) Invitada
Congreso: Curso de verano "Redes tecnológicas, Redes sociales y Redes empresariales: Ideas para la Innovación, la Investigación y el Desarrollo"
Lugar de celebración: Universidad Rey Juan Carlos, Aranjuez.
Fecha: Julio 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, Y. Moreno, A. Arenas
Título: Explosive Synchronization Transition in Complex Networks
Tipo de participación: Charla invitada
Congreso: Sigma-Phi-2011, International Conference on Statistical Physics
Lugar de celebración: Larnaca (Chipre).
Fecha: Julio 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes, M. Romance, R. Criado, D. Vilone, A. Sanchez
Título: Evolutionary Games defined at the Network Mesoscale: The Public Goods Game
Tipo de participación: Charla
Congreso: Game Theory and Society.
Lugar de celebración: ETH, Zürich (Suiza).
Fecha: Julio 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes, S. Gómez, Y. Moreno, A. Arenas
Título: Explosive Synchronization Transitions in Complex Networks
Tipo de participación: Charla
Congreso: X-Net Workshop, European Conference on Complex Systems, ECCS11.
Lugar de celebración: Viena (Austria).
Fecha: Septiembre 2011

Actuaciones

Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes

Título: Redes de Colaboración en Investigación

Tipo de participación: Ponencia plenaria

Congreso: XV Jornadas de la Investigación de la Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia.

Lugar de celebración: Sogamoso, UPTC (Colombia).

Fecha: Octubre 2011

Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes

Título: Estructura y Dinámica de Sistemas Complejos

Tipo de participación: Ponencia plenaria

Congreso: Congreso Nacional de Física de Colombia

Lugar de celebración: Bogotá (Colombia).

Fecha: Octubre 2011

Menciona al BIFI: SI

Autores: J. Gómez-Gardeñes, M. Romance, D. Vilone, R. Criado and A. Sánchez

Título: Evolutionary Games defined at the network mesoscale: The Public Goods game

Tipo de participación: Charla Invitada

Congreso: Net-Works 2011 International Conference. Complex Networks: structure, applications and related topics.

Lugar de celebración: El Escorial, Madrid.

Fecha: Octubre 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: Alfonso Tarancón, Rubén Vallés, Gonzalo Ruiz y Jaime Ibar

Título: OPTIWEB: AN OPTIMIZATION APPLICATION FOR STEEL CUT INDUSTRIES PORTED TO THE GRID IN THE FRAMEWORK OF PIREGRID PROJECT

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Ibergrid 2011

Lugar de celebración: Santander

Fecha: 7 al 10 Junio 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: Rubén Vallés

Título: Acercando las tecnologías Grid a las PYMES

Tipo de participación: comunicación oral

Congreso: Fronteras de la Computación

Lugar de celebración: Benasque (Huesca)

Fecha: 17 al 22 de Julio de 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: Rubén Vallés

Título: La supercomputación en el BIFI

Tipo de participación: comunicación oral

Congreso: HP-CAST IBERICA

Lugar de celebración: Málaga

Fecha: 4 y 5 de Octubre 2011

Menciona al BIFI: Sí

Autor: Jaime Ibar

Título: Computación Grid en el BIFI

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Taller Bilateral BIFI-CEAC. Física, Bioquímica, Computación y Política Científica.

Lugar de celebración: La Habana, (Cuba)

Fecha: 14-17 marzo de 2011

Menciona al BIFI: SI

Autores: Joaquin Sanz, Carlos Gracia, Javier Borge, Emanuele Cozzo, Sandro Meloni y Yamir Moreno

Congreso: Congreso Nacional del BIFI

Tipo de participación: comunicación oral

Lugar de celebración: Zaragoza

Fecha: febrero 2011

Autores: Carlos Gracia, Javier Borge

Congreso: Net-works 2011

Tipo de participación: comunicación oral

Lugar de celebración: El Escorial, Madrid

Fecha: Octubre 2011

Autor: Yamir Moreno

Congreso: Curso Catedra Orange

Tipo de participación: Keynote Speaker

Lugar de celebración: ETSIT, Univ. Politécnica de Madrid, Madrid

Fecha: Noviembre, 2011

Autor: Yamir Moreno
Congreso: Jornadas Sinergia
Tipo participación: Keynote Speaker
Lugar de celebración: Arts Santa Monica, Barcelona
Fecha: Diciembre, 2011

Autor: Yamir Moreno
Congreso: An Evolutionary Journey II
Tipo de participación: Invited Speaker
Lugar de celebración: Universidad Carlos III, Madrid
Fecha: Noviembre, 2011

Autor: CRISTINA VIÑAS VIÑUALES
Título: VISUALIZATION SYSTEM AND APPLICATIONS AT BIFI
Tipo de participación: COMUNICACIÓN ORAL
Congreso: RES - TECHNICAL SEMINAR VISUALIZATION AND VIRTUAL REALITY
Lugar de celebración: CESVIMA - MADRID
Fecha: 14-15 DICIEMBRE 2011
Menciona al BIFI: SI

Autor: A. Velazquez-Campoy
Título: Aproximación Experimental en la Investigación de Sistemas Biológicos Dependientes de Proteínas
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: Taller Bilateral BIFI-CEAC
Lugar de celebración: La Habana
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: SI

Autor: A. Velazquez-Campoy
Título: Métodos Computacionales en la Investigación de Sistemas Biológicos Dependientes de Proteínas
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: Taller Bilateral BIFI-CEAC
Lugar de celebración: La Habana
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: J.L. Neira, R. Domenech, R. Bocanegra, O. Abian, J. Correa, A. Sousa-Herves, M. Bueno, A. Velazquez-Campoy, C. Cavasotto, R. Riguera,

