



INSTITUTO DE BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS

MEMORIA ANUAL 2013



Instituto Universitario de Investigación
Biocomputación y Física
de Sistemas Complejos
Universidad Zaragoza

28 de enero de 2014

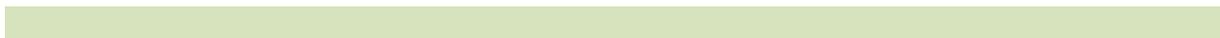
Índice

Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos	5
1.1. Equipo directivo y divisiones o áreas de organización	5
1.2. Recursos humanos	7
1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza	8
1.2.2. Investigadores que pertenecen a otras entidades, pero vinculados directamente en el IUI BIFI	9
1.2.3. Otros miembros que no pertenecen a la Universidad de Zaragoza	10
1.2.4. Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2013.....	12
1.2.4. Bajas y motivo	12
Apartado 2. Líneas de investigación	13
2.1. Estructura de investigación en BIFI.....	14
2.2. Descripción de las áreas de investigación.....	14
2.3. Área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular	15
2.3.1. Células Madre y Apoptosis/Stem Cells and apoptosis.....	15
2.3.2. Vehiculización de fármacos/Drug Delivery.....	18
2.3.3. Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias/Genetic regulation and physiology of cyanobacteria.....	19
2.3.4. Microcistinas y su tecnología/Studies on microcystin and its technology	24
2.3.5. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology.	26
2.3.6. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design	29
2.4. Área de Física	31
2.4.1. Vidrios de spín/Spin glasses.....	31
2.4.2. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomoléculas.....	34
2.4.3. Sistemas complejos y Redes/Complex Systems and networks	39
2.4.4. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic structure	45

2.4.5. Econofísica, modelos no-lineales y complejidad/Econophysics, nonlinear models and complexity.....	47
2.5. Área de Biofísica.....	49
2.5.1. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design	49
2.5.2. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology	49
2.5.3. Glicosiltransferasas e hidrolasas implicadas en enfermedades humanas/Glycosyltransferases and hydrolases involved in human diseases	50
2.5.4. Redes y sistemas complejos/Complex systems and networks	52
2.5.5. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomolecules	53
2.5.6. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic structure	53
2.5.7. Interacciones biomoleculares/Biomolecular interactions	53
2.6. Área Computación	57
2.6.1. High Performance Computing	57
2.6.2. Grid&Cloud Computing.....	60
2.6.3. Ciencia Ciudadana/Citizen science.....	62
2.6.4. Ordenadores dedicados/Special purpose computers	66
2.6.5. Visualización avanzada y transferencia tecnológica	67
2.6.6. Análisis de Información en Internet y Grandes Redes. Inteligencia Colectiva	69
2.7. Infraestructuras del BIFI.....	70
2.7.1. Infraestructuras de Física y Computación.....	71
2.7.2. Infraestructuras Bioquímica y Biofísica.....	88
2.8. Oferta tecnológica del BIFI.....	97
2.8.1. Laboratorios de Bioquímica y Biología Molecular y Celular y de Biofísica: equipos e infraestructuras.....	97
2.8.2. Infraestructuras de Computación: servicios	97
Apartado 3. Estructura de financiación: captación de recursos y destino de los mismos	99
3.1. Financiación basal proporcionada por el Gobierno de Aragón de apoyo al BIFI.....	100
3.2. Financiación basal proporcionada por la Universidad de Zaragoza	100

3.3. Financiación obtenida en convocatorias de carácter público y concurrencia competitiva: europeos, nacionales y autonómicos	101
3.3.1. Proyectos de carácter europeo.....	101
3.3.2. Proyectos de convocatorias nacionales.....	101
3.3.3. Proyectos de convocatorias autonómicas	103
3.3.4. Financiación obtenida de empresas	103
3.4. Estructura de gastos durante el año 2013	104
Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica	105
4.1. Proyectos de investigación	105
4.1.1. Proyectos de investigación de financiación pública y de concurrencia competitiva.....	105
Proyectos Financiados por entidades europeas en 2013	105
Financiados por entidades nacionales en 2013	107
Financiados por entidades autonómicas en 2013	111
4.1.2. Proyectos participados o liderados por investigadores pertenecientes al IUI financiados por empresas	112
4.2. Publicaciones	113
4.3. Comunicaciones a congresos.....	120
Conferencias invitadas	120
Comunicaciones orales	122
Posters	124
4.4. Congresos, cursos y jornadas organizados por el BIFI	127
4.4.1. Congresos, cursos y jornadas organizados por el IUI, talleres de trabajo	127
4.5. Conferencias	128
4.5.1. Organización de conferencias en las que participan Investigadores de otros centros de investigación.	128
4.6. Patentes	130
4.7. Empresas SPIN-OFF	130
Apartado 5. Formación	131
5.1. Tesis dirigidas leídas en 2013.....	131

5.2. Becas de iniciación a la investigación	131
5.3. Cursos impartidos	132
Apartado. 6. Proyección Internacional	132
6.1. Colaboraciones externas.....	132
6.1.1. Colaboración con centros extranjeros:.....	132
6.1.2. Colaboraciones con centros españoles.....	136
6.2. Estancias en otros centros de investigación	137
6.2.1. Estancias de investigación en centros extranjeros de investigadores del BIFI	137
6.2.2. Estancias de investigación realizadas por investigadores extranjeros en el BIFI.....	139
Apartado 7. Interacción con la sociedad	142
Anexo I. Tabla resumen Actividades BIFI 2013 firmada por el director	152



Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos

Entre los años 1999 y 2002 y gracias al empeño y esfuerzo de los departamentos de Física Teórica y de Bioquímica de la Universidad de Zaragoza, se gestó la creación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistema Complejos siendo como un nuevo Instituto Universitario de Investigación de la Universidad de Zaragoza. Desde su creación en 2002 se ubicó en el Edificio Cervantes, pero en 2010 se trasladó a las nuevas instalaciones sitas en el Campus Río Ebro, en el Edificio I+D.

Hasta el momento BIFI ha sido dirigido por 3 directores, el fallecido José Félix Sáenz, tras su fallecimiento fue directora Milagros Medina y, desde 2011, es Alfonso Tarancón Lafita.

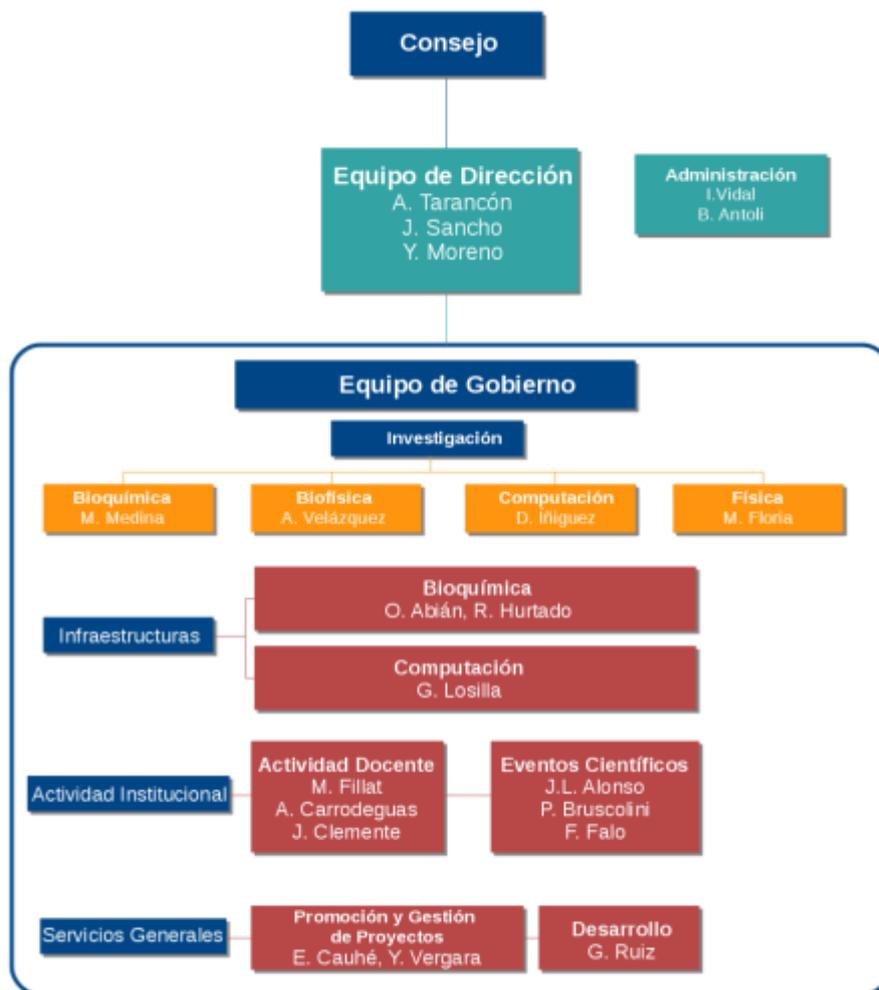
Este instituto nace con una vocación generada por el interés del estudio de moléculas de interés biológico y de otros sistemas físicos complejos desde un punto de vista multidisciplinar y con el uso masivo de recursos de computación. Sin embargo, el IUI BIFI es un centro dinámico que pretende ir avanzando y adaptándose a la situación real del mismo. Pretende mostrar una visión realista de la dimensión de su investigación. A lo largo de poco más de la década de vida de este centro se han ido perfilando y añadiendo líneas afines, en función de resultados obtenidos, de nuevos proyectos, de incorporación de investigadores, etc.

La cultura y los valores del BIFI incluyen distintos aspectos que cada año se intentan potenciar para obtener los mejores resultados:

- idoneidad interdisciplinar: reunir y establecer sinergias entre investigadores de distintos campos, especialmente computación, física y bioquímica y biología molecular
- excelencia investigadora: promover la máxima calidad en su producción científica y proporcionar los medios humanos y técnicos necesarios
- transferencia de conocimiento al entorno productivo e industrial
- formación de investigadores multidisciplinarios
- difusión de la cultura científica
- búsqueda de financiación

1.1. Equipo directivo y divisiones o áreas de organización

El organigrama actual del instituto es el que se ha representado en la siguiente imagen:



El Equipo de Dirección se compone por el Director, Alfonso Tarancón, el Subdirector, Javier Sancho y el Secretario Yamir Moreno. Este equipo de dirección se reúne mensualmente.

El Equipo de Gobierno se compone, además de por el Equipo de Dirección, por uno o varios de los implicados en cada una de las Áreas de Investigación, del Área de actividad institucional y de los Servicios Generales.

Anualmente se realiza una reunión del claustro total del Instituto BIFI, en el que se elabora y revisa la memoria y los presupuestos y, cada 4 años se realiza la elección del Director.

1.2. Recursos humanos

Los miembros del BIFI se han clasificado en 3 tipologías:

- Personas pertenecientes a la Universidad de Zaragoza.
- Personas pertenecientes al BIFI con vinculación con la Fundación ARAID ó con CSIC, que intervienen en la obtención y aplicación de los fondos del BIFI.
- Otros miembros que no pertenecen a la UZA, ni al CSIC, ni a la Fundación ARAID, ni a la Fundación CIRCE.

Una gran mayoría de los miembros del BIFI, 102 miembros, pertenecen a la Universidad de Zaragoza, con una u otra vinculación.

BIFI-UZA	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI	45	0	45
Investigadores	8	18	26
PTA	5	24	29
PA	0	2	2
TOTAL MIEMBROS BIFI UZA	58	44	102

De ellos, 47 son personal funcionario de la UZA y 6 están vinculados a otras entidades como ARAID y CSIC. Podemos ver en las siguientes tablas la distribución según la entidad a través de la cual están vinculados a la UZA:

Personal UZA	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI	44	0	44
Investigadores	3	18	21
PTA	5	24	29
PA	0	2	2
TOTAL Personal UZA	52	44	96

Personal CSIC	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI	1	0	1
TOTAL CSIC	1	0	1

Personal ARAID	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
Investigadores	5	0	5
ARAID	5	0	5

También se puede comentar que existen 90 miembros del BIFI todos doctores, que se suman a los anteriores y que pertenecen a otras entidades: a otros centros de investigación de Aragón, a las Unidades asociadas con las que el Instituto mantiene convenios oficiales, a otras universidades españolas y centros de investigación nacionales o internacionales.

1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza

Durante este año 2013 se pueden clasificar el personal del BIFI que pertenecen a la Universidad de Zaragoza según se ve en la tabla siguiente:

PDI	DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica	14	0
Área de Biofísica	3	0
Área de Física	28	0
Área de computación	0	0
	45	0
Investigadores		
	DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica	0	13
Área de Biofísica	0	2
Área de Física	3	8
Área de computación	0	0
	3	23
PTA		
	DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica	2	9
Área de Biofísica	1	1
Área de Física	1	1
Área de computación	1	13
	5	24
PA		
	DOCTORES	NO DOCTORES
Sin área asignada	0	2
	0	2
	53	49
TOTAL BIFI UZ		102

En cuanto a los miembros del BIFI pertenecientes a la Universidad de Zaragoza, destacamos que casi un 85% de los doctores del instituto es personal docente investigador (PDI), destacando que mitad de ellos son del área de Física. Sin embargo, la cantera de investigadores en cuanto a investigadores no doctores pertenecen en su mayoría al área de Bioquímica y Biofísica.

Otro detalle a comentar es la especialización del personal técnico del BIFI, que incluyen expertos técnicos, diplomados, licenciados y doctores que aunque trabajan en distintas áreas, es en la de computación en la que se puede observar su mayor proporción. Estos técnicos, aunque se han incluido en personal técnico, en muchos de los casos y en cuanto a su actividad, pueden considerarse investigadores, ya que participan como responsables o coordinadores de líneas de investigación supervisados por un investigador en sentido estricto del BIFI.

Las siguientes personas forman parte del BIFI y pertenecen a la Universidad de Zaragoza:

ALONSO BUJ, JOSE LUIS
BES FUSTERO, MARIA TERESA
CARMONA MARTINEZ, JOSE MANUEL
CARRODEGUAS VILLAR, JOSÉ ALBERTO
CATALAN RODRIGUEZ, PILAR
CRUZ FLOR, ANDRES
FALCETO BLECUA, FERNANDO
FALO FORNIES, FERNANDO
FERNANDEZ-PACHECO PEREZ, AMALIO
FILLAT CASTEJON, M. FRANCISCA
FLORIA PERALTA, LUIS MARIO
GARCIA ESTEVE, JOSE VICENTE VICTOR
LOPEZ LORENTE, FRANCISCO JAVIER
LOPEZ RUIZ, RICARDO
MARTINEZ OVEJAS, PEDRO JESUS
MEDINA TRULLENQUE, MILAGROS
PELEATO SANCHEZ, M^a LUISA
PLO ALASTRUE, BLAS FERNANDO
SANCHO SANZ, JAVIER
SANZ SAIZ, GERARDO
TARANCÓN LAFITA, ALFONSO
MORENO VEGA, YAMIR
GOPAR SÁNCHEZ, VÍCTOR ARTURO
CLEMENTE GALLARDO, JESUS JERONIMO
BRUSCOLINI, PIERPAOLO
PELLICER LOSTAO, MARIA DEL CARMEN
POLO ORTIZ, VICTORIANO
FERREIRA NEILA, PATRICIA
SEVILLA MIGUEL, EMMA
VELASCO GARASA, JOSE LUIS
GRACIA BONDIA, JOSE

MARTINEZ JULVEZ, MARTA MARIA
ALMUDÍ HIGUERAS, ISABEL
ALTARRIBA FARRAN, JUAN
VARONA AGUADO, LUIS
LOPEZ BUESA, PASCUAL LUIS
GIL NARVION, JOSE MIGUEL
MARESCHAL, MICHEL
ABIÁN FRANCO, OLGA MARIA
VELÁZQUEZ CAMPOY, ADRIÁN
PEREZ GAVIRO, SERGIO
CASTRO BARRIGÓN, ALBERTO
HURTADO GUERRERO, RAMON
IÑIGUEZ DIESTE, DAVID
ECHENIQUE ROBBA, PABLO
RIVERO GRACIA, ALEJANDRO ENRIQUE
GOMEZ GARDEÑES, JESUS
LOSILLA ANADON, GUILLERMO
VALLES PEREZ, RUBEN
SERRANO SANZ, FERMIN
GINER GRACIA, MANUEL ARTURO
IBAR YUBERO, JAIME
SANTOS MARCO, PATRICIA
RUIZ MANZANARES, GONZALO
VEGA SÁNCHEZ, SONIA
CAUHE MARTIN, ELISA
FERRER MARCO, ALFREDO
SANZ GARCIA, JUAN FRANCISCO
ALÍAS NIÑO, MIRIAM
GALANO FRUTOS, JUAN JOSÉ
BOTELLO MORTE, LAURA
ESPINOSA ANGARICA, VLADIMIR
GONZÁLEZ RODRÍGUEZ, ANDRÉS
LOPEZ RODRIGUEZ, LAURA
CATALINA
TORREBLANCA GONZALES,
RENZO ENMANUEL

CARDILLO, ALESSIO
VINCENZO
LOSTAL LANZA, EDUARDO
VERGARA LARRAYAD, YOLANDA
MELLADO ESTEBAN, XAVIER
IBÁÑEZ HERNÁNDEZ, MARIA DEL CARMEN
VIRUEL SANCHEZ, JUAN
VAL GASCON, CARLOS
HERNANDEZ RUIZ, CRISTINA
SEBASTIÁN VALVERDE, MARÍA
CEBALLOS LAITA, LAURA
RODRÍGUEZ, ÁNGELA
LIRA-NAVARRETE, ERANDI
FIGUEROLA-CONCHAS, AINOA
EMILIO LAMAZARES
ARILLA LUNA, SONIA SUSANA
SANCHEZ AZQUETA, ANA
BERVIS SEMILIANELUE, NOEMI
BENAVIDES RIVEROS, CARLOS LEONARDO
CONDE GIMÉNEZ, MARÍA
LATORRE MURO, PEDRO
TAPIA ROJO, RAFAEL
ARRUEBO LOSHUERTOS, MARIA ELENA
CALVO SEIN ECHALUCE, VIOLETA
BROSET BLASCO, ESTHER
VALERO GONZÁLEZ, JESSIKA
NELO BAZÁN, MARIA
ALEJANDRA
CLAVERÍA GIMENO, RAFAEL
VILLANUEVA LLOP, RAQUEL
MELONI, SANDRO
SANZ REMON, JOAQUIN
ALVAREZ BAÑOS, RAQUEL
PIEDRAHITA, PABLO
COZZO, EMANUEL
MONFORTE, JORGE
ANTOLI OCA, BEATRIZ
VIDAL ISABEL

1.2.2. Investigadores que pertenecen a otras entidades, pero vinculados directamente en el IUI BIFI

En cuanto a las personas que pertenecen al BIFI, que intervienen en la obtención y aplicación de los fondos, pero están vinculadas a otras entidades se enumeran a continuación:

Investigadores del Programa ARAID:

Alberto Castro Barrigón
Ramón Hurtado Guerrero
David Iñiguez Dieste
Sergio Pérez Gaviro
Adrián Velázquez Campoy

CSIC

Pablo Echenique

1.2.3. Otros miembros que no pertenecen a la Universidad de Zaragoza

Dentro de la multidisciplinaridad que prima en el IUI BIFI pueden destacarse también la multiterritorial en cuanto al centro de pertenencia de alguno de sus miembros que colaboran con los miembros pertenecientes a la UZA citados en el anterior apartado. Todos ellos están vinculados a entidades e instituciones nacionales e internacionales de relevancia en investigación y aportan una importante colaboración en las distintas líneas de investigación del BIFI.

Adrián Budini	Argentina
Albert Díaz Guilera	Física Fundamental. Universidad de Barcelona. Barcelona
Alejandro Arenas Moreno	Ciencias de la Computación e nInteligencia Artificial. Universidad Rovira y Virgili, Tarragona
Alejandro Tejedor Cubero	
Alfonso Jaramillo	Laboratoire de Biochimie. École Polytechnique. Paris, FRANCE
Álvaro Sebastián Yagüe	Laboratorio de Biología. Estación Experimental Aula Dei. Zaragoza
Ana Serrano Esteban	
Andrea Maiorano	Universidad de Ferrara. Italia
Andrés de Bustos Molina	CIEMAT. Madrid
Ángel Rubio Secades	Dpto. Física Materiales. Universidad del País Vasco
Ángel Sánchez Sánchez	Matemática Aplicada. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid
Angelo Rosa	Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA/ISAS) vía Bonomea, 265 - 34136 Trieste ITALY
Antonio Gordillo Guerrero	Universidad de Extremadura. Badajoz
Antonio Muñoz Sudupe	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
Antonio Parody	Química Física. Universidad de Granada. Granada
Antonio Rey Gayo	Química Física. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
Beatriz Herguedas Frances	Neurobiology Division. MRC Laboratory of Molecular Biology, CB2 0QH Cambridge, UK
Beatriz Martín Luna	OPERON S.A. ZARAGOZA
Beatriz Ibarra	Química Física. Universidad de Granada. Granada
Bruno Contreras Moreira	Estación Experimental Aula Dei. CSIC. Zaragoza
Carlos Naón	Universidad de la Plata. Argentina
Carlos Ungil	CERN. Ginebra
Celerino Abad Zapatero	Pharmaceutical Biotechnology Molecular Biology. University of Illinois. Chicago
Celia Conesa	Department of Life Science. University of Limerick. Ireland
Claudia Machicado Rivero	
Daniel López Bruna	Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid
Daniele Sciretti	Barcelona Media. Barcelona
David Yllanes Mosquera	Universidad Complutense de Madrid
Diego Prada Gracia	Freiburg Institute for Advanced Studies. School of Soft Matter Research. Freiburg (Alemania)
Emma Sevilla Miguel	CNB.CSIC. Madrid
Enrique Louis Cereceda	Física Aplicada. Universidad de Alicante. Alicante
Esther Broset Blasco	Grupo de Genética de Micobacterias CIBER de Enfermedades Respiratorias Departamento de Microbiología Facultad de Medicina Universidad de Zaragoza Zaragoza
Fernando de León Pérez	Centro Universitario de la Defensa

Fernando Naranjo Mayorga	Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia. Tunja-Bocaya (Colombia)
Francisco Castejón Magaña	Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid
Francisco Guinea	Instituto de Ciencia de los Materiales de Madrid. CSIC. Madrid
Giovanni Brucoli	Universidad de Zaragoza
Guillermina Goñi Rasia	Centro Nacional Investigaciones Oncológicas. CNIO. Zaragoza
Guillermo Chiappe	Física Aplicada. Universidad de Alicante. Alicante
Inmaculada Yruela Guerrero	Aula Dei. CSIC Zaragoza
Isabel Campos Plasencia	Instituto de Física de Cantabria CSIC. Santander
Isabel Nogués González	Instituto di Biología Agro-ambientale e Forestale IBAF. CNR. Roma (Italia)
Isaías Lans Vargas	
Iván Calvo Rubio	Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid
Jaime Sañudo Romeu	Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura. Badajoz
Jaroslav Pech	
Javier Burguete Tolosa	Estación Experimental Aula Dei. CSIC. Zaragoza
Jesús Tejero Bravo	Lerner Research Institute. Cleveland EEUU
Joaquín Marro Borau	Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional. Universidad de Granada. Granada
Joaquín Molla Lorente	Unidad de Materiales. CIEMAT. Madrid
Jon López Llano	Lima (Perú)
José Antonio Cuesta Ruiz	Departamento de Matemáticas. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid
José Luis López García	Matemática Aplicada. Universidad Pública Navarra. Navarra
José Luis Neira	Química Física. Universidad Miguel Hernández. Elche
José Luis Velasco Garasa	CIEMAT. MADRID
José M. Sánchez-Ruiz	Química Física. Universidad de Granada. Granada
José María Sancho Herrero	Materia Condensada. Universidad de Barcelona. Barcelona
José Miguel Reynolds Barredo	Universidad de Zaragoza
José Ramón Peregrina Bonilla	Science. University of St Andrews. Zaragoza
José Gracias Brudía	Química. Universidad de Salerno. Salerno (Italia)
Juan Jesús Ruiz Lorenzo	Física. Universidad de Extremadura. Badajoz
Juan Fernández - Recio	Barcelona Supercomputing Center. Universidad de Barcelona. Barcelona
Julia Poncela Casasnovas	Technological Institute. Northwestern University (Evanston, Illinois). Illinois
Laura Calvo Begueria	Estación Experimental de Aula Dei Zaragoza
Laura Vela Poves	Departamento de Bioquímica Universidad de Zaragoza Zaragoza
Liliana Arrachea	Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Departamento de Física. Universidad de Buenos Aires. 1428 Buenos Aires. ARGENTINA
Luis Alberto Campos Prieto	CSIC. Centro de Investigaciones Biológicas (CIB) - CSIC. Madrid
Luis Antonio Fernández	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
Luis García Gonzalo	Física. Universidad Carlos III. Madrid
Luis Martín Moreno	CSIC. Universidad de Zaragoza. Zaragoza
María Cotallo Abán	
Marta Bueno Fernández	Computational Biology University of Pittsburgh. Pittsburgh, PA (USA)
Mauricio García Mateu	Centro de Biología Molecular Severo Ochoa. Universidad Autónoma de Madrid. Madrid
Mauro Faccin	Institute for Scientific Interchange (ISI) Foundation, Via Alassio 11/c, 10126 Torino, Italy
Nunilo Cremades Casasin	Department of Chemistry. University of Cambridge. UK
Pablo García Risueño	Institut für Physik und IRIS Adlershof, Theoretische Festkörperphysik Humboldt-Universität zu Berlin

	Zum Grossen Windkanal 6, 12489 Berlin, Germany
Pep Español Garrigós	FRIAS. Universität Freiburg. Freiburg. Alemania
Ramón Fernández Álvarez-Estrada	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
Santiago Cuesta López	École Normale Supérieure de Lyon. Lyon (Francia)
Sara Ayuso Tejedor	
Sara López Gomollón	Estación Experimental Aula Dei CSIC
Sergio Jiménez Sanjuán	Scien Analytics
Silvia Pellicer Espuña	Zurko Research. Centro Regional de Investigaciones Biomédicas. CRIB. Albacete
Sol Carretero Palacios	
Susana Frago Moreno	Sir William Dunn School of Pathology. University of Oxford. U.K.
Víctor Martín Mayor	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
Xabier Arias Moreno	Bioquímica y Biología Molecular y Celular de la Universidad de Zaragoza
Xavier Horacio Calbet Álvarez	Institution: EUMETSAT, Alemania. EUMETSAT (Organización Europea para la Exploración de Satélites Meteorológicos) Darmstadt (Alemania)

1.2.4. Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2013

El año 2013 respecto a la captación de recursos ha dado como balance en el instituto BIFI muy positivo, con la contratación de 31 personas para realizar actividades científico/técnicas, distribuidas en las 4 áreas de investigación del BIFI, mayoritariamente en las áreas de Bioquímica y Computación.

La contratación se ha realizado con cargo al propio instituto, a ayudas a proyectos de investigación concedidas por concurrencia competitiva tanto en convocatorias nacionales como europeas (ver apartado 4)

Se puede citar que una de las contrataciones de personal técnico especialista se realizó a través de convocatoria de concurrencia competitiva, una ayuda concedida para la contratación por el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO).

A las anteriores incorporaciones, durante el año 2013 han realizado su proyecto de Máster 4 alumnos del Máster en Biología Molecular y Celular en 4 líneas de investigación principalmente: 1 con la investigadora Olga Abián, 3 con el investigador Ramón Hurtado y 1 con el investigador. Adrián Velázquez.

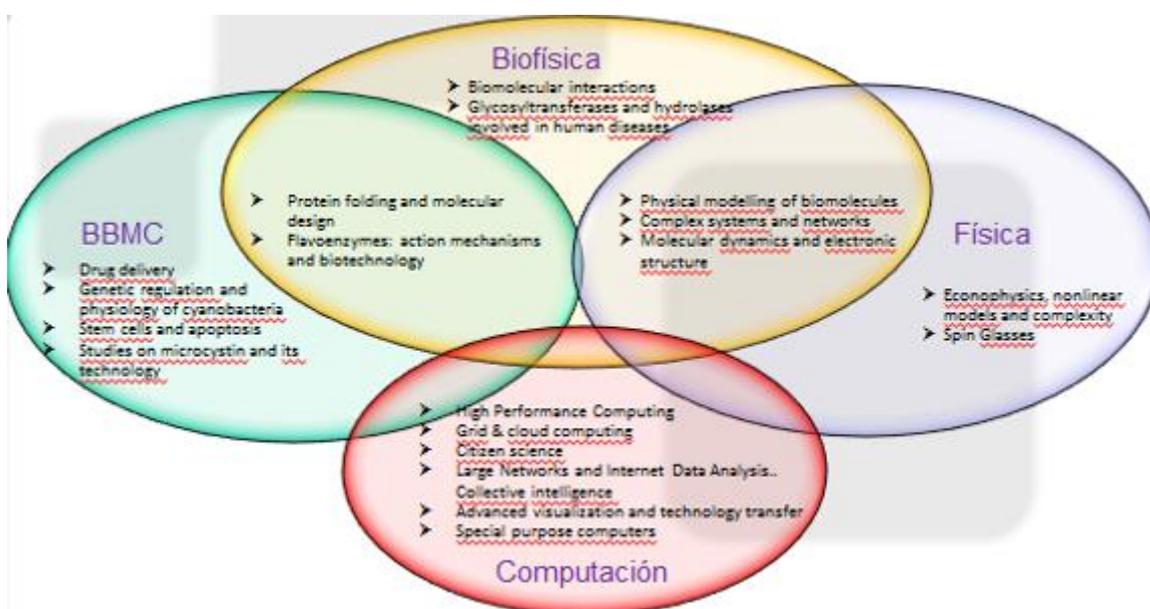
1.2.4. Bajas y motivo

Durante el año 2013 en el BIFI ha habido 11 altas como miembros del instituto y 6 personas se han dado de baja, 3 por finalización de relación contractual con el BIFI y otras 3 por incompatibilidad de pertenencia a 2 institutos universitarios de investigación de la Universidad de Zaragoza.

Apartado 2. Líneas de investigación

Siguiendo con los objetivos generales que se planteó en 2011 el BIFI en cuanto a mejora estratégica respecto a etapas anteriores, se ha conseguido interrelacionar la actividad científica entre las 4 áreas de investigación del instituto.

El esquema siguiente recoge dicha actividad conexas, complementaria y sinérgica entre las áreas de investigación del BIFI. Puede apreciarse que, aunque en las áreas hay líneas de investigación específicas, se destaca una importante actividad científica en este instituto que utiliza la colaboración como herramienta y aporta el potencial científico que supone una estrategia de colaboración de investigadores con experiencia investigadora multidisciplinar. En el esquema de conjuntos, las líneas del área de computación no se incluyen en ninguna de las intersecciones porque se considera que participa en todas las áreas. Se ha optado por incluirlas en ninguna de las intersecciones, aunque realmente deberían aparecer solapadas con los otros 3 globos.



Como un dato importante a reseñar sobre los miembros del BIFI que participan en las 19 líneas de investigación que se desarrollan en el instituto, es que además pertenecen a Grupos de Investigación reconocidos por el Gobierno de Aragón como grupos consolidados. Los grupos mayoritarios a los que pertenecen los investigadores son los de la tabla siguiente:

Tipología reconocida	Área	Ref	Nombre del Grupo
Consolidado	Exp. y Mat	E24/3	Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Consolidado	Biomédicas	B89	Protein Targets
Consolidado	Biomédicas	B18	Biología Estructural
Consolidado	Exp. y Mat	E19	Física Estadística y No Lineal
Consolidado	Exp. y Mat	E24/1	Física Matemática y Teoría de Campos
Consolidado	Biomédicas	B01	Patología Digestiva
Consolidado	Exp. y Mat	E24/2	Grupo Teórico de Altas Energías
Consolidado	Exp. y Mat	E07	Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos
Consolidado	Ag. y Vet	A52	Bioflora
Consolidado	Exp. y Mat	E22	Modelos Estocásticos

Este año 2013, el director del Instituto BIFI, Alfonso Tarancón no es investigador principal del grupo consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos sino que ha pasado el testigo al investigador David Iñiguez. El subdirector, Javier Sancho es Investigador Principal (IP) del grupo consolidado Protein Targets y el Secretario, Yamir Moreno pertenece al Grupo Física Estadística y No lineal, cuyo IP es Luis Mario Floría.

2.1. Estructura de investigación en BIFI

El instituto BIFI se creó en su origen con una vocación clara: *el estudio de moléculas de interés biológico y de otros sistemas físicos complejos desde un punto de vista multidisciplinar y con el uso masivo de recursos de computación.*

En transcurso de una década se ha ido perfilando el planteamiento inicial, incluyendo otras líneas afines, en función de la evolución de los resultados de los proyectos, nuevos intereses científicos para el instituto y para la sociedad, nuevos proyectos en colaboración nacional e internacional, incorporación de nuevos investigadores, etc.

2.2. Descripción de las áreas de investigación

La investigación del BIFI se estructura en 4 áreas de investigación cada una de ellas coordinada por un investigador responsable como puede verse en el esquema del organigrama anterior. Estas áreas son:

- Área Bioquímica
- Área Biofísica
- Área Computación
- Área Física

Cada una de estas áreas incluye varias líneas e investigadores según criterios de colaboración e interdisciplinaridad. Por eso, varias líneas de investigación pertenecen a más de un área (ver esquema anterior de intersección de conjuntos).

Al igual que en los últimos años, la investigación en colaboración en BIFI ha incrementado durante 2013 según los patrones a los que se dirige la investigación global a nivel nacional e internacional. Esta colaboración es básica tanto para el fomento de la colaboración interna y para la internacionalización del instituto.

Las líneas de investigación del BIFI desarrolladas en 2013 y que pretenden continuar en 2014, se encuentran en línea con los objetivos de I+D+i en 3 dimensiones: autonómica (*Estrategia Aragonesa de Investigación e Innovación para una Especialización Inteligente RIS3_ARAGON*), nacional (*Plan Estatal de I+D+i 2013-2016*) y europea (*Programa Marco Horizonte 2020*). En este instituto los proyectos de investigación que se desarrollan se han dirigido hacia las prioridades que priman en los programas actuales que han iniciado su andadura, la ciencia excelente, el liderazgo industrial y los retos sociales.

2.3. Área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular

Objetivo: comprender y controlar sistemas biológicos que dependen de proteínas con interés para aplicaciones en los campos de la química, biotecnología, farmacología y biomedicina.

Responsable de Área: Milagros Medina.

Líneas de Investigación:

2.3.1. Células Madre y Apoptosis	IP. José Alberto Carrodeguás
2.3.2. Vehiculización de fármacos	IP. Olga Abián
2.3.3. Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias	IP. María Fillat
2.3.4. Microcistinas y su tecnología	IP. María Luisa Peleato
2.3.5. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología	IP. Milagros Medina
2.3.6. Plegamiento de proteínas y diseño molecular	IP. Javier Sancho

Descripción de las líneas y sus principales logros 2013

2.3.1. Células Madre y Apoptosis/Stem Cells and apoptosis. IP. José Alberto Carrodeguás

Objetivos y descripción

El objetivo general es, por un lado, caracterizar funcionalmente proteínas implicadas en muerte celular, posibles dianas terapéuticas en cáncer. Por otro lado, pretendemos identificar compuestos químicos que inducen muerte celular selectivamente en células tumorales y también en células madre vs células diferenciadas, así como otros que inducen diferenciación celular específica en células madre.

Mantenemos también colaboraciones en las que se utilizan diversas técnicas moleculares y celulares aplicadas a otros campos de investigación, pudiendo destacar la identificación de polimorfismos genéticos implicados en la calidad de productos curados derivados del cerdo, principalmente. En esta línea hemos identificado un nuevo polimorfismo con efectos fenotípicos y estructurales en la proteína PEPCCK. Estamos comenzando el estudio del papel de una proteína implicada en apoptosis (Mtch2, previamente estudiada nuestra línea de apoptosis) en metabolismo lipídico y su posible relación con la deposición grasa en el cerdo, desde un enfoque relacionado con la producción animal pero también utilizando el cerdo como modelo animal para alteraciones genéticas con implicaciones fenotípicas y patológicas en humanos.

En otra línea estamos estudiando un nuevo producto con propiedades antitumorales usando cultivos celulares y modelos animales.

También participamos en proyectos europeos relacionados con la ciencia ciudadana, es decir, la implicación de la sociedad en experimentos científicos.

Utilizamos una gran variedad de técnicas bioquímicas y de biología molecular y celular, como la mutagénesis dirigida, expresión de proteínas en células procariotas y eucariotas, distintos tipos de electroforesis, cromatografía, fluorimetría, luminiscencia, cultivos celulares y microscopía óptica avanzada combinada con análisis automático de imagen. Estamos desarrollando una plataforma basada en supercomputación para el análisis multiparamétrico automatizado de imágenes de microscopía. Realizamos estudios en modelos animales, principalmente ratón pero también *Drosophila*.

Utilizamos principalmente el laboratorio de biología molecular, el laboratorio de cultivos celulares, el lector multimodo (fluorescencia, luminiscencia y absorbancia) y el microscopio invertido de fluorescencia. Actualmente estamos comenzando colaboraciones para la determinación de estructuras proteicas mediante difracción de rayos X en el BIFI.

Proyectos relacionados:

Título proyecto	Entidad Financiadora
Creación de una línea materna porcina de alta prolificidad, longevidad y buena conformación mediante la selección basada en marcadores.	DGA. INNOVA-A1-091/13
Identificación de moléculas bioactivas en células troncales mediante cribado funcional de quimiotecas: herramientas para terapias seguras.	Ibercaja/Universidad de Zaragoza
SOCIENTIZE: SOCIety as Infrastructure for E-science via Technology, Innovation and Creativity.	Comunidad Europea FP-7
GLOBAL excursión - Extended Curriculum for Science Infrastructure Online	Comunidad Europea FP-7
Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad	BIFI
Análisis del efecto en la proliferación de células in-vivo e in-vitro de un nuevo producto.	OTRI

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA
José Alberto Carrodegúas Villar/Profesor Contratado Doctor Investigador	Identificación Grupo B89-Grupo Protein Targets
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA
María Alejandra Nelo Bazán. Becaria predoctoral Fundación Ayacucho de Venezuela.	Identificación Grupo B89-Grupo Protein Targets

Resultados y conclusiones destacados en 2013

- Determinación del efecto de la sobreexpresión y de la interferencia de Mtch1 en cultivos celulares de mamífero mediante microscopía de célula viva.
- Conclusión del estudio de la implicación de Egr-1 en la expresión de Mtch1.
- Conclusión del primer estudio de compuestos inductores de muerte celular mediante ciencia ciudadana y comienzo de un nuevo estudio.
- Determinación del efecto de la interferencia del mRNA de Mtch1 en cultivos celulares de *Drosophila*.
- Determinación de alteraciones catalíticas y estructurales producidas por el cambio de un aminoácido en la proteína PEPCK, con implicaciones fenotípicas en porcino.
- Continuación del estudio de un nuevo producto antitumoral en células en cultivo y preparación de estudios en animales.
- Utilización de ultracentrifugación para la purificación de nanotubos de carbono con diversas aplicaciones.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

Galve A, Burgos C, Varona L, Carrodeguás JA, Cánovas A, López-Buesa P. Allelic frequencies of PRKAG3 in several pig breeds and its technological consequences on a Duroc × Landrace-Large White cross. *J Anim Breed Genet.* 2013, 130:382-393.