J. Sancho, E. Fernandez, M.G. Mateu
Título: Designing Inhibitors Against the Capsid Protein of HIV-1
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: BIFI 2011 - V National Conference
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: SI

Autor: A. Serrano, S. Frago, A. Velazquez-Campoy, M. Medina
Título: The Riboflavin Kinase and Adenyltransferase Catalytic Sites of the Bifunctional FAD Synthetase from *Corinebacterium ammoniagenes*
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: BIFI 2011 - V National Conference
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: SI

Autor: J.E. Martinez, X. Arias-Moreno, A. Velazquez-Campoy, R. Hurtado, J. Sancho
Título: Internalization and Release of Cholesterol in the Endosome: Role of the Extracellular Domains of the LDL Receptor
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: BIFI 2011 - V National Conference
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: SI

Autores: L. Botello, A. González, M.C. Pallarés, A. Lostao, C. Marcuello, M.T. Bes, M.L. Peleato and M.F. Fillat
Título: Functional diversity of Fur (ferric uptake regulator) proteins in cyanobacteria
Tipo de participación: Presentación oral
Congreso: 8th European Workshop on Molecular Biology of Cyanobacteria.
Lugar de celebración: Naantali (Finland)
Fecha: agosto 2011

Autores: Andrés González, Teresa Bes, Maria Luisa Peleato, Maria F. Fillat.
Título: FurA, a global transcriptional regulator in *Anabaena* sp. PCC 7120

Actuaciones

Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autores: Pellicer S, González A, Peleato ML, Martínez JI, Fillat MF and Bes MT
Título: Heme sensors: Recognition of heme by the ferric uptake regulator FurA from *Anabaena* sp. PCC7120
Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autor: Fillat MF
Título: Genetic regulation in cyanobacteria
Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autores: L. Botello, A. González, M.C. Pallarés, A. Lostao, C. Marcuello, M.T. Bes, M.L. Peleato and M.F. Fillat
Título: Functional diversity of Fur (ferric uptake regulator) proteins in cyanobacteria
Tipo de participación: Presentación oral
Congreso: 8th European Workshop on Molecular Biology of Cyanobacteria.
Lugar de celebración: Naantali (Finland),
Fecha: agosto 2011

Autor: Milagros Medina
Título: Catalytic mechanisms in flavoenzymes: a key factor for biotechnological and therapeutical applications
Tipo de participación: Presentación Oral M. Medina
Congreso: V National Conference BIFI 2011
Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Febrero 2-4, 2011

Autor: M. Medina
Título: Structural factors involved in the coordination of the two catalytic activities of prokaryotic FAD synthetase.
Tipo de participación: Conferencia invitada M. Medina
Congreso: BIT's 2nd Symposium on Enzymes and Biocatalysis
Publicación: Abstract.
Lugar de celebración: Dalian (China)

Fecha: April 25-27, 2011

Autor: M. Medina
Título: FMN and FAD biosynthesis in Prokaryotes: The FADS synthetase family
Tipo de participación: Conferencia invitada M. Medina
Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins
Publicación: Abstract.
Lugar de celebración: Berkeley (EEUU)
Fecha: July 25-29, 2011

Autores: P. Ferreira, R. Villanueva, M.D. Miramar, S. Susin, M. L. Peleato, M. Medina
Título: Unravelling the mitochondrial role of the human apoptosis inducing factor (hAIF)
Tipo de participación: Presentación Oral P. Ferreira
Congreso: V National Conference BIFI 2011
Publicación: Abstract.
Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)
Fecha: Febrero 2-4, 2011

Autores: I. Lans, J. R. Peregrina, M. Medina, M. Garcia-Viloca, A. González-Lafont, J.M. Lluch
Título: Application of Ensemble-Average Transition State Theory with Multidimensional Tunneling to the Study of Hydride Transfer between *Anabaena* Tyr303Ser FNR and NADP⁺/H
Tipo de participación: Presentación Oral I. Lans
Congreso: V National Conference BIFI 2011
Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Febrero 2-4, 2011

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

Título: The riboflavin kinase and adenyltransferase catalytic sites of the bifunctional FAD synthetase from *Corinebacterium ammoniagenes*

Tipo de participación: Presentación Oral A. Serrano

Congreso: V National Conference BIFI 2011

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Febrero 2-4, 2011

Autores: I. Yruela, S. Arilla-Luna, M. Medina, B. Contreras-Moreira

Título: Evolutionary divergence of chloroplast FAD synthetase proteins

Tipo de participación: Presentación Oral I. Yruela

Congreso: V National Conference BIFI 2011

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Febrero 2-4, 2011

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

Título: Structure of the C-terminal riboflavin kinase module of the bifunctional enzyme FADS from *Corynebacterium ammoniagenes* (CaFADS)

Tipo de participación: Presentación Oral M. Martínez-Júlvez

Congreso: V National Conference BIFI 2011

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)

Fecha: Febrero 2-4, 2011

Autores: De Miguel R, Martínez-Pérez M, Martínez-Júlvez M, Fiddymont S, García-Otín A.L., Poció M, Gómez-Moreno C, Luis F, Lostao A.

Título: Ferritin: nanotechnology at the service of the new biomedicine

Tipo de participación: Comunicación oral (De

Miguel R) y poster

Congreso: 36th FEBS Congress. Biochemistry for Tomorrow's Medicine

Publicación: Abstract

Lugar de celebración: Torino (Italia)

Fecha: Junio 25-30, 2011

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

Título: Unraveling the redox role of the human apoptosis inducing factor (hAIF)

Tipo de participación: Conferencia Vicent

Massey Award. P. Ferreira

Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Berkeley (EEUU)

Fecha: Julio 25-29, 2011

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

Título: Desentrañando el mecanismo catalítico de la enzima AAO implicada en la biodegradación de la lignina

Tipo de participación: Comunicación Oral A. Hernández-Ortega

Congreso: XIV Reunión de la Red Temática Biotecnología de materiales lignocelulósicos

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Madrid

Fecha: Septiembre 5-6, 2011

Autores: K. Lindenberg, J. M. Sancho, M. Khoury and A. M. Lacasta.

Título: Weak disorder in periodic potentials: Anomalous transport and diffusion

Tipo de participación: Comunicación Oral Conferencia: Conference on Fluctuations and Coherence: from Superfluids to Living Systems".

Lugar de celebración: Lancaster

Fecha: 2011

Autores: Autores: J M. Sancho and R. Perez-Carrasco.

Título: Power and efficiency of F1-ATPase molecular motor" (Oral invitada)

Conferencia: Fluctuations and Coherence: from

Actuaciones

Superfluids to Living Systems
Lugar de celebración: Lancaster
Fecha: 2011

Autores: Peleato ML
Título: El interés de caracterizar los operones tóxicos y su regulación
Tipo de participación: Oral
Congreso: II Congreso Iberico de Cianotoxinas
Lugar de celebración: Sevilla
Fecha: julio de 2011

Autores: P. Ferreira, R. Villanueva, M.D. Miramar, S. Susin, M. L. Peleato, M. Medina
Título: Unravelling the mitochondrial role of the human apoptosis inducing factor (hAIF)
Tipo de participación: Presentación Oral P. Ferreira
Congreso: V National Conference BIFI 2011
Publicación: Abstract.
Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)
Fecha: Febrero 2-4, 2011

Autores: Peleato ML, Sevilla E, Martin-Luna B, Kuniyoshi T, Bes MT and Fillat MF.
Título: Factors inducing microcystin production in *Microcystis aeruginosa* PCC7806
Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autores: P. Ferreira, R. Villanueva, M.D. Miramar, S. Susin, M. L. Peleato, M. Medina
Título: Unravelling the mitochondrial role of the human apoptosis inducing factor (hAIF)
Tipo de participación: Presentación Oral P.
Congreso: V National Conference BIFI 2011
Publicación: Abstract.
Lugar de celebración: Zaragoza (Spain)
Fecha: Febrero 2-4, 2011

Autores: L. Botello, A. González, M.C. Pallarés, A. Lostao, C. Marcuello, M.T. Bes, M.L. Peleato and M.F. Fillat

Título: Functional diversity of Fur (ferric uptake regulator) proteins in cyanobacteria
Tipo de participación: Presentación oral
Congreso: 8th European Workshop on Molecular Biology of Cyanobacteria.
Lugar de celebración: Naantali (Finland)
Fecha: agosto 2011

Autores: Andrés González, Teresa Bes, Maria Luisa Peleato, Maria F. Fillat.
Título: FurA, a global transcriptional regulator in *Anabaena* sp. PCC 7120
Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autores: Pellicer S, González A, Peleato ML, Martínez JI, Fillat MF and Bes MT
Título: Heme sensors: Recognition of heme by the ferric uptake regulator FurA from *Anabaena* sp. PCC7120
Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autor: Fillat MF
Título: Genetic regulation in cyanobacteria
Tipo de participación: Oral
Congreso: V Reunión Nacional del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: febrero 2011

Autores: L. Botello, A. González, M.C. Pallarés, A. Lostao, C. Marcuello, M.T. Bes, M.L. Peleato and M.F. Fillat
Título: Functional diversity of Fur (ferric uptake regulator) proteins in cyanobacteria
Tipo de participación: Presentación oral

Congreso: 8th European Workshop on Molecular Biology of Cyanobacteria.
Lugar de celebración: Naantali (Finland)
Fecha: agosto 2011

Autores: Aguado-Llera, D., Doménech, R. M., Marenchino, M. and Neira, J. L.
Título: Caracterización Biofísica de la Proteína E2-C de *Carasius Auratus*
Congreso: XXXIV Congreso de la SEBBM
Lugar de celebración: Barcelona
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: Si

Autores: Doménech, R., Bocanegra, R., González-Muñiz, R. Gómez, J., Mateu, M. G. and Neira, J. L.
Título: Helical Peptides Derived From the Dimerization Helix of the Capsid Protein of HIV-1 Bind to the Wild-Type Protein
Congreso: 8TH EBSA European Biophysics Congress
Lugar de celebración: Hungría
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: Si

Autores: Doménech, R., Abián, O., Bocanegra, R., Correa, J., Sousa-Herves, A., Riguera, R., Mateu, M. G., Fernández-Megía, E., Velázquez-Campoy, A. and Neira, J. L.
Título: Dendrimers as Potential Inhibitors of the Dimerization of the Capsid Protein of HIV-1
Congreso: IX European Symposium of the Protein Society
Lugar de celebración: Suecia
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: Si

Autores: Velázquez-Campoy, A. , Abian, O., Vega, S. and Neira, J. L.
Título: The Hepatitis C Virus NS3 Protease is an Intrinsically Disordered Protein
Congreso: IX European Symposium of the Protein Society
Lugar de celebración: Suecia
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: Si