Nelo-Bazán MA, Bolado-Carrancio A, Echenique-Robba P, Rodríguez-Rey JC, and Carrodeguás JA. Early growth response 1 (Egr-1) is a transcriptional regulator of Mtch1/PSAP.. Enviado a *BBA-Gene Regulatory Mechanisms*.

Ansón-Casaos A, González-Domínguez JM, Lafragüeta I, Carrodeguás JA, Martínez MT. Optical absorption response of chemically modified single-walled carbon nanotubes upon ultracentrifugation in various dispersants. *Carbon.* En prensa

Echenique-Robba P, Nelo-Bazán MA, and Carrodeguás JA. Reducing the standard deviation in multiple-assay experiments where the variation matters but the absolute value does not. *PLOS One*, en prensa.

Carrodeguás JA, Latorre P, Burgos C, Varona L and López-Buesa P. A polymorphism in cytosolic phosphoenolpyruvate carboxykinase changes its kinetic properties and modifies fat distribution in the pig... Enviado a *Nature Genetics*.

Sonia Liggi, Georgios Drakakis, Alexios Koutsoukas, Isidro Cortes-Ciriano, Patricia Martínez-Alonso, Thérèse E Malliavin, Adrian Velázquez-Campoy, Michael

Bodkin, David Evans, Robert C Glen, José Alberto Carrodeguás and Andreas Bender Extending In Silico Mode of Action Analysis by Annotating Targets with Pathways: Application to Cellular Cytotoxicity Readouts Datasets. Enviado a Future Medicinal Chemistry

Patentes

Inventores (p.o. de firma): Pascual López Buesa, Carmen Burgos Serrano, Luis Varona Aguado, José Alberto Carrodeguás Villar.

Título: Método para la selección de suidos con mejor calidad de la carne basado en un SNP en el gen que codifica la PEPCK citosólica porcina.

Nº de solicitud: P201330290

País de prioridad: España

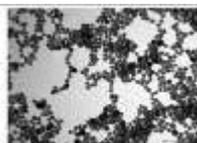
Fecha de prioridad: 1-3-13

Entidad titular: Universidad de Zaragoza

2.3.2. Vehiculización de fármacos/Drug Delivery. IP. Olga Abián

Objetivos y descripción

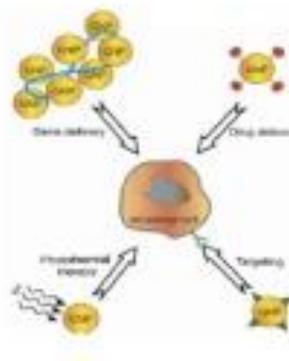
El proyecto actual de esta línea de investigación, pretende desarrollar una nueva estrategia para la inclusión de algunos compuestos antivirales activos contra el virus de hepatitis C (VHC), que se desarrollaron previamente en este grupo, utilizando nanopartículas de oro funcionalizadas (AuNP). Estas



AuNPs podían reconocer

selectivamente a las

células hepáticas infectadas donde fármaco debe actuar preferentemente. Así, se reducirían los efectos adversos debido a su distribución sistémica y sería de gran utilidad en caso de que se trate de compuestos activos con deficiente absorción o internalización celular.



Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Nanopartículas multifuncionales para el transporte y liberación selectiva de fármacos frente al virus de la hepatitis C (VHC).	INSTITUTO DE SALUD CARLOS III

Equipo de investigación

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Olga Abián Franco/Investigador SNS Programa Miguel Servet	B1-Patología Digestiva
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Rafael Clavería/ Becario Predoctoral DGA	B1-Patología Digestiva
María Arruebo/ Becario Predoctoral Fis	B1-Patología Digestiva
Pilar María Lanuza/ Estudiante Máster	No

Resultados y conclusiones destacadas 2013

- Caracterización de la unión de los complejos de OAV mediante ITC
- Estudios de biocompatibilidad celular de los complejos OAV
- Estudio celular de con anticuerpos específicos
- Microscopia electrónica con marcaje de anticuerpos y AuNPs

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Patente

Solicitantes (p.o. de firma): Abián, O., Velázquez, A., Sancho, J. and Vega, S.

Título: Allosteric inhibitors of ns3 protease from hepatitis C virus

Nº de registro: 300062217

Nº de solicitud: ep12382218.1

Lugar de presentación: European Patent Office

Entidad: Universidad de Zaragoza

Publicaciones

Abián O*, Vega S., Sancho J., Velázquez-Campoy A Allosteric Inhibitors of the NS3 Protease From the Hepatitis C Virus. PLOSone 2013, 8 (7): 69773.

Vega S, Neira JL, Marcuello C, Lostao A, Abián O* and Velázquez-Campoy A. NS3 protease from hepatitis C virus: Biophysical studies on an intrinsically disordered protein domain. International Journal of Molecular Sciences 2013, 14: 13282-13306.

Cortes-Ciriano I, Koutsoukas A, Abián O, Velázquez-Campoy A and Bender A. Experimental Validation of In Silico Target Predictions on Synergistic Protein Targets. MedChemComm 2013, 4, 278–288.

2.3.3. Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias/Genetic regulation and physiology of cyanobacteria IP. María Fillat

Objetivos y descripción

Las cianobacterias son microorganismos ubicuos en la naturaleza, juegan un papel básico en los ciclos totales de carbono- nitrógeno, y constituyen la base de la cadena trófica oceánica. Estos microorganismos tienen un extraordinario potencial en biotecnológico en agricultura en el proceso de fijación de nitrógeno, como fuente de biodiesel o como productores de moléculas de interés terapéutico, entre otras aplicaciones. Además, algunas cepas de cianobacterias producen en determinadas condiciones ambientales metabolitos secundarios que pueden tener carácter tóxico en la salud humana y para otros organismos. Aunque en la actualidad los factores de desencadenamiento de la síntesis de cianotoxinas son desconocidos, la disponibilidad de hierro parece ser un factor determinante.

El *objetivo general* de esta línea de trabajo es conocer si está regulado el metabolismo del hierro en cianobacterias y su relación con el metabolismo de nitrógeno, estrés oxidativo y la producción de cianotoxinas. En cianobacterias, la homeostasis de hierro está controlada por FurA (ferric uptake regulator A), un regulador global que forma parte de la familia Fur, junto con los parálogos FurB y FurC. Anteriormente se ha llevado a cabo una completa caracterización funcional de FurA y de los mecanismos de regulación de esta proteína. En los últimos meses, se están investigando las funciones de los otros miembros de la familia Fur, FurB y FurC en la cianobacteria y a partir de la información obtenida de la caracterización de las tres proteínas se están diseñando diferentes estrategias para la mejora de organismos de interés biotecnológico que porten genes de cianobacterias. Por otra parte, trabajos previos del grupo encaminados a la detección de cianobacterias potencialmente tóxicas en agua, se han ampliado de cara a la detección de otros patógenos frecuentes.

Finalmente se ha iniciado un nuevo proyecto encaminado a la utilización de los ortólogos de FurA como dianas terapéuticas en patógenos. Concretamente se está trabajando con las proteínas de *Helicobacter pylori* y *Listeria monocytogenes*.

Objetivos específicos:

1.- *Identificación de nuevas funciones de FurA en la cianobacteria.* FurA es una proteína extraordinariamente abundante en la cianobacteria que realiza otras funciones además de la regulación transcripcional. Durante los últimos años se ha investigado el papel fisiológico de la interacción FurA-hemo y se está trabajando en la elucidación del mecanismo que hace que la sobreexpresión de esta proteína tenga efecto detoxificante en la cianobacteria. También se está evaluando la posible función de FurA como transductor de señales redox a través de alguno de los dos motivos CXXC que presenta la proteína.

2.- *Análisis funcional de FurB y FurC en las cianobacterias Anabaena PCC 7120 y Microcystis aeruginosa PCC 7806.* Se están investigando las funciones que desempeñan estos parálogos en las dos cianobacterias incluyendo su posible interactividad con FurA. Se está caracterizando el fenotipo tanto de mutantes de *Anabaena* PCC 7120 sobreexpresando cada una de estas proteínas, como de los mutantes de delección en los que se han inactivado cada uno de estos genes.

3.- *Explorar el uso de FurA como diana farmacológica en patógenos.* Se han purificado y caracterizado las proteínas Fur de *H. pylorii* y *L. monocytogenes*. Se ha clonado el gen *fur* de *Clostridium difficile*, responsable de un elevado número de muertes en hospitales por su difícil tratamiento y se está trabajando en su sobreexpresión y la caracterización de la proteína recombinante.

Metodología e infraestructura utilizada: Se utilizan las técnicas básicas en biología molecular: aislamiento de DNA y RNA, clonaje, PCR, sqRT-PCR y qRT-PCR, mutagénesis dirigida, determinación de sitios de inicio de la transcripción, sobreexpresión y purificación de proteínas recombinantes. Además se han llevado a cabo análisis de footprinting en colaboración con los Dres. Flores y Herrero (IBVF, CSIC-Universidad de Sevilla). Transformación de enterobacterias y conjugación en cianobacterias.

Para la caracterización de las proteínas, además de las técnicas bioquímicas clásicas se han realizado análisis de interacción mediante *pull-down* y del estado redox de las cisteínas mediante modificación química con ANS. La interacción DNA-proteína se evalúa mediante análisis de retardo en gel no radiactivo (EMSA). Las determinaciones de potenciales redox se han realizado mediante titulación con DTTred/DTTox. También se utilizan diversas medidas de actividad enzimática como actividad diaforasa, actividad férrico reductas y disulfuro reductasa. La parte de la caracterización de la interacción FurA-hemo correspondiente al análisis de EPR se ha realizado en colaboración con el Dr. J.I. Martínez (Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA), CSIC-UZ, Universidad de Zaragoza)

Para la caracterización del fenotipo de los mutantes se determinan los parámetros de crecimiento, tasas de fotosíntesis y respiración, nivel de ROS y actividades nitrogenasa, catalasa y superóxido dismutasa, así como los niveles de clorofila, proteína total, carotenos y ficobiliproteínas. Se ha evaluado la ultraestructura de los mutantes mediante análisis de SEM y TEM (en colaboración con el Prof. F. Barja de la Universidad de Ginebra) y la distribución de pigmentos mediante microscopía de fluorescencia confocal.

Proyectos relacionados

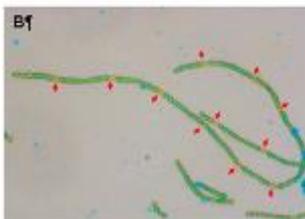
Título proyecto	Entidad Financiadora
Transducción de señales redox mediadas por FurA (ferric uptake regulator) en cianobacterias. Consecuencias en la fotosíntesis y la fijación de nitrógeno.	Ministerio de Ciencia e Innovación
Regulación de genes en cianobacterias	Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Biotecnología de las Interacciones Beneficiosas Planta-Microorganismo.	VIII Red Temática. Subprograma de Acciones Complementarias. MICINN (BIO20009-05735-E)
Royalties por la explotación comercial de la patente US-6,781,034 "Stress resistant plants" y de su familia de patentes	Plant Bioscience Limited

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
María Francisca Fillat Castejón/Catedrática de Universidad (CU)	B18-Biología Estructural
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
María Teresa Bes Fustero/TU Andrés González Rodríguez/ contratado Laura Botello Morte/ contratada Violeta Calvo Sein-Echaluze/becaria DGA	B18-Biología Estructural B18-Biología Estructural B18-Biología Estructural B18-Biología Estructural

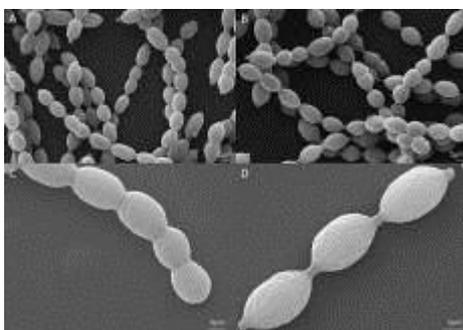
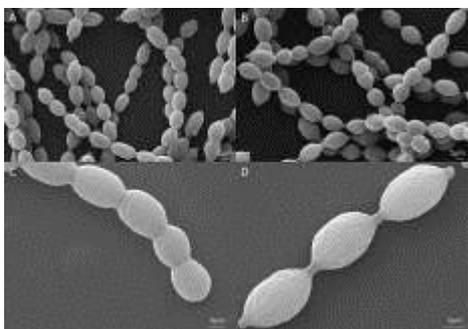
Resultados y conclusiones destacadas 2013

Se demuestra la diversidad de funciones de FurA en *Anabaena*, así como su papel de regulador global. FurA no sólo controla la homeostasis de hierro y el metabolismo del hemo en cianobacterias, sino que puede actuar como un sensor de hemo, tiene efecto detoxificante en la cianobacteria, presenta actividad disulfuro-reductasa y participa en el control de la diferenciación del heterocisto en *Anabaena*.



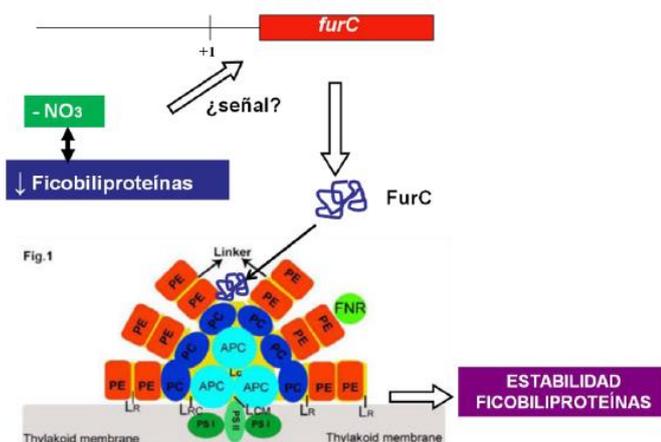
Inhibición de la diferenciación del heterocisto por la sobreexpresión de FurA. Las células se tiñeron con Alcian blue, específico de heterocistos. (A) Filamentos de la estirpe silvestre tras 24 horas de déficit nitrogenado. (B) Mutante de *Anabaena* que sobreexpresa FurA. Los filamentos muestran un patrón de diferenciación alterado con morfogénesis del heterocisto bloqueada en estadios tempranos de la diferenciación (flechas rojas).

Se ha caracterizado el fenotipo de un mutante de delección de FurB en *Anabaena* que es más sensible a daño oxidativo y posee menor contenido en clorofila y ficobiliproteínas que la estirpe silvestre. Este mutante presenta una unión más débil entre células. Asimismo se ha generado un mutante de *Anabaena* que sobreexpresa este regulador y que servido para demostrar su doble funcionalidad en cianobacterias: control de la homeostasis de Zn y modulador de la transcripción de los genes implicados en la respuesta concertada a estrés oxidativo.



Imágenes de Microscopía electrónica de barrido mostrando que el mutante de delección de FurB presenta un septo más estrecho entre las células. . A y C) *Anabaena* sp. PCC 7120. B y D) *Anabaena* $\Delta furB$. Las escalas están indicadas por las barras horizontales (1 μ m). Imágenes tomadas por el Dr. Francisco Barja (Laboratory of Bioenergetics and Microbiology, University of Geneva, Switzerland).

Se ha generado y caracterizado un mutante de sobreexpresión de FurC y se ha demostrado que esta proteína interacciona con el ficobilisoma y está relacionada con la integridad del mismo en función de la disponibilidad de nitrógeno combinado.



Modelo de actuación propuesto para FurC en relación con la estabilidad del ficobilisoma (Tomado del Proyecto fin de Máster de Esther Broset). En deficiencia de nitrógeno disminuye la síntesis de ficobiliproteínas y se activa la expresión de FurC, que se une al linker del ficobilisoma estabilizándolo.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones de relevancia

Botello-Morte L, Bes MT, Heras B, Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF. [Unraveling the redox properties of the global regulator FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120: disulfide reductase activity based on its CXXC motifs.](#) Antioxid Redox Signal. 2013 Oct 5. [Epub ahead of print] 24093463 (IF 7.189)

González A, Valladares A, Peleato ML, Fillat MF. [FurA influences heterocyst differentiation in *Anabaena* sp. PCC 7120.](#) (IF 3.582) FEBS Lett. 2013 Aug 19; 587(16):2682-90. doi: 10.1016/j.febslet.2013.07.007. Epub 2013 Jul 9.

Calvo L, Gregorio I, García A, Fernández MT, Goñi P, Clavel A, Peleato ML, Fillat MF. [A new pentaplex-nested PCR to detect five pathogenic bacteria in free living amoebae.](#) (IF 4.655) Water Res. 2013 Feb 1; 47(2):493-502. doi: 10.1016/j.watres.2012.09.039. Epub 2012 Oct 29.

Patentes:

Inventores (p.o. de firma): 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

Empresa/s que la están explotando: en trámite

2.3.4. Microcistinas y su tecnología/Studies on microcystin and its technology

IP. María Luisa Peleato

Objetivo y descripción.

Las cianobacterias pueden dar lugar a una gran cantidad de metabolitos secundarios, algunos de los cuales pueden tener carácter tóxico para los organismos eucariotas. Estos compuestos se denominan cianotoxinas. Entre las cianotoxinas más ubicuas y abundantes están las microcistinas. Las microcistinas se producen bajo condiciones ambientales todavía no bien determinadas. Nuestro grupo está interesado en estudiar la regulación del operón responsable de la síntesis de microcistina, así como en algunos aspectos aplicados. Utilizamos como cepa modelo *Microcystis aeruginosa* PCC7806, sobre la que existe una gran cantidad de información disponible.

Hemos estudiado los efectos de varios factores nutricionales, como la disponibilidad de hierro, nitrato, fosfato, y ambientales, luz, estrés oxidativo, en la expresión del operon *mcy*, responsable de la síntesis de microcistina. Nuestro objetivo actual es estudiar la regulación de este operon mediada por dos reguladores transcripcionales, NtcA (regulador global del metabolismo del nitrógeno en cianobacterias) y Fur (Ferric uptake regulator). La disponibilidad de hierro, y el balance entre el metabolismo del carbono y el nitrógeno parecen ser factores fundamentales en la regulación del operon.

En este año, hemos estudiado la interacción de NtcA con el promotor central bidireccional del operon *mcy*. Este estudio ha llevado a cabo utilizando diversas estrategias experimentales, entre ellas el uso de SPR (Surface Plasmon Resonance). Tras fragmentar el promotor en dos partes, cada una conteniendo secuencias identificadas de unión de NtcA, hemos estudiado la interacción de este regulador con el promotor. Así mismo, hemos estudiado la interacción en presencia de diversos metabolitos, como 2-oxoglutarato y aminoácidos diversos. Se han podido medir constantes cinéticas y constantes de equilibrio. Este trabajo se completa con estudios de retardo en gel, y hay un manuscrito en preparación.

El efecto del lindano sobre la producción de microcistina ha mostrado que la presencia de este contaminante en las aguas induce la producción de la toxina. También se han estudiado contaminantes de los llamados "emergentes", entre los que se encuentran gran número de fármacos. No se ha encontrado un efecto significativo de los fármacos ni del benceno en la producción de la toxina

Proyectos relacionados

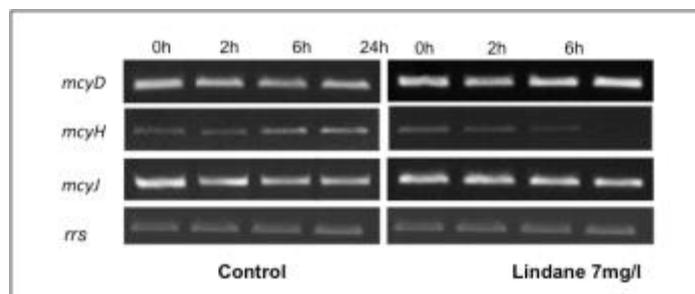
	Entidad Financiadora
Evaluación del riesgo asociado al impacto del cambio climático en aguas: proliferación de patógenos oportunistas y cianobacterias potencialmente tóxicas y alteración de la fijación del CO ₂ atmosférico.	Gobierno de Aragón, obra Social La Caixa

Equipo investigador

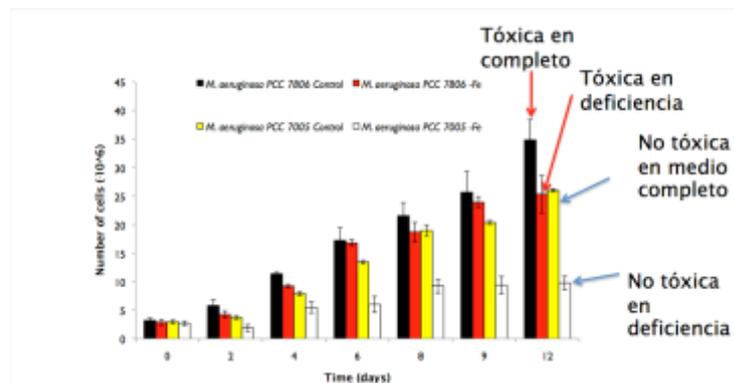
Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA
María Luisa Peleato Sánchez/ Catedrático de Universidad	Identificación Grupo B18-Biología Estructural
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA
Laura Ceballos Laita/Contratado	Identificación Grupo B18-Biología Estructural

Resultados y conclusiones destacados 2013

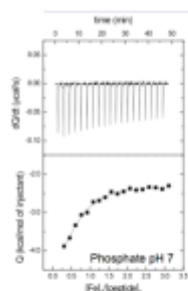
- 1- La cepa toxica de *M. aeruginosa* PCC7806 tiene una alta tolerancia al lindano.
- 2- *mcyD*, gen del operon *mcy*, implicado en la síntesis de microcistina, se induce en presencia de lindano



- 3- Las cianobacterias tóxicas solventan mucho mejor la deficiencia de hierro que las no tóxicas



- 4- En colaboración con el Dr. Adrián Velázquez se ha podido establecer que la microcistina une hierro a pHs fisiológicos

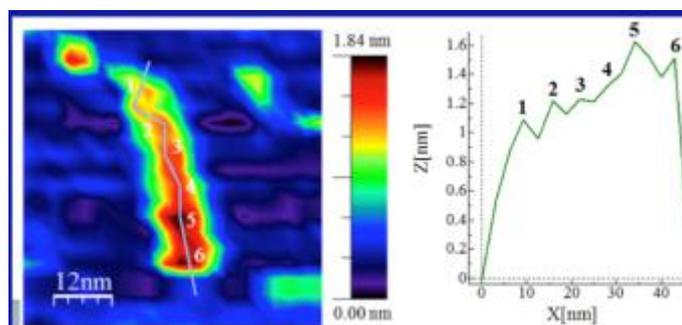


La mayor afinidad se da a pH 7

	K_D (μM)	ΔH (kcal/mol)
Fe^{3+}	2.4	-2.8
Fe^{2+}	2.4	-5.6

La menor entalpía en el caso de Fe^{2+} indica que la interacción es más favorable en ese caso

5- En colaboración con la Dra. Ana Isabel Gracia Lostao, del INA, se ha podido visualizar que en presencia de Fe^{3+} , la microcistina forma hexámeros



Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

Ceballos L, Calvo L, Bes MT, Fillat MF, and Peleato ML Effect of several emerging contaminants on growth and microcystin production in *Microcystis aeruginosa* PCC 7806. Aceptado en *Limnetica*. 2013

Martín-Luna B*, Sevilla E*, Lagunas B, Bes MT, Fillat MF and Peleato ML. Salinity decreases transcription of *mcyD* and microcystin synthesis in *Microcystis aeruginosa* PCC 7806. Aceptado en *Limnética*. 2013.

2.3.5. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology. IP. Milagros Medina

Objetivo y descripción

El objetivo es utilizar el potencial de flavoenzimas en aplicaciones biotecnológicas y terapéuticas.

Tópicos actuales:

1-Flavoenzimas bacterianas como potenciales dianas en el tratamiento de enfermedades causadas por microorganismos patógenos en plantas, ganado y humanos. Trabajamos con flavoenzimas implicadas en:

- *Biosíntesis de los cofactores flavínicos*
- *Sistemas de transformación de energía dependientes de flavoreductasas*

2-Flavoenzimas en mamíferos: el factor de inducción de apoptosis humano (hAIF) como potencial diana farmacológica. La comprensión de los mecanismos a nivel moleculares que subyacen detrás de encefalopatías relacionadas con mutaciones en esta proteína permite proponer nuevos enfoques terapéuticos.

3-Explorando otras flavoenzimas con interés biotecnológico.

- La aril-alcohol oxidasa (AAO) y la degradación de lignina
- Flavoreductasas que degradan de compuestos tóxicos en bacterias
- Dihidroorotato dehidrogenasa y fármacos contra tripanosomatidos

Empleamos métodos de Bioquímica, Biología Estructural y Biofísica tanto experimentales como computacionales: medidas de interacción proteína-proteína y proteína-ligando, de potenciales oxido-reducción, de la capacidad de transferir electrones en estado estacionario y resuelto en el tiempo, resolución de estructuras tridimensionales por difracción de Rayos X y métodos computacionales (docking, dinámica molecular MM y QM/MM).

Proyecto relacionado

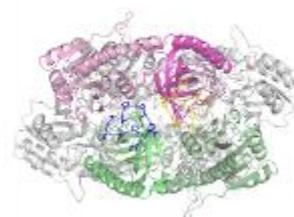
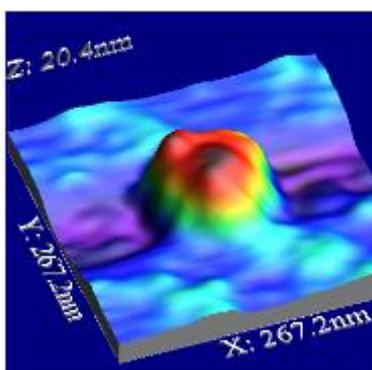
Título proyecto	Entidad Financiadora
Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica	Ministerio de Ciencia e Innovación

Equipo de investigación

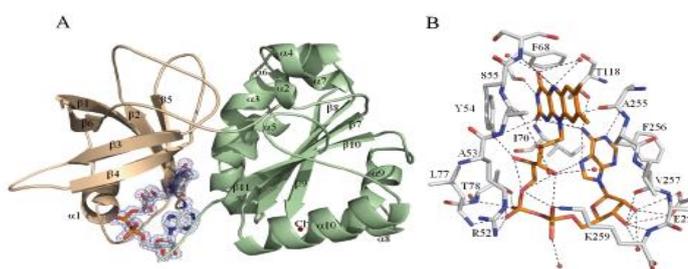
Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Milagros Medina Trullenque/ Catedrático	B18-Biología Estructural
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Marta Martínez Júlvez/Profesor Titular	B18-Biología Estructural
Patricia Ferreira Neila/Profesor Ayudante Doctor	B18-Biología Estructural
Ana Sánchez Azqueta/Estudiante de Doctorado	B18-Biología Estructural
Sonia Arilla Luna / Estudiante de Doctorado	B18-Biología Estructural
Raquel Villanueva Llop / Contratado Predoctoral FPI	B18-Biología Estructural
María Sebastián Valverde / Técnico Especialista	B18 Biología Estructural

Resultados y conclusiones destacados 2013

- FAD sintetasa: La organización cuaternaria en un dímero de trímeros de la enzima de *Corynebacterium ammoniages* es dependiente de la interacción con los ligandos y forma parte de su ciclo catalítico.



- Ferredoxina-NADP⁺ reductasa tipo bacteriano frente a eucariota. La resolución de la estructura de la enzima del patógeno de plantas *Xanthomonas*



axonopodis pv. *citri*, así como el análisis del efecto producido al eliminar la extensión C-terminal existente en enzimas bacterianas y del papel de la red de puentes de hidrógeno que estabilizan el sitio activo en enzimas plastídicas han contribuido a definir el papel de diversas regiones y aminoácidos durante la catálisis, e identificar diferencias claves entre enzimas bacterianas y eucariotas. Esta información sienta las bases para el desarrollo de compuestos bioactivos frente a enzimas de patógenos bacterianos.

- El factor de inducción de apoptosis humano (hAIF): La transición monómero-dímero como consecuencia de la reducción de hAIF por NADH regula su función cromatinolítica. Esta información resulta crítica para comprender el papel fisiológico de hAIF en el ciclo de vida y muerte en células de mamíferos.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

Marcuello C, Arilla-Luna S, Medina* M, and Lostao* A. Detection of a quaternary organization into dimer of trimers of *Corynebacterium ammoniagenes* FAD synthetase at the single-molecule level and at the in cell level. *BBA-proteins*. 1834:665-676. 2013. Impacto ISI: 3.733

Ferreira P, Villanueva R, Cabon L, Susín S, and Medina M. The oxido-reductase activity of the Apoptosis inducing factor: a promising pharmacological tool?. *Curr. Pharm. Design*. 19:2628-2636. 2013. Impacto ISI: 3.311

Bortolotti A, Sánchez-Azqueta A, Maya CM, Velázquez-Campoy A, Hermoso JA, Medina* M, and Cortez* N. The C-terminal extension of bacterial flavodoxin-reductases: involvement in the hydride transfer mechanism from the coenzyme. *BBA-Bioenergetics* 1837:33-43. 2014. Impacto ISI: 4.624

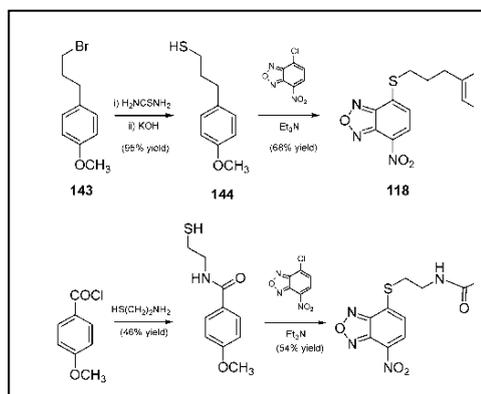
2.3.6. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design

IP. Javier Sancho

Objetivo y descripción

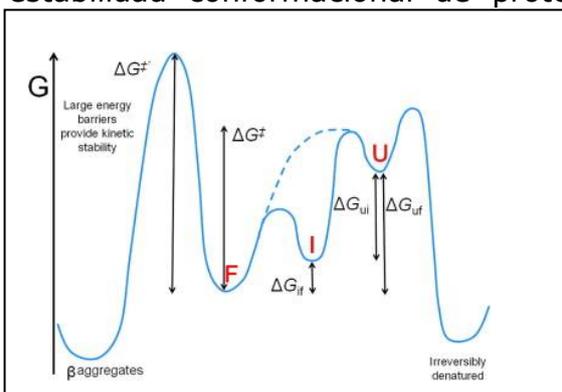


En computación, hemos completado, en colaboración con el Prof. S. Ventura (UAB) un algoritmo capaz de analizar proteomas completos e identificar posibles proteínas priónicas mediante una función de puntuación de su potencial priónico (doi: 10.1186/1471-2164-14-316.). En base a este algoritmo y en colaboración con el área de computación del BIFI hemos desarrollado una base de datos de posibles priones y un servidor web que proporciona predicción de regiones priónicas en secuencias de proteínas (prionscan: <http://webapps.bifi.es/prionscan>) Además, hemos terminado de implementar un proceso de cálculo electrostático que predice el efecto estabilizante o desestabilizante de mutaciones electrostáticas en proteínas.



En la parte biomédica, hemos desarrollado nuevos inhibidores de la flavodoxina de *H. pylori* con mejores índices terapéuticos (DOI: 10.1021/jm400786q) y hemos aclarado las causas moleculares de la creciente resistencia que presenta esta bacteria en Gambia al antibiótico metronidazol (doi: 10.1128/AAC.00517-12).

En estabilidad de proteínas, hemos avanzado en el diseño racional de la estabilidad de la flavodoxina de Anabaena PCC 7119, en el estudio de los intermediarios de la flavodoxina de *H. pylori* y en la caracterización de una nueva flavodoxina que es esencial para el patógeno *S. pneumoniae*. Así mismo hemos realizado una revisión sobre cómo analizar la estabilidad conformacional de proteínas con



equilibrios y sobre el

método de análisis estructural denominado análisis phi de equilibrio (doi:10.1016/j.abb.2012.10.014)

Antimicrobial Susceptibility and Resistance Patterns among *Helicobacter pylori* The Gambia, West Africa

TABLE 2
rdxA nonsense and frameshift mutations^a

Strain	Concn (μg/ml)	Frameshift	Mutation description (base position) ^b	Mutation (codon, base position) ^c
Mt2 ^d				
71R	32	0	Substitution* (523), C→T or G→T	Stop codon (175, 523)
83R	32	+1	Insertion (576)	Stop codon (205, 613)
93R	32	0	Substitution (415), C→T	Stop codon (139, 415)
100R	32	0	Substitution* (523), C→T or G→T	Stop codon (175, 523)
114R	32	0	Substitution (19), G→T	Stop codon (7, 19)
115R	32	-1	Deletion (496)	Stop codon (167, 496)
121R	16	+2	Insertion (6,7)	Stop codon (14, 40)
123R	32	+1	Insertion (23)	Stop codon (23, 67)
205R	32	+1	Insertion (959)	Stop codon (205, 613)
239R	8	+1	Insertion (313)	Stop codon (110, 328)
244R	32	-7	Deletion <7 (179)	Stop codon (74, 220)
249R	32	+5	Insertion >5 (178)	Stop codon (64, 190)
263R	32	+1	Insertion (193)	Stop codon (73, 217)
269R	32	-1	Deletion (191)	Stop codon (76, 226)
270R	32	+1	Insertion (193)	Stop codon (74, 220)
Mt2 ^d				
β1145	<8	+4	Insertion >4 (300)	Stop codon (111, 331)
β1245	<8	+4	Insertion >4 (300)	Stop codon (111, 331) frameshift <4
1015	<8	-1	Deletion (86)	Stop codon (33, 97)

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Convenio de colaboración	Genoma España
Estabilidad conformacional de proteínas: principios generales, análisis estabilidad función del r-LDL y búsqueda de nuevas chaperonas farmacológicas.	MICINN

Equipo de investigación

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA
Javier Sancho Sanz/ Catedrático	Identificación Grupo B89-Protein Targets
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA
Vladimir Espinosa/Contratado	Identificación Grupo B89-Protein Targets
Laura C. López/Contratado	B89-Protein Targets
Juan Martínez/Contratado técnico especialista	B89-Protein Targets
Angela Rodríguez/Becario predoctoral	B89-Protein Targets
Emilio Lamazares/Becario predoctoral	B89-Protein Targets
Juan J. Galano/Becario Santander	B89-Protein Targets

Resultados y conclusiones destacados 2013

Se ha culminado el desarrollo del algoritmo de identificación de priones y se ha construido una base de datos y un servidor web de predicción de priones: Prionscan. Así mismo se han desarrollado nuevos inhibidores contra *H. pylori* con mejor índice terapéutico.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

Angarica VE, Ventura S and Sancho J. Discovering Putative Prion Sequences in Complete Proteomes using Probabilistic Representations of Q/N-rich Domains. BMC Genomics 2013, 14:316 DOI: 10.1186/1471-2164-14-316

Galano JJ, Alías M, Pérez R, Velázquez-Campoy A, Hoffman PS, Sancho J. Improved Flavodoxin Inhibitors with Potential Therapeutic Effects against Helicobacter pylori infection. J. Med. Chem. 2013 (In Press)

2.4. Área de Física

Objetivo: la investigación en Física en BIFI pretende superar las barreras que separan las disciplinas tradicionales, en un intento de abrir nuevas fronteras en campos donde la investigación de vanguardia y la innovación puedan emerger.

Responsable del Área de Física: Mario Floría

Líneas de investigación:

2.4.1. Vidrios de spín	IP Alfonso Tarancón
2.4.2. Modelos físicos de biomoléculas	IP Fernando Falo
2.4.3. Sistemas complejos y Redes	IP Yamir Moreno
2.4.4. Dinámica molecular y estructura electrónica	IP Pablo Echenique
2.4.5. Econofísica, modelos no-lineales y complejidad	IP Ricardo López-Ruíz

Descripción de las líneas y sus principales logros 2013

2.4.1. Vidrios de spín/Spin glasses. IP Alfonso Tarancón

Objetivo y descripción

El objetivo de esta línea se centra en el estudio teórico de vidrios de espín, paradigma de los sistemas complejos. En particular, se hace uso del modelo de Edwards-Anderson, que de forma simple integra los dos componentes esenciales de estos materiales: frustración y aleatoriedad. El estudio se lleva a cabo mediante la aplicación de diversas técnicas computacionales, como algoritmos de Monte Carlo combinados con la técnica de Parallel Tempering, que facilitan la termalización a bajas temperaturas. Dado que las simulaciones numéricas requieren un gran número de muestras para el cálculo de los diversos observables la demanda de tiempo de computación resulta muy elevada. Sólo clusters de ordenadores o superordenadores como "Marenostrum" (Barcelona), "Caesaraugusta" (Zaragoza), "Terminus" (Zaragoza), "Memento" (Zaragoza) u ordenadores dedicados como "Janus" y "Janus II" (Zaragoza) son capaces de satisfacer tales necesidades.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Janus 2	FEDER
Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte, FIS2012-35719-C02-02 SCC Computing, 2012-2013	Ministerio de Economía y Competitividad VII Proyecto Marco UE
Extended curriculum for science infrastructure online, 2011-2014	VII Proyecto Marco UE
Scientific gateway based user, 2011-2014	VII Proyecto Marco UE

Equipo de investigación

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Alfonso Tarancón Lafita / Catedrático Universidad de Zaragoza	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Andrés Cruz Flor/Prof Emérito	NA
Luis Antonio Fernández Pérez/UCM	NA
Víctor Martín Mayor/UCM	NA
Juan Jesús Ruiz Lorenzo/UNEX	NA
David Íñiguez / ARAID. UZ	NA
David Yllanes/U. di Roma	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Raquel Álvarez Baños/Predocctoral	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
José Miguel Gil Narvi6n/Predocctoral	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Antonio Gordillo Guerrero/UNEX	NA
Andrea Maiorano/U. di Roma	NA
Jorge Monforte Garc3a/Predocctoral	NA
Sergio P6rez Gaviro/ARAID. UZ	E24/3-Biocomputaci3n y F3sica de Sistemas complejos
Beatriz Seoane/U. di Roma	E24/3-Biocomputaci3n y F3sica de Sistemas complejos
	NA

Resultados y conclusiones destacados 2013

Han sido varios los resultados relevantes relacionados con vidrios de esp3n en 2013, centr3ndose en el modelo de Edwards-Anderson.

A trav3s de un estudio de finite-size scaling de alta precisi3n, se ha caracterizado la transici3n de fase del modelo de Ising-Edwards-Anderson en tres dimensiones con la mayor precisi3n conseguida hasta el momento. Para ello, gracias a Janus, se han termalizado ret3culos de tama1o hasta $L=40$ (siendo el volumen del ret3culo $V=L^3$) y se han calculado diferentes cantidades universales en el punto cr3tico.