Autores: Neira, J. L. , Mateu, M. G., Doménech, R., Bocanegra, R., Álamo, M., Lidón-Moya, M. C.
Título: Designing Inhibitors Against the Protein of the Capsid of HIV-1 (oral communication)
Congreso: I Reunión de la Red Española Interdisciplinar de Virus
Lugar de celebración: Barcelona
Fecha: 2011
Menciona al BIFI: Si

Participación mediante póster

Autor: A. Bustos, F. Castejón, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, M. Osakabe
Título: Kinetic simulations of fast ions in stellarators
Tipo de participación: póster
Congreso: V National BIFI Conference
Lugar de celebración: BIFI, Zaragoza
Fecha: Febrero 2011
Menciona al BIFI: Sí

Autores: Celia Conesa, Verónica Tomey, Michael Xavier Doss, Charles Antzelevitch, Agapios Sachinidis, Javier Sancho and José A. Carrodegua
Título: Identification of bioactive compounds for selective elimination/selection or directed differentiation of stem cells.
Tipo de participación: Presentación póster
Congreso: VI Congreso de la Sociedad Española de Terapia Génica y Celular
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: 21-23 septiembre, 2011
Menciona al BIFI: Sí.

Autores: Jelena Grujic, Jose A. Cuesta y Angel Sánchez.
Título: Replicator dynamics for the multiplayer Prisoner's Dilemma with "moody" conditional cooperators.
Tipo de participación: Póster
Congreso: Física Estadística '11
Lugar: Barcelona, Catalunya

Actuaciones

Fecha: 2 a 4 de junio de 2011.

Autores: Luis A. Martínez, José A. Cuesta y Angel Sánchez.

Título: Emergencia de estrategias en juegos iterados con reciprocidad directa.

Tipo de participación: Póster

Congreso: Física Estadística '11

Lugar de celebración: Barcelona, Catalunya

Fecha: 2 a 4 de junio de 2011

Autores: J.L. Velasco, J. Arévalo, J.A. Alonso

Título: Configuration dependence of the neoclassical viscosity in TJ-II

Tipo de participación: Póster

Congreso: 14th European Fusion Theory Conference

Lugar de celebración: Frascati, Italia

Fecha: Septiembre de 2011

Menciona al BIFI: No

Autores: F. Castejón, A. Bustos, E. Sánchez, J.L. Velasco

Título: Simulaciones cinéticas de gran escala en física del plasma

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física

Lugar de celebración: Santander, España

Fecha: Septiembre de 2011

Menciona al BIFI: No

Autores: R. Tapia-Rojo, D. Prada-Gracia, J.J. Mazo, F. Falo

Título: Mesoscopic model for DNA-protein interaction

Tipo de participación: poster

Congreso: XVII Congreso de Física Estadística FISES'11.

Lugar de celebración: Barcelona

Fecha: 1 a 3 de Junio de 2011

Menciona al BIFI: Si

Autores: Iván Calvo y Félix I. Parra.

Título: Second-order electrostatic gyrokinetics in general magnetic geometry and its relevance for toroidal

momentum transport in tokamaks.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: 38th EPS Conference on Plasma Physics.

Lugar de celebración: Estrasburgo, Francia.

Fecha: 27 de junio – 1 de julio de 2011.

Menciona al BIFI: No

Autores: E. Sánchez, X. Sáez, A. Soba, I. Calvo, R. Kleiber, R. Hatzky,

F. Castejón y J. M. Cela.

Título: Modification of turbulent transport by magnetic shear in cylindrical gyrokinetic simulations.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: 38th EPS Conference on Plasma Physics.

Lugar de celebración: Estrasburgo, Francia.

Fecha: 27 de junio – 1 de julio de 2011.

Menciona al BIFI: No

Autor: D. Carralero, I. Calvo, M. Shoji, B. A. Carreras, K. Ida,

S. Ohdachi, S. Sakakibara, H. Yamada y C. Hidalgo.

Título: Recent Results on the Search for Self-Organization of Plasma Edge Fluctuations.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: 38th EPS Conference on Plasma Physics.

Lugar de celebración: Estrasburgo, Francia.

Fecha: 27 de junio – 1 de julio de 2011.

Menciona al BIFI: No

Autor: Renzo Torreblanca Gonzáles, Javier Sancho

Título: MOLTEN GLOBULE STRUCTURE OF APOFLAVODOXIN OF Helicobacter pylori

Tipo de participación: POSTER

Congreso: XI CONGRESO DE LA SOCIEDAD BIOFISICA DE ESPAÑA

Lugar de celebración: Murcia - España

Fecha: 1-4 junio 2011.

Menciona al BIFI: Si

Autor: Renzo Torreblanca Gonzales, Javier Sancho Sanz

Título: Estructura de un intermediario de plegamiento por análisis ? de equilibrio: el glóbulo fundido de apoflavodoxina

Tipo de participación: POSTER

Congreso: XXXIV Congreso de la sociedad española de bioquímica y biología molecular

Lugar de celebración: BARCELONA - ESPAÑA

Fecha: 5-8 SETIEMBRE 2011.

Menciona al BIFI: SI

Autor: Consorcio PireGrid

Título: Proyecto PireGrid

Tipo de participación: Poster

Congreso: Foro de proyectos de cooperación transfronteriza (POCTEFA)

Lugar de celebración: Toulouse

Fecha: 25 al 27 de Octubre de 2011

Menciona al BIFI: SI

Congreso: Net-works 2011

Participaron: Joaquin Sanz, Emanuele Cozzo, Sandro Meloni

Tipo participacion: poster

Lugar: El escorial, Madrid

Fecha: Octubre 2011

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

Título: The Hepatitis C Virus NS3 Protease is an Intrinsically Partially Disordered Protein

Tipo de participación: Póster

Congreso: First Workshop on Advances in Colloidal Materials

Lugar de celebración: Granada

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: A. Serrano, S. Frago, A. Velazquez-Campoy, M. Medina

Título: Estudio Funcional de Residuos Implicados en las Actividades Riboflavina Kinasa y Adeniltransferasa de la FAD Sintetasa de *Corynebacterium ammoniagenes*

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIV Congreso de la Sociedad

Española de Bioquímica y Biología Molecular

Lugar de celebración: Barcelona

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: R. Graña-Montes, N.S. de Groot, V. Castillo, J. Sancho, A. Velazquez-Campoy, S. Ventura

Título: Contribution of Disulfide Bonds to Stability, Folding and Amyloid Fibril Formation: The PI3-SH3 Domain Case

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIV Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular

Lugar de celebración: Barcelona

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: C.S.H. Jesus, C.J.V. Simoes, E.S. Henriques, A. Velazquez-Campoy, R.M.M. Brito

Título: Thermodynamics: A Tool for Affinity Optimization of Drug Candidates for Transthyretin Amyloidosis

Tipo de participación: Póster

Congreso: 8th EBSA European Biophysics Congress

Lugar de celebración: Budapest

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: M. Medina, S Frago, A. Serrano, B. Herguedas, S. Arilla-Luna, J.A. Hermoso, A. Velazquez-Campoy, M. Martínez-Julvez

Título: FMN and FAD Biosynthesis in Prokaryotes: The FADS Synthetase Family

Tipo de participación: Póster

Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins 2011

Lugar de celebración: Berkeley

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: J. Martínez-Olivan, X. Arias-Moreno, A. Velazquez-Campoy, J. Sancho

Título: Dominios Extracelulares del receptor de LDL: Cinética de Unión de Ca²⁺ y Mg²⁺ a LR5

Tipo de participación: Póster

Actuaciones

Congreso: XI Congreso de la Sociedad de Biofísica de España

Lugar de celebración: Murcia

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

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

Título: The Hepatitis C Virus NS3 Protease is an Intrinsically Disordered Protein

Tipo de participación: Póster

Congreso: IXth European Symposium of The Protein Society

Lugar de celebración: Stockholm

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autor: R. Domenech, O. Abian, R. Bocanegra, J. Correa, A. Sousa-Herves, R. Riguera, M.G. Mateu, E. Fernandez-Megia, A. Velazquez-Campoy, J.L. Neira

Título: Dendrimers as Potential Inhibitors of the Dimerization of the Capsid Protein of HIV-1

Tipo de participación: Póster

Congreso: IXth European Symposium of The Protein Society

Lugar de celebración: Stockholm

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

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

Título: Thermodynamics of Chlorpromazine Association with Lipid Bilayers

Tipo de participación: Póster

Congreso: 55th Annual Meeting of the Biophysical Society

Lugar de celebración: Baltimore

Fecha: 2011

Menciona al BIFI: SI

Autores: Botello-Morte L, Bes MT, Peleato ML and Fillat MF

Título: Role of cysteines in biological function of FurA from Anabaena sp. PCC 7120.

Tipo de participación: póster

Congreso: ESF- EMBO Symposium- Molecular

Bioenergetics of Cyanobacteria: From Cell to Community

Lugar de celebración: Sant Feliu de Guixols

Fecha: abril 2011

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

Título: A role of FurA in the modulation of photosynthesis, iron uptake and cellular morphology is unravelled by overexpression of the regulator in Anabaena sp. PCC 7120

Tipo de participación: Póster

Congreso: ESF Research Conference. Molecular Bioenergetics of Cyanobacteria: From Cell to Community

Lugar de celebración: San Feliu de Guixols

Fecha: abril de 2011

Autores: Pellicer S, González A, Martínez JI, Peleato ML, Fillat MF and Bes MT

Título: Elucidation of the heme-binding site of the transcriptional repressor FurA from Anabaena sp. PCC7120 by spectroscopic studies of mutant proteins

Tipo de participación: Póster

Congreso: ESF Research Conference. Molecular Bioenergetics of Cyanobacteria: From Cell to Community

Lugar de celebración: San Feliu de Guixols

Fecha: abril de 2011

Autores: Botello-Morte L, Bes MT, Peleato ML and Fillat MF

Título: Cysteine residues are directly involved in oligomerization and biological function of the global transcriptional regulator FurA from Anabaena sp. PCC 7120

Tipo de participación: póster

Congreso: ESF- EMBO Symposium – Glutathione and related thiols in living cells.

Lugar de celebración: Sant Feliu de Guixols

Fecha: septiembre 2011

Autores: Peleato ML, Fillat MF

Título: Regulación génica y fisiología de cianobacterias

Tipo de participación: póster

Congreso: VIII Reunión de la red temática "Biotecnología de las interacciones beneficiosas entre plantas y microorganismos"
Lugar de celebración: Granada, septiembre 2011

Autores: Marcuello C, De Miguel R, Martínez-Júlvez M, Gómez-Moreno C, Lostao A.