Asimismo, se ha realizado un an3lisis en profundidad de la distribuci3n de probabilidad del overlap, $P(q)$, del modelo de sing-Edwards-Anderson en 3 dimensiones, comprobando que las predicciones de la teor3a RSB (Replica Symmetry Breaking) se cumplen.

Tras el estudio realizado el a1o pasado en relaci3n al modelo de Ising-Edwards-Anderson en 4 dimensiones en un campo magn3tico externo, se ha estudiado dicho modelo en tres dimensiones. Las simulaciones, realizadas a temperatura fija y usando un protocolo de annealing, han permitido alcanzar tiempos de simulaci3n equivalentes a 0.01 segundos de un experimento real. Un estudio de la relajaci3n del sistema a alta y baja temperatura ha permitido identificar un punto de transici3n, siendo la temperatura cr3tica diferente para cada valor del campo externo aplicado. Los resultados pueden explicarse como una transici3n vidrio de esp3n o como un mode-coupling crossover en el comportamiento.

Se ha estudiado el modelo de Edwards-Anderson-Heisenberg en tres dimensiones con anisotrop3as fuertes. Para ello, se han utilizado aceleradores

gráficos para estudiar el diagrama de fases del modelo, en presencia de fuertes anisotropías. En efecto, en nuestro anterior estudio del problema ([Martin-Mator, Pérez-Gaviro 2011]), se estudió el régimen de anisotropía débil, que es más directamente relevante para materiales reales. Sin embargo, en este régimen microscópicamente realista aparecieron fuertes fenómenos de crossover, difíciles de interpretar. En este trabajo, hemos considerado términos de anisotropía 10 veces mayores, y hemos estudiado cuidadosamente la evolución con la anisotropía y el tamaño del sistema. El escenario que hemos encontrado es relativamente sencillo. Los dos parámetros de orden (quiral-glass y spin-glass) se hacen no nulas en una única temperatura crítica, y la clase de universalidad relevante es la de Ising spin-glass. Sin embargo, el tamaño de los sistemas necesarios para encontrar este comportamiento sencillo crece muy rápidamente al disminuir las anisotropías. Esto sugiere que en la correcta interpretación de los resultados experimentales deberá jugar un papel muy relevante el llamado "tiempo de espera", aunque los experimentos realizados hasta la fecha no han considerado este efecto sistemáticamente.

También se ha propuesto un análisis alternativo del fenómeno del caos en temperatura. La herramienta principal ha sido el llamado funcional de grandes desviaciones. Un análisis detallado de las configuraciones en equilibrio obtenidas con el ordenador dedicado Janus ha permitido construir explícitamente dicho funcional. Se ha comprobado explícitamente que el funcional se comporta como una densidad de energía libre, y se ha utilizado para deducir relaciones de escala que encuentran reflejo automático en las funciones de correlación espacial.

Además, la transición de fase del modelo RFIM en tres dimensiones espaciales se ha estudiado a temperatura cero, mediante el cálculo de estados fundamentales en retículos de tamaño $L \leq 192$. Un formalismo de fluctuación-disipación ha permitido generalizar a este problema el estudio de tamaño finito habitual en simulaciones con temperatura no nula. La consideración simultánea de diversas distribuciones de probabilidad ha permitido establecer la existencia de una única clase de Universalidad en el problema, mediante el cálculo explícito y preciso de varias cantidades adimensionales y de los exponentes críticos asociados.

También se ha estudiado el scaling de los ceros de Lee-Yang en un modelo con simetría continua, el modelo de Heisenberg en tres dimensiones, y en particular se caracterizó el efecto de los bosones de Goldstone en su comportamiento.

Asimismo, se han caracterizado numéricamente las singularidades en el plano complejo (Lee-Yang) asociadas al overlap en el modelo de Ising-Edwards-Anderson en tres dimensiones. Con la información proporcionada por estas singularidades se caracterizó la dimensión anómala en el punto crítico y se pudo calcular, en la fase spin glass, el parámetro de orden de Edwards-Anderson.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

Baity-Jesi M, A-Baños R, Cruz A, Fernández LA, Gil-Narvi6n JM, Gordillo-Guerrero A, I6niguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinar E, Martin-Mayor V, Monforte-García J, Mu6noz Sudupe A, Navarro D, Parisi G, P6rez-Gaviro S, Pivanti M, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Taranc6n A, Tripiccione R,

Yllanes D. Critical parameters of the three-dimensional Ising spin glass. arXiv:1310.2910 Accepted for publication in Physical Review B

Billoire A, Fernández LA, Maiorano A, Marinari E, Martin-Mayor V, Parisi G, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo JJ and Yllanes D. Comment on "Evidence of Non-Mean-Field-Like Low-Temperature Behavior in the Edwards-Anderson Spin-Glass Model. Phys. Rev. Lett. 110, 219701 (2013).

Baity-Jesi M, Alvarez Baños R, Cruz A, Fernández LA, Gil-Narvi3n JM, Gordillo-Guerrero, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, A. Mu3noz Sudupe A, Navarro D, G. Parisi G, P3rez-Gaviro S, Pivanti M, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Taranc3n A, Ricci-Tersenghi F, Tripiccion R, Yllanes D. Dynamical Transition in the $D = 3$ Edwards-Anderson spin glass in an external magnetic field. arXiv:1307.4998

Baity-Jesi M, Fernandez LA, Martin-Mayor V, Sanz JM. Phase Transition in 3d Heisenberg Spin Glasses with Strong Random Anisotropies, through a Multi-GPU Parallelization. arXiv:1309.1599

Fernandez LA, Martin-Mayor V, Parisi G, Seoane B. Temperature chaos in 3D Ising Spin Glasses is driven by rare events. EPL, 103 (2013) 67003.

Fytas NG, Martin-Mayor V. Universality in the three-dimensional random-field Ising model. Phys. Rev. Lett. 110, 227201 (2013).

Gordillo-Guerrero A, Kenna R and Ruiz-Lorenzo JJ. Scaling Behavior of the Heisenberg Model in Three Dimensions . Phys. Rev. E (in press, 2013).

A. Banos R, Gil-Narvion JM, Monforte-Garcia J, Ruiz-Lorenzo JJ, Yllanes D. Numerical study of the overlap Lee-Yang singularities in the three-dimensional Edwards-Anderson model. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment P02031 (2013).

2.4.2. Modelos f3sicos de biomol3culas/Physical modelling of biomol3culas.

IP Fernando Falo

Objetivo y descripci3n

El grupo de Modelado F3sico de Biomol3culas se articula en torno a tres grupos de investigaci3n que comparten el mismo enfoque en el estudio de la f3sica de mol3culas biol3gicas, as3 como en las t3cnicas de an3lisis mediante la mec3nica estad3stica.

Grupo de Antonio Rey (UCM):

Utilizamos un m3todo de simulaci3n molecular y modelos de grano grueso (coarse-graining) para explorar el proceso de plegamiento de prote3nas.

Dise3amos estos modelos para analizar los aspectos estructurales, termodin3micos y cin3ticos del proceso. La parte m3s importante de este dise3o es el potencial de interacci3n que produce la estructura plegada. En los 3ltimos

años, hemos estado utilizando principalmente potenciales basados en la estructura nativa. Se consideran los contactos presentes en la estructura nativa para definir interacciones atractivas a lo largo de la simulación. Hemos estudiado diferentes modelos que combinan los potenciales nativos con potenciales de campo medio para tener en cuenta la secuencia química de la proteína. Asimismo hemos introducido potenciales para describir los enlaces de puente de hidrógeno, particularmente interesantes en el estudio de procesos de agregación de proteínas a concentraciones moderadas o altas.

La técnica utilizada para estudiar la transición térmica entre los estados plegados y los estados desplegados es la simulación Monte Carlo mediante el método denominado de "parallel tempering". Nuestro trabajo involucra un importante componente metodológico, mediante la disección de los diferentes aspectos físicos y matemáticos que intervienen en los modelos de simulación. Al hacer esto, hemos sido capaces de crear modelos que pueden ser usados para aprender acerca de los procesos de plegamiento de proteínas en diferentes sistemas interesantes: sistemas de dos estados y proteínas plegadoras "downhill", proteínas con intermedios termodinámicos, proteínas anudadas, proteínas bajo presión, o la competencia entre el plegamiento de proteínas y la agregación.

Grupo de Pierpaolo Bruscolini:

Se aplican modelos "coarse-grained" y métodos de la mecánica estadística para el problema de plegamiento de proteínas, y también para su diseño y secuenciación, buscando el mejor equilibrio entre la precisión cuantitativa de las predicciones (que aumenta con la complejidad del modelo) y la viabilidad en término de tiempo de cálculo.

a) plegamiento de proteínas: utilizamos modelos binarios como el propuesto por Wako y Saito y por Muñoz y Eaton (WSME, J. Phys. Soc. Japan, 44,1931,1978; PNAS, 96,11311,1999), para el que se puede dar una solución exacta (PRL, 88, 258101, 2002), lo que permite el estudio del equilibrio y cinética de proteínas de tamaño razonable (200 aminoácidos). Recientemente nos hemos dedicado al estudio de proteínas modulares, por sus características de representar un toy model real.

b) Diseño de proteínas: en los años pasados nos hemos ocupado de diseño de proteínas como un proceso de optimización, sobre la elección de los aminoácidos y de sus rotámeros, de la energía libre de la proteína. Ésta línea no se ha desarrollado ulteriormente este año.

c) Secuenciación de Proteínas: hemos propuesto un nuevo método, T-novoMS, para la secuenciación por espectrometría de masas en tandem (MS/MS), una de las técnicas principales de high-throughput, sobre que hoy en día se basan muchos análisis proteómicas. El método proporciona una combinación de secuenciación de-novo y búsqueda en base de datos, y desde los primeros ensayos su performance es comparable con las de otros métodos extremadamente refinados. Estamos preparando un servidor web para que los investigadores interesados puedan usar el programa desde sus centros de trabajo.

Grupo de Fernando Falo:

Usamos modelos mesoscópicos a diferentes escalas para resolver problemas en diferentes sistemas biológicos:

a) Comportamiento mecánico del DNA. Estudiamos modelos mesoscópicos para entender y modelar el comportamiento mecánico del DNA bajo fuerzas externas constantes (overstretching) y/o alternas (campos EM en el rango de los THz).

b) Translocación de polímeros. El paso a través de membranas de polímeros es un fenómeno importante tanto desde el punto de vista de los procesos biológicos y tecnológicos. Estamos desarrollando modelos de translocación impulsados por fuerzas dependientes del tiempo (determinística o estocástica) para simular un motor molecular. Se propone aplicar estos modelos para el problema de empaquetamiento del ADN en bacteriófagos.

c) interacción proteína-DNA. Hemos desarrollado un modelo mesoscópico de desnaturalización del ADN (Phys. Rev. E, 82, 031 916 (2010)) basados en el modelo de Bishop-Dauxois-Peyrard. A partir de este modelo, hemos propuesto un potencial para la interacción proteína-ADN para la localización de sitios de unión en los promotores. Estamos realizando un estudio sistemático en promotores de cianobacterias.

El estudio de estos modelos se realiza mediante exhaustivas simulaciones numéricas, principalmente por dinámica molecular de Langevin.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Modelos físicos para la simulación de tránsitos conformacionales en proteínas. Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal.	Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto FIS2009-13364-C02-02
Química a alta presión, QUIMAPRES	Ministerio de Ciencia e Innovación. (FIS2011-25167)
Grupo de Investigación: Física Estadística y No Lineal.	Comunidad de Madrid. Proyecto S2009/PPQ-1551
Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes.	Gobierno de Aragón E19
Grupo de Investigación : Biocomputación y Física de Sistemas Complejos	Ministerio de Ciencia e Innovación, FIS2009-13364-C02-01
	Gobierno de Aragón E24/3

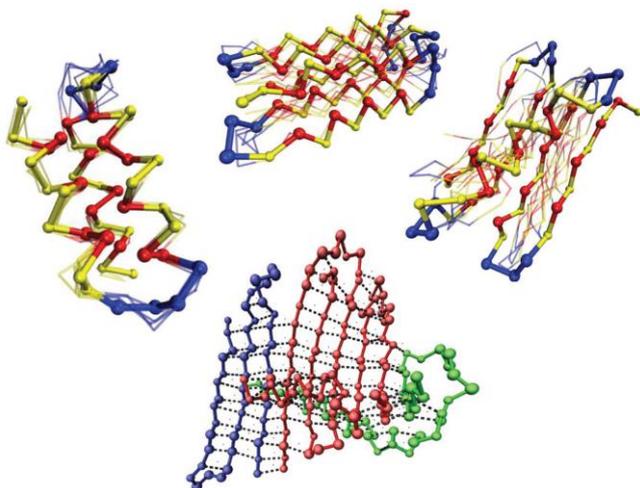
Equipo de investigación

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Fernando Falo Forniés, Profesor Titular	E19-Grupo de Física Estadística y no lineal
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Pierpaolo Bruscolini Profesor Contratado Doctor.	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Antonio Rey Gayo, Catedrático, Universidad Complutense de Madrid (UCM)	NA
Ramiro Perezzan, Estudiante de Doctorado (UCM)	NA
Vicente Charro, Estudiante de Máster (UCM)	NA
Rafael Tapia Rojo, Estudiante de Doctorado, Becario DGA	E19-Grupo de Física Estadística y no lineal
Ana Elisa Bergues Pupo, Becaria B. Santander	E19-Grupo de Física Estadística y no lineal

Resultados y conclusiones destacados 2013

1.- Hemos sido capaces de utilizar estos modelos para obtener diagramas esquemáticos de fase que muestra el comportamiento de proteínas con secuencias diferentes en función tanto de la temperatura como de la concentración.

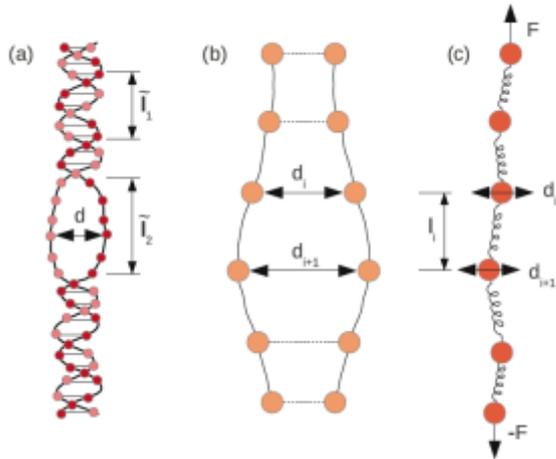
Enciso, M., Rey, A. "Sketching protein aggregation with a physics-based toy model". *J. Chem. Phys.* **139**, 115101-1 – 115101-10 (2013).



Proteínas con diferentes secuencias/estructuras y su agregación (portada del volumen 139, no. 11, de 21-Sep-2013 en The Journal of Chemical Physics).

2.- Hemos modelado la curva de "overstretching" del DNA mediante un modelo que incorpora tanto el comportamiento mecánico de la molécula como las propiedades térmicas de la misma ("melting")

Bergues-Pupo AE, Falo F, Fiasconaro A. "DNA overstretching transition induced by melting in a dynamical mesoscopic model". *Journal of Chemical Physics* **139**, 095101 (2013).



Esquema del modelo mesoscópico de DNA propuesto en el artículo.

3.- Hemos planteado un nuevo método para secuenciación de péptidos, proponiendo la correspondencia entre la interpretación de los espectros de masa en tandem y el estudio del equilibrio de un modelo físico definido para este fin, cuyas variables describen la posición de los sitios de fragmentación a lo largo de un índice de masa discreto.

Este enfoque de física estadística permite unificar un acercamiento "de-novo" y otro de búsqueda en base de datos: la caracterización del estado fundamental del modelo permite la identificación "de-novo" del péptido precursor, mientras que los perfiles de probabilidad a $T > 0$ permiten averiguar cuáles son los fragmentos más fiables de la predicción, y pueden ser utilizados como para reconocer el péptido precursor más probable entre los contenidos en una base de datos.

Los resultados, aun sin haber realizado una optimización del método, revelan una prestación en línea con la de otros métodos de-novo y de búsqueda en base de datos, que llevan años optimizándose. Además, el método se puede generalizar para elecciones más realistas de la función de coste."

M. Faccin; P. Bruscolini, "MS/MS spectra interpretation as a statistical-mechanics problem", *Analytical Chemistry* 85 (10), 4884-4892 (2013)

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

Bergues-Pupo AE, Falo F, Fiasconaro A. DNA overstretching transition induced by melting in a dynamical mesoscopic model. *Journal of Chemical Physics* **139**, 095101 (2013). Impacto ISI: 3.164

Enciso, M., Rey, A. Sketching protein aggregation with a physics-based toy model. *J. Chem. Phys.* **139**, 115101-1 – 115101-10 (2013). Impacto ISI: 3.164

M. Faccin; P. Bruscolini. MS/MS spectra interpretation as a statistical-mechanics problem. *Analytical Chemistry* 85 (10), 4884-4892 (2013). Impacto ISI: 5.595

2.4.3. Sistemas complejos y Redes/Complex Systems and networks IP Yamir Moreno

Objetivo y descripción

El objetivo de esta línea es estudiar la dinámica y estructura de redes y sistemas complejos en sistemas naturales, biológicos, tecnológicos y sociales.

La metodología que se usa es aquella de la Física Estadística, la Teoría de Redes Complejas, Dinámica No lineal y Teoría de la Complejidad. El método de trabajo incluye aproximaciones analíticas y en la mayoría de los casos simulaciones numéricas extensivas.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
REDES, BIOFISICA Y CIENCIA NO LINEAL	Ministerio de Economía y Competitividad. FIS2011-25167
Mathematical framework for multiplex networks (PLEXMATH)	European Unión. Project 317614.
Foundational Research on multilevel complex networks and systems (MULTIPLEX).	European Unión. Project 317532.

Equipo de investigación

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Yamir Moreno	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Luis Mario Floría	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Jesús Gómez Gardeñes	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Joaquín Sanz Remón	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Emanuele Cozzo	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Javier Borge Holthoefer	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Sandro Meloni	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Pablo Piedrahita	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Alessio Cardillo	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)

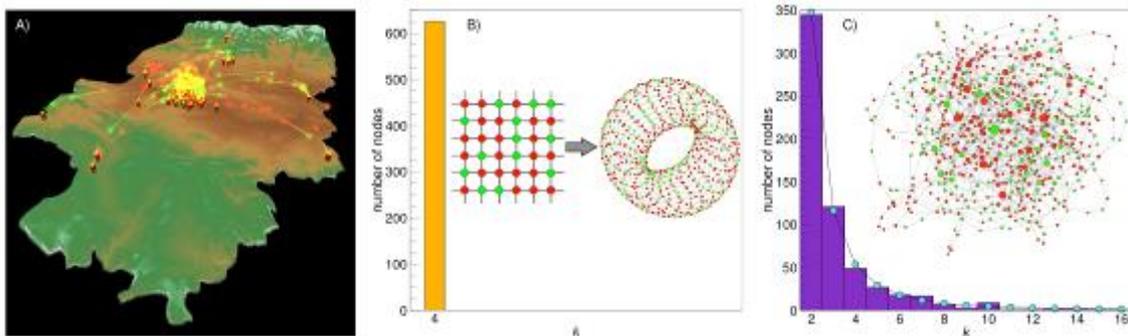
Resultados y conclusiones destacadas 2013

En la Línea de Redes y Sistemas Complejos, se ha trabajado tanto en modelos generales como en sus aplicaciones en diferentes áreas. A continuación se resumen las actividades principales realizadas en esta línea, divididas por subtemas.

Teoría de Juegos Evolutivos.

En el marco teórico, se han proseguido los estudios sobre evolución de la cooperación en redes complejas mediante procedimientos tanto analíticos como numéricos. Por un lado, se ha estudiado la dinámica en poblaciones interdependientes, encontrando un nuevo mecanismo de fomento de la cooperación: la polarización. Este mecanismo convive con los ya conocidos, como la reciprocidad, pudiendo actuar tanto sinérgicamente como en oposición en función de la hostilidad del escenario. Este resultado es de aplicabilidad en diversos ámbitos como la economía de mercado o el diseño de mecanismos de control. Por otro lado, se ha estudiado la reversibilidad de la dinámica evolutiva de la cooperación en diferentes redes heterogéneas, encontrando la existencia de puntos de no retorno que, una vez traspasados, dan lugar a ciclos de histéresis.

En el ámbito experimental, hemos proseguido con la realización de experimentos sobre dilemas sociales. El primero de ellos, centrado en la evolución vital de la cooperación, ha permitido determinar la adquisición de la conciencia social con la edad. En particular, se ha encontrado que los niños, ante dilemas sociales, adoptan estrategias encaminadas a maximizar su beneficio, mientras que los jóvenes y los adultos tienen adquirida la conciencia del bien común, siendo por último los mayores los que adoptan estrategias más cooperativas. Otro experimento ha estudiado la evolución de la cooperación en redes dinámicas mediante un dilema social que posibilita a los sujetos establecer su red de contactos, lo que permite analizar estrategias mucho más complejas, fuera de equilibrios triviales. Para la realización de estos experimentos disponemos de una plataforma computacional diseñada por el BIFI en constante evolución.



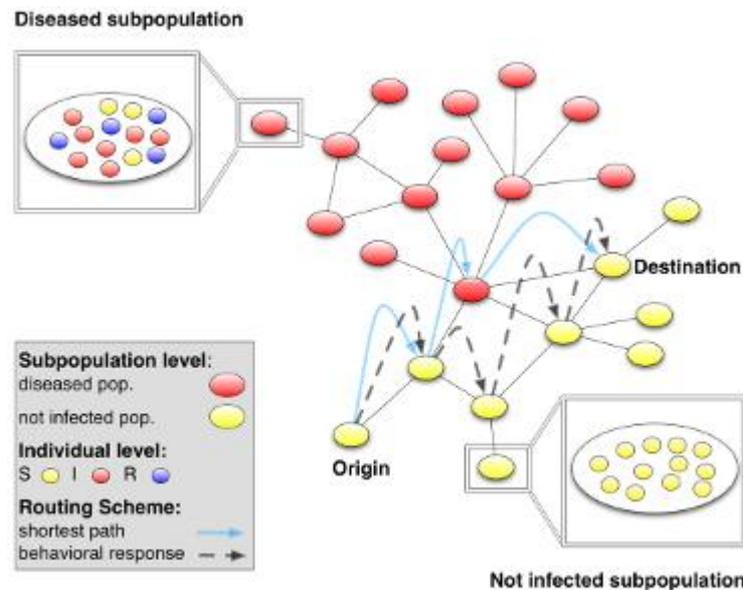
Estructura y Dinámica de redes multicapa. La ciencia de redes se ha demostrado particularmente eficaz en estudiar sistemas complejos en distintos ámbitos. Sin embargo, la mayoría de sistemas complejos son sistemas en que conviven distintos sub-sistemas o canales de comunicación. Para representar explícitamente este nivel de complejidad es más apropiada una estructura de red multicapa. Durante el año hemos realizado el desarrollo de formalismos matemáticos basados en tensores y matrices de adyacencia para el estudio de redes multicapa. En este marco se ha propuesto la generalización a redes multicapa de un conjunto de medidas topológicas estándares. En particular, hemos propuesto la generalización de la noción de tensores en sistemas multicapas aplicando la medida propuesta a diferentes sistemas reales, tanto sociales como tecnológicos. En el mismo marco, hemos estudiado las propiedades espectrales de las redes multicapas y las relaciones entre estas y las distintas redes monocapas que se obtienen reduciendo la dimensionalidad del

sistema original. En el marco de la modelización de sistemas dinámicos, hemos desarrollado un modelo de contagio social en redes multicapas. Hemos estudiados analíticamente el modelo mediante la generalización del método de cadenas de Markov microscópicas, encontrando que el punto crítico asociado a la fase activa está determinado por la capa dominante del sistema, es decir, la capa que posee la matriz de probabilidades de contacto con autovalor máximo más grande que las demás. Este resultado es de particular interés a la hora de estudiar dinámicas de difusión de información en la sociedad, teniendo en cuenta el nivel de penetración de las redes sociales on-line.

Sincronización y dinámicas no-lineales. A largo de este último año investigamos diversos fenómenos de sincronización tanto de osciladores caóticos débilmente acoplados como de osciladores deterministas no-caóticos sobre redes complejas. En particular, demostramos que es posible sincronizar completamente dos sistemas caóticos idénticos no acoplados directamente entre ellos, pero sí a través de un acople bidireccional con un tercer oscilador no idéntico (configuración llamada "relay"). Concretamente, entre la unidad de acople y las dos idénticas se presenta el fenómeno conocido como sincronización generalizada siempre que el acople sea lo suficientemente fuerte, sirviendo así la primera como "puente" de interacción entre las unidades idénticas. El mínimo valor del acople a partir del cual se presenta la sincronización generalizada (y la sincronización completa entre los osciladores idénticos) puede ser determinado estudiando el espectro de Lyapunov del sistema, a saber, el mínimo valor del acople para el cual sólo exista un exponente de Lyapunov positivo determina el inicio de la sincronización generalizada. En cuanto a las redes complejas de osciladores deterministas no-caóticos, implementamos un modelo de cascadas basado una conocida dinámica neuronal (un modelo tipo "integración y disparo") sobre las topologías complejas Erdos-Renyi y Scale-free. Dicha dinámica es de gran valor ya que nos permitió demostrar que existe una correspondencia estadística entra la distribución de cascadas generada por la misma y la distribución de cascadas de información en sistemas socio-técnicos tales como el twitter. Adicionalmente, desarrollamos un criterio analítico de anticipación de eventos globales el cual, con base a una medida simple del tiempo de inter-eventos de los osciladores (o usuarios), permite establecer el tamaño de la cascada máxima posible.

Modelos epidemiológicos. Epidemiología de tuberculosis. Durante el año se ha trabajado en el desarrollo de un nuevo modelo destinado a describir en términos cuantitativos, la propagación, incidencia y mortandad de la tuberculosis en las distintas áreas geográficas del mundo, así como el impacto de una vacuna genérica en cada una de ellas. El modelo involucra ingredientes obviados en trabajos similares hasta la fecha tales como una descripción detallada de la interacción entre la estructura demográfica y la dinámica de la enfermedad, así como la heterogeneidad recientemente observada que se aprecia entre las intensidades de interacción entre los distintos grupos de edad que componen una población. Paralelamente, se ha desarrollado un modelo general para describir la dinámica simultánea de dos enfermedades que interaccionan favoreciendo o impidiendo mutuamente su propagación. Por las características de nuestro modelo, -que permite simultáneamente una descripción de la evolución temporal del sistema con una derivación analítica de los umbrales epidémicos-, resulta un marco adecuado para describir la interacción existente entre dos enfermedades

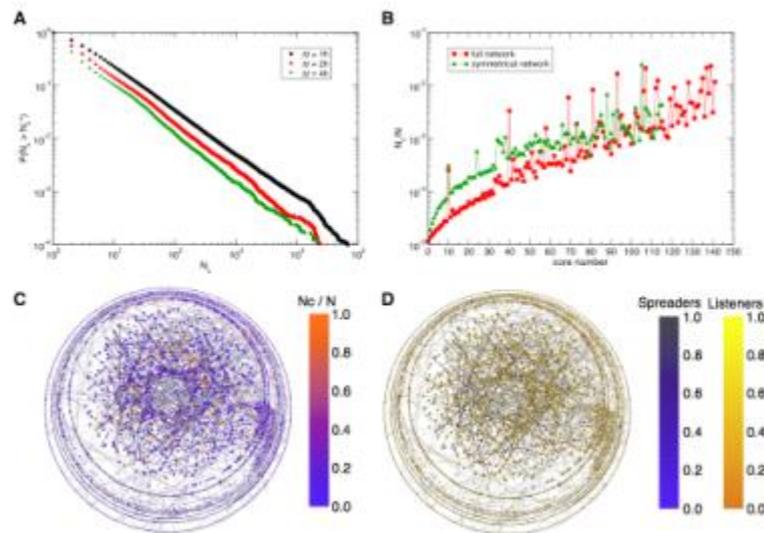
como el SIDA y la tuberculosis, cuyas incidencias se encuentran estrechamente relacionadas, especialmente en áreas como el África subsahariana.



Biología de Sistemas, redes genéticas y control transcripcional en *Mycobacterium tuberculosis*. Continuando nuestra línea de investigación sobre redes de regulación genética, durante este año hemos desarrollado una herramienta computacional para la identificación de falsos positivos y negativos en dichos sistemas, así como en cualquier otro tipo de red dirigida. Actualmente en proceso de revisión, nuestro algoritmo arroja resultados más precisos que cualquier otro método similar desarrollado hasta la fecha tanto en la detección de errores aleatorios como en la de errores reales y arbitrariamente correlacionados. Paralelamente, en colaboración con el profesor J. García-Ojalvo de la Universitat Politècnica de Catalunya, se está trabajando en la modelización "in silico" de un circuito genético concreto estrechamente involucrado en la respuesta a diferentes stresses ambientales en *Mycobacterium tuberculosis*.

Propagación de información en redes sociales. A lo largo del último año se han llevado a cabo diferentes investigaciones relacionadas con el modo en que la información se propaga sobre los distintos agentes que componen una red social. En particular, los análisis se han centrado en el conocido "Movimiento 15M" estudiado a través de la plataforma online www.twitter.com. A través de datos recogidos mediante la propia plataforma se ha podido observar cómo se propaga la información haciendo uso de una definición de "cascada de información" en la que se tiene en cuenta la relación de following/friend de los usuarios que participaron en el movimiento y sus perfiles de actividad. Se ha podido observar que no solo los nodos más centrales son capaces de producir cascadas de gran tamaño en las que la información llega a un gran número de usuarios, si no que adicionalmente existen determinados usuarios, denominados "hidden influentials", que a pesar de no ocupar posiciones centrales en la red son capaces de transmitir la información a un gran número de nodos. Estos usuarios han sido caracterizados a partir de su posición en la estructura de comunidades de la red, donde se observa que suplen su falta de centralidad con altos valores de "participación", es decir, uniendo módulos de distintas comunidades. También se

han podido caracterizar a partir de su "efecto multiplicativo", que mide su capacidad de incrementar el número de usuarios que reciben la información en cada paso temporal. Finalmente, se ha observado que los "hubs" o nodos altamente conectados actúan generalmente como cortafuegos de la información cuando no son los iniciadores de la cascada, no transmitiendo la información que reciben de otros usuarios.



Difusión de logros científicos destacados en 2013

Como resultado del trabajo realizado, se han publicado 24 artículos científicos este año, lo cual constituye por una parte un logro importante y por otra una medida objetiva de la importancia y actualidad de la investigación en esta línea no sólo en el BIFI, sino a nivel Nacional e Internacional, siendo nuestro grupo una referencia indudable. De hecho, este año uno de los artículos publicados por el grupo continúa siendo el artículo científico más citado de la Universidad de Zaragoza en toda su historia (más de 2500 citas). A continuación se enumeran las publicaciones en estas líneas:

- 1- J. A. Molina, J. I. Giménez-Nadal, J. A. Cuesta, C. Gracia-Lázaro, Y. Moreno, and A. Sánchez, "Gender differences in cooperation: experimental evidence on high school students", PLoS ONE, in press (2013)
- 2- R. Gutiérrez, R. Sevilla-Escoboza, P. Piedrahita, C. Finke, U. Feudel, J. M. Buldú, G. Huerta-Cuellar, R. Jaimes-Reátegui, Y. Moreno, and S. Boccaletti, "Generalized synchronization in relay systems", Physical Review E, in press (2013).
- 3- E. Cozzo, R. A. Baños, S. Meloni, and Y. Moreno, "Contact-based social contagion in multiplex networks", Physical Review E (RC), in press (2013).
- 4- M. De Domenico, A. Sole-Ribalta, E. Cozzo, M. Kivela, Y. Moreno, M. A. Porter, S. Gómez, and A. Arenas, "Mathematical formulation of multi-layer networks", Physical Review X, in press (2013).

- 5- R. A. Baños, J. Borge-Holthoefer, N., Wang, Y. Moreno, and S. González-Bailón, "Diffusion dynamics with changing network composition", *Entropy* 15, 4553-4568 (2013).
- 6- Z. Wang, C.-Y. Xia, S. Meloni, C.-S. Zhou and Y. Moreno, "Impact of social punishment on cooperative behavior in complex networks", *Scientific Reports* 3, 3055 (2013).
- 7- C. Gracia-Lázaro, L. M. Floría, J. Gómez-Gardeñes and Y. Moreno, "Cooperation in changing environments: Irreversibility in the transition to cooperation in complex networks", *Chaos, Solitons and Fractals* 56, 188 (2013).
- 8- J. Borge-Holthoefer, S. González-Bailón, A. Rivero, and Y. Moreno, "The Spanish Indignados Movement: Time dynamics, geographical distribution, and recruitment mechanisms", Chapter contribution to *Online Collective Action*, in press, 2013.
- 9- S. González-Bailón, J. Borge-Holthoefer and Y. Moreno, "Online Networks and the Diffusion of Protest", Chapter contribution to *Analytical Sociology: Norms, Actions and Networks*, in press, 2013.
- 10- R. A. Baños, J. Borge-Holthoefer and Y. Moreno, "The role of hidden influentials in the diffusion of online information cascades", *EPJ Data Science* 2:6 (2013).
- 11- C. Poletto, S. Meloni, V. Colizza, Y. Moreno and A. Vespignani, "Host mobility drives pathogen competition in spatially structured populations", *PLoS Computational Biology*, 9 (8): e1003169 (2013).
- 12- J. Borge-Holthoefer, R. A. Baños, S. González-Bailón and Y. Moreno, "Cascading Behavior in Complex Socio-technical Networks", *Journal of Complex Networks* 1, 3-24 (2013). doi: 10.1093/comnet/cnt006.
- 13- S. González-Bailón, J. Borge-Holthoefer, and Y. Moreno, "Broadcasters and Hidden Influentials in Online Protest Diffusion", *American Behavioral Scientist* 57, 943 – 965 (2013); doi: 10.1177/0002764213479371.
- 14- C. Y. Xia, Z. Wang, J. Sanz, S. Meloni, and Y. Moreno, "Effects of delayed recovery and nonuniform transmission on the spreading of diseases in complex networks", *Physica A* 392, 1577 (2013).
- 15- M. Perc, J. Gómez-Gardeñes, A. Szolnoki, L. M. Floría and Y. Moreno, "Evolutionary dynamics of group interactions on structured populations – A review", *Journal of the Royal Society Interface* 10, 20120997 (2013).
- 16- J. Borge-Holthoefer, S. Meloni, B. Gonçalves, and Y. Moreno, "Emergence of influential spreaders in modified rumor models", *Journal of Statistical Physics* 151, 383 (2013).
- 17- S. Gómez, A. Díaz-Guilera, J. Gómez-Gardeñes, C. J. Pérez-Vicente, Y. Moreno, and A. Arenas, "Diffusion dynamics on multiplex networks", *Physical Review Letters* 110, 028701 (2013).

- 18- V. Gambuzza, A. Cardillo, A. Fiasconaro, L. Fortuna, J. Gómez-Gardeñes and M. Frasca, "Analysis of remote synchronization in complex networks", Chaos 23, 043103 (2013).
- 19- A. Cardillo, C. Reyes-Suárez, F. Naranjo and J. Gómez-Gardeñes, "The evolutionary vaccination dilemma in complex networks", Physical Review E 88, 032803 (2013).
- 20- A. Cardillo, F. Galve, D. Zueco and J. Gómez-Gardeñes, "Information sharing in quantum complex networks", Physical Review A 87, 052312 (2013).
- 21- L. Lacasa and J. Gómez-Gardeñes, "Correlation dimension of complex networks", Physical Review Letters 110, 168703 (2013).
- 22- J. Gómez-Gardeñes, V. Nicosia, R. Sinatra and V. Latora "Motion-induced synchronization in metapopulations of mobile agents", Physical Review E 87, 032814 (2013).
- 23- A. Cardillo, J. Gómez-Gardeñes, M. Zanin, M. Romance, D. Papo and S. Bocaletti, "Emergence of network features from multiplexity", Scientific Reports 3, 1344 (2013).
- 24- A. Cardillo, M. Zanin, M. Romance, J. Gómez-Gardeñes, A.J. García del Amo and S. Bocaletti, "Modelling the multi-layer nature of the european air transportation network: Resilience and passengers re-scheduling under random failures", European Physical Journal Special Topics 215, 23 (2013).

2.4.4. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic structure IP Pablo Echenique

Objetivo y descripción

En el grupo de "Molecular Dynamics and Electronic Structure" se estudian 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 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. Análisis de la mecánica estadística de sistemas cuánticos y fundamentos de mecánica cuántica no relativista en general. Estudio de anomalías en mecánica cuántica no relativista en los teoremas del virial, de Hellmann-Feynman, y otras identidades entre valores esperados. Análisis de transporte electrónico en circuitos mesoscópicos y

nanoscópicos utilizando métodos de mecánica cuántica y teoría de matrices aleatorias.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Time dynamics and Control in nanostructures for magnetic recording and energy applications (CRONOS)	European Unión - FP7
Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte	MICINN

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Pablo Echenique-Robba / Científico Titular del CSIC	E24/3 - Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
José Luis Alonso Buj / Catedrático de Universidad (UZ)	E24/3 - Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Alberto Castro / Científico contratado por la Fundación ARAID	E24/3 - Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Jesús Clemente Gallardo / Profesor Contratado Doctor (UZ)	E24/1 - Física matemática y Teoría de campos
Fernando Falceto / Profesor Titular de Universidad (UZ)	E24/2 - Grupo Teórico de Altas Energías
Víctor A. Gopar / Profesor Titular (UZ)	E24/3 - Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Víctor Polo Ortiz / Profesor Titular de Universidad (UZ)	E07 - Catálisis homogénea por Compuestos Organometálicos

Resultados y conclusiones destacadas 2013

- *Resultado 1.* Respecto de un nuevo modelo exacto para sistemas moleculares desarrollado por otro grupo, se llevó a cabo una demostración de que la dinámica propuesta conserva, en efecto, las normas de las funciones de ondas electrónica y nuclear. Esta propiedad, indispensable para que la propuesta tenga sentido, no se había probado adecuadamente en el trabajo original.
- *Resultado 2.* Se desarrolló un método sencillo y numéricamente nada costoso para corregir resultados de experimentos con múltiples ensayos en los que exista alta correlación entre éstos, pero también un error sistemático multiplicativo. El método elimina el error sistemático multiplicativo (así como el aditivo si lo hubiere), reduciendo así la desviación estándar con respecto a la media sobre ensayos, aumentando consiguientemente la significación estadística de los datos, y respetando el legítimo error aleatorio del experimento.
- *Resultado 3.* Se ha conseguido implementar numéricamente la combinación de la teoría del funcional dependiente del tiempo con la teoría de control óptimo para sistemas cuánticos, con el objetivo, por ejemplo, de predecir láseres intensos capaces de romper o crear enlaces químicos. Los desarrollos teóricos se han incluido en el código "octopus".