Título: New strategy to measure efficiently intermolecular forces between proteins

Tipo de participación: Poster

Congreso: III Multifrequency AFM Conference

Publicación: Abstract

Lugar de celebración: Madrid (España).

Fecha: Marzo 14-15, 2011

Autores: M. Medina, A. Sánchez-Azqueta, I. Lans, J.R. Peregrina, M. Martínez-Júlvez,

Título: Ser80 and Ser59 in Anabaena Ferredoxin-NADP⁺ reductase contribute to the stabilization of the catalytically competent complex with the coenzyme

Tipo de participación: Poster.

Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Berkeley (EEUU)

Fecha: Julio 25-29, 2011

Autores: C. Gómez-Moreno, C. Marcuello, R. De Miguel, M. Medina, M. Martínez-Júlvez, A. Lostao.

Título: Atomic Force Microscopy as a tool to understand the mechanostability of Ferredoxin-NADP⁺ reductase complexes with its protein partners

Tipo de participación: Poster.

Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Berkeley (EEUU)

Fecha: Julio 25-29, 2011

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

Título: Stereoselective hydride transfer mechanism in substrate oxidation by aryl-alcohol oxidase

Tipo de participación: Poster.

Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins

PUBLICACION: Abstract.

Lugar de celebración: Berkeley (EEUU)

Fecha: Julio 25-29, 2011

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

Título: Modulating flavin reoxidation in fungal aryl-alcohol oxidase: involvement of Phe501 contiguous to catalytic histidine.

Tipo de participación: Poster.

Congreso: 17th International Symposium on Flavins and Flavoproteins

Publicación: Abstract.

Lugar de celebración: Berkeley (EEUU)

Fecha: Julio 25-29, 2011

Autores: Calvo L, Garcia A, Goñi P, Clavel A, Peleato ML y Fillat MF

Título: La presencia del gen mcyD en DNA extraído de amebas de vida libre indica que alojan cianobacterias potencialmente tóxicas.

Tipo de participación: Póster

Congreso: II Congreso Iberico de Cianotoxinas

Lugar de celebración: Sevilla

Fecha: julio de 2011

Autores: Pascual MM, Fillat, MF y Peleato ML y González A*

Título: Clonaje, expresión recombinante y purificación del regulador NtcA de Microcystis aeruginosa PCC 7806 en Escherichia coli

Tipo de participación: Póster

Congreso: II Congreso Iberico de Cianotoxinas

Lugar de celebración: Sevilla

Fecha: julio de 2011

Autores: Pascual MM, Bes MT, Fillat MF y Peleato ML

Título: Estudios sobre la interacción covalente entre la microcistina y PP2A

Tipo de participación: Póster

Congreso: II Congreso Iberico de Cianotoxinas

Lugar de celebración: Sevilla

Fecha: julio de 2011

Actuaciones

Autores: García A, Goñi P, Calvo L, Fillat MF, Peleato ML, Roka M, Clavel A
Título: Amebas de vida libre en heces humanas y en aguas procedentes de la Isla de Bioko, Guinea Ecuatorial.
Tipo de participación: Póster
Congreso: XII Congreso Ibérico de Parasitología
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: julio de 2011

Autores: Calvo L, Garcia A, Goñi P, Clavel A, Peleato ML y Fillat MF
Título: Detección del gen *mcyD* de cianobacterias potencialmente tóxicas en el interior de amebas de vida libre .
Tipo de participación: Póster
Congreso: XII Congreso Ibérico de Parasitología
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: julio de 2011

Autores: Fernández MT, Calvo L, García A, Alejandro MC, Fillat MF, Peleato ML, Navarro M, Goñi P, Clavel A
Título: Aislamiento e identificación de amebas de vida libre en aguas de red y muestras clínicas de Aragón.
Tipo de participación: Póster
Congreso: XII Congreso Ibérico de Parasitología
Lugar de celebración: Zaragoza
Fecha: julio de 2011

Autores: Botello-Morte L, Bes MT, Peleato ML and Fillat MF
Título: Role of cysteines in biological function of FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120.
Tipo de participación: póster
Congreso: ESF- EMBO Symposium- Molecular Bioenergetics of Cyanobacteria: From Cell to Community
Lugar de celebración: Sant Feliu de Guixols
Fecha: abril 2011

Autores: González A, Bes T, Peleato ML and

Fillat MF
Título: A role of FurA in the modulation of photosynthesis, iron uptake and cellular morphology is unravelled by overexpression of the regulator in *Anabaena* sp. PCC 7120
Tipo de participación: Póster
Congreso: ESF Research Conference. Molecular Bioenergetics of Cyanobacteria: From Cell to Community
Lugar de celebración: San Feliu de Guixols
Fecha: abril de 2011

Autores: Pellicer S, González A, Martínez JI, Peleato ML, Fillat MF and Bes MT
Título: Elucidation of the heme-binding site of the transcriptional repressor FurA from *Anabaena* sp. PCC7120 by spectroscopic studies of mutant proteins
Tipo de participación: Póster
Congreso: ESF Research Conference. Molecular Bioenergetics of Cyanobacteria: From Cell to Community
Lugar de celebración: San Feliu de Guixols,
Fecha: abril de 2011

Autores: Botello-Morte L, Bes MT, Peleato ML and Fillat MF
Título: Cysteine residues are directly involved in oligomerization and biological function of the global transcriptional regulator FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120
Tipo de participación: póster
Congreso: ESF- EMBO Symposium – Glutathione and related thiols in living cells.
Lugar de celebración: Sant Feliu de Guixols,
Fecha: septiembre 2011

Autores: Peleato ML, Fillat MF
Título: Regulación génica y fisiología de cianobacterias
Tipo de participación: póster
Congreso: VIII Reunión de la red temática "Biotecnología de las interacciones beneficiosas entre plantas y microorganismos"
Lugar de celebración: Granada
Fecha: septiembre 2011

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:

Nombre de investigador: Bruno Goncalvez
Procedencia: Northeastern University, USA
Duración: 2 días
Responsable: Yamir Moreno

Nombre de investigador: Sandra Gonzalez Bailon
Procedencia: University of Oxford, UK
Duración: 2 días
Responsable: Yamir Moreno

Nombre de investigador: James Gleeson
Procedencia: University of Limerick, Ireland
Duración: 2 días
Responsable: Yamir Moreno

Nombre de investigador: Ramon Guevara
Procedencia: Centro Vasco de Neurociencias, España
Duración: 2 días
Responsable: Yamir Moreno

Nombre de investigador: Luce Prigiano
Procedencia: Universidad de Barcelona, España
Duración: 30 días (distribuidos en varias visitas)
Responsable: Yamir Moreno

Anxo Sanchez, Alex Arenas y Albert Diaz-Guilera han visitado el grupo en varias ocasiones. Ellos son miembros externos del BIFI.

Nombre de investigador: Néstor Cortez
Procedencia: Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentina
Febrero 2011

Nombre de investigador: Laura Ledesma

Procedencia: Universidad Pablo Olavide, Sevilla.

Duración: Septiembre 2011-Octubre 2011

Responsable: Milagros Medina

Estancias de miembros de nuestro instituto en otros centros

Nombre de investigador: Yamir Moreno
Lugar de estancia: Instituto ISI, Turin, Italia
Duración: 4 meses

Nombre de investigador: Sandro Meloni
Lugar de estancia: Instituto ISI, Turin, Italia
Duración: 4 meses

Nombre de investigador: Joaquín Sanz
Lugar de estancia: Instituto ISI, Turin, Italia
Duración: 4 meses

Nombre de investigador: Emanuele Cozzo
Lugar de estancia: Instituto ISI, Turin, Italia
Duración: 4 meses

Nombre de investigador: Javier Borge
Lugar de estancia: Instituto ISI, Turin, Italia
Duración: 1 semana

Nombre de investigador: Isaías Lans
Lugar de estancia: Laboratory of Chemical Physics, National Institute of Health, Bethesda, USA
Duración: Mayo 2011-Agosto 2011

Nombre de investigador: Ana Sánchez Azqueta
Lugar de estancia: Instituto de Fisiología Vegetal y Fotosíntesis, CSIC, Sevilla
Duración: Junio 2011

Actuaciones

Distinciones y premios

Autor: Alfonso Tarancón Lafita, Rubén Vallés, Gonzalo Ruiz y Jaime Ibar. (Empresa colaboradora: Schnell Software)
Categoría: Transferencia de Conocimientos a la Empresa, III Edición
Organizador: Consejo Social de la Universidad de Zaragoza, la Confederación de Empresarios de Aragón (CREA) y la Confederación de Empresarios de la Pequeña y Mediana Empresa (CEPYME-ARAGÓN)

Guilermína Goñi, Premio Extraordinario de Doctorado 2011.

Patricia Ferreira, Vicent Massey Award en el campo de investigación en Flavinas y Flavoproteínas. Berkeley University, San Francisco (CA), USA, Julio 2011

Proyectos fin de carrera dirigidos

“Desarrollo de un sistema de información para la Red Española de Supercomputación”
Víctor Civitani Monzón (Ingeniería Informática), 18 Mayo 2011.
Dirigido por Guillermo Losilla

Contratos con empresas

Se han realizado los siguientes contratos con empresas:

Título del contrato: Desarrollo de nuevos test de diagnóstico y aplicación en muestras de campo
Contrato OTRI de I+D con la empresa ZEUI-Inmunotec
Duración desde: 01/04/2010 **hasta** 31/03/2011
Investigador responsable: María F. Fillat Castejón

Título del contrato: 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
Duración desde: 16/07/2009 **hasta** 31/12/2012
Investigador responsable: María F. Fillat Castejón

Título del proyecto: ANEXO VALIDACIÓN TEST PARA DETECCIÓN DE MICROCISTINA EN AGUA DE BOCA

Entidad financiadora: Zeu Inmunotec/Otri 2011-0394
Duración desde: 2011

Investigador principal: María Luisa Peleato Sánchez

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: ASESORAMIENTO, DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE ENSAYOS BIOANALÍTICOS

Entidad financiadora: Zeu Inmunotec/Otri 2011-0254
Duración desde: 2011

Investigador principal: María Luisa Peleato Sánchez

Número de investigadores participantes: 5

En el área de computación también se han llevado a cabo durante este año 2011 una serie de contratos:

Título del proyecto: Escucha activa en entornos grid y cloud

Entidad financiadora: Empresa “Ingeniería y Control”. Contrato OTRI 2011-0120. Cheque tecnológico ARAID-Ibercaja.

Duración: 2011

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título del proyecto: Curso desarrollo de aplicaciones para dispositivos móviles smartphone

Entidad financiadora: Empresa “Advantia”. Contrato OTRI 2011-0385.

Duración: 2011

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título del proyecto: Implantación de un modelo predictivo para la plataforma SMMART

Entidad financiadora: Empresa "Cierzo Development". Contrato OTRI 2011-0296. Cheque tecnológico ARAID-Ibercaja.