- *Resultado 4.* Se ha desarrollado un modelo teórico de matrices aleatorias para estudiar las propiedades estadísticas de la conductancia en "nanoribbons" desordenados de grafeno con terminaciones "zigzag" y "armchair". Se mostró que la localización de los electrones en "nanoribbons" con terminaciones "zigzag" es del tipo Anderson, mientras que en "nanoribbons" con terminaciones tipo "armchair", los electrones se localizan de manera anómala

Difusión de logros científicos destacados en 2013

A continuación se citan los logros más destacados de los 4 resultados comentados en el punto anterior.

Alonso JL, Castro A, Clemente-Gallardo J, Echenique-Robba P, and Jover-Galtier JA. Comment on "Correlated electron-nuclear dynamics: Exact factorization of the molecular wavefunction" [J. Chem. Phys. 137, 22A530 (2012)], Journal of Chemical Physics 139 (2013) 087101.

Echenique-Robba P, Nelo-Bazán MA, and Carrodeguás JA. Reducing the standard deviation in multiple-assay experiments where the variation matters but the absolute value does not, PLoS one 8 (2013) e78205.

Castro A. Theoretical Shaping of Femtosecond Laser Pulses for Ultrafast Molecular Photo-Dissociation with Control Techniques Based on Time-Dependent Density Functional Theory, ChemPhysChem 14 (2013), 1488.

Kleftogiannis I, Amanatidis I, and Gopar VA. "Conductance through disordered graphene nanoribbons: Standard and anomalous electron localization" Physical Review B (in press)

2.4.5. Econofísica, modelos no-lineales y complejidad/Econophysics, nonlinear models and complexity IP Ricardo López-Ruíz

Objetivo y descripción

El objetivo general de esta línea de investigación es el estudio de Sistemas complejos en su más amplio sentido y los objetivos específicos:

- Análisis de los regímenes dinámicos que aparecen en diferentes modelos estadísticos que hemos propuesto en los últimos años y que se enmarcan dentro de la econofísica, bien sean de tipo determinista o bien sean de tipo aleatorio, y otros caen dentro de la física estadística clásica tal como puede ser un nuevo modelo de gas ideal que acabamos de publicar.
- Continuación del estudio y posibles aplicaciones de diferentes modelos discretos construidos con mappings caóticos, algunos de los cuales han sido propuestos en un contexto de dinámica de poblaciones, otros en un contexto de neuro-computación y otros en un contexto de criptografía caótica.

Estudio de la complejidad en diferentes sistemas físicos, desde sistemas fuera del equilibrio hasta sistemas cuánticos. Prevemos además en este apartado

poder abordar el problema de aplicar estos indicadores de complejidad a otros sistemas multicomponente tal como pueden ser las proteínas

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes	MICINN – 2010-2013

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Ricardo López-Ruiz	E24/3- Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Jaime Sañudo/Catedrático Univ. Extremadura	NA
José-Luis López/Catedrático Univ. Pub. Navarra	NA
Carmen Pellicer-Lostao/ Dr. Univ. Zaragoza	NA

Resultados y conclusiones destacados 2013

- Estudio de modelos en econofísica.
- Sistemas complejos con dinámica trivial.
- Cálculo complejidad en modelos de sólidos.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Además, el capítulo de libro ***A Statistical Measure of Complexity***, R. López-Ruiz, H. Mancini and X. Calbet, está por aparecer en el libro RECENT ADVANCES IN GENERALIZED INFORMATION MEASURES AND STATISTICS, Kowalski, Rossignoli & Curado (Eds.), Ch.7, pp. 145-166, Bentham Science Books. También hemos organizado en Setiembre de 2013 un congreso internacional del que se están preparando los proceedings, ***Proceedings of the International Workshop NOMA'13***, Proc. del Congreso NOMA'13, Zaragoza, que aparecerán en la serie Springer PROMS, Eds. R.López-Ruiz, D. Fournier-Prunaret, C. Gracio & N. Yoshifumi (2014).

Publicaciones

López-Ruiz R, Shivanian E, Abbasbandy S and López JL. A Continuous Model for Random Markets. R, *Mathematica Aeterna* 3, 317-328 (2013).

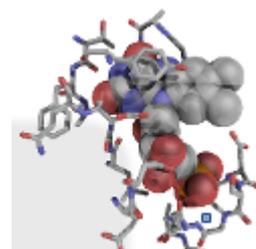
Martínez-Martínez I, and López-Ruiz R. Directed Random Markets: Connectivity determines Money, *International Journal of Modern Physics C* 24, ID1250088(14) (2013).

López-Ruiz R and Sañudo J. Study of a Quant. Scattering Process by means of Entropic Measures, *Physcis Letters A* 377, 2556-2560 (2013).

López-Ruiz R. Complex Systems with Trivial Dynamics, Contributed Talk to ECCS'12, European Conference on Complex Systems, Brussels (Belgium), Setember (2012); Proceedings of the ECCS'12, Gilbert, Kirkilionis & Nicolis Eds, Part I, pp. 57-65, Springer Proceedings in Complexity, XVII, 2013.

2.5. Área de Biofísica

Objetivo: utilización de herramientas y metodologías computacionales y experimentales en un entorno multidisciplinar para comprender el comportamiento de sistemas biológicos, desde moléculas (proteínas, ácidos nucleicos, ...) hasta organismos y ecosistemas, desde una perspectiva cuantitativa, con aplicación en biología, biotecnología y biomedicina.



Responsable del Área de Biofísica: Adrián Velázquez Campoy

Líneas de investigación:

2.5.1. Plegamiento de proteínas y diseño molecular	IP Javier Sancho
2.5.2. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología	IP Milagros Medina
2.5.3. Glicosiltransferasas e hidrolasas implicadas en enfermedades humanas	IP Ramón Hurtado
2.5.4. Redes y sistemas complejos	IP Yamir Moreno
2.5.5. Modelos físicos de biomoléculas	IP Fernando Falo
2.5.6. Dinámica molecular y estructura electrónica	IP Pablo Echenique
2.5.7. Interacciones biomoleculares	IP Adrián Velázquez

Descripción de las líneas de investigación y sus logros en 2013

2.5.1. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design IP Javier Sancho

Ver en área de Bioquímica

2.5.2. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology IP Milagros Medina

Ver en área de Bioquímica

2.5.3. Glicosiltransferasas e hidrolasas implicadas en enfermedades humanas/Glycosyltransferases and hydrolases involved in human diseases

IP Ramón Hurtado

Objetivo y descripción

Esta línea de investigación se centra en el estudio de enzimología estructural de enzimas involucradas en enfermedades humanas que procesan carbohidratos y desarrollo de inhibidores para tratar las patologías en las que están involucradas

Nuestro grupo está interesado en el estudio de glicosiltransferasas, hidrolasas y proteínas de unión a carbohidratos que están involucradas en enfermedades humanas. Usamos la cristalografía de rayos-X como herramienta principal y la complementamos con estudios de enzimología, de inhibición, etc, para dilucidar los mecanismos catalíticos de las enzimas que están involucradas en la síntesis 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 Chemical Biology, 2012; Hurtado-Guerrero R *et al*, EMBO J, 2008).

Actualmente trabajamos en glicosiltransferasas tan dispares como PoFUT1, PoFUT2, B3GALTL o ppGalNAc transferasa. También somos activos en otras áreas no relacionadas con la Glicobiología y recientemente hemos descrito la primera estructura de la colina quinasa con un potente inhibidor en la prestigiosa revista Angewandte Chemie International con mención VIP. Las implicaciones de nuestros estudios son y serán muy importantes para el desarrollo de nuevos tratamientos para enfermedades humanas.

Por último también estamos interesados en elucidar las coordenadas de reacción y los mecanismos moleculares mediante el uso de análogos del estado de transición o por la obtención de complejos de Michaelis.

Proyectos relacionados

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

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA
Ramón Hurtado-Guerrero/Investigador ARAID	Identificación Grupo B89-Protein Targets
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA
Erandi Lira-Navarrete/Becario Jessika Valero-González/Becario Jorge Castro Estudiante de máster Matilde de las Rivas Estudiante de máster Sofía Macías Estudiante de máster Ainoa Figuerola-Conchas/Becario	Identificación Grupo B89-Protein Targets B89-Protein Targets B89-Protein Targets

Resultados y conclusiones destacadas 2013

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Publicaciones

María Sahún-Roncero, Belén Rubio-Ruiz, Giorgio Saladino, Ana Conejo-García, Antonio Espinosa, Adrián Velázquez-Campoy, Francesco Luigi Gervasio, Antonio Entrena and Ramón Hurtado-Guerrero*. The mechanism of allosteric coupling in choline kinase $\alpha 1$ revealed by a rationally designed inhibitor. Accepted in *Angewandte Chemie* (selected as VIP). 2013. *corresponding author

Edith Serrano, Rosaura Pérez-Pé, Lucía Calleja, Natalia Guillén, Adriana Casao, Ramon Hurtado-Guerrero, Teresa Muiño-Blanco and José A. Cebrián-Pérez. Characterization of the cDNA and in vitro expression of the ram seminal plasma protein RSVP 14. *GENE*. Accepted, 2013.

María Sahún-Roncero, Belen Rubio-Ruiz, Ana Conejo-García, Adrián Velázquez-Campoy, Antonio Entrena* and Ramon Hurtado-Guerrero* Determination of potential scaffolds for human choline kinase $\alpha 1$ by chemical deconvolution studies. Accepted in *ChemBiochem*, 2013. *corresponding author

(Back cover of *CHEMBIOCHEM*, July 22, 2013, Volume 14, Issue 11: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cbic.201390041/pdf>)

W. Fang, T. Du, O.G. Raimi, R. Hurtado-Guerrero, M.D. Urbaniak A.F.M. Ibrahim, M.A.J. Ferguson, C. Jin and D.M.F. van Aalten "Genetic and structural validation of *Aspergillus fumigatus* UDP-N-acetylglucosamine pyrophosphorylase as an antifungal target", *Mol. Microbiol.* (2013), in press.

W. Fang, T. Du, O.G. Raimi, R. Hurtado-Guerrero, K. Mariño, A.F.M. Ibrahim, O. Albarbarawi, M.A.J. Ferguson, C. Jin and D.M.F. van Aalten "Genetic and structural validation of *Aspergillus fumigatus* N-acetylphosphoglucosamine mutase as an antifungal target", *Biosci. Rep.* (2013), accepted.

María Laura Tondo, R. Hurtado-Guerrero, Eduardo A. Ceccarelli, M. Medina, Elena G. Orellano and Marta M. Martínez-Júlvez. Crystal structure of the FAD-containing ferredoxin-NADP⁺ reductase from the plant pathogen *Xanthomonas axonopodis* pv. *citri*. *BioMed Research International*, 2013, Accepted.

Eduardo Marca, Jessika Valero-González, Ignacio Delso, Tomás Tejero, Ramón Hurtado-Guerrero and Pedro Merino*. Synthesis of O- and C-glycosides derived from β -(1,3)-D-glucans. *Carbohydrate research*, 2013, Accepted.

Pedro Merino, Graziella Greco, Tomás Tejero, Ramón Hurtado-Guerrero, Rosa Matute, Ugo Chiacchio, Antonino Corsaro, Venerando Pistarà and Roberto Romeo. Stereoselective 1,3-Dipolar Cycloadditions of Nitrones derived from Amino Acids. Asymmetric Synthesis of N-(Alkoxy carbonylmethyl)-3-Hydroxypyrrolidin-2-ones. *Tetrahedron* 2013 (Accepted).

2.5.4. Redes y sistemas complejos/Complex systems and networks IP Yamir Moreno

Objetivo y descripción

Biología de Sistemas es el tema de la línea de investigación Redes y Sistemas complejos que se incluye en el Área de Biofísica. El resto, como se ha comentado en el punto 2.3., se desarrolla dentro del área de Física.

El objetivo general de esta línea, centrada en la temática concreta, es estudiar la dinámica y estructura de redes biológicas y los objetivos específicos: estudiar la estructura y la dinámica de redes de regulación, redes de proteínas y redes metabólicas de diferentes organismos biológicos con el objetivo de identificar mecanismos bioquímicos relevantes en estos sistemas.

La metodología que se usa es aquella de la Física Estadística, la Teoría de Redes Complejas, Dinámica No lineal y Teoría de la Complejidad. El método de trabajo incluye aproximaciones analíticas y en la mayoría de los casos las simulaciones numéricas extensivas

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
REDES, BIOFISICA Y CIENCIA NO LINEAL	Ministerio de Economía y Competitividad. FIS2011-25167

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Yamir Moreno/ PCD Investigador	E19- Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Joaquín Sanz Remón/Becario predoctoral	E19- Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Emanuele Cozzo/Becario predoctoral	E19- Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Javier Borge/Contratado investigador UZ	E19- Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)

Resultados y conclusiones destacados 2013

Respecto a los objetivos, las tareas desarrolladas tienen que ver con la caracterización topológica y dinámica de la red de transcripción de *Mycobacterium tuberculosis (Mtb)*, previamente compilada por el propio grupo el año anterior. A través de dicho análisis topológico, y mediante una comparación entre ésta red y algunas otras redes de regulación génica bien caracterizadas como las de *E.coli* y *B.subtilis*, fuimos capaces de identificar la influencia que la incompletitud de dichas bases de datos ejerce sobre determinadas propiedades topológicas de estas redes, tenidas como ciertas hasta la fecha.

Siempre en relación con el problema de la incompletitud y la incertidumbre de los datos en Biología, y su relación con los análisis y técnicas basados en la teoría de redes, este año hemos desarrollado un método para la identificación de falsos positivos y negativos en sistemas que, como las redes de regulación genética, pueden ser descritos como redes dirigidas. El trabajo se encuentra actualmente en revisión, y en él se demuestra que este tipo de métodos basados

en la topología de red no sólo son útiles para predecir errores aleatorios sino también errores arbitrariamente correlacionados.

Paralelamente, en colaboración con el profesor J. García-Ojalvo de la Universitat Politècnica de Catalunya, se está trabajando en la modelización "in silico" de un circuito genético concreto estrechamente involucrado en la respuesta a diferentes stresses ambientales en *Mycobacterium tuberculosis*

Difusión de logros científicos en 2013

Como resultado del trabajo realizado, se han enviado para su publicación 2 artículos científicos este año (actualmente están en proceso de revisión por pares) y se han presentado los resultados en 4 conferencias científicas.

2.5.5. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomolecules IP Fernando Falo

Ver área de Física

2.5.6. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic structure IP Pablo Echenique

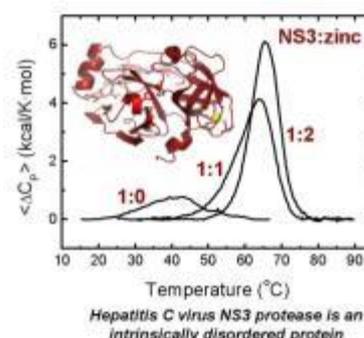
Ver área de Física

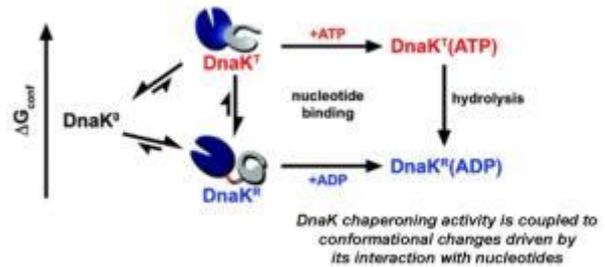
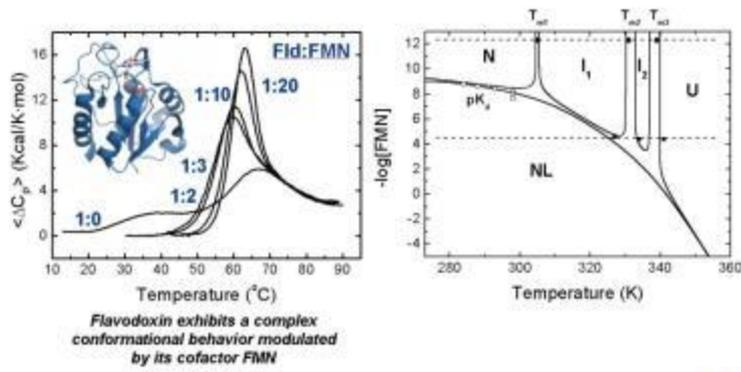
2.5.7. Interacciones biomoleculares/Biomolecular interactions IP Adrián Velázquez

Objetivo y descripción

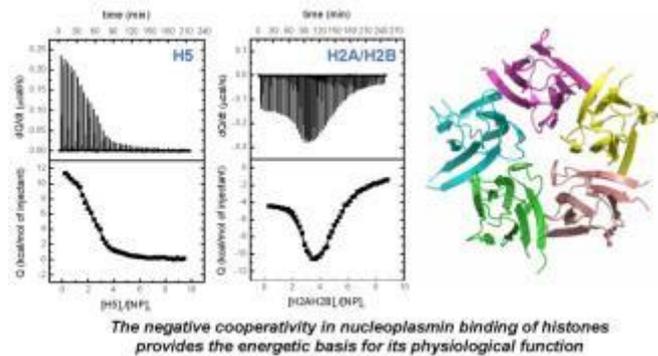
Todos los procesos biológicos (regulación, señalización, transporte, catálisis) se pueden descomponer en subprocesos de interacción y cambios conformacionales en biomoléculas. Para entender, modular y controlar dichos procesos biológicos es imprescindible obtener información detallada sobre las interacciones y los cambios conformacionales subyacentes. Empleamos técnicas experimentales biofísicas (principalmente, calorimetría y espectroscopía) y computacionales para:

- Caracterizar estructural y energéticamente el paisaje conformacional, las interacciones con otras biomoléculas y los cambios conformacionales en proteínas con relevancia biomédica y/o biotecnológica

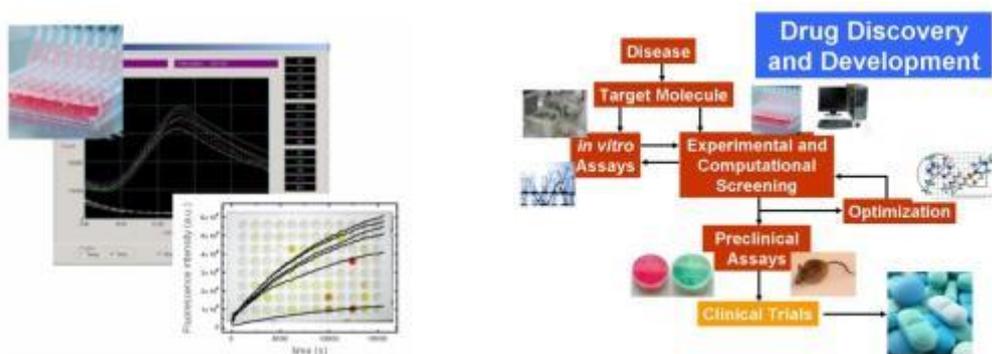




- Desarrollar metodologías experimentales para el estudio de interacciones biomoleculares y fenómenos cooperativos alostéricos en sistemas biológicos



- Desarrollar e implementar métodos de cribado para la identificación de compuestos bioactivos capaces de modular la función de dianas farmacológicas



Proyectos relacionados.

Título proyecto	Entidad Financiadora
Bioavailability of amphiphilic ligands – Drugs and metabolites	Ministerio de Ciencia e Innovación (Acción Integrada España-Portugal)
Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos	Ministerio de Ciencia e Innovación

Equipo de investigación

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA
Adrián Velázquez Campoy/Investigador ARAID	Identificación Grupo B89-Protein Targets
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA
José Luís Neira Faleiro/Catedrático Universidad Miguel Hernández (Elche)	Identificación Grupo NA
Isidro Cortés Ciriano/Estudiante Máster	NA

Resultados y conclusiones destacadas 2013

La caracterización termodinámica del equilibrio conformacional de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C ha proporcionado información para la identificación de inhibidores alostéricos que presentan un nuevo mecanismo de acción.

En colaboración con investigadores de la Universidad de Coimbra se ha desarrollado una novedosa metodología para la caracterización termodinámica de la interacción de moléculas pequeñas con membranas biológicas.

Colaboramos con investigadores de la National University of Singapore en el estudio de interacciones proteína-proteína.

Colaboramos con investigadores de la Universidad Miguel Hernández en el estudio de interacciones proteína-proteína del sistema fosfotransferasa y la búsqueda de nuevos agentes antibacterianos.

En colaboración con investigadores de la Universidad Autónoma de Barcelona extendemos la metodología para caracterizar interacciones proteína-metal previamente desarrollada para la proteasa NS3 y el módulo LR5 del receptor de LDL.

En colaboración con investigadores de la Universidad de Cambridge aplicamos métodos computacionales para la predicción de moléculas diana a partir de bases de datos de compuestos bioactivos

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Abián O, Vega S, Sancho J, Velázquez-Campoy A. Allosteric inhibitors of the NS3 protease from the hepatitis C virus. PLoS ONE 2013 8:e69773

Vega S, Neira JL, Marcuello C, Lostao A, Abián O, Velázquez-Campoy A. NS3 protease from hepatitis C virus: Biophysical studies on an intrinsically disordered protein domain. *International Journal of Molecular Sciences* 2013 14:13282-13306

Filipe HAL, Coreta-Gomes FM, Velázquez-Campoy A, Almeida AR, Peixoto AF, Pereira MM, Vaz WLC, Moreno MJ. Synthesis and characterization of a lipidic alpha amino acid: Solubility and interaction with serum albumin and lipid bilayers. *Journal of Physical Chemistry B* 2013 117:3439-3448

Padavannil A, C. Jobichen C, E. Mills E, A. Velázquez-Campoy A, M. Li, Leung KY, Mok YK, Rosenshine I, Sivaraman J. Structure of GrlR-GrlA complex that prevents GrlA activation of virulence genes. *Nature Communications* 2013 4:2546

Kumar V, Chichili VPR, Zhong L, Tang X, Velázquez-Campoy A, Sheu FS, Seetharaman J, Gerges NZ, Sivaraman J. Structural basis for the interaction of unstructured neuron specific substrates neuromodulin and neurogranin with calmodulin. *Scientific Reports* 2013 3:1392

Domenech R, Hernández-Cifre JG, Bacarizo J, Diez-Peña AI, Martínez-Rodríguez S, Cavasotto CN, García de la Torre J, Cámara-Artigas A, Velázquez-Campoy A, Neira JL. The histidine-phosphocarrier protein of the phosphoenolpyruvate:sugar phosphotransferase system of *Bacillus sphaericus* self-associates. *PLoS ONE* 2013 8:e69307

Chopra S, A. Palencia A, C. Virus C, Tripathy A, Temple BR, Velázquez-Campoy A, Cusack S, J.S. Reader. Plant tumour biocontrol agent employs a tRNA-dependent mechanism to inhibit leucyl-tRNA synthetase. *Nature Communications* 2013 4:1417

Fraga H, Papaleo E, Vega S, Velázquez-Campoy A, Ventura S. Zinc induced folding is essential for TIM15 activity as an mtHsp70 chaperone. *Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects* 2013 1830:2139-2149

Cortes-Ciriano I, Koutsoukas A, Abián O, R. Glen, Velázquez-Campoy, A. Bender. Experimental validation of in silico target predictions on synergistic protein targets. *Medicinal Chemistry Communications* 2013 4:278-288

Cruz-Gallardo I, Díaz-Moreno I, Díaz-Quintana A, Donaire A, Velázquez-Campoy a, Curd RD, Rangachari K, Birdsall B, Ramos A, Holder AA, De la Rosa MA. Antimalarial activity of cupredoxins: The interaction of Plasmodium merozoite surface protein 1-19 (MSP1-19) and rusticyanin. *Journal of Biological Chemistry* 2013 288:20896-20907

Núñez D, Domingo P, Sánchez-Martínez D, Cebolla V, Chiou A, Velázquez-Campoy A, Pardo J, Galvez E. Recombinant production of human ICAM-1 chimeras by single step on column refolding and purification. *Process Biochemistry* 2013 48:708-715

Gállego P, Velázquez-Campoy A, Regue L, Roig J, Reverter D. Structural analysis of the regulation of the DYNLL/LC8 binding to Nek9 by phosphorylation. *Journal of Biological Chemistry* 2013 288:12283-12294

2.6. Área Computación

Objetivo: Este área, además de proporcionar infraestructuras de computación a grupos investigadores y empresas, realiza investigación en las distintas tecnologías punteras de computación, tanto en la vertiente software (middleware para un acceso más eficiente a las infraestructuras) como hardware (diseño de arquitecturas optimizadas para la resolución de problemas específicos). Asimismo dedica una especial atención a la colaboración ciudadana con la ciencia y al análisis de grandes volúmenes de información.



Responsable del Área de Computación: David Iñiguez

Líneas de investigación:

2.6.1. High Performance Computing	IP Guillermo Losilla
2.6.2. Grid&Cloud Computing	IP Rubén Vallés
2.6.3. Ciencia Ciudadana	IP Fermín Serrano
2.6.4. Ordenadores dedicados	IP Sergio Pérez Gaviro
2.6.5. Visualización avanzada y transferencia tecnológica	IP Gonzalo Ruiz
2.6.6. Análisis de Información en Internet y Grandes Redes. Inteligencia Colectiva	IP Alejandro Rivero

Descripción de las líneas y sus logros 2013

2.6.1. High Performance Computing IP. Guillermo Losilla

Objetivo y descripción

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 para uso científico, así como en el diseño y mantenimiento de CPDs. Actualmente gestionamos el Laboratorio de Supercomputación del BIFI (CPD de 150m² que alberga la mayor parte de la infraestructura computacional del Instituto) y 2 supercomputadores masivamente paralelos: MEMENTO/CAESARAUGUSTA y TERMINUS.
- Ofrecer un servicio de cálculo y almacenamiento de calidad para los investigadores del Instituto y otros usuarios 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, el programa Hosted Clusters y otros servicios prestados.

- 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...

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
SCC-Computing ("Strategic Collaboration with China on super-computing based on Tianhe-1A")	Comisión Europea (FP7)
Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAr)	FEDER
Convenio CAESARAUGUSTA	Gobierno de Aragón
Cofinanciación para la contratación de un técnico de apoyo para el Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAr)	Universidad de Zaragoza

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Guillermo Losilla Anadón / contratado	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Arturo Giner Gracia / contratado	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
Patricia Santos Marco / contratado	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

Resultados y conclusiones destacados 2013

A nivel técnico, la principal novedad de 2013 ha sido la actualización del supercomputador CAESARAUGUSTA, nodo en Aragón de la Red Española de Supercomputación (RES).

Desde 2007 hasta principios de este año, CAESARAUGUSTA era una de las máquinas cedidas por el Ministerio y el Barcelona Supercomputing Center que habían formado parte del antiguo supercomputador Marenostrum. El sistema, que constaba de 512 procesadores de arquitectura PowerPC, se encontraba alojado en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza.

En Marzo de 2013, coincidiendo con lo que a lo largo de 2012 y 2013 harían la mayoría de nodos participantes en la RES, se produjo una actualización del sistema. En el caso de CAESARAUGUSTA, el antiguo ordenador se sustituyó por una porción de MEMENTO, el supercomputador de memoria compartida "híbrida" de 3072 cores de cálculo adquirido en 2012 por el BIFI y el ZCAM con fondos FEDER para infraestructura científica.

La "porción" de MEMENTO que se comparte a través de la RES consta de 1024 cores de cálculo (un tercio de la máquina); 512 para los usuarios asignados por

el Comité de Acceso global y 512 para usuarios locales. Esto ha supuesto duplicar los recursos ofrecidos por el BIFI-Universidad de Zaragoza en el proyecto.

MEMENTO se encuentra alojado en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI.

Por convención, se ha creído conveniente mantener el nombre de "CAESARAUGUSTA" para referirnos al sistema en el marco de la RES, o más concretamente a la parte del mismo que se comparte con dicha red.



Para conocer más detalles de MEMENTO/CAESARAUGUSTA, ver la sección de Infraestructuras de Computación (2.7.1).

Otra importante actuación que hemos llevado a cabo este año ha sido la instalación en el Laboratorio de Supercomputación de un sistema de free-cooling que durante buena parte del año es capaz de refrigerar el CPD sólo con el aporte de aire externo, permitiendo un importante ahorro energético a la Universidad.



Además la instalación incluye un autómata que gobierna todo el sistema de clima (enfriadoras, cabinas de extracción, compuertas) de forma automática y permite realizar una monitorización más exhaustiva mediante el envío de alertas por email, SMS y llamadas de teléfono si se produce alguna avería o según las condiciones de temperatura establecidas.

Uno de los eventos más destacados que hemos organizado durante 2013, fue la jornada "Presentación recursos y servicios de cálculo: BIFI, Ibercivis, BSC, RES y PRACE", acogida por la Universidad de Zaragoza el jueves 26 de Septiembre. En la misma se dieron detalles sobre los recursos y servicios de cálculo que ofrecen el BIFI, la Fundación Ibercivis, el BSC-CNS (Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación), la RES y el proyecto europeo PRACE ("Partnership for Advanced Computing in Europe").

El objetivo de la reunión fue dar a conocer a la comunidad local de I+D+i (investigadores y empresas) los recursos y servicios de cálculo que se prestan desde estos organismos, muchos de ellos gratuitos para el investigador, así como informarles del método de solicitud de acceso a los mismos.

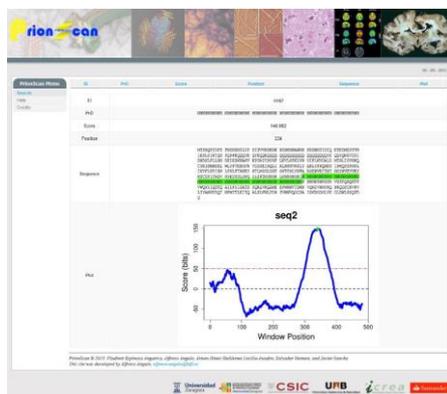
En este sentido, la aprobación en Junio por parte de la Vicegerencia de Investigación de la Universidad de los precios públicos para los servicios

prestados por el Instituto, nos ha facilitado el establecimiento de colaboraciones con empresas y otros usuarios externos al BIFI.

Por otro lado, durante 2013 ha tenido lugar la segunda mitad del proyecto europeo SCC-Computing ("Strategic Collaboration with China on super-computing based on Tianhe-1A"), que nos ha permitido ampliar e intensificar nuestras relaciones con centros de supercomputación chinos. A falta del final review del proyecto, se espera que la Comisión Europea incluya la colaboración con China en temas de computación avanzada en sus próximos planes de financiación (Horizon 2020), lo que esperamos nos permita explotar y dar continuidad a las colaboraciones iniciadas

Difusión de logros científicos destacados en 2013

En 2013, y en colaboración con el grupo ProtMol ("Protein folding and molecular design") del BIFI, hemos dirigido un Proyecto Fin de Carrera titulado "Desarrollo de un entorno web para la ejecución remota de aplicaciones de biología computacional".



Interfaz web de la herramienta desarrollada

El proyecto, que fue llevado a cabo con éxito por el alumno de Ingeniería Informática Alfonso Angulo Vela, tenía como objetivo la creación de un entorno web que permita la ejecución remota de varias aplicaciones de biología computacional, desarrolladas por el grupo de investigación ProtMol, incluyendo, en algún caso, el envío a un clúster de memoria distribuida (*Terminus*) y devolviendo el resultado de forma inmediata, mediante el interfaz web o a través de correo electrónico, según el caso.

2.6.2. Grid&Cloud Computing IP. Rubén Vallés

Objetivo y descripción

La línea Grid & Cloud computing se dedica principalmente a la investigación con infraestructuras de computación distribuidas.

Participación en proyectos nacionales e internacionales relacionados con la computación distribuida (grid y cloud) y foros de discusión e integración de dichas tecnologías en las empresas.

En el aspecto técnico se realiza configuración, administración y soporte a usuarios de las infraestructuras de AraGrid y PireGrid, las cuales suman en conjunto más de 2000 cores de cálculo y alrededor de 100TB de almacenamiento.

Dichas infraestructuras proveen recursos computacionales no sólo a investigadores de Aragón, sino que además sirven como plataforma de pruebas a la PYMES para la mejora de su modelo de negocios mediante éstas nuevas tecnologías.

Durante este año 2013 la línea de trabajo se ha visto reforzada notablemente en el despliegue y configuración de tecnologías cloud basadas en OpenStack, lo que nos permite estar a la vanguardia del uso de recursos computacionales y almacenamiento virtualizados, siendo compatibles en más de un 90% con Amazon que es el cloud comercial más usado actualmente.

Además, dichas infraestructuras forman parte de la iniciativa Ibergrid (España y Portugal), así como de EGI (European Grid Infrastructure), que es la más grande de las infraestructuras distribuidas a nivel mundial.

Nuestro principal trabajo dentro del proyecto EGI-InSPIRE es proveer los servicios centrales y el soporte técnico de la VO internacional de fusión en colaboración con el Laboratorio Nacional de Fusión (CIEMAT).

Debido a la especial arquitectura del Grid, también trabajamos en el soporte para la migración y adaptación de aplicaciones para su correcto funcionamiento en este tipo de infraestructuras distribuidas.

Dentro de proyecto con SCI-BUS y CloudSME combinamos el desarrollo de portales web con interfaces de usuario amigables para el usuario final, así como su interconexión con tecnologías cloud y los paradigmas de computación MapReduce y su implementación libre Hadoop. Del mismo modo, somos proveedores de recursos cloud y realizamos un acercamiento de estas tecnologías a las PYMES no sólo a nivel nacional, sino europeo.

Como último punto, la difusión y la enseñanza de estos conceptos en talleres técnicos es muy importante, por lo que organizamos workshops, cursos, charlas y meetings con empresas, del mismo modo que realizamos difusión de todos aquellos proyectos en los que participamos.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
CloudSME	FPVII
SCI-BUS	FPVII
EGI-InSPIRE	FPVII
AraGrid	FEDER
Cofinanciación para la contratación de un técnico de apoyo para la infraestructura de AraGrid	MINECO

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Rubén Vallés Pérez/ contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Jaime Ibar Yubero/ PTA MINECO	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos

Resultados y conclusiones destacados 2013

- Acercamiento de tecnologías cloud a las PYMES a través del proyecto CloudSME (<http://cloudsme.eu>)
- Gestión y administración computacional de la infraestructura grid regional AraGrid distribuida en Zaragoza, Huesca y Teruel. Dando servicio a usuarios tanto nacionales como internacionales a través de la participación en Ibergrid y EGI.
- Desarrollo de interfaces web de usuario para facilitar el uso de las infraestructuras distribuidas, mediante nuestra participación en SCI-BUS (www.sci-bus.eu)

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Cauhé E, Giner A, Ibar J, Ruiz G, Vallés R. *Hadoop Cloud SaaS access via WS-PGRADE adaptation*. 6Th Iberian Grid Infrastructure Conference Proceedings:161-172. 2013.

2.6.3. Ciencia Ciudadana/Citizen science IP.Fermín Serrano

Objetivo y descripción

En esta línea queremos integrar a la ciudadanía en el proceso científico. Desde el BIFI y la Fundación Ibercivis queremos aprovechar la sociedad actual como herramienta útil para hacer investigaciones en campos como las TIC o ciencias naturales y sociales. Los ciudadanos pueden participar activamente con su propio conocimiento y conformar una red de trabajo colectivo que genere nuevas fuentes de datos o que resuelva problemas complejos; y también pueden aportar sus dispositivos físicos, tales como ordenadores o teléfonos personales, para crear una infraestructura de captación y cálculo distribuida. Ofrecemos soluciones hardware y software necesarias para aprovechar nuestra comunidad de usuarios, así como un equipo de comunicación para llegar a la ciudadanía en general.

Integramos al público en general que participa activamente en el proceso investigador con sus propios recursos y con su conocimiento. Desde el BIFI y la Fundación Ibercivis entendemos la sociedad digital como una herramienta útil que debe ser modelada y aprovechada para resolver viejos y nuevos problemas globales.

En esta ciencia abierta participativa, se mezclan trabajos sociales, científicos y políticos:

- se nuevas ciencias sociales o ambientales digitales, participativas a escala local y global
- se reducen costes, por ejemplo usando los recursos que ya existen como ordenadores o móviles.
- se obtienen nuevas propuestas y soluciones propuestas por voluntarios, algunas rompedoras y muy válidas basadas en un conocimiento distribuido, como puede ser el labor de los activistas locales que plantean trabajos a investigadores para tener evidencias y poder plantear cambios en la política local)
- se puede modelar y estudiar la inteligencia colectiva
- se comparte de forma abierta todo el proceso científico (lo bueno, lo malo, los datos, los métodos...) aumentando la eficiencia del sistema y democratizando la ciencia, donde todos participan sin importar sexo, condición, ni ubicación física.
- los voluntarios aprenden, se adquieren nuevos conocimientos y habilidades, se re-enganchan con el hábito de estudiar y aprender, se utilizan nuevos canales de formación en información, se obtienen información de primera mano de los investigadores.
- se abren nuevos debates y mecanismo para transformar la ciencia al buscar nuevos incentivos, nuevos reconocimientos y nuevos lenguajes artísticos.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
SOCIENTIZE	FP7
Global Excursion	FP7
Creación de audiovisual explicativo de la ciencia ciudadana	FECYT
LA CIUDAD ES AGUA: MAPsCLOR	FECYT

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Fermín Serrano/Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Francisco Sanz/Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Carlos Val/Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Eduardo Lostal/Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Silvia Almonacid/Colaborador	NO
Mari Carmen Ibáñez/Contratada	NO

Resultados y conclusiones destacados 2013

- El BIFI es referencia internacional en la ciencia ciudadana, siendo invitado e influyendo en distintos foros de ciencia-política-sociedad a nivel europeo: ciencia digital, ciencia abierta, ciencia 2.0, ciencia emergente, ciencia responsable....
- Se ha consolidado la Fundación Ibercivis como iniciativa nacional de ciencia ciudadana
- Se ha publicado el Libro Verde de la Ciencia Ciudadana: **Citizen Science for Europe** Towards a better society of empowered citizens and enhanced research.
- Se ha colaborado con decenas de grupos a escala nacional y europea. Destacamos algunos ejemplos: Test de Turing con I3A, Biosoft con la EHU-CSIC, Bindsurf con la UCAM, HappyUp con la USJ y Simply, Liga Energética Edificio I+D con HowLab y GEE, IbercivisLab con etopia_, Células con DGA...



Portada Libro Verde Ciencia Ciudadana www.socientize.eu

Difusión de logros científicos destacados en 2013

- Se ha contado con un papel destacado en mayor evento de TIC de Europa: ICT2013 en Vilna, Lituania, donde contamos con un stand permanente y con una sesión de networking, con más de 5.000 profesionales registrados.
- Se han organizado dos Hackathons en Zaragoza y en Madrid involucrando a decenas de participantes
- Se han impartido y participado en cursos, conferencias, workshops, festivales, jornadas, ferias, etc.
- Se tiene una fuerte presencia en redes sociales, twitter, facebook, linkedin, google+, youtube, vimeo, flickr, blogs, foros, etc.
- Se han creado varios videos explicativos, destacando el video sobre el experimento de análisis de células, y el video promocional de Ibercivis con una novedosa técnica de parpadeo y música original, que transmiten los valores de la ciencia ciudadana.



Grabación música video #somosciencia Grupo Bitterman. *Entrega de premios en Binéfar. Science Hack Day en Medialab-Prado Madrid*



Stand en Vilna ICT2013eu

2.6.4. Ordenadores dedicados/Special purpose computers

IP. Sergio Pérez Gaviro

Objetivo y descripción

El objetivo general del área de investigación en ordenadores dedicados es diseñar nuevos supercomputadores teniendo especialmente en cuenta las aplicaciones o el rango de aplicaciones que se van a ejecutar en él. Al adaptar la arquitectura a las particularidades de los problemas a ejecutar permite en algunos casos simular a velocidades entre 1000 y 100.000 veces superiores a las de procesadores convencionales, consiguiendo saltos cualitativos en los resultados que se pueden obtener.

Como objetivos específicos del área, nos hemos propuesto ampliar el rango de aplicaciones que pueden ejecutar los supercomputadores dedicados del BIFI, para incluir problemas tales como Dinámica Molecular, reconocimiento de secuencias en polipéptidos, acelerador numérico para problemas con fuerzas a largo alcance (como por ejemplo potenciales tipo Coulomb), redes neuronales y problemas similares.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Janus 2	FEDER
Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte, FIS2012-35719	Ministerio de Economía y Competitividad
Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte, FIS2009-12648-C03-02, 2010-2012	MICINN

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Sergio Pérez Gaviro/ ARAID	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Andrés Cruz Flor/Prof Emérito	NA
Luis Antonio Fernández Pérez/UCM	NA
Víctor Martín Mayor/UCM	NA
Juan Jesús Ruiz Lorenzo/UNEX	NA
Alfonso Tarancón Lafita / Catedrático UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
David Yllanes/UI di Roma	NA
Raquel Álvarez Baños/Predocctoral	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
José Miguel Gil Narvión/Predocctoral	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Antonio Gordillo Guerrero/UNEX	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Andrea Maiorano/U. di Roma	NA
Jorge Monforte García/UZ	NA
David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Beatriz Seoane/UCM	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
	NA

Resultados y conclusiones destacados 2013

Durante el año 2013 se han cumplido 5 años de explotación científica del supercomputador dedicado Janus, explotado por el grupo de investigación en Spin Glasses del BIFI y herramienta clave para la elaboración de diversas publicaciones científicas en ese ámbito.

Además, se ha finalizado la construcción la nueva generación de supercomputador dedicado, al que hemos llamado Janus II, que ha llegado al Instituto a finales de julio y que ha sido financiado con una convocatoria de fondos FEDER para infraestructuras.

Dicho superordenador presenta diversas mejoras y mayores prestaciones respecto a su predecesor, Janus, como mejores procesadores fpga de la familia Virtex7, mayor velocidad en las transacciones y menor latencia, mayor memoria, un número más elevado de celdas programables y una topología mucho más flexible.

Con la nueva máquina ya en nuestras manos, durante este periodo de final de año se está trabajando en el sistema operativo y puesta a punto de las comunicaciones internas para sacarle el mayor partido a Janus II

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Baity-Jesi M, et al. The Janus Collaboration: "Janus II: a new generation application-driven computer for spin-system simulations" arXiv:1310.1032. Accepted for publication in Computer Physics Communications (<http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2013.10.019>)

Baity-Jesi M, et al. Spin glass simulations on the Janus architecture: A desperate quest for strongscaling. LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE. 7640 LNCS - , pp. 528 - 537. 2013. ISSN 0302-9743

Baity-Jesi M et al. An FPGA-based supercomputer for Statistical Physics: the weird case of Janus. HIGH-PERFORMANCE COMPUTING USING FPGAS. pp. 481 - 506. 2013. ISBN 978-1-4614-17

Baity-Jesi M, et al. The Janus Collaboration: "Critical parameters of the three-dimensional Ising spin glass" arXiv:1310.2910. Accepted for publication in Phys. Rev. B

Baity-Jesi M, et al. The Janus Collaboration: M. "Dynamical Transition in the D=3 Edwards-Anderson spin glass in an external magnetic field" arXiv:1307.4998

2.6.5. Visualización avanzada y transferencia tecnológica IP. Gonzalo Ruíz Manzanares

Objetivo y descripción

Se trata de un grupo joven del área de computación del BIFI, formado por ingenieros en informática. En él se desarrollan tres tareas bien diferenciadas.

- Dar soporte a la investigación realizada en el instituto participando en proyectos nacionales e internacionales que requieren desarrollo de software. También se da soporte en cuanto a la adaptación y optimización de sistemas ya creados, 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, como son el laboratorio de visualización 3D, el laboratorio de Realidad aumentada, las redes sociales, y el uso de tecnologías móviles con distintos fines que van desde la mejora de la educación hasta la optimización de procesos productivos.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Aragón Open Social Data	DGA
Sistema experto de previsión y severidad de incidentes en redes eléctricas	MINECO - INNPACTO
Realidad Aumentada	FECYT
SCI-BUS	FPVII
SOCIETIC	FPVII
Global Excursion	FPVII
CloudSME	FPVII
Unidad didáctica sobre el sistema solar con Kinect	Cátedra Juan De Lanuza
Realización de experimentos colectivos en redes complejas	BIFI - U3C
Adaptación WEB de la aplicación TNOVO	BIFI

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Gonzalo Ruiz Manzanares / Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Alfredo Ferrer Marco / Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Xavier Mellado Esteban / Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos

Resultados y conclusiones destacados 2013

- Participación en la creación de la herramienta de gran repercusión a nivel nacional Kampal, el mapa de investigación de la Universidad de Zaragoza
- Participación en el desarrollo de diferentes proyectos europeos y nacionales en colaboración con otras áreas del BIFI como SCI-BUS, CloudSME, SEPS (financiado por MINECO a través de la convocatoria INNPACTO) y OpenSocialData de la DGA

- Durante el año 2013 se han abierto diferentes posibilidades de colaboración con nuevas empresas y organismos que se han puesto en contacto con el BIFI debido al interés que han despertado algunos de los proyectos desarrollados

Difusión de logros científicos destacados en 2013

- Cahué E, Arturo Giner A, Ibar J, Ruiz G, Vallés R. Hadoop Cloud SaaS access via WS-PGRADE adaptation. 6th Iberian Grid Infrastructure Conference.
- Cahué E, Ferrer A, Íñiguez D, Ruiz G. RRLab: Remote Reality Laboratory chapter en la edición 2013 del libro titulado "Using Remote Labs in Education" publicado por la Universidad de Deusto.

2.6.6 Análisis de Información en Internet y Grandes Redes. Inteligencia Colectiva

IP. Alejandro Rivero

Objetivo y descripción

Análisis de Información en Internet y Grandes Redes

Esta línea apoya las investigaciones de otros grupos del instituto a la vez que desarrolla técnicas específicas para la búsqueda y organización de grandes cantidades de información. Entran en ella los algoritmos para realizar minería de datos de fuentes disponibles en internet, tanto de redes sociales como de otras fuentes que pueden presentarse en forma de red, por ejemplo empresas con cuadros directivos comunes o investigadores con proyectos y publicaciones en común. Para las redes sociales, se tienen establecidos canales de almacenamiento sistemático de mensajes con datos de geoposición o con hashtags de interés para determinadas investigaciones.

Asimismo, se incluyen los algoritmos y métodos necesarios para el tratamiento de grandes redes, tanto obtenidas mediante la minería anterior como provenientes de otras fuentes.

Este año se ha culminado la colaboración con los servicios de la Universidad de Zaragoza en la recogida y análisis de datos de publicaciones científicas, con vistas a la elaboración de un mapa de la universidad, generalizable a otras instituciones.

Inteligencia Colectiva

En esta línea, se estudia si una colectividad presenta rasgos de inteligencia, sea por combinación de habilidades o por otras sinergias, vayan más allá de la mera suma de individualidades, e incluso si pueda realizar algún tipo de tareas que sean imposibles para individuos aislados. Es una extensión en cierto modo de los trabajos del instituto sobre ciencia ciudadana y colaboración.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Global Excursion	VII FP
Modelos de centralidad y comunidades en redes de clientes	ARAID/Ibercaja - Trustserver
Modelo de identificación de clientes únicos en compañía de telefonía	Applied Advanced Analytics

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Alejandro Rivero/Contratado Investigador	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Alfonso Tarancón/Profesor Titular UZ	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Yamir Moreno/contratado doctor	E19- Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Gonzalo Ruíz/Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Sandro Meloni/contratado	E19- Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)
Javier López Lorente/Profesor Titular UZ	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Raquel Álvarez/Predocctoral	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos

Resultados y conclusiones destacados 2013

En la línea de inteligencia colectiva, se ha preparado un prototipo de sistema de propagación de ideas que se puede emplear en experimentos de brainstorming

En Análisis de Información, se ha comenzado a trabajar con al DGA en la elaboración de un programa de recogida de mensajes sobre Aragón que se produzcan en las redes sociales, que se entregara en Diciembre de este año y se culminara el primer cuatrimestre del 2014.

Difusión de logros científicos destacados en 2013

Edición del mapa de la universidad de Zaragoza, a través de la web <http://kampal.unizar.es>. Se ha realizado una presentación oficial en la Universidad en Noviembre.

2.7. Infraestructuras del BIFI.

Una gran parte de las infraestructuras del Instituto BIFI están localizadas en el Edificio I+D, situado en el Campus Río Ebro de la Universidad de Zaragoza. En este edificio se ubican otros Institutos Universitarios de Investigación de la Universidad de Zaragoza. El BIFI cuenta con 20 laboratorios, 22 despachos y algunas otras salas comunes y están distribuidos en las 3 plantas de edificio. Por otra parte también se pueden utilizar zonas comunes que se comparten con otros institutos.

Se van a describir a continuación las infraestructuras singulares que dan a los investigadores unas prestaciones específicas y especializadas. Estos servicios dan servicio a la propia investigación del instituto, aunque también a otros investigadores externos. Los investigadores y técnicos coordinadores y los técnicos responsables de cada uno de los equipos están excelentemente preparados para la puesta en marcha, manejo y mantenimiento de los mismos.

Se han catalogado como Infraestructuras de Física y Computación e Infraestructuras de Bioquímica y Biofísica.

2.7.1. Infraestructuras de Física y Computación

En lo que respecta a Computación, en los últimos años, gracias al programa FEDER y otros proyectos de infraestructura, el Instituto se ha dotado de unos recursos de primer nivel. Esto permite afirmar que por infraestructura computacional, el BIFI está entre el "top 5" de centros de computación y e-Ciencia en España y se encuentra muy bien posicionado a nivel europeo.

El rango de sistemas de cálculo disponible cubre todo el espectro de la computación actual, abarcando supercomputadores de memoria distribuida (Terminus) y compartida (Memento/Caesaraugusta), sistemas más "desacoplados" de computación distribuida (AraGrid, Ibercivis, recursos en cloud) y ordenadores dedicados o de propósito específico diseñados por nosotros mismos (Janus I y II).

Adicionalmente, como complemento y divulgación a sus investigaciones, el BIFI cuenta con sus propios laboratorios de visualización y de realidad aumentada.

MEMENTO/CAESARAUGUSTA

Descripción. Memento es un supercomputador de memoria compartida "híbrida" de 20 TFLOPS, compuesto por 3072 cores de cálculo, 12 TeraBytes de memoria RAM, red de interconexión Infiniband QDR y 51 Terabytes de almacenamiento. Fue adquirido en 2012 por el BIFI y el ZCAM (Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling) con fondos FEDER para infraestructura científica. Una parte del sistema, denominada CAESARAUGUSTA, se comparte a través de la Red Española de Supercomputación.

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Guillermo Losilla Anadón

Investigadores/Técnicos implicados. Arturo Giner Gracia, Patricia Santos Marco



Metodología y técnicas disponibles. Memento ofrece un servicio clásico de cálculo en clúster HPC, estando por su configuración especialmente indicado para aplicaciones paralelas y/o con grandes necesidades de memoria RAM. El listado actual de software disponible en el sistema (ampliable bajo demanda de los usuarios) se puede consultar en: <http://bifi.es/en/infraestructures/scientific-equipment/memento-caesaraugusta/available-software>.

Acceso vía BIFI-ZCAM

Actualmente, todos los miembros del BIFI y el ZCAM tienen derecho de acceso gratuito a Memento. En el caso de colaboradores de miembros de alguno de los dos institutos, también pueden solicitar acceso sin coste al sistema, siempre que el objeto de la actividad a desarrollar tenga lugar en el marco de su colaboración con el miembro del BIFI/ZCAM, el cual deberá aparecer como co-autor (con afiliación BIFI/ZCAM) en cualquier potencial publicación, que además deberá incluir agradecimientos por el uso de los recursos. El resto de usuarios externos (Unizar, OPIs, Empresas...), pueden acceder a Memento vía Caesaraugusta, CECAM (ver a continuación) o a través de nuestros servicios de cálculo que cuentan con unas tarifas extremadamente competitivas.

Acceso vía CAESARAUGUSTA (RES)

La Red Española de Supercomputación (RES), creada en 2007 por el entonces Ministerio de Educación y Ciencia, es una red de 8 superordenadores con centro en el MareNostrum (BSC-CNS), que busca dar soporte a los servicios de supercomputación que demanda la comunidad científica española. La Universidad de Zaragoza, a través del BIFI, gestiona CAESARAUGUSTA, el nodo de Aragón en la RES, desde su creación.

En Marzo de 2013, el supercomputador CAESARAUGUSTA se actualizó, pasando a ser una porción de Memento (actualmente 512 cores) y sustituyendo al antiguo equipo de arquitectura PowerPC que se encontraba alojado en la Facultad de Ciencias. Pese al cambio, la parte de Memento que se comparte con la RES mantuvo el nombre de CAESARAUGUSTA.

Las actividades que hacen uso de los recursos puestos en común a través de la RES son asignadas por el Comité de Acceso global del BSC-CNS. Más información: <http://www.res.es>.

Acceso vía CAESARAUGUSTA (CeSAr)

Además de la partición de Memento puesta en común a través de la RES, existe una partición adicional de 512 cores, que se ofrece sin coste alguno a cualquier proyecto de investigación con base en Aragón.

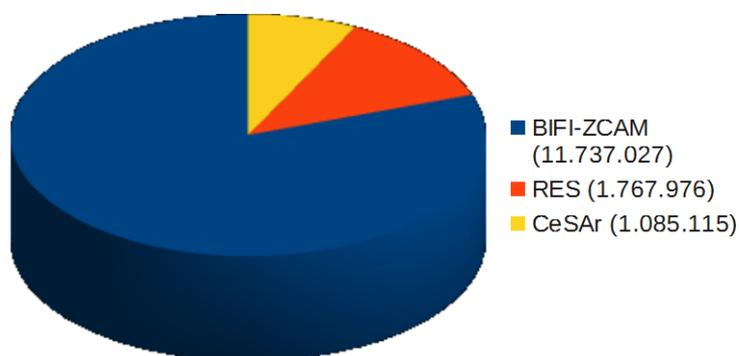
Dichos recursos, que de alguna manera son el embrión de un proyecto futuro denominado CeSAr (Centro de Supercomputación de Aragón), son asignados (1.250.000 horas de CPU cada cuatro meses) por un Comité de Acceso local que evalúa las solicitudes recibidas en cada periodo cuatrimestral (coincidentes con los de la RES): Marzo-Junio, Julio-October y Noviembre-Febrero.

Acceso vía CECAM

A corto plazo se prevé dar también acceso a investigadores del CECAM.

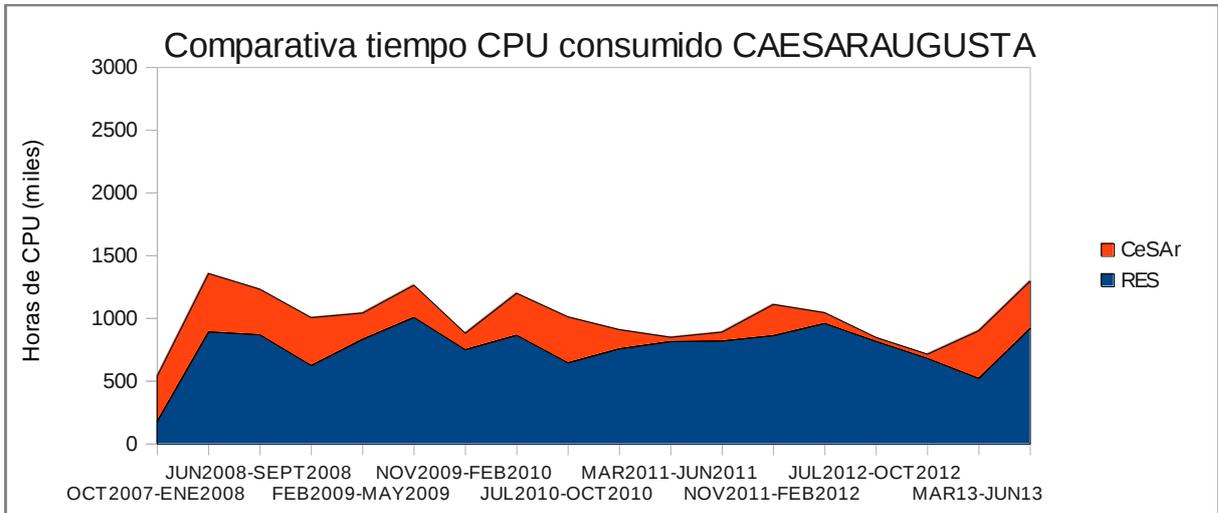
Comentarios de interés. Memento es actualmente la plataforma de cómputo más potente alojada en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI (Edificio I+D) y uno de los supercomputadores más potentes de España. Técnicamente, se trata de una máquina de memoria compartida híbrida con una potencia de cálculo pico (R_{peak}) de 25,8 TeraFLOPS (20 TFLOPS de R_{max}). El sistema cuenta con un total de 3072 cores de cálculo de arquitectura AMD64 (procesador AMD Opteron "Interlagos" 6272 2,1GHz), 12 TeraBytes de memoria RAM, 51 Tbytes de espacio de almacenamiento neto sobre RAID60 y redes de interconexión Infiniband QDR (40 Gbps) y Gigabit Ethernet. Todo este hardware se encuentra agrupado en 48 servidores, cada uno conteniendo 64 cores de cálculo y 256 GB de memoria RAM.

De Enero a Noviembre de 2013, en el sistema se han computado un total de 14.590.119 horas de CPU. La distribución del consumo de horas de CPU según el tipo de acceso (BIFI-ZCAM / RES / CeSAr) durante el mismo periodo puede verse en el siguiente gráfico:



Consumo de horas de CPU en Memento/CaesarAugusta por tipo de acceso (Ene-Nov 2013)

A continuación se muestra el histórico de consumo de CPU en el nodo de Caesaraugusta (particiones RES y CeSAr) a lo largo de los distintos periodos cuatrimestrales. Notar que en Marzo de 2013 se produjo la actualización de CAESARAUGUSTA:



Evolución del consumo de horas de CPU en Caesaraugusta (Oct 2007-Oct 2013)

Más información sobre esta infraestructura: <http://bifi.es/memento>.

TERMINUS

Descripción. Terminus es un supercomputador de memoria distribuida de 8 TFLOPS, compuesto por 996 cores de cálculo, 3 TeraBytes de memoria RAM, red Gigabit+Infiniband y 12 TeraBytes de almacenamiento.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Guillermo Losilla Anadón

Investigadores/Técnicos implicados. Arturo Giner Gracia, Patricia Santos Marco

Metodología y técnicas disponibles. Terminus permite ofrecer un servicio clásico de cálculo en clúster HPC de memoria distribuida. El listado actual de software disponible en el sistema (ampliable bajo demanda de los usuarios) se puede consultar en: <http://bifi.es/en/infraestructures/scientific-equipment/terminus/available-software>.

Actualmente, todos los miembros del BIFI tienen derecho de acceso gratuito a Terminus. En el caso de colaboradores de miembros del Instituto, también pueden solicitar acceso sin coste al sistema, siempre que el objeto de la actividad a desarrollar tenga lugar en el marco de su colaboración con el miembro del BIFI, el cual deberá aparecer como co-autor (con afiliación BIFI) en cualquier potencial publicación, que además deberá incluir agradecimientos por el uso de los recursos. El resto de usuarios externos (Unizar, OPIs, Empresas...), pueden acceder a Terminus a través de nuestros servicios de cálculo que cuentan con unas tarifas extremadamente competitivas.

Comentarios de interés. Terminus es una de las plataformas de cálculo más potentes que se encuentran alojadas en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI en el Edificio I+D. Se trata de un clúster de memoria distribuida bajo OpenSUSE GNU/Linux con 3 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 950 procesadores, todos de arquitectura de doble precisión ("em64t" = 64-bit). En total se cuenta con una potencia de cálculo (R_{max}) superior a los 8 TeraFLOPs. Más de 150 usuarios, la mayoría investigadores del BIFI y sus colaboradores, poseen cuenta en Terminus.

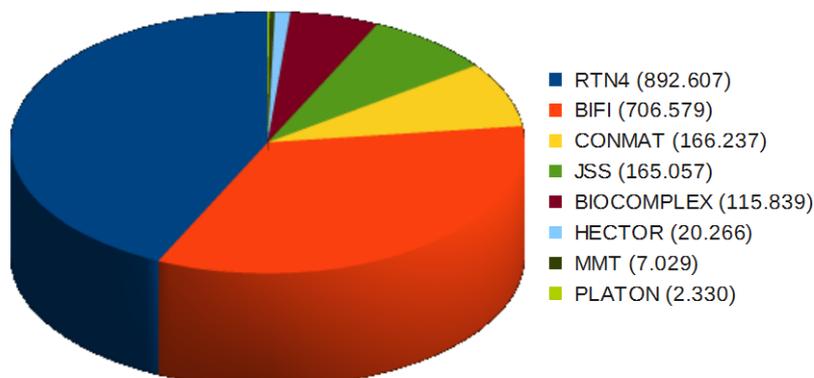
Adicionalmente, Terminus también alberga los recursos acogidos al programa "Hosted Clusters", un servicio del BIFI que permite a los grupos de investigación con financiación para infraestructura pero sin personal dedicado ni unas instalaciones apropiadas, gozar de una solución completa de hosting para sus recursos de supercomputación.

Nombre	Investigador Principal	Departamento-Centro	# Cores	# RAM (GB)
BIFI			190	294
BIOCOMPLEX	Pierpaolo Bruscolini	Física Teórica-UNIZAR	64	104
CONMAT	Luis Martín Moreno	Física de la Materia Condensada-UNIZAR	414	2217
EEAD	Javier Burguete	Estación Experimental Aula Dei-CSIC	16	16
HECTOR	Jesús Santamaría	INA-UNIZAR	24	96
JSS	Javier Sancho	Bioquímica y Biología Molecular y Celular-UNIZAR	72	144
MMT	Milagros Medina	Bioquímica y Biología Molecular y Celular-UNIZAR	68	68
PLATON	Carlos Lafuente	Química Física-UNIZAR	24	48
RTN4	Alfonso Tarancón	Física Teórica-UNIZAR	124	124
TOTAL			996	3111

Distribución actual de los recursos de Terminus en los distintos hosted clusters

De Enero a Noviembre de 2013, en el sistema se han computado un total de 2.075.948 horas de CPU.

La distribución del consumo de horas de CPU por hosted clúster en el mismo periodo se muestra en el siguiente gráfico:



Consumo de horas de CPU en Terminus por hosted clúster (Enero-Noviembre 2013)

Más información sobre esta infraestructura: <http://bifi.es/terminus>.

ARAGRID

Descripción. AraGrid es una infraestructura científico-tecnológica financiada con fondos FEDER que, a través de la tecnología grid, ofrece una plataforma de cálculo de 2000 cores, 200 TB de almacenamiento y 4 TB de memoria RAM.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Rubén Vallés Pérez

Investigadores/Técnicos implicados. Jaime Ibar Yubero

Metodología y técnicas disponibles. AraGrid es una infraestructura de cálculo distribuida y accesible mediante tecnologías grid, que consta de 2000 cores de cálculo, 120TB de almacenamiento y 4 TB de memoria RAM. Información de acceso a la plataforma: <http://www.aragrid.es>.

Cada uno de sus 4 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.

Gracias a su arquitectura distribuida geográficamente, permite la ejecución tanto de trabajos de forma local como distribuida en el resto de los nodos, de una forma transparente al usuario dotando de redundancia ante fallos y alto grado de disponibilidad.

Comentarios de interés. 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.

AraGrid a su vez, se encuentra integrado en la red grid nacional (NGI-Ibergrid) y europea (EGI: "European Grid Initiative").

Durante el último año se han ejecutado más de un millón de trabajos de computación pertenecientes principalmente a las áreas de Fusión, Física Computacional e Ingeniería como puede verse en:

<https://accounting.egi.eu/egi.php?ExecutingSite=ARAGRID-CIENCIAS>

<https://accounting.egi.eu/egi.php?ExecutingSite=BIFI>

<https://accounting.egi.eu/egi.php?ExecutingSite=BIFI-IBERGRID>

RECURSOS CLOUD

Descripción. El BIFI cuenta actualmente con plataformas cloud con un total de unos 600 cores de cálculo.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Rubén Vallés Pérez

Investigadores/Técnicos implicados. Jaime Ibar Yubero

Metodología y técnicas disponibles. Cloud privada de 256 cores accesible a través del middleware OpenStack: <http://www.openstack.org>.

Esta infraestructura cloud es la evolución de la infraestructura PireGrid que da soporte tanto a investigadores, proyectos y PYMES. Estas últimas especialmente requieren unos tipos de aplicaciones que muchas veces son difíciles de encajar en clusters o grids de propósito más general.

Por ello, la flexibilidad que permite el cloud a la hora de desplegar diferentes versiones de sistemas operativos, con bibliotecas específicas y control total sobre el sistema le da un grado extra de funcionalidad. Éste modo descrito de utilización se denomina IaaS (Infraestructura como Servicio), que en muchos casos sólo se ajusta a perfiles avanzados de administradores de sistemas, por lo que también se trabaja en el desarrollo y adaptación de portales web de acceso directo a Software, abstrayendo la capa inferior de infraestructura, pero ofreciendo todas las características necesarias de sistema para cada aplicación y servicio.

Parte de los recursos de AraGrid, definido anteriormente, también están siendo migrados a cloud por su gran versatilidad, aportando un total de unos 400 cores de cómputo y varios Terabytes de almacenamiento.

Dicho almacenamiento puede ser usado mediante dos paradigmas diferenciados:

- Almacenamiento de bloques: Con este almacenamiento se permite al usuario tener un disco duro virtual que puede utilizar con cualquiera de sus máquinas virtuales de modo que sus datos de acceso más usual sean persistentes.
- Almacenamiento de objetos: Este esquema de almacenamiento a través del componente SWIFT de OpenStack es el equivalente al que Amazon implementa con su S3 y que permite crear contenedores y guardar datos de acceso menos usual o copias de seguridad. Estos datos son más lentos en su acceso pero por contra un usuario dispone de más capacidad que el almacenamiento por bloques que es más rápido pero también más caro.

Comentarios de interés. Estos recursos se utilizan en proyectos europeos participados por el Instituto (SCI-BUS <https://www.sci-bus.eu/> y CloudSME <http://cloudsme.eu/>) y además se ofrecen a empresas a través de proyectos de innovación.

Actualmente, la parte computacional del cloud está sirviendo como base de pruebas para empresas dentro del proyecto SCI-BUS, que la utilizan como testbed de integración de OpenStack en sus plataformas de gestión de cloud heterogéneos. Del mismo modo, se ha realizado un desarrollo software sobre el portal WS-PGRADE, para la ejecución de simulaciones del tipo MapReduce utilizando la implementación Hadoop, muy utilizada actualmente para la gestión de grandes cantidades de datos de forma no relacional.

Además dicha infraestructura sirve como banco de pruebas a los desarrolladores de software, permitiendo acelerar el uso de sistemas ya preconfigurados para sus implementaciones de software.

Durante 2013 uno de los racks que componen AraGrid implementa la versión Grizzly de OpenStack y sirve como base de producción al proyecto CloudSME (Cloud-based Simulation platform for Manufacturing and Engineering), así como

a otros proyectos de análisis de datos y redes sociales de internet en los que el BIFI participa, permitiendo el trabajo simultáneo de multitud de “robots araña” recopiladores de información.

Como dato final, se ha configurado y es completamente funcional la parte de almacenamiento de objetos mediante el componente SWIFT, que es compatible con el almacenamiento S3 de Amazon con lo que su compatibilidad con dicho cloud comercial es prácticamente total.

IBERCIVIS

Descripción. Ibercivis es un proyecto de computación ciudadana cuya infraestructura se encuentra distribuida en distintos centros de investigación en España, y Portugal. Actualmente, Ibercivis cuenta con más de 30.000 usuarios registrados que diariamente aportan el equivalente a un supercomputador equipado con 10.000 cores de cálculo.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Fermín Serrano

Investigadores/Técnicos implicados. Francisco Sanz, Carlos Val, Eduardo Lostal, Mari Carmen Ibáñez

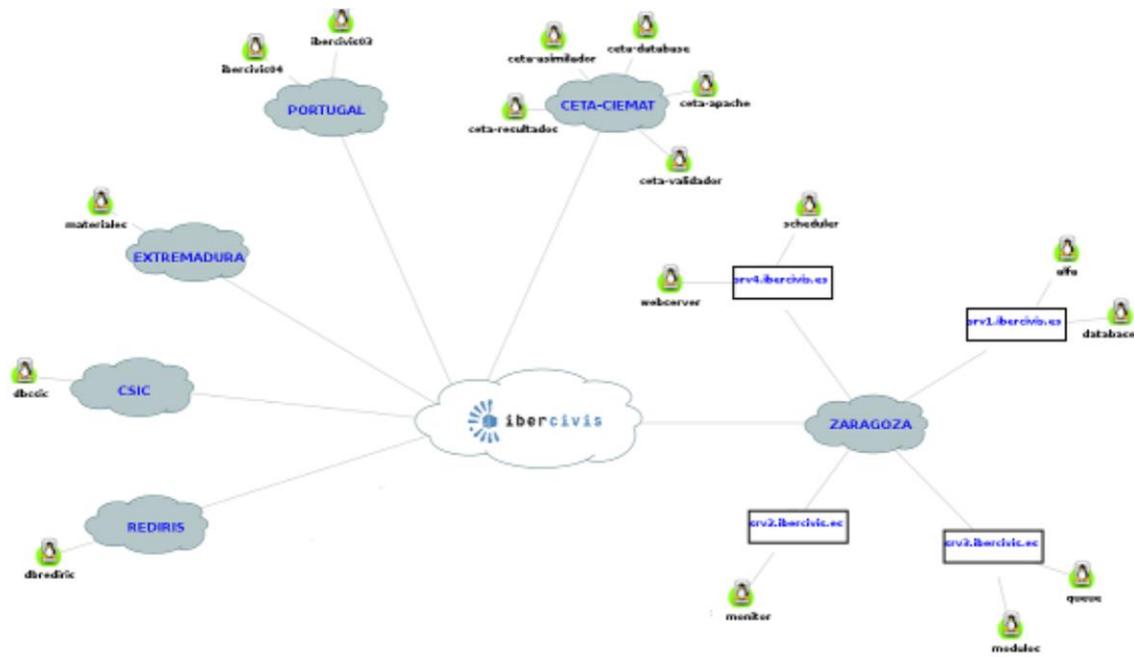
Metodología y técnicas disponibles. Ibercivis es una plataforma de computación voluntaria dirigida a investigadores de diferentes áreas cuyas necesidades de cálculo son elevadas.

Las aplicaciones apropiadas para ser ejecutadas en Ibercivis deben reunir las siguientes características:

- Interés científico-tecnológico
- Runs segmentables en periodos de hasta 4 horas cada uno
- Uso de RAM inferior a 1 Gbytes
- Paralelismo nulo
- Input/output bajo para cada job (del orden 1 Mbyte máximo) para no saturar el ancho de banda comercial.
- No necesitar licencias
- Necesidad de ejecutar del orden de millones de jobs.

Desde Ibercivis analizaremos los proyectos que se propongan para su ejecución. Aquéllos que cumplan los requisitos, serán aprobados y se colaborará con el grupo de investigadores para realizar los cambios necesarios en el código para que pueda ser ejecutado eficientemente en la arquitectura de Ibercivis. Más info: <http://www.ibercivis.es>

Comentarios de interés. Infraestructura de Ibercivis:



JANUS

Descripción. Janus es un supercomputador de propósito específico u ordenador dedicado. 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).

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.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. David Iñiguez Dieste

Investigadores/Técnicos implicados. Jorge Monforte, Raquel Álvarez, José Miguel Gil, Sergio Pérez Gaviro

Metodología y técnicas disponibles. Janus es un ordenador dedicado, construido y optimizado para obtener muy altos rendimientos en simulaciones de Monte Carlo de Vidrios de Espín. 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 ha permitido durante este último año pasar a simular retículos de tamaños tan grandes como 256. Más info: <http://bifi.es/janus>

Comentarios de interés. Durante todos estos años Janus se ha dedicado al estudio y simulación de los vidrios de espín. Podemos decir que la producción científica de Janus ha sido muy fructífera. La gran cantidad de artículos publicados en revistas de prestigio internacional avalan a este ordenador dedicado. Además, hasta la fecha no ha habido ningún superordenador o clúster

de ordenadores capaz de alcanzar el rendimiento de Janus en simulaciones de vidrios de espín.

JANUS II

Descripción. Janus II es un nuevo supercomputador de propósito específico u ordenador dedicado. Al igual que su predecesor, Janus, está compuesto por 16 placas que contienen 16 procesadores reprogramables FPGA que actuarán como procesadores de simulación (Simulation Processors SP) y una FPGA más (Input-Output Processor, IOP) que hará las labores de control y comunicación tanto entre las SP's como con el exterior. Además, cada placa vendrá controlada por una COM (Computer-On-Module) integrado en la propia tarjeta.

Janus II presenta diversas mejoras y mayores prestaciones respecto a su predecesor, Janus, como: mejores procesadores FPGA de la familia Virtex7; mayor velocidad en las transacciones y menor latencia, ya que la IOP y la COM están integrados en la misma tarjeta; mayor memoria, lo que permitirá agrandar el abanico de posibles aplicaciones a implementar en la máquina; un número más elevado de celdas programables, que dará una potencia mayor de cálculo; y una topología mucho más flexible, lo que nos permitirá interconectar todas las SP's de toda la máquina entera para simular sistemas mucho mayores de los abordados hasta ahora.



Por el momento disponemos de un host externo para gestionar Janus II, y de varios ordenadores para almacenar y analizar los datos que se extraigan, compartiendo este almacenamiento con los host de Janus.

Investigador/Técnico responsable/coordinador. David Iñiguez Dieste

Investigadores/Técnicos implicados. Jorge Monforte, Raquel Álvarez, José Miguel Gil, Sergio Pérez Gaviro

Metodología y técnicas disponibles. Janus II es un ordenador dedicado, construido y optimizado para obtener muy altos rendimientos en simulaciones de Monte Carlo de Vidrios de Espín. El superordenador presenta una alta flexibilidad lo que permitirá 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 diferentes variables. Al adaptar su arquitectura al problema concreto permitirá alcanzar velocidades de simulación entre 10 y 100 veces las alcanzadas por Janus, lo que supondrá llegar a velocidades de entre 10000 y 10.000.000 procesadores convencionales del hoy en día. Esto supondrá un salto cualitativo y cuantitativo en los resultados que se obtendrán en el futuro

En estos momentos nos encontramos en la fase de verificación de la máquina y de implementación del software necesario para hacerla funcionar en un ambiente cómodo para el usuario. Dada la experiencia previa con Janus de nuestro grupo, estimamos que en los próximos tres meses tengamos este nuevo superordenador funcionando a pleno rendimiento. Más info: <http://bifi.es/janus2>.

Comentarios de interés. La construcción de esta segunda generación de Janus ha sido posible gracias a Fondos FEDER para infraestructuras. Esta nueva máquina tiene como objetivo fundamental ampliar el rango de aplicaciones que se pueden ejecutar en Janus, 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. Asimismo las velocidades de simulación se verán incrementadas en dos órdenes de magnitud respecto a su predecesor Janus

LABORATORIO DE VISUALIZACIÓN

Descripción. El laboratorio de visualización se encuentra en la Sala Multimedia del instituto, 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 más 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.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Gonzalo Ruiz

Investigadores/Técnicos implicados. Xavier Mellado

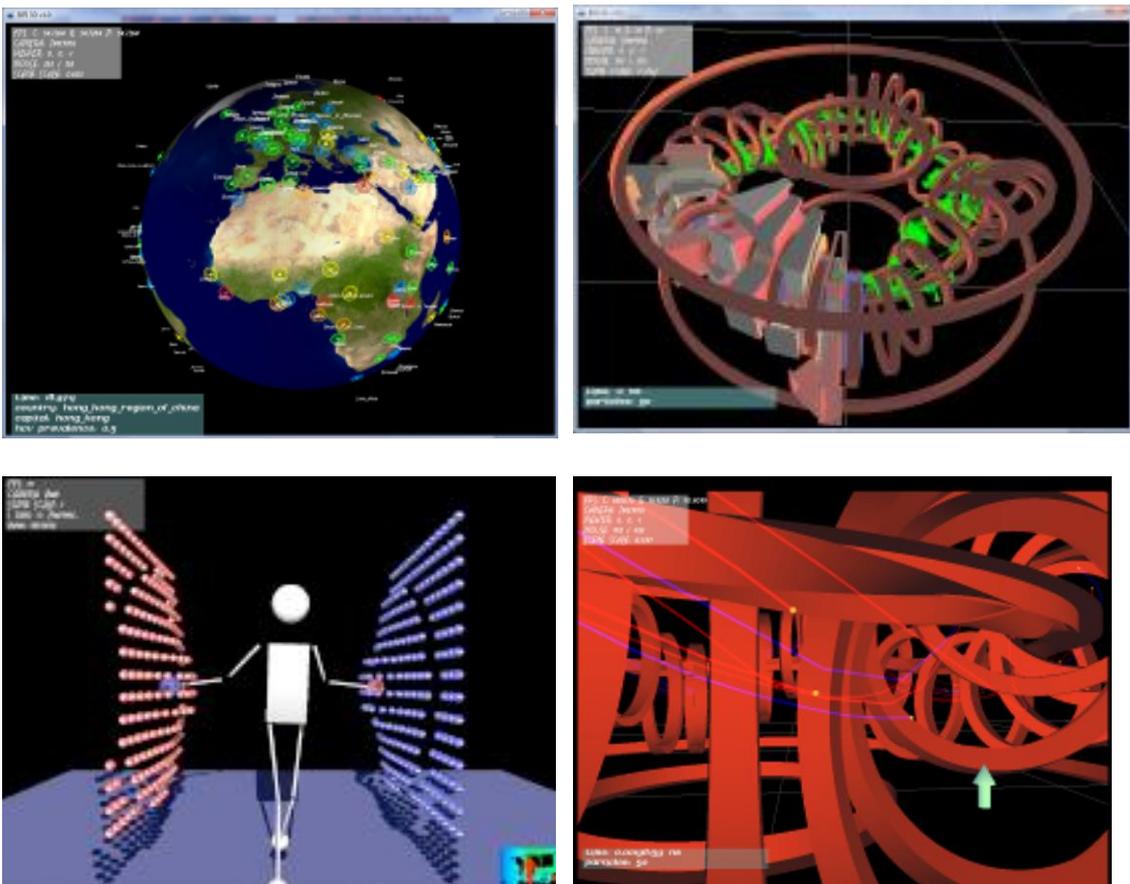
Metodología y técnicas disponibles. El BIFI ha desarrollado su propio entorno de desarrollo software que permite la creación de aplicaciones gráficas de manera sencilla. Durante finales del 2010 se crearon dos que integraban conceptos físicos básicos (una de gravitación universal, y otra de campo eléctrico 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.
- 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.
- Aplicación del Sistema Solar: consiste en una recreación en 3D estéreo del sistema solar completo junto con su comportamiento, con un modelo de física lo más fiel a la realidad que nos permiten las tecnologías que usamos. Además, este modelo puede ser modificado en tiempo real para estudiar cómo afectarían variaciones en los elementos del sistema (como la masa) a su comportamiento.
- Aplicación de campo eléctrico: representa diferentes escenarios en los que interactúan protones y electrones con diferentes elementos como puede ser un conductor por el que circula una corriente eléctrica. Este sistema también es interactivo y permite modificar los escenarios para su mejor estudio a través de modelos que se adecúan al comportamiento real.
- 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
 - Aplicación para el estudio del sistema solar (fases lunares, estaciones, eclipses y planetas) a través de distintos mini-juegos manejados a través de gestos que son reconocidos por Kinect. Este proyecto se ha desarrollado en el marco de colaboración con el Colegio Juan de Lanuza y su cátedra con la Universidad de Zaragoza.