Duración: 2011

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título del proyecto: Desarrollo de un modelo de identificación de clientes únicos en una compañía de telefonía móvil

Entidad financiadora: Empresa "Advanced Applied Analytics". Contrato OTRI 2011-0539.

Duración: 2011-1012

Investigador principal: David Iñiguez

Patentes

Inventores: José Alberto Carrodegua Villar, Javier Sancho, Celia Conesa y Agapios Sachinidis.

Título: Uso de derivados de bencetonio para la eliminación de células madre.

N. de solicitud: P200701973

Fecha de prioridad: 18-5-11

Entidad titular: Universidad de Zaragoza, Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud, Universidad de Colonia

Inventores: María F. Fillat, María Luisa Peleato, Antonio Clavel, María Pilar Goñi, Laura Calvo, Irene Gregorio, Alicia García Berna, María Teresa Fernández

Título: Método de detección de cianobacterias y bacterias patógenas presentes en agua o en amebas de vida libre.

N. de solicitud: 201131130

Entidad titular: Universidad de Zaragoza

Otra información relevante

- Participamos en La Noche de los investigadores 2011 realizado en septiembre, el BIFI presentó sus 4 áreas: bioquímica, con una mesa de extracción de ADN, una mesa de electrónica, un espacio de visualización 3D y un espacio de Ibercivis.

- Participamos en Espacio Ciencia 2011. Estuvimos presentes en la feria de Muestras Zaragoza en octubre de 2011, con motivo de las Fiestas de El Pilar, personal del BIFI se desplazó al pabellón de la ciencia en Zaragoza para atender los stands de extracción de ADN, juego de Ibercivis "Ibergame" y un espacio de visualización 3D. También se llevó un póster de Feelicity y del estudio sobre el 15M además de folletos genéricos del BIFI.

- Participación en una Charla en Ramon Areces. En abril de 2011 se realizó en el centro Fundación Ramón Areces un evento científico en el que el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos estuvo presente, presentado Ibercivis junto al sistema de visualización 3D.

- El 23 de marzo de 2011 la asociación de mujeres investigadoras y tecnólogas AMIT-MUCIT organizó el III Girls' Day en Aragón (www.girls-day.es). El Girls' Day es una jornada para acercar a alumnas de Enseñanza Secundaria al mundo de la ingeniería y la tecnología de la mano de mujeres que desempeñan papeles relevantes tanto en el ámbito empresarial, como el investigador. El Girls' Day se celebra a nivel internacional desde hace varios años y en España se celebró por primera vez en la Universidad de Zaragoza en el año 2008.

Actuaciones

Ese día 1200 estudiantes de ESO visitaron laboratorios de investigación y empresas de base tecnológica. Para ello se organizaron visitas a grupos de 20 estudiantes y de una duración de unos 30 minutos cada una. En esta edición el BIFI apoyó la iniciativa y se comprometió a participar. Las personas encargadas de enseñar los laboratorios de Bioquímica (cultivo celular, cristalografía y biofísica) fueron Milagros Medina, Marta Martínez, Olga Abian y Celia Conesa. Patricia Santos fue la encargada de mostrar el de computación.

- Realizamos la V Conferencia Nacional del BIFI, este año dedicada a la memoria del que fue nuestro director, José Félix Sáenz.

Se reunieron noventa investigadores de toda España. Se presentarán los avances de investigación en las áreas científicas desarrolladas en el Instituto: Biofísica, Bioquímica y Biología molecular, Sistemas Dinámicos y Redes Complejas, Materiales Complejos y Fenómenos de Transporte, y Computación.

En la Conferencia se trataron asuntos como las proteínas precursoras en la enfermedad de Alzheimer y del diseño de inhibidores contra proteínas del HIV, de cómo modelar de forma aproximada sistemas fluidos y moléculas, de cómo las simulaciones por ordenador de todos estos sistemas se verán afectadas por los avances previstos en la potencia de cálculo, de sistemas desordenados y de transporte de iones en fusión nuclear, del estudio de las redes complejas de regulación de la bacteria de la tuberculosis, de sincronización en redes y de cómo los comportamientos humanos afectan a la difusión de epidemias en redes de contactos.

El científico aragonés Mateo Valero, de la Universidad Politécnica de Cataluña Barcelona Supercomputing Center, pronunció la conferencia inaugural.

- Estamos organizando la V Conferencia Internacional del BIFI, que será durante los días 1, 2, 3 y 4 de febrero de 2012.
- El 11 de Febrero de 2011, Mateo Valero fue investido como nuevo Doctor Honoris Causa por la Universidad de Zaragoza.
- Mateo Valero, natural de Alfamén (Zaragoza), es el director del Barcelona Supercomputing Center, centro que alberga el supercomputador MareNostrum y con el que el BIFI mantiene una estrecha colaboración a través de la Red Española de Supercomputación.

Propuesto por el BIFI junto con el Centro Politécnico Superior y el Departamento de Ingeniería e Informática de Sistemas, Mateo Valero tuvo como padrinos a Alfonso Tarancón, director del BIFI y catedrático de Física Teórica, y Manuel Silva Suárez, catedrático de Ingeniería de Sistemas y Automática de la Universidad de Zaragoza. Alfonso Tarancón leyó en la ceremonia de investidura el discurso que había preparado el que hasta hacía unos días había sido el director del BIFI, José Félix Sáenz Lorenzo, fallecido el 7 de Enero de 2011.



El director: Alfonso Tarancón Lafita
Zaragoza diciembre de 2011.