LABORATORIO DE REALIDAD AUMENTADA

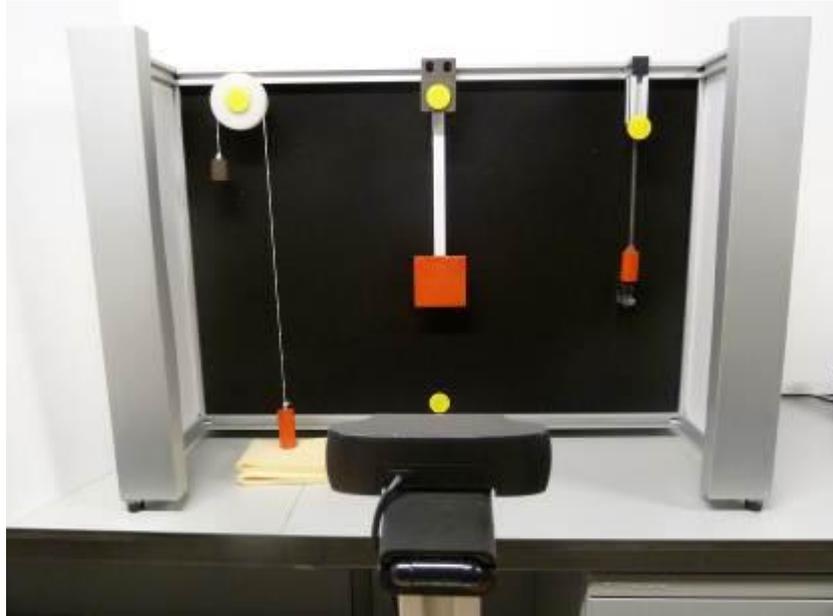
Descripción. Realidad Aumentada (RA) es el término usado para definir la aplicación de elementos virtuales superpuestos en imágenes reales obtenidas por una cámara. La diferencia sobre la realidad virtual, es que no se sustituye el mundo real, sino que se le añade información de interés al mismo.

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.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Gonzalo Ruiz

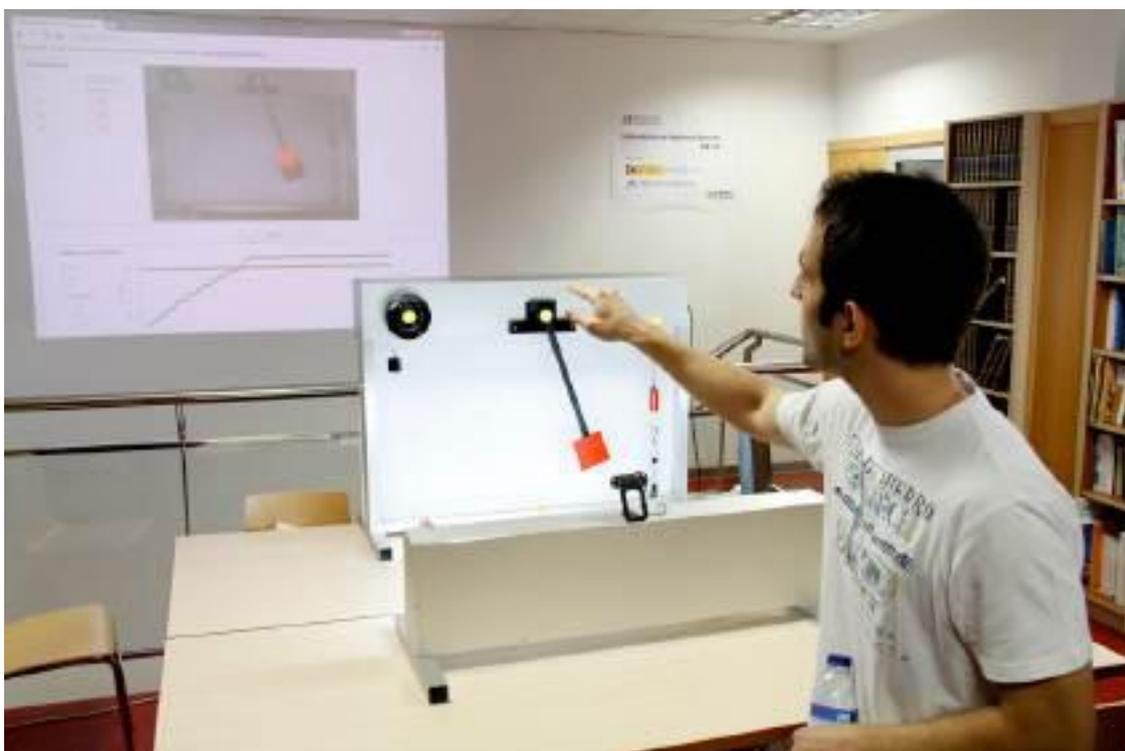
Investigadores/Técnicos implicados. Alfredo Ferrer



Metodología y técnicas disponibles. El laboratorio está compuesto por dos elementos, el dispositivo físico, y el servidor con nuestra aplicación, que permite el acceso remoto al mismo.

- En el dispositivo físico, que consiste en una estructura de aluminio, se reproducen los tres experimentos físicos de caída libre, péndulo, y muelle con carga. Los elementos están robotizados mediante una serie de motores y placas de manera que pueden ser controlados electrónicamente a través del servidor, al que están conectados a través de USB. Además, se dispone de una cámara web de alta definición con iluminación que captura lo que está pasando en el sistema y se lo transmite al servidor para ser analizado. La iluminación se enciende sólo cuando el sistema está siendo usado para ahorrar energía.
- Nuestra aplicación se encuentra instalada en un servidor suficientemente potente para soportar la carga de usuarios que accedan al sistema. La aplicación consiste en una plataforma web accesible para los alumnos desde cualquier parte del mundo a través de un navegador, que permite el control de la infraestructura para el estudio de los problemas previamente mencionados. Las imágenes que la cámara web captura son analizadas mediante una técnica llamada colorimetría que, gracias a que los elementos están pintados de ciertos colores y a la aplicación de diversos filtros para mejorar la precisión, permiten recoger la posición de los mismos en todo momento, con la que posteriormente se pueden calcular otros parámetros como son velocidad, aceleración, energías, etc. Cuando el alumno entre en el sistema, se le pide realizar una serie prácticas en la que tiene que calcular ciertos parámetros basándose en la teoría que ve en clase. Estos cálculos se utilizan para dibujar elementos virtuales que se comportan conforme a lo que el alumno ha calculado sobre las imágenes que capta la cámara de los elementos reales en movimiento, de manera que pueden comprobar la corrección de las fórmulas y de sus cálculos. El alumno también puede estudiar cómo afectan dichos parámetros al comportamiento de los elementos gracias a unas gráficas comparativas dibujadas en tiempo real.

Comentarios de interés. Como se trata de un sistema real, sólo puede haber 3 alumnos utilizándolo simultáneamente, uno por cada experimento, con intervalos de 10 minutos para que hagan las pruebas que necesiten, y cuando su turno termine, pasará a manejarlo el siguiente que haya accedido a la plataforma en orden cronológico. Por ello, hemos desarrollado también un sistema de reservas que permite utilizar la plataforma más tiempo indicándolo con antelación, pero siempre con un máximo 4 horas a la semana y de 1 hora consecutiva. Además, disponemos de 3 réplicas, dos de ellas están instaladas en el BIFI, y la otra en el colegio Juan de Lanuza de Zaragoza, permitiendo que el sistema sea utilizado por 9 alumnos al mismo tiempo. La dirección de acceso al laboratorio es <http://rrlab.bifi.es>. A lo largo de 2013 se han abierto nuevas vías de colaboración con distintas empresas y organizaciones con el fin de trabajar en torno a este laboratorio.



2.7.2. Infraestructuras Bioquímica y Biofísica

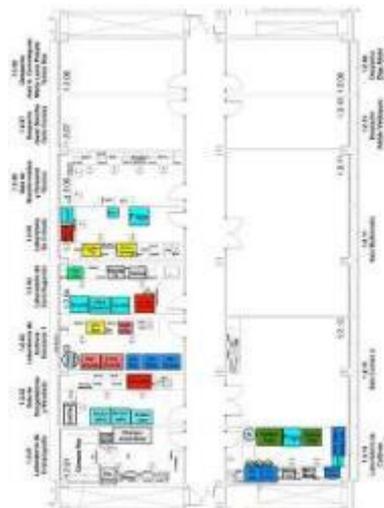
Los laboratorios en el Edificio I+D se distribuyen según técnicas y equipos. De esta forma se pretende que todos los investigadores puedan hacer uso cómodamente de las instalaciones y que la distribución del espacio sea más eficaz.

La sección de Biofísica, Bioquímica y Biología molecular y Celular del BIFI está organizada en laboratorios dedicados a aplicaciones específicas, distribuidos en la planta baja del bloque 2 y en la planta segunda del bloque 1.

En la planta baja se localizan los siguientes laboratorios:

LABORATORIO GENERAL 1

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.



LABORATORIA DE ESPECTROSCOPIA

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 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.

LABORATORIO DE CALORIMETRÍA Y SPR

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.**

CÁMARAS FRÍAS

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.



LABORATORIO DE BIOLOGÍA MOLECULAR



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 procariotas 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.**

LABORATORIO GENERAL 2

En el Laboratorio General 2 (2.0.06) se localizan:

- **Agitador orbital.**
- **pHmetro.**
- **Horno microondas.**
- **Centrífuga de sobremesa refrigerada.**
- **Estufa termostaticada.**
- **Bloque térmico.**
- **Incubador de rodillos.**
- **Cabina de seguridad química.**



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

Laboratorio de Cromatografía y Microscopía

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**

LABORATORIO DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X



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:

LABORATORIO DE CRISTALOGRAFÍA

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

- **Cámara termostatazada** 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

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.



LABORATORIO DE CULTIVOS CELULARES 1

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 se localizan:

- **Cuatro incubadores orbitales termostatazados.**
- **Incubador orbital de sobremesa.**
- **Dos estufas de incubación termostatazadas.**
- **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.



sala

LABORATORIO DE CENTRIFUGACIÓN

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.



LABORATORIO DE CRIBADO

El Laboratorio de Cribado (1.2.04) incluye:

- **PCR REAL TIME**, con la que se pueden llevar a cabo experimentos de amplificación de DNA/RNA en tiempo real mediante fluorescencia, cribado de alto rendimiento, etc.
- **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**

SALA DE BIOINFORMÁTICA Y PERSONAL TÉCNICO

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.

LABORATORIO DE CULTIVOS CELULARES 2

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.

Investigador/Técnico responsable/coordinador. Olga Abián y Ramón Hurtado.

Investigadores/Técnicos implicados. Sonia Vega y Miriam Alías

Metodología y técnicas disponibles.

Las técnicas y metodologías disponibles específicas de carácter bioquímico y bifísico se enumeran a continuación:

- **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.

2.8. Oferta tecnológica del BIFI.

Además de las capacidades del BIFI descritas tanto generales, como en I+D+i como en infraestructuras, este instituto dispone de una oferta tecnológica de servicios que puede ser de gran importancia para aportar a entidades, tanto públicas como privadas, unos servicios que necesitan infraestructuras potentes y un personal cualificado específicamente para cada uno de ellos y que de otra forma podría resultar inviable llevarlas a cabo.

A continuación se enumera la oferta tecnológica que ofrece el BIFI que pueden considerarse de elevado interés para distintas entidades para sus proyectos de investigación u otras necesidades. Se incluyen también el coste público del servicio.

2.8.1. Laboratorios de Bioquímica y Biología Molecular y Celular y de Biofísica: equipos e infraestructuras

Equipo	Coste de Servicio/día
SPR Biacore T200 (GE)	250 €
Calorímetro VP-ITC (MicroCal, GE)	100 €
Calorímetro VP-DSC (MicroCal, GE)	100 €
Calorímetro AutoITC200 (MicroCal, GE)	250 €
Dispersión de Luz NanoStar DynaPro (Wyatt)	100 €
Difractómetro Rayos-X (Bruker)	250 €
Granja y Robots Cristalización (Janus, Formulatrix)	100 €
HPLC (Waters)	100 €
FPLC ÄKTA (GE)	100 €
Espectropolarímetro/Fluorímetro Chirascan (Applied Photophysics)	150 €
Espectrofotómetro Cary 100 (Varian) / Nanovue (GE)	100 €
Fluorímetro Cary Eclipse (Varian)	100 €
Microscopio Fluorescencia (Leica)	200 €
Centrífugas preparativas Avanti J-E & J-26 XP (Beckman)	100 €
Ultracentrífuga Optima L-100 XP (Beckman)	150 €
Clonación, mutagénesis, expresión y purificación de proteínas	150 €
HTS Fluorímetro lector de placas FluoDia T70 (PTI)	100 €
HTS Fluorímetro/Espectrofotómetro/Luminómetro Synergy HT (BioTek)	100 €
HTS Real-Time qPCR Mx3005P (Agilent)	100 €

2.8.2. Infraestructuras de Computación: servicios

Equipo	Coste de Servicio
Servicios High Performance Computing	
Servicio de cálculo en clúster HPC de memoria	0.03€/horaCPU

distribuida/compartida*	
Servicio de alojamiento de hardware para supercomputación**	86.40€/core y año
Servicio housing servidores (no incluye mantenimiento ni integración en clúster HPC)	179.63€/servidor/año
Servicios Transferencia Tecnológica	
Servicio de desarrollo web	25€/hora
Servicio de desarrollo de aplicaciones móviles	30€/hora

*El cliente trae sus programas, libre o con su licencia, se realiza el alojamiento en el CPU y en remoto el cliente puede utilizar el programa. Se factura por tiempo de uso de CPU

- Si el software es libre o tiene licencia, el personal del IUI BIFI lo instala y el cliente puede utilizarlo.
- Si quiere utilizar un software de los que tienen licencia investigadores del BIFI, habría que revisar la licencia y ver si el cliente puede utilizarlo o debe comprar su propia licencia.
- En caso de enmarcar estos ensayos en un proyecto de investigación, no habría problema porque el uso sería por los investigadores titulares de la licencia

**El cliente trae sus servidores y los aloja en el clúster, aunque son suyos y se contrata el mantenimiento de los mismos. Se factura por año y core.

Apartado 3. Estructura de financiación: captación de recursos y destino de los mismos

La financiación del Instituto BIFI incluye distintas vías de obtención de recursos económicos.

Por una parte, existe una partida de ingreso directa del Gobierno de Aragón y que está destinada directamente al instituto como apoyo a su actividad. La Universidad de Zaragoza aporta también una importante fuente de financiación y que incluye principalmente la financiación de nóminas de una parte de los miembros del BIFI que son Personal Docente Investigador (PDI) o Personal Investigador.

El Gobierno de Aragón también aporta otras fuentes de financiación al BIFI que son de varios tipos: convenios, grupos de investigación reconocidos por el Gobierno de Aragón, proyectos financiados por la Universidad de Zaragoza. También se ha tenido financiación procedente de la Diputación Provincial de Zaragoza en el desarrollo de un proyecto durante el 2013.

Otras fuentes de financiación importantes para el desarrollo de la actividad investigadora del BIFI son sin duda las ayudas recibidas a través de concurrencia competitiva a nivel nacional y europeo para el desarrollo de proyectos individuales y en colaboración.

Durante el año 2013 en el BIFI se han desarrollado con éxito como se ha podido comprobar en el apartado 2 un buen número de proyectos con implicación autonómica, nacional e internacional.

También en 2013 se han incrementado las acciones de transferencia de conocimiento hacia el sector empresarial, a través del desarrollo de proyectos en colaboración entre grupos de investigación con empresas, tendencia que va a dirigir el esquema de investigación global a nivel autonómico, nacional y europeo en los próximos 8 años.

El esquema siguiente recoge la estructura de financiación del BIFI en el año 2013, donde puede observarse los volúmenes económicos aportados por las distintas vías de financiación y los % respecto al total de recursos de financiación del 2013:

TIPO DE PROYECTOS	Recursos en 2013 (€)	%
NÓMINAS PERSONAL UZ	1.672.995	49,13
APOYO A IUI GOBIERNO DE ARAGÓN	128.396	3,77
AUTONÓMICOS/LOCALES	107.111	3,15
OTROS	6.184	0,18
NACIONALES	622.260	18,27
EUROPEOS	572.502	16,81
EMPRESAS	295.720	8,68
TOTAL financiación 2013	3.405.168	

Para la elaboración de esta tabla se han tenido en cuenta los datos de proyectos OTRI con referencia /2013 y se incluye el importe firmado en el contrato y si no el ingresado por facturación emitida. Los datos que se incluyen son con IVA y con los costes indirectos incluidos.

En cuanto a los proyectos obtenidos por concurrencia competitiva tanto a nivel nacional como autonómico se incluyen los iniciados en el ejercicio 2013, salvo en convocatorias del vicerrectorado de la UZ que se ha considerado la convocatoria del año 2013, independientemente que se haya comenzado en 2013 o 2014. En los importes se han incluido los costes indirectos.

Los proyectos europeos se han incluido los comenzados en 2013, con código I-2013 e igualmente se incluyen los costes indirectos.

Citar que en estos datos no se incluyen la financiación de proyectos que se encuentran en vigor, aunque fueron aprobados en años anteriores. Principalmente la mayor diferencia que encontraríamos al tomar un criterio u otro es la aportación proveniente de proyectos nacionales obtenidos a través de convocatorias de concurrencia competitiva. Durante este año 2013 estaban en vigor varios proyectos del Plan nacional de convocatorias anteriores del MINECO. También siguen durante este año 2013 otros proyectos europeos que comenzaron en años anteriores y que igual han contribuido a la financiación del BIFI durante este años 2013.

3.1. Financiación basal proporcionada por el Gobierno de Aragón de apoyo al BIFI

La financiación de apoyo del Gobierno de Aragón que proviene de la ayuda que concede a los institutos anualmente supone para el BIFI un 3,77% de la financiación total.

APOYO GOBIERNO DE ARAGÓN AL BIFI	Importe ayuda 2013 (€)
Instituto BIFI	128.396

3.2. Financiación basal proporcionada por la Universidad de Zaragoza

La Universidad de Zaragoza aporta indirectamente a la financiación del BIFI las nóminas de las personas que forman parte de la plantilla del propio centro. Se estima que esta financiación es del 49,13% de la global del instituto.

AYUDA UNIZAR	Importe ayuda 2013 (€)
NÓMINAS PERSONAL BIFI DE LA UZ*	1.672.995

*Estimación con salarios medios,

3.3. Financiación obtenida en convocatorias de carácter público y concurrencia competitiva: europeos, nacionales y autonómicos

Ya se ha comentado en la introducción de este apartado que la principal fuente de financiación sin tener en cuenta la directa de la UZ, de la investigación en el Instituto BIFI procede de las ayudas obtenidas en convocatorias, tanto públicas como privadas y en la mayoría de los casos de concurrencia competitiva. Se detallan a continuación la financiación según la tipología de los proyectos.

3.3.1. Proyectos de carácter europeo

Los proyectos financiados a través de convocatorias europeas que han comenzado durante el 2013 y el importe de la ayuda ha sido el que aparece en la tabla siguiente:

FINANCIACIÓN EUROPEA	
<i>TOTAL Importe ayuda 2013 (€)</i>	572.501,97
<i>PROYECTOS EUROPEOS concedidos en 2013</i>	

El importe de la ayuda de estos proyectos asciende a 572.501,97 euros, que supone el 16,81 % de la financiación total del instituto.

NOTA: Sin embargo, si tenemos en cuenta los proyectos en vigor durante este 2013 y también los nuevos de este año, pero considerando la parte proporcional a su duración otorgando un reparto equitativo por anualidad, la tabla quedaría como sigue:

PROYECTOS EUROPEOS	Importe ayuda (€) 2013
<i>SCI-BUS</i>	80.410
<i>SOCIENTIZE</i>	87.000
<i>GLOBAL EXCURSION</i>	46.280
<i>CRONOS</i>	79.027
<i>PLEXMATH</i>	88.044
<i>MULTIPLEX</i>	77.327
<i>SCC COMPUTING</i>	47.824
<i>EGI-InSPIRE</i>	67.092
<i>CLOUDSME</i>	94.400
TOTAL PROYECTOS EUROPEOS	667.404

3.3.2. Proyectos de convocatorias nacionales

Los proyectos financiados a través de convocatorias nacionales durante el 2013 suponen un 18,27% de la financiación total del BIFI.

La financiación es la que aparece en la tabla siguiente:

FINANCIACIÓN NACIONAL	
<i>TOTAL Importe ayuda 2013 (€)</i> <i>PROYECTOS NACIONALES concedidos en 2013</i>	622.260

NOTA: Sin embargo, si tenemos en cuenta los proyectos en vigor durante este 2013 y también los nuevos de este año, pero considerando la parte proporcional a su duración otorgando un reparto equitativo por anualidad, la tabla quedaría como sigue:

PROYECTOS NACIONALES	Importe ayuda (€) 2013
<i>Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica</i>	110.000
<i>Red Temática de Biotecnología de materiales lignocelulósicos: retos enzimáticos, químicos y moleculares para su aplicación industrial, energética y medioambiental</i>	25.000
<i>Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes</i>	43.000
<i>Estructuras matemáticas en sistemas cuánticos y sus aplicaciones</i>	1.500
<i>Métodos Geométricos en integrabilidad y teoría de control</i>	22.000
<i>O-fucosilación de proteínas: buscando inhibidores para la leucemia linfática celular aguda y para la esclerosis múltiple. BFU2010-19504 (subprograma BMC)</i>	60.000
<i>Estabilidad conformacional de proteínas: principios generales, análisis estabilidad función del r-LDL y búsqueda de nuevas chaperonas farmacológicas.</i>	157.300
<i>BIFI2012 - Protein Targets: Discovery of Bioactive Compound</i>	7.000
<i>Bioavailability of amphiphilic ligands - Drugs and metabolites</i>	6.000
<i>Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos</i>	45.000
<i>Mtm2010-15972. Modelos estocásticos y aplicaciones</i>	10.833
<i>Mtm2011-15044-e. The Pyrenees international workshop and summer school on statistics, probability and operations research, spo 2011</i>	2.100
<i>Diseño de catalizadores organometálicos para la activación y funcionalización de amoníaco: Estudios computacionales y experimentales.</i>	23.000
<i>Navegación Cuántica en Redes de Información</i>	16.700
<i>Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal</i>	156.695
<i>Genómica comparada, biogeografía y evolución floral y adaptativa de gramíneas modelo. CGL2012-39953-C02-01</i>	55.000
<i>FPA2013-35453 Física del modelo estándar y sus posibles extensiones</i>	110.500
<i>Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte FIS2012-35719-C02-02 Proyecto coordinado por con las Universidades Complutense y Zaragoza</i>	46.500
<i>Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAR)</i>	666.667

<i>Acuerdo Ciemat y UZ para el mantenimiento de la organización virtual de fusión. Computación en Grid para Fusión</i>	20.425
<i>AragrI+D: Creación de una Grid en Aragón (FONDOS FEDER)</i>	327.083
TOTAL PROYECTOS NACIONALES	1.912.303

3.3.3. Proyectos de convocatorias autonómicas

Los proyectos financiados a través de convocatorias autonómicas suponen un 3,15% de la financiación del BIFI durante el 2013.

La financiación para este año proveniente de ayudas autonómicas ha sido el que aparece en la tabla siguiente:

FINANCIACIÓN AUTONÓMICA	
<i>TOTAL Importe ayuda 2013 (€)</i>	107.111
<i>PROYECTOS AUTONÓMICOS concedidos en 2013</i>	

NOTA: En este caso la financiación proveniente de proyectos autonómicos si englobamos la financiación de la UZ directamente, incluimos la subvención de los Grupos reconocidos por el Gobierno de Aragón y los obtenidos en concurrencia competitiva y considerando la parte proporcional a la duración (considerando que todos los años se ingresa el mismo importe) la financiación autonómica sería el doble de la que aparece en la tabla. Ha llegado a ser de 291.045 euros.

3.3.4. Financiación obtenida de empresas

La financiación por empresas durante el 2013 ha sido el que aparece en la tabla siguiente y supone un 8,68% de la financiación obtenida para el 2013 por el BIFI:

FINANCIACIÓN EMPRESAS	
<i>TOTAL Importe ayuda 2013 (€)</i>	295.720
<i>PROYECTOS EMPRESAS concedidos en 2013</i>	

NOTA: Algunos de los proyectos OTRI no se incluyen en el apartado 4 por cuestiones de confidencialidad, aunque sí se contemplan en el total que aparece en la tabla anterior de financiación del BIFI obtenida de empresas

3.4. Estructura de gastos durante el año 2013

Durante el año 2013 el instituto BIFI ha llevado una gran actividad investigadora y de difusión que ha podido ser llevada a cabo gracias a la financiación descrita en los anteriores puntos de este apartado.

El gasto principal del instituto es el personal que supone aproximadamente un 40% del gasto total. El resto de los gastos se reparten según la siguiente tabla:

GASTOS 2013	
Asig. Pers Confe. NO UZ	2.200,00
Equipo Laboratorio	9.167,17
Fungible	173.529,07
Gastos generales	733.286,89
Informática	421.512,44
Libros	1.450,06
Mobiliario	5.791,06
Personal	1.013.980,89
Viajes	183.315,38
Total gastos 2013	2.544.232,96

Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

Un desafío para el BIFI es ser motor de arranque para la colaboración con otros agentes, como empresas o centros tecnológicos, que aunque el comienzo de estas colaboraciones es complicado, pero deben tender a instaurarse de una forma estable y durante el 2013 se han realizado acciones encaminadas

En BIFI su actividad científica se puede incluir en 2 desafíos que consideramos prioritarios que redundan en la participación y beneficio de la sociedad en cuanto al bienestar del ciudadano. Por una parte, Ciencia de Datos y Ciencia Ciudadana y, por otra, Ciencias de la Vida y Biotecnología, dirigidas a la identificación y desarrollo de nuevas alternativas para la mejora de la salud humana, sanidad ambiental y seguridad alimentaria.

4.1. Proyectos de investigación

En este apartado se van a enumerar todos los proyectos de investigación desarrollados por el instituto BIFI durante el año 2013, incluidos los concedidos anteriormente, pero que durante este año han estado en vigor.

4.1.1. Proyectos de investigación de financiación pública y de concurrencia competitiva

Proyectos Financiados por entidades europeas en 2013

Durante el año 2013, 9 proyectos de investigación financiados por entidades europeas han sido concedidos o han estado en vigor durante el año 2013 y han servido para financiar parte de las actividades de investigación del instituto. Alguno de los miembros del BIFI también han obtenido ayudas europeas para proyectos, pero los fondos no han revertido directamente sobre la actividad del instituto.

Los proyectos se incluyen en varios programas de ayudas europeos para el desarrollo de proyectos de investigación. Son proyectos en colaboración prueba fehaciente del buen hacer del instituto BIFI en cuanto a la forma de trabajo en dichos proyectos. Esta financiación europea ha supuesto en 2013 casi un 13,7% de la total del Instituto.

Título: Societize as Infraestructure for E-science via Technology, Innovation and Creativity Societize

Entidad financiadora: VII Programa Marco UE

Duración: 2012-2014

Importe total del proyecto: 709.999,86 €. *Importe del proyecto al BIFI:*173.010€

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Scientific Gateway Based User SCIBUS
Entidad financiadora: VII Programa Marco UE
Duración: 2011-2014
Importe del proyecto al BIFI: 241.230 €
Investigador principal: Alfonso Tarancón
Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Extended Curriculum for Science Infrastructure Online GLOBAL EXCURSION
Entidad financiadora: VII Programa Marco UE
Duración: 2011-2013
Importe total del proyecto: 800.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 110.160€
Investigador principal: Alfonso Tarancón
Líder o socio del proyecto: Líder

Título: EGI-InSPIRE
Entidad financiadora: VII Programa Marco UE
Duración: 2010-2014
Importe del proyecto al BIFI: 134.184 €
Investigador principal: Alfonso Tarancón
Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Strategic Collaboration with China on super-computing based on Tianhe-1A. SCC-Computing.
Entidad financiadora: Comisión Europea (CSA FP7)
Duración: 2 años (1 Enero 2012 – 31 Diciembre 2013)
Importe total del proyecto: 410.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 47.824 €
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita
Tipo de participación en el proyecto: BIFI-UNIZAR es socio del consorcio

Título: Mathematical Framework for Multiplex Networks (PLEXMATH)
Entidad financiadora: Unión Europea
Duración: 11/2012 – 10/2015
Importe total del proyecto: 1.500.000€. *Importe del proyecto al BIFI:* 350.000€
Investigador principal: Yamir Moreno
Líder o socio del proyecto: socio

Título: Foundational Research on Multilevel Complex Networks and Systems (MULTIPLEX)
Entidad financiadora: Unión Europea
Duración: 11/2012-10/2016
Importe total del proyecto: 5.100.000€. *Importe del proyecto al BIFI:* 300.000€
Investigador principal: Yamir Moreno
Líder o socio del proyecto: socio

Título: Time Dynamics and Control of in nanostructures for magnetic recording and energy applications. CRONOS.
Entidad financiadora: EU - FP7
Duración: 2012-2015
Importe total del proyecto: 3.380.058€. *Importe del proyecto al BIFI:* 232.600€
Investigador principal: Alberto Castro
Líder o socio del proyecto: Socio

Título: Cloud-based Simulation platform for Manufacturing and Engineering
Entidad financiadora: Comisión Europea. VII FP
Duración: 2013-2015
Importe total 4.499.668 €. Importe al BIFI 236.600€
Investigador principal: Alfonso Tarancón
Tipo de participación en el proyecto: Socio

Título: Brachypodium adaptation to drought stress across different geographic and ecological clines

Entidad financiadora: European Plant Phenotyping Network - EPPN

Duración: 2013-2014

Importe total del proyecto: 50000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* - €

Investigador principal: Pilar Catalán

Líder o socio del proyecto: Líder

Financiados por entidades nacionales en 2013

En cuanto a los proyectos de investigación del BIFI que han sido financiados por entidades nacionales han sido 25 (aunque solo de 21 la financiación ha revertido directamente en el IUI BIFI) mediante convocatorias competitivas incluidas en diferentes programas de financiación del antiguo Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) y el actual Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO).

Título: Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte FIS2012-35719-C02-02 Proyecto coordinado por con las Universidades Complutense y Zaragoza

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad

Duración: 2012-2014

Importe total del proyecto: 149.995 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 93.000 €

Investigador principal: David Iñiguez Dieste

Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Convenio marco para la asociación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos, BIFI, al Laboratorio Nacional de Fusión por Confinamiento Magnético, LNF

Entidad financiadora: Laboratorio Nacional de Fusión por Confinamiento Magnético, LNF

Duración: 2004-actualidad

Investigador principal: Alfonso Tarancón

Líder o socio del proyecto: socios

Título: BIFI2012 - Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad (Acción Complementaria, SAF2011-15732-E)

Duración: 2011-2013

Importe total del proyecto: 7.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 7.000 €

Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy

Líder o socio del proyecto: Líder

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

Importe total del proyecto: 6.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 6.000 €

Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy

Líder o socio del proyecto: Líder

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
Importe total del proyecto: 90.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 90.000 €
Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy
Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes. ACCORPS.
Entidad financiadora: MICINN. FIS2009-13364-C02-01
Duración: 2010-2013
Importe del proyecto al BIFI: 86000 €
Investigador principal: Pierpaolo Bruscolini
Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Métodos Geométricos en integrabilidad y teoría de control
Entidad financiadora: Mineco
Duración: 01/01/2013-31/12/2015
Importe total del proyecto: 66000€. *Importe del proyecto al BIFI:* 0 €
Investigador principal: José F. Cariñena Marzo
Líder o socio del proyecto:

Título: Estructuras matemáticas en sistemas cuánticos y sus aplicaciones
Entidad financiadora: Mineco
Duración: 26/10/2011-25/10/2013
Importe total del proyecto: 3000€. *Importe del proyecto al BIFI:* 0€
Investigador principal: Jesús Clemente Gallardo
Líder o socio del proyecto:

Título: Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica. BIO2010-14983
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación
Duración: Enero 2011- Septiembre 2014
Importe total del proyecto: 220.00 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 220.00 €
Investigador principal: Milagros Medina
Líder o socio del proyecto: Universidad de Zaragoza

Título: Red Temática de Biotecnología de materiales lignocelulósicos: retos enzimáticos, químicos y moleculares para su aplicación industrial, energética y medioambiental. BIO2011-15394-E
Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)
Duración: 2013
Importe total del proyecto: 25.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* €
Investigador principal: Susana Camero Fernández
Líder o socio del proyecto: CIB-CSIC/Universidad de Zaragoza y otros

Título: O-fucosilación de proteínas: buscando inhibidores para la leucemia linfática celular aguda y para la esclerosis múltiple.
Entidad financiadora: MICINN
Duración: 2011-2013
Importe total del proyecto: 120000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 12000 €
Investigador principal: Ramón Hurtado-Guerrero
Líder o socio del proyecto:

Título: MTM2010-15972. MODELOS ESTOCÁSTICOS Y APLICACIONES.
Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad
Duración: 2011-2014
Importe total del proyecto: 32500€. (*Sólo costes directos*)
Investigador principal: Gerardo Sanz
Líder o socio del proyecto: Universidad de Zaragoza

Título: MTM2011-15044-E. THE PYRENEES INTERNATIONAL WORKSHOP AND SUMMER SCHOOL ON STATISTICS, PROBABILITY AND OPERATIONS RESEARCH, SPO 2011.
Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad
Duración: 2012-2013
Importe total del proyecto: 4200 €.
Investigador principal: Gerardo Sanz
Líder o socio del proyecto: Universidad de Zaragoza.

Título: COMPUTACION AVANZADA EN SISTEMAS COMPLEJOS Y FENOMENOS DE TRANSPORTE
Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad
Duración: 2012-2015
Importe total del proyecto: 93.000 €
Investigador principal: David Iñiguez
Líder o socio del proyecto: socio

Título: Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón. CeSAr.
Entidad financiadora: MINECO + FEDER
Duración: -
Importe total del proyecto: 2.000.000 €
Importe del proyecto al BIFI: 2.000.000 €
Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita
Tipo de participación en el proyecto: Proyecto de infraestructura

Título: Navegación Cuántica en Redes de Información
Entidad financiadora: MINECO
Duración: 24 meses
Importe total del proyecto: 33400 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 100%
Investigador principal: Jesús Gómez Gardeñes
Líder o socio del proyecto:

Título: Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal
Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. (FIS2011-25167)
Duración: 1-1-2012 hasta 31-12-2014
Importe total: 313390 €.
Investigador principal: Juan José Mazo Torres
Líder o socio del proyecto: Socio.

Título: FPA2013-35453 Física del modelo estándar y sus posibles extensiones
Entidad financiadora: MINECO Ministerio de Economía y Competitividad y fondos FEDER
Duración: 2013-2015
Importe total del proyecto: 221.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* - €
Investigador principal: Vicente Azcoiti
Líder o socio del proyecto: Socio

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

Entidad financiadora: MINECO

Duración: 2011-2014

Importe del proyecto al BIFI: 157.300€

Investigador principal: Javier Sancho Sanz

Líder o socio del proyecto:

Título: Diseño de catalizadores organometálicos para la activación y funcionalización de amoniaco: Estudios computacionales y experimentales.

Entidad financiadora: MINECO. CTQ2012-35665.

Duración: 2013-2015 (3 años)

Importe total del proyecto: 69.000 €.

Investigador principal: Víctor Polo Ortiz

Líder o socio del proyecto:

Título: FPA2013-35453 Física del modelo estándar y sus posibles extensiones

Entidad financiadora: MINECO Ministerio de Economía y Competitividad y fondos FEDER

Duración: 2013-2015

Importe total del proyecto: 221.000 €.

Investigador principal: Vicente Azcoiti

Líder o socio del proyecto: Socio

Título: Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. (FIS2011-25167)

Duración: 1-1-2012 hasta 31-12-2014

Importe total: 313390 €.

Investigador principal: Juan José Mazo Torres

Líder o socio del proyecto: Socio.

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

Entidad financiadora: FIS2009-13364-C02-01: MICINN & UZ

Duración: 1-1-2012 hasta 31-12-2014

Importe total: 313390 €.

Investigador principal: Ricardo López Ruíz

Líder o socio del proyecto: Socio.

Título: Genómica comparada, biogeografía y evolución floral y adaptativa de gramíneas modelo. CGL2012-39953-C02-01

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad

Duración: 2013-2015

Importe total del proyecto: 110.000 €.

Investigador principal: Pilar Catalán

Líder o socio del proyecto: Líder

Título: Networks, Biophysics and Nonlinear Science

Entidad financiadora: MINECO

Duración: 12/2011-12/2013

Importe total del proyecto: 259000€. *Importe del proyecto al BIFI:* 259000€

Investigador principal: Juan José Mazo

Líder o socio del proyecto: Socio

Financiados por entidades autonómicas en 2013

La financiación por entidades autonómicas en 2013 para el desarrollo de proyectos de investigación ha sido de varios tipos. Ha habido colaboraciones enmarcadas en convenios de colaboración, como el que se firma con el Gobierno de Aragón para soporte de CeSAr.

Por otro lado, los investigadores pertenecen en un elevado porcentaje a grupos de investigación reconocidos por el Gobierno de Aragón, que reciben subvención anual.

CONVENIOS

Título: Convenio de colaboración entre el Gobierno de Aragón, y la Universidad de Zaragoza para el soporte del nodo de Aragón en la Red Española de Supercomputación.

Entidad financiadora: Gobierno de Aragón

Duración: 1 año (1 Enero – 31 Diciembre 2013)

Importe total del proyecto: 18.000 € *Importe del proyecto al BIFI:* 18.000 €

Investigador principal: Alfonso Tarancón Lafita

Tipo de participación en el proyecto: Convenio de colaboración

GRUPOS RECONOCIDOS POR EL GOBIERNO DE ARAGÓN

Título Grupo Consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2013

Subvención: 17.427 €

Investigador principal: David Iñiguez

Tipo de participación en el proyecto: Líder

Título Grupo Consolidado Protein Targets

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2013

Subvención: 5.952€

Investigador principal: Javier Sancho Sanz

Tipo de participación en el proyecto: Líder

Título: Grupo Consolidado Biología Estructural (B18)

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2013

Subvención: 8.192 €

Investigador principal: Carlos Gómez-Moreno

Tipo de participación en el proyecto: Líder

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

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.

Duración: 2013

Subvención: 8.538 €

Investigador principal: Dr. Luis Mario Floría Peralta.

Tipo de participación en el proyecto: Líder

Título: Física Matemática y Teoría de Campos
Entidad financiadora: DGA
Duración: 2013
Subvención: 2.864€
Investigador principal: Manuel Fernández Rañada
Tipo de participación en el proyecto: Investigador

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Título: Identificación de moléculas bioactivas en células troncales mediante cribado funcional de quimiotecas: herramientas para terapias seguras.
Entidad financiadora: Universidad de Zaragoza/Ibercaja
Duración: 2012-2013
Importe total del proyecto: 19000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 19000 €
Investigador principal: Pascual López Buesa
Líder o socio del proyecto: Socio: Agropecuaria del Pirineo S.A.

Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud IACS

Título: Ayuda para utilización de unidades de apoyo de la investigación del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud.
Entidad financiadora: Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud.
Duración: 2012-2013
Importe total: 5000 €
Investigador principal: José Alberto Carrodeguás Villar
Líder o socio del proyecto: I+CS

CONCURRENCIA COMPETITIVA

Título: Creación de una línea materna porcina de alta prolificidad, longevidad y buena conformación mediante la selección basada en marcadores.
Entidad financiadora: DGA. INNOVA-A1-091/13
Duración: 2013
Importe total del proyecto: 85305 €.
Investigador principal: Pascual López Buesa
Líder o socio del proyecto: Socio: Agropecuaria del Pirineo S.A.

4.1.2. Proyectos participados o liderados por investigadores pertenecientes al IUI financiados por empresas

Con este tipo de proyectos el Instituto BIFI quiere facilitar la transmisión al entorno empresarial las capacidades y conocimiento adquirido a través de la I+D de los grupos e institutos de investigación del instituto, poniendo en contacto a investigadores con empresas, de manera que éstas puedan incorporar los avances científicos generados en la Universidad, a sus productos y procesos. Durante el 2013 se pueden citar estos proyectos que se han llevado a cabo, aunque no aparecen todos por motivos de confidencialidad:

Título del proyecto: Expresión y purificación de la proteína de la cápside VP1 de Norovirus genotipo GI.1 y GII.4 variante 2002, que se ensamblan formando partículas pseudovíricas (virus-like particles, VLPs) a partir de la cepa de baculovirus recombinante (producido mediante el sistema de vectores Bac-to-bac de Invitrogen).
Entidad financiadora: Certest Biotec. S.L.

Entidades participantes: Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos/
Certest Biotec S.L.

Duración, desde: 2012 hasta: 2013

Cuantía de la subvención: 2725,8 €

Investigador responsable: José A. Carrodeguás.

Título: Convenio de colaboración

Entidad financiadora: Genoma España

Entidades participantes: Genoma España y Universidad de Zaragoza

Duración: 2008- 2013

Importe total: 295.600€

Investigador principal: Javier Sancho

Líder o socio del proyecto:

Título: DISEÑO Y COSNTRUCCIÓN DE UN ESTIMADOR DE PRECIOS

Entidad financiadora: YUDIGAR SLU

Duración: 2013

Importe total del proyecto: 2500€.

Investigador principal: F. Javier López

Líder o socio del proyecto: Universidad de Zaragoza.

4.2. Publicaciones

Las publicaciones científicas que se han generado a partir de la actividad investigadora de los miembros del Instituto BIFI se recogen en la siguiente tabla. En ella se identifican todos los artículos del 2013 publicados en revistas de difusión internacional y su índice de impacto reconocido según el Institute for Scientific Information-ISI.

Padavannil A, Jobichen C, Mills E, Velázquez-Campoy A, M. Li, Leung KY, Mok YK, Rosenshine I, Sivaraman J. Structure of GrIR-GrIA complex that prevents GrIA activation of virulence genes. <i>Nature Communications</i> 2013, 4:2546	10,020
Chopra S, Palencia A, C. Virus C, Tripathy A, Temple BR, Velázquez-Campoy A, Cusack S, Reader JS. Plant tumour biocontrol agent employs a tRNA-dependent mechanism to inhibit leucyl-tRNA synthetase. <i>Nature Communications</i> 2013, 4:1417	10,015
Billoire A, Fernandez LA, Maiorano A, Marinari E, Martin-Mayor V, Parisi G, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo JJ, Yllanes D. Comment on "Evidence of non-mean-field-like low-temperature behavior in the Edwards-Anderson spin-glass model". <i>Physical Review Letters</i> 2013, 110:219701	7,943
Fytas NG, Victor Martin-Mayor V. Universality in the three-dimensional random-field Ising model. <i>Physical Review Letters</i> 2013, 110:227201	7,943
Gómez S, Díaz-Guilera A, Gómez-Gardeñes J, Pérez-Vicente CJ, Moreno Y, Arenas A. Diffusion dynamics on multiplex networks. <i>Physical Review Letters</i> 2013, 110:028701	7,943
Botello-Morte L, Bes MT, Heras B, Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF. Unraveling the redox properties of the global regulator FurA from <i>Anabaena</i> sp. PCC 7120: Disulfide reductase activity based on its CXXC motifs. <i>Antioxidants & Redox Signaling</i> 2013, in press	7,189
De Domenico M, Sole-Ribalta A, Cozzo E, Kivel M, Moreno Y, Porter MA, Gómez S, Arenas A. Mathematical formulation of multi-layer networks. <i>Physical Review X</i> 2013, 3:041022	6,711
Ansón-Casaos A, González-Domínguez JM, Lafragüeta I, Carrodeguás JA, Martínez MT. Optical absorption response of chemically modified single-walled carbon nanotubes upon ultracentrifugation in various dispersants. <i>Carbon</i> 2014, 66:115-118 (online 2013)	5,870
Galano JJ, Alías M, Pérez R, Velázquez-Campoy A, Hoffman PS, Sancho J. Improved flavodoxin inhibitors with potential therapeutic effects against <i>Helicobacter pylori</i> infection. <i>Journal of Medicinal Chemistry</i> 2013, 56:6248-6258	5,614
Faccin M, Bruscolini P. MS/MS spectra interpretation as a statistical-mechanics problem. <i>Analytical Chemistry</i> 2013, 85(10):4884-4892	5,595
Membrado M, Pacheco AF. Mass limits for dark clusters of degenerate fermions. <i>Astronomy & Astrophysics</i> 2013	5,084
Fang W, Du T, Raimi OG, Hurtado-Guerrero R, Urbaniak MD, Ibrahim AFM, Ferguson MAJ, Jin C, van Aalten DMF. Genetic and structural validation of <i>Aspergillus fumigatus</i> UDP-N-acetylglucosamine pyrophosphorylase as an antifungal target. <i>Molecular Microbiology</i> 2013, 89(3):479-493	4,961

Perc M, Gómez-Gardeñes J, Szolnoki A, Floría LM, Moreno Y. Evolutionary dynamics of group interactions on structured populations – A review. <i>Journal of the Royal Society Interface</i> 2013, 10:20120997	4,907
Poletto C, Meloni S, V. Colizza V, Moreno Y, Vespignani A. Host mobility drives pathogen competition in spatially structured populations. <i>PLoS Computational Biology</i> 2013, 9(8):e1003169	4,867
Inda LA, Sanmartin I, Buerki S, Catalán P. Mediterranean origin and Miocene-Holocene Old World diversification of meadow fescues and ryegrasses (<i>Festuca</i> subgen. <i>Schedonorus</i> and <i>Lolium</i>). <i>Journal of Biogeography</i> 2013, in press	4,860
Calvo L, Gregorio I, García A, Fernández MT, Goñi P, Clavel A, Peleato ML, Fillat MF. A new pentaplex-nested PCR to detect five pathogenic bacteria in free living amoebae. <i>Water Research</i> 2013, 47:493-502	4,655
Cruz-Gallardo I, Díaz-Moreno I, Díaz-Quintana A, Donaire A, Velázquez-Campoy A, Curd RD, Rangachari K, Birdsall B, Ramos A, Holder AA, De la Rosa MA. Antimalarial activity of cupredoxins: The interaction of <i>Plasmodium</i> merozoite surface protein 1-19 (MSP1-19) and rusticyanin. <i>Journal of Biological Chemistry</i> 2013, 288:20896-20907	4,651
Gallego P, Velázquez-Campoy A, Regue L, Roig J, Reverter D. Structural analysis of the regulation of the DYNLL/LC8 binding to Nek9 by phosphorylation. <i>Journal of Biological Chemistry</i> 2013, 288:12283-12294	4,651
Bortolotti A, Sánchez-Azqueta A, Maya CM, Velázquez-Campoy A, Hermoso JA, Medina M, Cortez N. The C-terminal extension of bacterial flavodoxin-reductases: involvement in the hydride transfer mechanism from the coenzyme. <i>Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics</i> 2014 1837:33-43 (online 2013)	4,624
Salcedo G, Cano-Sánchez P, Tuena de Gómez-Puyou M, Velázquez-Campoy A, García-Hernández E. Isolated noncatalytic and catalytic subunits of F1-ATPase exhibit similar, albeit not identical, energetic strategies for recognizing adenosine nucleotides. <i>Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics</i> 2014, 1837:44-50 (online 2013)	4,624
Sánchez-Azqueta A, Herguedas B, Hurtado-Guerrero R, Hervas M, Navarro JA, Martínez-Júlvez M, Medina M. A hydrogen bond network in the active site of Anabaena Ferredoxin-NADP+ reductase modulates its catalytic efficiency. <i>Biochimica et Biophysica - Bioenergetics</i> 2014, 1837:251-263 (online 2013)	4,624
Gálvez JA, Díaz-De-Villegas MD, Alías M, Badorrey R. Chiral iminoesters derived from D-glyceraldehyde in [3+2] cycloaddition reactions. Asymmetric synthesis of a key intermediate in the synthesis of neuraminidase inhibitors. <i>Journal of Organic Chemistry</i> 2013, 78:11404-11413	4,564
Angarica VE, Ventura S, Sancho J. Discovering putative prion sequences in complete proteomes using probabilistic representations of Q/N-rich domains. <i>BMC Genomics</i> 2013, 14:316	4,397
Minaya M, Pimentel M, Mason-Gamer R, Catalán P. Distribution and evolutionary dynamics of stowaway miniature inverted repeat transposable elements (MITEs) in grasses. <i>Molecular Phylogenetics and Evolution</i> 2013, 68:106-118	4,100
Fraga H, Papaleo E, Vega S, Velázquez-Campoy A, Ventura S. Zinc induced folding is essential for TIM15 activity as an mtHsp70 chaperone. <i>Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects</i> 2013, 1830:2139-2149	3,848
Baity-Jesi M, Baños R, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-García J, Muñoz Sudupe A, Navarro D, Parisi G, Pérez-Gavero S, Pivanti M, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancón A, Tripicciono R, Yllanes D. Critical parameters of the three-dimensional Ising spin glass. <i>arXiv:1310.2910. Physical Review B</i> 88, 224416 (2013)	3,767
Kleftogiannis I, Amanatidis I, Gopar VA. Conductance through disordered graphene nanoribbons: Standard and anomalous electron localization. <i>Physical Review B</i> 2013, 88:205414	3,767
Sahún-Roncero M, Rubio-Ruiz B, Conejo-García A, Velázquez-Campoy A, Entrena A, Hurtado-Guerrero R. Determination of potential scaffolds for human choline kinase a1 by chemical deconvolution studies. <i>ChemBiochem</i> 2013, 14:1291-1295	3,740
Marcuello C, Arilla-Luna S, Medina M, Lostao A. Detection of a quaternary organization into dimer of trimers of <i>Corynebacterium ammoniagenes</i> FAD synthetase at the single-molecule level and at the in cell level. <i>BBA - Proteins & Proteomics</i> 2013, 1834:665-676	3,733
Abián O, Vega S, Sancho J, Velázquez-Campoy A. Allosteric inhibitors of the NS3 protease from the hepatitis C virus. <i>PLoS ONE</i> 2013, 8:69773	3,730
Domenech R, Hernández-Cifre JG, Bacarizo J, Diez-Peña AI, Martínez-Rodríguez S, Cavasotto CN, García de la Torre J, Camara-Artigas A, Velázquez-Campoy A, Neira JL. The histidine-phosphocarrier protein of the phosphoenolpyruvate:sugar phosphotransferase system of <i>Bacillus sphaericus</i> self-associates. <i>PLoS ONE</i> 2013, 8:e69307	3,730
Echenique-Robba P, Nelo-Bazán MA, Carrodeguás JA. Reducing the standard deviation in multiple-assay experiments where the variation matters but the absolute value does not. <i>PLoS ONE</i> 2013, 8:e78205	3,730
Molina JA, Giménez-Nadal JI, Cuesta JA, Gracia-Lázaro C, Moreno Y, Sánchez A. Gender differences in cooperation: Experimental evidence on high school students. <i>PLoS ONE</i> 2013, 8(12): e83700	3,730
Aguado-Llera A, Hamidi T, Pantoja-Uceda D, Gironella M, Santoro J, Velázquez-Campoy A, Neira JL, Iovanna JL. Deciphering the binding between Nupr1 and MSL1 and their DNA-repairing activity. <i>PLoS ONE</i> 2013, 8:e78101	3,730
Filipe HAL, Coreta-Gomes FM, Velázquez-Campoy A, Almeida AR, Peixoto AF, Pereira MM, Vaz WLC, Moreno MJ. Synthesis and characterization of a lipidic alpha amino acid: Solubility and interaction with	3,607

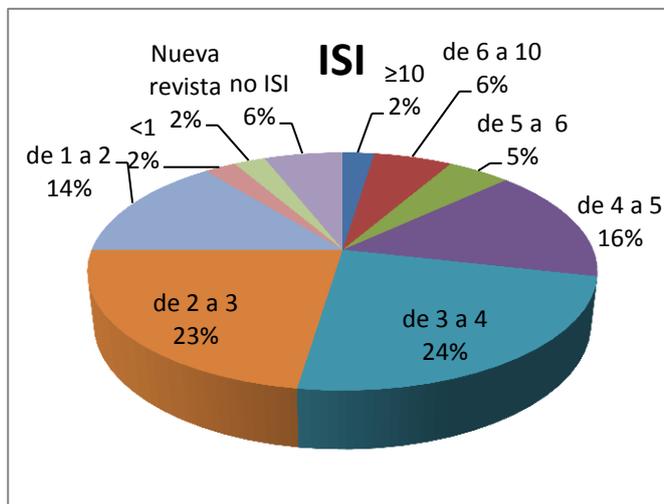
serum albumin and lipid bilayers. <i>Journal of Physical Chemistry B</i> 2013, 117:3439-3448	
González A, Valladares A, Peleato ML, Fillat MF. FurA influences heterocyst differentiation in <i>Anabaena</i> sp. <i>PCC 7120. FEBS Letters</i> 2013, 587(16):2682-90	3,582
Pimentel M, Sahuquillo E, Torrecilla Z, Popp M, Catalán P, Brochmann C. Hybridizations and long-distance colonizations at different time scales: Towards resolution of long-term controversies in the sweet vernal grasses (<i>Anthoxanthum</i>). <i>Annals of Botany</i> 2013, 112:1015-1030	3,440
Castro A. Theoretical shaping of femtosecond laser pulses for ultrafast molecular photo-dissociation with control techniques based on time-dependent density functional theory. <i>ChemPhysChem</i> 2013, 14:1488	3,349
Ferreira P, Villanueva R, Cabon L, Susin S, Medina M. The oxido-reductase activity of the apoptosis inducing factor: A promising pharmacological tool? <i>Current Pharmaceutical Design</i> 2013, 19:2628-2636	3,311
Alonso JL, Castro A, Clemente-Gallardo J, Echenique-Robba P, Jover-Galtier JA. Comment on "Correlated electron-nuclear dynamics: Exact factorization of the molecular wavefunction" [<i>J. Chem. Phys.</i> 137, 22A530 (2012)]. <i>Journal of Chemical Physics</i> 2013, 139:087101	3,164
Bergues-Pupo AE, Falo F, Fiasconaro A. DNA overstretching transition induced by melting in a dynamical mesoscopic model. <i>Journal of Chemical Physics</i> 2013, 139:095101	3,164
Enciso M, Rey A. Sketching protein aggregation with a physics-based toy model. <i>Journal of Chemical Physics</i> 2013, 139:115101	3,164
Baity-Jesi M, et al. The Janus Collaboration: "Janus II: a new generation application-driven computer for spin-system simulations" arXiv:1310.1032. <i>Computer Physics Communications</i> 2013, accepted	3,078
Cardillo A, Galve F, Zueco D, Gómez-Gardeñes J. Information sharing in quantum complex networks. <i>Physical Review A</i> 2013, 87:052312	3,042
Cardillo A, Gómez-Gardeñes J, Zanin M, Romance M, Papo D, del Pozo F, Boccaletti S. Emergence of network features from multiplexity. <i>Scientific Reports</i> 2013, 3:1344	2,927
Kumar V, Chichili VPR, Zhong L, Tang X, Velázquez-Campoy A, Sheu FS, Seetharaman J, Gerges NZ, Sivaraman J. Structural basis for the interaction of unstructured neuron specific substrates neuromodulin and neurogranin with calmodulin. <i>Scientific Reports</i> 2013, 3:1392	2,927
Wang Z, Xia CY, Meloni S, Zhou CS, Moreno Y. Impact of social punishment on cooperative behavior in complex networks. <i>Scientific Reports</i> 2013, 3:3055	2,927
Tondo ML, Hurtado-Guerrero R, Ceccarelli EA, Medina M, Orellano EG, Martínez-Júlvez M. Crystal structure of the FAD-containing ferredoxin-NADP+ reductase from the plant pathogen <i>Xanthomonas axonopodis</i> pv. <i>citri</i> . <i>BioMed Research International</i> 2013, 2013:906572	2,880
Merino P, Greco G, Tejero T, Hurtado-Guerrero R, Matute R, Chiacchio U, Corsaro A, Pistarà V, Romeo R. Stereoselective 1,3-dipolar cycloadditions of nitrones derived from amino acids. Asymmetric synthesis of N-(alkoxycarbonylmethyl)-3-hydroxypyrolidin-2-ones. <i>Tetrahedron</i> 2013, 69:9381-9390	2,803
Cortes-Ciriano I, Koutsoukas A, Abián O, Glen R, Velázquez-Campoy A, Bender A. Experimental validation of in silico target predictions on synergistic protein targets. <i>Medicinal Chemistry Communications</i> 2013, 4:278-288	2,722
Torrecilla P, Acedo C, Marques I, Díaz-Pérez AJ, López-Rodríguez JA, Mirones V, Sus A, Llamas F, Alonso A, Pérez-Collazos E, Viruel J, Sahuquillo E, Sancho MC, Komac B, Manso JA, Segarra-Moragues JG, Draper D, Villar L, Catalán P. Morphometric and molecular variation in concert: Taxonomy and genetics of the reticulate Pyrenean and Iberian alpine spiny fescues (<i>Festuca eskia</i> complex, Poaceae). <i>Botanical Journal of the Linnean Society</i> 2013, 173:676-706	2,580
Vega S, Neira JL, Marcuello C, Lostao A, Abián O, Velázquez-Campoy A. NS3 protease from hepatitis C virus: Biophysical studies on an intrinsically disordered protein domain. <i>International Journal of Molecular Sciences</i> 2013, 14:13282-13306	2,464
Nuñez D, Domingo P, Sanchez-Martinez D, Cebolla V, Chiou A, Velázquez-Campoy A, Pardo J, Galvez E. Recombinant production of human ICAM-1 chimeras by single step on column refolding and purification. <i>Process Biochemistry</i> 2013, 48:708-715	2,414
Cardillo A, Reyes-Suárez C, Naranjo F, Gómez-Gardeñes J. Evolutionary vaccination dilemma in complex networks. <i>Physical Review E</i> 2013, 88:032803	2,313
Cozzo E, Baños RA, Meloni S, Moreno Y. Contact-based social contagion in multiplex networks. <i>Physical Review E</i> 2013, 88:050801	2,313
Gómez-Gardeñes J, Nicosia V, Sinatra R, Latora V. Motion-induced synchronization in metapopulations of mobile agents. <i>Physical Review E</i> 2013, 87:032814	2,313
Gordillo-Guerrero A, Kenna R, Ruiz-Lorenzo JJ. Scaling behavior of the Heisenberg model in three dimensions. <i>Physical Review E</i> 2013, in press	2,313
Gutiérrez R, Sevilla-Escoboza R, Piedrahita P, Finke C, Feudel U, Buldú JM, Huerta-Cuellar G, Jaimes-Reátegui R, Moreno Y, Boccaletti S. Generalized synchronization in relay systems. <i>Physical Review E</i> 2013, 88:052908	2,313
Fernandez LA, Martin-Mayor V, Parisi G, Seoane B. Temperature chaos in 3D Ising spin glasses is driven by rare events. <i>EPL - Europhysics Letters</i> 2013, 103:67003	2,260
Piedrahita P, Borge-Holthoefer J, Moreno Y, Arenas A. Modeling self-sustained activity cascades in socio-technical networks. <i>EPL - Europhysics Letters</i> 2013, 104:48004	2,260
Serrano E, Pérez-Pé R, Calleja L, Guillén N, Casao A, Hurtado-Guerrero R, Muiño-Blanco T, Cebrián-Pérez JA. Characterization of the cDNA and in vitro expression of the ram seminal plasma protein RSVP 14. <i>Gene</i> 2013, 519(2):271-278	2,196
Gambuzza LV, Cardillo A, Fiasconaro A, Fortuna L, Gómez-Gardeñes J, Frasca M. Analysis of remote synchronization in complex networks. <i>Chaos</i> 2013, 23:043103	2,188

Marca E, Valero-González J, Delso I, Tejero T, Hurtado-Guerrero R, Merino P. Synthesis of O- and C-glycosides derived from β -(1,3)-D-glucans. <i>Carbohydrate Research</i> 2013, 382:9-18	2,044
Fang W, Du T, Raimi OG, Hurtado-Guerrero R, Mariño K, Ibrahim AFM, Albarbarawi O, Ferguson MAJ, Jin C, van Aalten DMF. Genetic and structural validation of <i>Aspergillus fumigatus</i> N-acetylphosphoglucosamine mutase as an antifungal target. <i>Bioscience Reports</i> 2013, 33(5):e00063	1,876
Baños RA, Gil-Narvion JM, Monforte-García J, Ruiz-Lorenzo JJ, Yllanes D. Numerical study of the overlap Lee-Yang singularities in the three-dimensional Edwards-Anderson model. <i>Journal of Statistical Mechanics - Theory and Experiment</i> 2013, P02031	1,866
Sanz J, Cozzo E, Moreno Y. Data reliability in complex directed networks. <i>Journal of Statistical Mechanics - Theory and Experiment</i> 2013, in press	1,866
Cardillo A, Zanin M, Gómez-Gardeñes J, Romance M, García del Amo AJ, Boccaletti S. Modeling the multi-layer nature of the European air transport network: Resilience and passengers re-scheduling under random failures. <i>European Physical Journal - Special Topics</i> 2013, 215:23-33	1,796
López-Ruiz R, Sañudo J. Study of a quantum scattering process by means of entropic measures. <i>Physics Letters A</i> 2013, 377:2556-2560	1,766
Xia CY, Wang Z, Sanz J, Meloni S, Moreno Y. Effects of delayed recovery and nonuniform transmission on the spreading of diseases in complex networks. <i>Physica A - Statistical Mechanics and Its Applications</i> 2013, 392:1577	1,676
Galve A, Burgos C, Varona L, Carrodeguás JA, Cánovas A, López-Buesa P. Allelic frequencies of PRKAG3 in several pig breeds and its technological consequences on a Duroc \times Landrace-Large White cross. <i>Journal of Animal Breeding and Genetics</i> 2013, 130:382-393	1,654
Borge-Holthoefter J, Meloni S, Gonçalves B, Moreno Y. Emergence of influential spreaders in modified rumor models. <i>Journal of Statistical Physics</i> 2013, 151:383	1,400
Baños RA, Borge-Holthoefter J, Wang N, Moreno Y, González-Bailón S. Diffusion dynamics with changing network composition. <i>Entropy</i> 2013, 15:4553-4568	1,347
Gracia-Lázaro C, Floría LM, Gómez-Gardeñes J, Moreno Y. Cooperation in changing environments: Irreversibility in the transition to cooperation in complex networks. <i>Chaos, Solitons and Fractals</i> 2013, 56:188	1,246
Ceballos L, Calvo L, Bes MT, Fillat MF, Peleato ML. Effect of several emerging contaminants on growth and microcystin production in <i>Microcystis aeruginosa</i> PCC 7806. <i>Limnetica</i> 2013, aceptado	1,113
Martín-Luna B, Sevilla E, Lagunas B, Bes MT, Fillat MF, Peleato ML. Salinity decreases transcription of <i>mcyD</i> and microcystin synthesis in <i>Microcystis aeruginosa</i> PCC 7806. <i>Limnetica</i> 2013, aceptado	1,113
González-Bailón S, Borge-Holthoefter J, Moreno Y. Broadcasters and hidden influentials in online protest diffusion. <i>American Behavioral Scientist</i> 2013, 57:943-965	0,622
Martínez-Martínez I, López-Ruiz R. Directed random markets: Connectivity determines money. <i>International Journal of Modern Physics C</i> 2013, 24:1250088(14)	0,615
Borge-Holthoefter J, Baños RA, González-Bailón S, Moreno Y. Cascading behavior in complex socio-technical networks. <i>Journal of Complex Networks</i> 2013, 1:3-24	Revista nueva
Baños RA, Borge-Holthoefter J, Moreno Y. The role of hidden influentials in the diffusion of online information cascades. <i>European Physical Journal - Data Science</i> 2013, 2:6	Revista nueva
Baity-Jesi M, Álvarez Baños R, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-García J, Muñoz Sudupe A, Navarro D, Parisi G, Pérez-Gaviro S, Pivanti M, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancón A, Ricci-Tersenghi F, Tripiccion R, Yllanes D. Dynamical transition in the D=3 Edwards-Anderson spin glass in an external magnetic field. <i>arXiv:1307.4998</i> , 2013	sin revista asignada
Baity-Jesi M, Fernandez LA, Martin-Mayor V, Sanz JM. Phase transition in 3d Heisenberg spin glasses with strong random anisotropies through a multi-GPU parallelization. <i>arXiv:1309.1599</i> , 2013	no indice de impacto
Borge-Holthoefter J, González-Bailón S, Rivero A, Moreno Y. The Spanish Indignados Movement: Time dynamics, geographical distribution, and recruitment mechanisms. Chapter contribution to <i>Online Collective Action</i> 2013, in press	no indice de impacto
Catalán P, López-Álvarez D, López-Herránz ML. Código de barras genético de gramíneas modelo (<i>Brachypodium</i>): Incremento de la biodiversidad. <i>Conservación Vegetal</i> 2013, 17:3-6	no indice de impacto
López-Ruiz R, Shivanian E, Abbasbandy S, López JL. A continuous model for random markets. <i>Mathematica Aeterna</i> 2013, 3:317-328	no indice de impacto

Analizando los datos que se muestran en la tabla sobre el factor de impacto de las publicaciones realizadas por el instituto durante el 2013 puede observarse que de las 84 publicaciones, 2 no tienen aún asignado ISI, ya que se trata de nuevas revistas y otras 4 no tienen índice de impacto y uno todavía no tiene revista asignada.

Subrayar que hay 2 publicaciones que destacan por tener un índice a 10 y el grueso de las publicaciones tiene un ISI asignado entre 2 y 4, suponiendo un 47% de las publicaciones del 2013. Tan solo un 2% tienen un índice de impacto por debajo de 1.

RangoISI	Nº public	%
≥10	2	2,38
de 6 a 10	5	5,95
de 5 a 6	4	4,76
de 4 a 5	13	15,48
de 3 a 4	20	23,81
de 2 a 3	19	22,62
de 1 a 2	12	14,29
<1	2	2,38
Nueva revista	2	2,38
no ISI	5	5,95
Nºpublicaciones 2013	84	



Otras publicaciones

También durante el año 2013 se han publicado en otros medios distintos de revistas. A continuación se enumeran algunas de ellas:

Proceedings

Editor Proceedings Internacionales:

Proceedings of the International Workshop NOMA'13. Proc. del Congreso NOMA'13, pp. 76, Zaragoza, 3-4 Setiembre, 2013. Extended Proceedings aparecerán en la serie Springer PROMS (2014). Eds. R.López-Ruiz, D. Fournier-Prunaret, C. Gracio & N. Yoshifumi.

Proceedings en Congresos Internacionales:

Complex Systems with Trivial Dynamics, R. López-Ruiz, ECCS'12 Conference, Brussels (Belgium), Setember (2012); Proceedings in CSS Archive, Springer Complexity (2013).

The Importance of the Strategy in Backward Orbits, C. Pellicer and R. López-Ruiz, NOMA'13 Conference, pp. 57-60, Abstracts, Zaragoza, Spain (2013), Springer Proc. in Mathematics & Statistics (PROMS), to appear (2014).

A note on Directed Random Markets, I. Martínez-Martínez and R. López-Ruiz, NOMA'13 Conference, pp. 38-40, Abstracts, Zaragoza, Spain (2013), Springer Proc. in Mathematics & Statistics (PROMS), to appear (2014).

Random Markets with an H-Theorem, R. López-Ruiz, Elyas Shivanian and J.-L. López, NOMA'13 Conference, pp. 34-37, Abstracts, Zaragoza, Spain (2013), Springer Proc. in Mathematics & Statistics (PROMS), to appear (2014).

López-Ruiz R. Complex systems with trivial dynamics. Contributed Talk to ECCS'12, European Conference on Complex Systems, Brussels (Belgium), September (2012); Proceedings of the ECCS'12, Gilbert, Kirkilionis & Nicolis Eds., 2013, Part I, pp.57-65, Springer Proceedings in Complexity, XVII

López-Ruiz R. Complex systems with trivial dynamics. Contributed Talk to ECCS'12, European Conference on Complex Systems, Brussels (Belgium), September (2012); Proceedings of the ECCS'12, Gilbert, Kirkilionis & Nicolis Eds., 2013, Part I, pp.57-65, Springer Proceedings in Complexity, XVII

Publicaciones en libros

Se citan a continuación algunas publicaciones en formato libro que también han realizado los investigadores del BIFI durante el 2013.

Hernández-Ortega A, Lucas F, Ferreira P, Medina M, Guallar V, and Martínez AT. Modulating flavin reoxidation in fungal aryl-alcohol-oxidase: Involvement of Phe501 contiguous to catalytic efficiency. *Flavins and Flavoproteins*, 169-175. ISBN: 9781300786405. 2013. S. Miller, R. Hille, B. Palfey. Lulu, Berkeley, USA.

Hernández-Ortega A, Ferreira P, Merino P, Medina M, Guallar V, and Martínez AT. Stereoselective hydride transfer mechanism in substrate oxidation by aryl-alcohol oxidase. *Flavins and Flavoproteins*, 175-180. ISBN: 9781300786405. 2013. S. Miller, R. Hille, B. Palfey. Lulu, Berkeley, USA.

Serrano A, Herguedas B, Frago S, Arilla-Luna S, Ferreira P, Yruela I, Hermoso JA, Velázquez-Campoy A, Martínez-Júlvez M, and Medina M. FMN and FAD biosynthesis in Prokaryotes: The FADS synthetase family. *Flavins and Flavoproteins*, 481-492. ISBN: 9781300786405. 2013. S. Miller, R. Hille, B. Palfey. Lulu, Berkeley, USA.

Ferreira P, Villanueva R, Usón A, Miramar MD, Susin S, Peleato ML, and Medina M. Unraveling the role of the reductase activity of the human apoptosis inducing factor (hAIF). *Flavins and Flavoproteins*, 503-508. ISBN: 9781300786405. 2013. S. Miller, R. Hille, B. Palfey. Lulu, Berkeley, USA.

Gómez-Moreno C, Marcuello C, De Miguel R, Medina M, Martínez-Júlvez M, and Lostao A. Atomic Force Microscopy as a tool to understand the mechanostability of Ferredoxin-NADP⁺ reductase complexes with its protein partners. *Flavins and Flavoproteins*, 569-575. ISBN: 9781300786405. 2013. S. Miller, R. Hille, B. Palfey. Lulu, Berkeley, USA.

Sánchez-Azqueta A, Lans I, Peregrina JR, Hurtado-Guerrero R, Martínez-Júlvez M, and Medina M. Ser80 in *Anabaena* Ferredoxin-NADP⁺ reductase contributes to stabilize the catalytically competent complex NADP⁺. *Flavins and Flavoproteins*, 577-582. ISBN: 9781300786405. 2013. S. Miller, R. Hille, B. Palfey. Lulu, Berkeley, USA.

Ferreira P, Martínez-Júlvez M, and Medina M. Electron Transferases. *Methods in Molecular Biology, Flavins and Flavoproteins*. 2013. En prensa. E. Schleicher, S. Weber. Humana Press USA.

A Statistical Measure of Complexity, R. López-Ruiz, H. Mancini and X. Calbet, CHAPTER in the book RECENT ADVANCES IN GENERALIZED INFORMATION MEASURES AND STATISTICS, Kowalski, Rossignoli & Curado (Eds.), Bentham Science Books, to appear (2013).

Catalán P, Acedo C, Marques I, Llamas F, Alonso A, Pérez-Collazos E, Viruel J, Sahuquillo E, Sancho MC, Komac B, Manso JA, Segarra-Moragues JG, Draper D, Villar

L. 2013. *Genética del paisaje y ecología de pastos subalpinos de Festuca eskia, F. gautieri y F. x picoeuropeana en los Parques Nacionales de Ordesa-Monte Perdido, Aigüestortes y Estany de Sant Maurici, y Picos de Europa*. In: Ramírez L, Asensio B (eds). *Proyectos de investigación en Parques Nacionales: 2009-2012*. pp. 39-70. Organismo Autónomo Parques Nacionales, Ministerio de Medio Ambiente. Madrid. Capítulo de Libro.

Baity-Jesi M et al. An FPGA-based supercomputer for Statistical Physics: The weird case of Janus. *High-Performance Computing Using*, 2013, pp.481-506, ISBN 978-1-4614-17

Baity-Jesi M, et al. Spin glass simulations on the Janus architecture: A desperate quest for strong scaling. *Lecture Notes in Computer Science*. 7640 LNCS, 2013, pp.528-537, ISSN 0302-9743

Cahué E, Ferrer A, Íñiguez D, Ruiz G. RRLab: Remote Reality Laboratory chapter en la edición 2013 del libro titulado "Using Remote Labs in Education" publicado por la Universidad de Deusto.

Cahué E, Giner A, Ibar J, Ruiz G, Vallés R. Hadoop Cloud SaaS access via WS-PGRADE adaptation. *6th Iberian Grid Infrastructure Conference*, 2013, pp.161-172

Catalán P, López-Álvarez D, López-Herránz ML. Código de barras genético de gramíneas modelo (*Brachypodium*): Incremento de la biodiversidad. *Conservación Vegetal* 2013, 17:3-6

Devesa J, Catalán P, Müller J, Cebolla C, Ortuñez E. Checklist de *Festuca L.* (Poaceae) en la Península Ibérica. *Lagascalia* 2013, 33

González-Bailón S, Borge-Holthoefer J, Moreno Y. Online networks and the diffusion of protest. Chapter contribution to *Analytical Sociology: Norms, Actions and Networks* 2013, in press

Sahún-Roncero M, Rubio-Ruiz B, Saladino G, Conejo-García A, Espinosa A, Velázquez-Campoy A, Gervasio FL, Entrena A, Hurtado-Guerrero R. The mechanism of allosteric coupling in choline kinase $\alpha 1$ revealed by a rationally designed inhibitor. *Angewandte Chemie International Edition* 2013, 52:4582-4586

Números de Revista Editados:

Medina M, Ferreira P, Martínez-Júlvez M Eds. Special Issue: Flavoproteins and Flavoenzymes with Biomedical and Therapeutic Impact. *Current Pharmaceutical Design* 19, number 14. April 2013. ISSN: 1873-4286. 2013. Bentham Science Publishers.

4.3. Comunicaciones a congresos

4.3.1. Presentaciones durante el año 2013 en congresos, talleres, seminarios

Conferencias invitadas

El personal del BIFI ha participado en 43 conferencias como invitados. De estas 18 han sido como invitados a distintos eventos nacionales y 25 en eventos internacionales, lo que da idea de la internacionalización y actividades de colaboración internacionales del instituto BIFI.

Eventos Nacionales

Pacheco AF. Invited Conference in MATHGEO-2013, *The Binomial Distribution as a Renewal Model for the recurrence of large earthquakes*. UAM, Madrid 4-8 nov. 2013-11-29.

Echenique, P. From Bayes (to electrons to proteins) to therapies, Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid, España, junio 2013.

Moreno, Y. *The Physics of Humans, European Conference on Complex Systems (ECCS 2013)*, Barcelona, Spain. September 2013.

Moreno, Y. *Collective Behavior in Large-scale social systems. ECCS 2013 Satellite "Collective Contagion"*, Barcelona, Spain. September 2013.

Moreno, Y. *Structure and Dynamics of Online Social Systems. ECCS 2013 Satellite "Global Computing for our Complex Hyper-connected World"*, Barcelona, Spain. September 2013.

Hurtado-Guerrero R. *The mechanism of allosteric coupling in choline kinase $\alpha 1$ revealed by a rationally design inhibitor*. Programa XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. Santander. 2013

Castro A. *From the femto- to the atto-second time scale: analysis and control of the electronic motion with time-dependent density-functional theory. Psik-CECAM Research Conference: Multiscale Modeling from First Principles*. Platja d'Aro (España). Septiembre 2013.

Castro A. *Analysis and control of the electronic motion with time-dependent density-functional theory: new developments in the octopus code*. 13Th International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering. Almería (España). Junio 2013.

Gómez Gardeñes, J. *Emergence of network features from multiplexity*. Multiplex Time-Varying and Evolutive Complex Networks, Dynamic Days Europe, Madrid, 7 Junio 2013.

Gómez Gardeñes, J. *Transport in Multiplex Networks: Empirical and Theoretical Approaches, Complexity Science and Transport Systems*, ECCS Satellite, Barcelona, 16-20 Septiembre 2013.

Pérez-Gaviro S, *The Janus family: a dedicated computer generation*. Instituto Gregorio Millán Barbany, Universidad Carlos III de Madrid, Campun de Leganés. Madrid (España). Diciembre 2013.

Pérez-Gaviro S, *Janus: una familia de ordenadores dedicados*. Instituto Universitario de Matemáticas y Aplicaciones (IUMA), Universidad de Zaragoza. Zaragoza (España). Noviembre 2013.

Pérez-Gaviro S, *Explorando los vidrios de espín con Janus*, Universidad de Extremadura. Badajoz (España). Octubre 2013.

Pérez-Gaviro S, *Janus: una familia de ordenadores de propósito especial*, Universidad de Extremadura. Cáceres (España), Spain. Octubre 2013

J. Sancho. Conferencia invitada. VI Congreso Nacional del BIFI. Zaragoza 2013

Ibar J. *Cloud Resources at BIFI*. 7th Iberian Grid Infrastructure Conference. Madrid (España). Septiembre 2013

Valles R. *CloudSME project. GECON 2013* (10th International Conference on Economics of Grids, Clouds, Systems and Services). Zaragoza (España). Septiembre 2013.

Benavides-Riveros CL. *Some formal requirements for the two-body reduced density matrix*. Universidad de Zaragoza. Zaragoza (España). Febrero 2013.

Eventos Internacionales

Castro A. Progress in the control of electron systems. *Gordon Research Conference on Time-Dependent Density-Functional Theory*. University of New England at Biddeford (ME, USA). Agosto 2013.

Gopar V. Quantum Transport through Disordered Systems: Conductance via localized and delocalized electrons. V Leopoldo García-Colín Mexican Meeting on Mathematical and Experimental Physics. Colegio Nacional, México, D.F. Fechas: Del 9 al 13 de septiembre, 2013

Gopar V. Wave Transport in the Frequency and Time Domains. Anomalous localization. Centro Internacional de Ciencias, Cuernavaca, Morelos, México. Fechas: Del 1 al 7 de septiembre, 2013.

García Gardeñes J. Explosive Synchronization in Complex Networks of Phase-oscillators and Chaotic Units. 4th Workshop on Complex Networks, Berlin (Alemania), 13-15 Marzo 2013.

García Gardeñes J. *Navigation, ranking and information in quantum complex networks. IQC Workshop on Quantum Computation and Complex Networks, Waterloo (Canada), 24-26 Mayo 2013.*

García Gardeñes J. Emergence of network features from multiplexity, Multiple Network Modeling, Analysis and Mining Satellite Symposium at NetSci2013, Copenhagen (Dinamarca), 3 Junio 2013.

García Gardeñes J. Studying Protein Folding via Complex Networks School on Biological Complex Networks: From the cell to the brain and beyond, Natal (Brasil), 8-19 Julio 2013.

García Gardeñes J. Diseño de un Google Cuántico, XXV Congreso Nacional de Física de Colombia, Armenia (Colombia), 25-29 Agosto 2013.

Perez-Gaviro S, Overview through the Janus dedicated machine generation. *Kyoto University*. Kyoto (Japón). Julio 2013

Benavides-Riveros CL. Pauli exclusion principle, Reloaded. *Universität des Saarlandes*. Saarbrücken (Alemania). Abril 2013.

Benavides-Riveros CL. On the reduction of the number of Slater determinants in CI. *Universität des Saarlandes*, Saarbrücken (Alemania). Julio 2013.

Benavides-Riveros CL. The Klyachko conditions from the chemical viewpoint. *VIII International meeting Mathematical Methods for Ab Initio Quantum Chemistry*. Niza (Francia). Noviembre de 2013.

Sancho J. Conferencia invitada. 9th European Biophysics Congress EBSA2013. Lisboa 2013

Taller "Noncommutative geometry and Particle Physics", Lorentz Center, Leiden, Holanda, octubre del 2013. Director del grupo de estudio: "Noncommutative geometry and fermion mixing".

Catalan P., López-Álvarez D., López-Herránz ML, Betekhtin A. More than one model plant within the complex? A DNA barcoding method to discriminate between *Brachypodium distachyon* and its close relatives *B. stacei* and *B. hybridum*. I International Brachypodium Conference. Modena. 19-21/06/2013.

Vogel J, Gordon S, Steinwand M, Bragg J, Young H, Barry K, Schmutz J, Catalan P, Contreras B, Hasterok R, Doonan J, Mur L, Budak H, Chalhoub B. The genus *Brachypodium* as a tool to study perenniality and polyploidy. I International Brachypodium Conference. Modena. 19-21/06/2013.

Gordon S, Priest H, Des Marais DL, Schackwitz W, Figueroa M, Martin J, Bragg J, Tyler L, Lee C-R, Bryant D, Wang W, Messing J, Barry K, Garvin DF, Doonan J, Catalan P, Mur L, Budak H, Tuna M, Mitchell-Olds T, Pfender F, Jeunger T, Mockler TC, Vogel JP. Surveying Brachypodium diversity through deep sequencing and de-novo genome assembly. I International Brachypodium Conference. Modena. 19-21/06/2013.

Catalan P., López-Álvarez D., Contreras B., Cantalapiedra C., Gordon S., Vogel J. Comparative genomics, phylogenetic, and biogeographical studies of the *Brachypodium* (Poaceae: Brachypodieae) model complex. Monocots V. New York. 7-13/07/2013.

Raz L, Viruel J, Segarra-Moragues JG, Wilkin P, Catalan P. Economic botany of *Dioscorea* in the 21st century and a new phylogenetic framework for applied research. Monocots V. New York. 7-13/07/2013.

Catalan P., López-Álvarez D., Bellosta C., Pérez-Collazos E., Corke F., Mur L., Zubair H, Draper J, Doonan JH. Phenotypic, genotypic and metabolomic analyses within the *Brachypodium distachyon* complex (Poaceae): first approaches to phenomics and GWA studies. EPPN workshop. Porto Heli. 5/09/2013.

Moreno, Y. Complex Disease Spreading. *Second Symposium of the Institute for Basic Science Towards a Theoretical Description of Nonlinear Dynamics in Complex Systems*, Seoul, Korea. August 2013.

Moreno, Y. Understanding Human Behavior. *The Being of Science*, ISI Foundation, Turin, Italy. Junio 2013

Moreno, Y. Complex Multilevel Networks. *Uncertainty in Interactions Networks*, Bath University, UK. June 2013.

Moreno, Y. Structure and Dynamics of Online Social Systems. *Final Conference of Cyberemotions*, Warsaw, Poland. January 2013.

Comunicaciones orales

Se han presentado 33 comunicaciones orales en congresos nacionales e internacionales. 21 de las mismas se mostraron en eventos nacionales y entre ellos destacar las participaciones en el *VI National Conference*. Zaragoza (España) en enero de 2013. Se listan a continuación dichas comunicaciones, con los autores y las fechas y lugares de celebración.

Díaz-Moreno I, Cruz-Gallardo I, Díaz-Quintana A, Donaire A, Velázquez-Campoy A, Curd RD, Rangachari K, Birdsall B, Ramos A, Holder AA, De la Rosa MA. Antimalarial activity of cupredoxins: The interaction of *Plasmodium* merozoite surface protein 1-19 (MSP1-19) and rusticyanin. *XIII International Congress of the Spanish Biophysical Society (SBE)*. Valencia (España). Valencia 2013

Abián O, Vega S, Marcuello C, Lostao A, Neira JL, Velázquez-Campoy A. NS3 protease from hepatitis C virus: Biophysical characterization of a partially disordered protein domain. *II Reunión de la Red Española de Biofísica de los Virus (BioFiViNet)*. Madrid (España). Abril 2013

Picorel R, Sancho D, Bernal M, Velázquez-Campoy A. Interactions Cu (I)-CCS (the copper chaperone for the copper/zinc superoxide dismutase) of soybean. *Molecular Machineries for Ion Translocation Across Biomembranes (EU COST Action MC0902)*. 4th Annual MC and Joint WG Meeting. Innsbruck (Alemania). Marzo 2013

Abián O, Vega S, Sancho J, Velázquez-Campoy A. Nuevos inhibidores alostéricos de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C. *XXXVIII Congreso Anual de la Asociación Española para el Estudio del Hígado (AEEH)*. Madrid (España). Febrero 2013

Abrunheiro L, Camarinha M, Clemente-Gallardo J, Geometric Hamiltonian formulation of a variational problem depending on the covariant acceleration, *The Cape Verde International Days on Mathematics 2013*, Praia (Cabo Verde), Abril 2013

Villanueva R, Ferreira P, Fernández-Silva P, Cabon L, Susin S, Medina M. Dimerization affects the reductase and pro-apoptotic functions of the human apoptosis-inducing factor. *BIFI 2013: VI National Conference*. Zaragoza (España). Enero, 2013

Sánchez-Azqueta A, and Medina M. Active Site Architecture and Protein Motion Evolution in Plant-Type Ferredoxin-NADP⁺ reductases. *XIII International Congress of the Spanish Biophysical Society*. Valencia (España). Junio, 2013

Hurtado-Guerrero R. Structural biology: a tool to decipher the molecular mechanism of glycoproteins and a basis for drug design. Copenhagen. 2013

Castro A and Gross E. K. U. Theoretical shaping of femtosecond laser pulses for ultrafast molecular photo-dissociation with control techniques based on time-dependent density-functional theory. *TDDFT Conference in Nantes*. Nantes (Francia). Abril 2013.

Borque, A.; Esteban, L.M.; Sanz, G. et al. Analysing temporal biochemical relapse after prostatectomy and perineural or lymphovascular invasion. *IV Rising Stars in Urology*. Granada. Marzo 2013.

Esteban, L.M.; Sanz, G. and Borque, A.; Evaluating the role of correlations among markers in risk prediction models. *XIV Conferencia Española de Biometría*. Ciudad Real. Mayo 2013.

Galbete A, Moler JA and Plo F. A covariate adjusted response adaptive design based on the Klein urn. *Seventh International Workshop on Simulation*. Rimini (Italy). May 2013.

Galbete A, Moler JA, Plo F and Urmeneta H. Randomization based inference in clinical trials. *Seventh International Workshop on Simulation*. Rimini (Italy). May 2013

Galbete A, Moler JA and Plo F. Randomization based inference for the drop-the-loser rule. *Model-Oriented Data Analysis and Optimum Design, mODa10*. Lagow Lubuski (Poland). June 2013.

Esteban, L.M.; Borque, A. and Sanz, G. Estimation of models under AUC criterion. *XXXIV Congreso SEIO*. Castellón. Septiembre 2013.

Gouet, R.; López, F.J. Sanz, G. Near record values. *XXXIV Congreso SEIO*. Castellón. Septiembre 2013.

Gouet, R.; López, F.J.; Maldonado L.P. and Sanz, G. Statistical inference for continuous distributions based on delta-records. *XXXIV Congreso SEIO*. Castellón. Septiembre 2013.

Losilla Anadón G. Advances in the High Performance Computing group. *VI National Conference BIFI 2013*. Zaragoza (España). 30 Enero - 1 Febrero 2013.

Losilla Anadón G, Giner Gracia A. Memento: the new supercomputer at BIFI. *VI National Conference BIFI 2013*. Zaragoza (España). 30 Enero - 1 Febrero 2013.

Losilla Anadón G. Recursos y servicios HPC en el BIFI. *Presentación recursos y servicios de cálculo: BIFI, Ibercivis, BSC, RES y PRACE*. Zaragoza (España). 26 Septiembre 2013.

Fiasconaro A, Falo F. DNA (over)stretching: a dynamical model". *VI National Conference BIFI 2013*, Zaragoza, Spain, January 30, 2013.

Bergues-Pupo AE, Bergues JM, Falo F. Study of the influence of THz fields on thermal properties of DNA. *VI National Conference BIFI 2013*, Zaragoza, Spain, January 30, 2013.

Tapia-Rojo R, González A, Mazo JJ, Fillat MF, Peleato ML, F. Falo F. Finding binding sites in cyanobacterial genome through a mesoscopic model and free energy landscape analysis". *VI National Conference BIFI 2013*, Zaragoza, Spain, January 30, 2013.

Perez-Gavero S, The Janus family: a Special Purpose Computer generation devoted to spin glasses. *14th International NTZ-Workshop on New Developments in Computational Physics, CompPhys13*. Leipzig (Alemania). Noviembre 2013

Janus Collaboration: Baños R. A, Cruz A, Fernandez L.A, Gil-Narvion J. M, Gordillo-Guerrero A, Guidetti M, Iñiguez D, Maiorano A, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz Sdupe A, Navarro D, Parisi G, Perez-Gavero S, Ruiz-Lorenzo J. J, Schifano S.F, Seoane B, Tarancón A, Tellez P, Tripiccion R, Yllanes D. Critical Behavior of Spin Glasses in a Field. *VI National Conference BIFI 2013*. Zaragoza (España). Enero-Febrero 2013.

VI National Conference BIFI 2013. "Critical Behavior of Spin Glasses in a Field". 'VI Reunión Nacional del BIFI', Zaragoza; Enero - 2013.

'I Jornadas sobre Simulación Social y Distribución de la Riqueza', Córdoba; Marzo - 2013. 'Dynamics Days Europe XXXIII', Madrid (Spain); June - 2013. 'NOMA-13: Workshop on Nonlinear Maps and Applications', Zaragoza (Spain); Setiembre - 2013.

Catalan P., López-Álvarez D., Gordon S., Vogel J. A DNA barcoding method to discriminate between the model plant *Brachypodium distachyon* and its close relatives *B. stacei* and *B. hybridum*. *VI National Conference BIFI*. Zaragoza. 30/01-01/02/2013.

Cardillo A, Petri G, Nicosia V, Sinatra R, Gómez-Gardeñes J, and Latora V. [Evolutionary dynamics of time-resolved social interactions](#). *NetSci 2013*. Copenhagen (Dinamarca). Junio 2013.

Moreno, Y. Contributed talk at the "Workshop on Time-dependent and Multiplex Networks", University of Oxford, Oxford, UK. July 2013.

José A. Carrodeguás. Live-cell microscopy. Presentación oral. Tutorial. Congreso: VI National Conference BIFI 2013. Zaragoza Fecha: 30 enero-1 febrero, 2013

María Alejandra Nelo Bazán and José A. Carrodeguás.: Egr-1 is a transcriptional regulator of PSAP/Mtch1... Presentación oral (M. A. Nelo)... Congreso: VI National Conference BIFI 2013. Zaragoza Fecha: 30 enero-1 febrero, 2013

M. Medina. Análisis mecanístico de flavoproteínas para su aplicación biotecnológica. Comunicación Oral. Las raíces de la Bioquímica en Aragón y su proyección futura: 50 años de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular. 30 años del Departamento de Bioquímica de la Universidad de Zaragoza. Zaragoza FECHA: 7 Noviembre, 2013

Posters

Durante el 2013, se han presentado varios posters a eventos nacionales e internacionales. En total 36 posters que indican una importante actividad científica de difusión del BIFI durante este año 2013.

Ravanal MC, Velázquez-Campoy A, Regue L, Roig L, Reverter D. Structural analysis of the regulation of the DYNLL/LC8 binding to Nek9 by phosphorylation. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular (SEBBM)*. Madrid (España). Septiembre 2013

Ledesma-García L, Reyes-Ramírez F, Sanchez-Azqueta A, Velázquez-Campoy A, Medina M, Santero E. ThnA3 and ThnY, electron transfer proteins of the dioxygenase systems, evolved to become regulators of the tetralin biodegradation operons. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular (SEBBM)*. Madrid (España). Septiembre 2013

Moreno MJ, Martins PT, Velázquez-Campoy A. Applications of isothermal titration calorimetry in the characterization of the energetics, and kinetics, of the interaction of amphiphiles with lipid bilayers. *57th Annual Meeting of the Biophysical Society*. Philadelphia (EEUU), Febrero 2013

Clemente I, Velázquez-Campoy A, Sancho J. Rational increase in the stability of a protein model. *BIFI2013 - VI National Conference*. Zaragoza (España). Febrero 2013

Abián O, Vega S, Sancho J, Velázquez-Campoy A. Novel allosteric inhibitors of the NS3 protease from the hepatitis C virus. *Congreso: BIFI2013 - VI National Conference*. Zaragoza (España). Febrero 2013

Serrano A, Velázquez-Campoy A, Medina M. Characterization of the putative residues involved in the adenylyltransferase activity in FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*. *BIFI2013 - VI National Conference*. Zaragoza (España). Febrero 2013

Claveria R, Grazu V, Vega V, Martínez de la Fuente J, Velázquez-Campoy A, Abián O. Nanoparticles Gal-TAMRA: Entry and cellular effects studies in hepatitis C virus infected cells. *BIFI2013 - VI National Conference*. Zaragoza (España). Febrero 2013

Arruebo M, Vega S, Lanás A, Velázquez-Campoy A, Abián O. Identification of p8 ligands using high-throughput screening. *BIFI2013 - VI National Conference*. Zaragoza (España). Febrero 2013

Arias-Moreno X, Martínez-Olivan J, Velázquez-Campoy A, Millet O, Sancho J. ApoB and apoE peptides bind to the convex face of the fifth repeat of the LDL receptor. *BIFI2013 - VI National Conference*. Zaragoza (España). Febrero 2013

Arilla-Luna S, and Medina M. Analytical methods for the detection of the in vitro and in vivo quaternary organization of *Corynebacterium ammoniagenes* FAD synthetase. *BIFI 2013: VI National Conference*. Zaragoza (España). Enero, 2013

Sánchez-Azqueta A, Herguedas B, Martínez-Júlvez M, Hervás M, Navarro JA, and Medina M. A hydrogen bond network in the active site of *Anabaena* ferredoxin-NADP⁺ reductase modulates its catalytic efficiency. *BIFI 2013: VI National Conference*. Zaragoza (España). Enero, 2013

Serrano A, Velázquez-Campoy A, and Medina M. Characterization of the putative residues involved in the adenylyltransferase activity in FAD synthetase from *Corynebacterium ammoniagenes*. *BIFI 2013: VI National Conference*. Zaragoza (España). Enero, 2013

Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Villanueva R, Hermoso JA, Ferreira P, and Medina M. Crystallographic structure of reduced human apoptosis inducing factor (hAIF) in complex with NAD⁺ reveals two binding sites for the coenzyme. *BIFI 2013: VI National Conference*. Zaragoza (España). Enero, 2013

Sebastián M, Serrano A, Arilla-Luna S, and Medina M. Characterization of FAD synthetase mutants of *Corynebacterium ammoniagenes*. *XIII International Congress of the Spanish Biophysical Society*. Valencia (España). Junio, 2013

Villanueva R, Ferreira P, Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Marcuello C, Fernandez-Silva P, Hermoso JA, Cabon L, Lostao A, Susin A, and Medina M. Modulation of the reductase activity of

the human Apoptosis Inducing Factor by its redox induced dimerization. *XIII International Congress of the Spanish Biophysical Society*. Valencia (España). Junio, 2013

Navarro JA, Bashir Q, Leferink NGH, Ferreira, Moreno-Beltrán JB, Westphal AH, Díaz-Moreno I, Medina M, de la Rosa MA, Ubbink M, Hervás M, and van Berkel WJH. Electron transfer mechanisms in the interaction between GALDH and cytochrome c. *9th European Biophysics Congress EBSA2013*. Lisboa (Portugal). Julio, 2013

Navarro JA, Bashir Q, Leferink NGH, Ferreira P, Moreno-Beltrán JB, Westphal AH, Díaz-Moreno I, Medina M, De la Rosa MA, Ubbink M, Hervás M, and van Berkel WJH. Comunicación intermolecular entre la L-galactono-1,4-lactona deshidrogenasa y el citocromo c de plantas. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Ferreira P, Reis RAG, Nonato C, and Medina M. Mecanismo catalítico de la enzima Dihidrorotato deshidrogenasa de *Leishmania mayor*. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Medina M, Serrano A, Arilla-Luna S, and Sebastián M. Prokaryotic FAD synthetase: identification of putative drug-targeting points and screening for inhibitors. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Carro J, Medina M, Martínez AT, and Ferreira P. Transient-state studies of hydrogen tunneling in aryl-alcohol oxidase from *Pleurotus eryngii* and its Y92W variant. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Villanueva R, Ferreira P, Herguedas B, Martínez-Júlvez M, Fernandez-Silva P, Hermoso JA, Cabon L, Susín S, and Medina M. The oxido-reductase activity of the human Apoptosis inducing factor: dimerization and catalytic efficiency. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Hermoso JA, and Medina M. Ligand induced allosterism in the kinase module of the bifunctional FAD synthetase. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Ledesma-García L, Reyes-Ramírez F, Sánchez-Azqueta A, Velázquez-Campoy A, Medina M, and Santero E. ThnA3 and ThnY, electron transfer proteins of the dioxygenase systems, evolved to become regulators of the tetralin biodegradation operons. *XXXVI Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular*. Madrid (España). Septiembre, 2013

Rubio, J.; Borque, A.; Esteban, L.M.; Sanz, G. et al. Validación externa y estudio comparativo de la capacidad predictiva de cáncer de próstata no órgano-confinado entre un nomograma español y las tablas de Partin de 2012. *LXXVIII Congreso Nacional de Urología*. Granada. Junio 2013.

Torres A, Gómez-Gardeñes J, Falo F. A system biology approach to heterocyst differentiation. *VI National Conference BIFI 2013*, Zaragoza, Spain, January 30, 2013

Tapia-Rojo R, Mazo JJ, González A, Peleato ML, Fillat MF and Falo F. Free energy landscape analysis of mesoscopic model for finding DNA-protein binding sites. *Joint CRM-Imperial College School and Workshop in Complex System*, Barcelona. April 8 to 13, 2013

Tapia-Rojo R, Mazo JJ, González A, Peleato ML, Fillat MF and Falo F. Free energy landscape analysis of mesoscopic model for finding DNA-protein binding sites. *International Summer School Fundamental Problems in Statistical Physics XIII*, June 16-29 2013, Leuven, Belgium

Tapia-Rojo R, Marcuello C, Mazo JJ, Gómez-Moreno C, Lostao A, Falo F Analysis of unbinding force for the Flavodoxin-FNR and Ferredoxin-FNR via AFM experiments. *Molecular Kinetics '13*, Berlin, Sep 2th-5th, 2013

Bergues Pupo AE, Fiasconaro A, Falo F. Mesoscopic model of the overstretching transition of DNA, *Joint CRM-Imperial-College School and Workshop in Complex Systems*, Barcelona, Spain, 8-13 April 2013.

Fiasconaro A, Bergues Pupo AE, Falo F. DNA (over)stretching: a mesoscopic dynamical model, , *38th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO38)*, ICTP, Trieste, Italy, 25-27 March 2013

Janus Collaboration: Baity-Jesi M, Alvarez Baños R, Cruz A, Fernandez L.A, Gil-Narvion J. M, Gordillo-Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz Sudupe A, Navarro D, Parisi G, Perez-Gaviro S, Pivanti M, Ruiz-Lorenzo J. J, Schifano S.F, Seoane B, Tarancón A, Ricci-Tersenghi F, Tripiccione R, Yllanes D. Off-equilibrium Spin Glasses in a Field. *Frontier of Statistical Physics and Information Processing 2013, Satellite Meeting STATPHYS25*. Julio 2013.

Acedo C, Alonso A, Llamas F, Pimentel M, Sahuquillo E, Catalan P. Phylogenetic relationships of the pooid grasses based on ITS and ETS nuclear markers. *Monocots V*. New York. 7-13/07/2013.

Cardillo A, Reyes-Suárez C, Naranjo F, and Gómez-Gardeñes J. [The Evolutionary Vaccination Dilemma in Complex Networks](#). *NetSci 2013*. Copenhagen (Dinamarca). Junio 2013.

Viñas C, Martínez P, Iñiguez D and Carrodeguás JA. Automated multiparametric analysis of multidimensional microscopy images.. Presentación de póster (José A. Carrodeguás)... Congreso: VI National Conference BIFI 2013. Zaragoza. Fecha: 30 enero-1 febrero, 2013

Lostal Lanza E, Serrano Sanz F, Carrodeguás Villar JA, Martínez Alonso P, Sanz García F, Val Gascón C. Cell images analysis as a case of citizen science for advanced education. Submitted paper. Congreso: 7th International Technology, Education and Development Conference. Publicación: INTED2013 Proceedings, 2489-2496, 2013. ISBN: 978-84-616-2661-8. ISSN: 2340-1079. Valencia. Fecha: 4-5 Marzo, 2013

Lostal Lanza E, Serrano Sanz F, Val Gascón C, Sanz García F, Martínez Alonso Pand Carrodeguás Villar JA. A case of Citizen Science for Cell Biology Images Analysis. Submitted paper Congreso: XXXIII Congresso da Sociedade Brasileira de Computação. VII e-Science workshop. Publicación: Anais do CSBC, 1855-1862, 2013. ISSN: 2175-2761. Brasil. Fecha: 23-26 Julio, 2013.

4.4. Congresos, cursos y jornadas organizados por el BIFI

4.4.1. Congresos, cursos y jornadas organizados por el IUI, talleres de trabajo

Se han organizado 10 importantes eventos científicos por el instituto BIFI durante el año 2013. A continuación se recogen la información básica de los mismos, su duración y la fecha y lugar de celebración.

Título: EMTCCM School on Molecular Excited States

Duración: 40 h

Fecha y Lugar de celebración: 8-12 de abril de 2013. ZCAM/BIFI, Zaragoza

Título: Presentación recursos y servicios de cálculo: BIFI, Ibercivis, BSC, RES y PRACE

Duración: 2 h

Fecha y Lugar de celebración: 26 Septiembre 2013. BIFI, Zaragoza (España)

Título: Ciclo Semana Inmersión en Ciencias 2013, Universidad de Zaragoza, Seminario (1h)

"Supercomputation at Bifi. Clusters And Dedicated Machines" *Autor:* S. Pérez-Gaviro

Duración: 5h

Fecha y Lugar de celebración: 19 de junio de 2013. BIFI, Zaragoza

Título: Jornadas de Divulgación Científica en el Bifi,
Seminario (1h) "Supercomputation at Bifi. The Dedicated Machine: Janus" Autor: S. Perez-Gaviro
Duración: 5h

Fecha y Lugar de celebración: 22 de mayo de 2013. BIFI, Zaragoza

Título: Jornadas de Divulgación Científica en el Bifi,
Seminario (1h) "Supercomputation. Dedicated Machines: Janus"
Autor: S. Pérez-Gaviro

Duración: 5h

Fecha y Lugar de celebración: 15 de mayo de 2013. BIFI, Zaragoza

Título: Jornadas de Divulgación Científica en el Bifi,
Seminario (1h) "Supercomputation: Janus" Autor: S. Pérez-Gaviro
Duración: 5h

Fecha y Lugar de celebración: 8 de marzo de 2013. BIFI, Zaragoza

Título: Distributed Computing: Grid, Cloud and gateways to enhance its usage.

Duración: 30 min

Fecha y Lugar de celebración: 30 Enero 2013. BIFI (Zaragoza)

Título: Stand del proyecto SCI-BUS en EGI Community Forum 2013

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 9-12 Marzo 2013. Manchester (Inglaterra).

Título: Stand del proyecto SCI-BUS en IWSG 2013

Duración: 3 días

Fecha y Lugar de celebración: 3-5 Junio 2013. Zurich (Suiza).

Título: Stand del proyecto SCI-BUS en EGI Technical Forum 2013

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 16-20 Septiembre 2013. Madrid (España)

4.5. Conferencias

4.5.1. Organización de conferencias en las que participan Investigadores de otros centros de investigación.

El IUI BIFI realiza una labor de difusión del conocimiento dentro de su comunidad científica, para ello organiza conferencias en las que participan investigadores venidos de otros centros de investigación, para dar a conocer distintos aspectos de su investigación. Entre las organizadas durante el 2013 se pueden citar las siguientes:

Título: VI National Conference BIFI 2013

Ponente: -

Fecha y Lugar de celebración: 30 Enero - 1 Febrero 2013. Zaragoza (España)

VI National Conference BIFI 2013

Last name, Name	Institution/Company
Abián Franco, Olga	INSTITUTO ARAGONÉS DE CIENCIAS DE LA SALUD (I+CS)
Alías Niño, Miriam	Univerty of Zaragoza
Álvarez, Raquel	BIFI
Antoli, Beatriz	University of Zaragoza
Arilla-Luna, Sonia Susana	Universidad de Zaragoza
Arruebo, María	Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (I+CS)

Bergues Pupo, Ana Elisa	Universidad de Zaragoza
Bes, María Teresa	University of Zaragoza
Borge-Holthoefer, Javier	BIFI
Botello-Morte, Laura	University of Zaragoza
Broset, Esther	UNIVERSITY OF ZARAGOZA
Bruscolini, Pierpaolo	Universidad de Zaragoza
Burquete, Javier	CSIC
Calvo, Violeta	University of Zaragoza
Calvo, Laura	Universidad Zaragoza
Carrodeguás, José A.	Universidad de Zaragoza
Castelo Gutiérrez, Víctor	CSIC & MINECO
Castro, Alberto	ARAID - BIFI
Catalán, Pilar	University of Zaragoza
Ceballos Laita, Laura	Facultad de Ciencias (Universidad de Zaragoza)
Clavería, Rafael	BIFI
Clemente, Isabel	Universidad de Zaragoza
Clemente-Gallardo, Jesús	Universidad de Zaragoza
Conde, María	BIFI-University of Zaragoza
Contreras-Moreira, Bruno	EEAD/CSIC
Cozzo, Emanuele	Bifi
Echenique, Pablo	CSIC
Fabra, Javier	University of Zaragoza
Falo, Fernando	BIFI- Universidad de Zaragoza
Fernandez-Otal, Angela	University of Zaragoza
Ferreira Neila, Patricia	Universidad de Zaragoza
Ferrer, Alfredo	BIFI
Fiasconaro, Alessandro	Universidad de Zaragoza
Figuerola-Conchas, Ainoa	BIFI
Fillat, María F.	BIFI/University of Zaragoza
García, Pedro	BiFi
García Tobío, Javier	Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)
Gil Narvion, José Miguel	BIFI
Giner Gracia, Arturo	BIFI-UNIZAR
González, Andrés	Universidad de Zaragoza
Guinea, Francisco	Instituto de Ciencia de Materiales-CSIC
Guisan, José Manuel	Instituto de Catálisis. CSIC
Hermoso, Juan A.	Instituto de Química Física "Rocasolano", CSIC
Hernández, Sergio	Universidad de Zaragoza
Hurtado-Guerrero, Ramón	BIFI/Universidad de Zaragoza
Ibar, Jaime	BIFI
Iñiguez, David	Universidad de Zaragoza - ARAID
Isanta Amela, Silvia	UCM
Lázaro, Gracia	BIFI
Lira, Erandi	BIFI
López, Laura	University of Zaragoza- BIFI
López-Ruiz, Ricardo	Unizar
Losilla Anadón, Guillermo	BIFI-UNIZAR
Lostal, Eduardo	BIFI
Martínez, Juan	BIFI
Martínez-Júlvez, Marta	Universidad de Zaragoza
Medina, Milagros	Universidad de Zaragoza
Meloni, Sandro	Universidad de Zaragoza
Merino, Pedro	Universidad de Zaragoza
Nelo Bazán, María Alejandra	BIFI
Nogués, María Isabel	Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR)
Pallarés, M Carmen	Instituto de Nanociencia de Aragón. Universidad de Zaragoza
Peleato, María Luisa	Universidad de Zaragoza-BIFI
Pellicer-Lostao, Carmen	BIFI
Pérez-Gaviro, Sergio	EUPLA & BIFI
Perezan, Ramiro	UCM, Universidad Complutense de Madrid
Piedrahita Salom, Pablo	Universidad de Zaragoza
Ruiz, Gonzalo	BIFI
Sánchez, Anxo	Universidad Carlos III de Madrid
Sánchez Azqueta, Ana	Universidad de Zaragoza/BIFI
Sancho, Javier	BIFI-Unizar
Santos, Patricia	BIFI
Sanz, Joaquín	Institute BIFI
Sebastián, María	Universidad de Zaragoza, BIFI

Sebastián Yague, Álvaro	EEAD-CSIC
Serran Aguilera, Lucia	University of Granada
Serrano, Fermín	Fundación Ibercivis
Serrano, Ana	University of Zaragoza
Tapia, Rafael	Universidad de Zaragoza
Torreblanca Gonzales, Renzo	Universidad de Zaragoza
Val , Carlos	Ibercivis
Valero González, Jessika	BIFI
Valles, Rubén	BIFI
Vega, Sonia	BIFI
Velázquez-Campoy, Adrián	BIFI
Vergara Larrayad, M ^a Yolanda	University of Zaragoza- BIFI
Vidal, Isabel	University of Zaragoza
Vilà I Freixa, Jordi	Universitat de Vic
Villanueva Llop, Raquel	University of Zaragoza- BIFI
Yruela, Inmaculada	CSIC

4.6. Patentes

La solicitud de estas 2 patentes desde el área de Bioquímica pone de manifiesto el interés de explotación que tienen algunos de los resultados de investigación de este año 2013.

Título: Allosteric inhibitors of NS3 protease from hepatitis C virus

Autores: A. Velázquez-Campoy, O. Abián, S. Vega, J. Sancho

Nº solicitud: EP12382218.1

Fecha concesión:

País de prioridad:

Entidad titular: Universidad de Zaragoza, Fundación Agencia Aragonesa para la Investigación y el Desarrollo (ARAIID), Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (I+CS)

Título: Método para la selección de suidos con mejor calidad de la carne basado en un SNP en el gen que codifica la PEPCK citosólica porcina.

Autores: Pascual López Buesa, Carmen Burgos Serrano, Luis Varona Aguado, José Alberto Carrodeguás Villar.

Nº solicitud: P201231452

Fecha concesión: Solicitada 19/09/2012

País de prioridad: España

Entidad titular: Universidad de Zaragoza

4.7. Empresas SPIN-OFF

Durante el año 2013 no se han generado ninguna empresa Spin Off.

Apartado 5. Formación

5.1. Tesis dirigidas leídas en 2013

Como parte de las actividades del IUI BIFI hay que comentar también la labor de formación de nuevos investigadores que podrán seguir su carrera investigadora dentro o fuera del propio instituto, aunque siempre vinculados como miembros del mismo. Durante este año 2013 han sido 3 tesis defendidas. A continuación se especifican cada una de ellas con su título, doctorando, director/es de tesis, fecha de lectura y la calificación.

Título: Relación estructura-función de enzimas implicadas en el metabolismo de flavinas en organismos procariotas

Doctorando: Sonia Arilla Luna

Director/es: Milagros Medina

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 15 Julio 2013

Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Título: Mecanismos catalíticos en ferredoxina-NADP⁺ reductasas de tipo planta

Doctorando: Ana Sánchez Azqueta

Director/es: Milagros Medina

Universidad: Universidad de Zaragoza.

Fecha de defensa: 4 Octubre 2013

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Título: Evolución, genética y filogeografía de gramíneas templadas (Loliinae, Gramineae) y otros organismos modelo

Doctorando: Antonio José Díaz Pérez

Director/es: Pilar Catalán

Universidad: Universidad de Zaragoza / Escuela Politécnica Superior de Huesca

Fecha de defensa: 20/11/2013

Calificación: Sobresaliente cum laude

Dentro de la actividad del instituto también se ha dirigido uno proyecto fin de carrera y se han tutorizado por lo menos 4 proyectos fin de máster en el área de Bioquímica y Biofísica. A continuación se indica el detalle del primero.

Título: Desarrollo de un entorno web para la ejecución remota de aplicaciones de biología computacional

Proyectando: Alfonso Angulo Vela

Director/es: Guillermo Losilla Anadón, Arturo Giner Gracia

Universidad: Escuela de ingeniería y arquitectura, Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 19/09/2013

Calificación: 6,5

5.2. Becas de iniciación a la investigación

Título proyecto: Genómica comparada, biogeografía y evolución floral y adaptativa de gramíneas modelo. CGL2012-39953-C02-01

Beneficiario: Rubén Sancho Cohen

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad. Contrato FPI.

Fecha de comienzo: 16 Diciembre 2013

5.3. Cursos impartidos

Sin tener en cuenta la actividad docente de los investigadores PDI en los distintos grados, postgrados, másteres, etc se han impartido por personal del BIFI los siguientes cursos durante 2013.

Título: OpenStack and WS-PGRADE hands-on introduction

Duración: 2h 30 min

Fecha y Lugar de celebración: 1 Febrero 2013. BIFI (Zaragoza)

Título: Networks: Structure and Diffusion Dynamics

Duración: 6 horas

Fecha y Lugar de celebración: Summer School "Emergent Dynamics of Discrete & Stochastic Multiscale Systems: analysis & simulation", TU Eindhoven, The Netherlands. June 2013.

Título: XVIII curso Flora y Vegetación Pirenaicas (director Luis Villar, colaboradora: Pilar Catalán)

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 15-19/07/2013, IPE, Jaca

Título: Clases teóricas y prácticas, asignatura de Teoría Cuántica de la Materia, Master en Física y Tecnologías Físicas

Duración: 6 horas

Fecha y Lugar de celebración: Universidad de Zaragoza, 2013

Apartado. 6. Proyección Internacional

6.1. Colaboraciones externas

Una de las características del IUI BIFI es también la investigación multidisciplinar en cuanto a que reconoce la colaboración como la herramienta útil para avanzar hacia la resolución de incógnitas en la investigación. Se colabora con los mejores especialistas estableciendo un feed-back que enriquece los resultados de investigación. Algunas de estas colaboraciones están ya consolidadas, mientras que otras se encuentran en proceso de serlo. Se han identificado durante este año 2013 66 colaboraciones, de las que 10 son con centros españoles y 56 internacionales, que se enumeran a continuación brevemente.

6.1.1. Colaboración con centros extranjeros:

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Chemistry Department FCTUC, Universidade de Coimbra, Portugal

Investigador colaborador: María Joao Moreno

Tipo de colaboración: Interacciones en membranas biológicas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México

Investigador colaborador: Enrique García-Hernández

Tipo de colaboración: Interacciones de nucleótidos con la F1-ATPasa

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Biological Science, National University of Singapore, Singapore

Investigador colaborador: Jayaraman Sivaraman

Tipo de colaboración: Interacciones proteína-proteína

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Chemistry, University of Cambridge, UK

Investigador colaborador: Andreas Bender

Tipo de colaboración: Cálculos predictivos de actividades biológicas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Biology, The Johns Hopkins University, Baltimore, Maryland, USA

Investigador colaborador: Ernesto Freire

Tipo de colaboración: Interacciones proteína-ligando y descubrimiento de fármacos

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Cell Biology and Physiology, University of North Carolina, Chapel Hill, North Carolina, USA

Investigador colaborador: John S. Reader

Tipo de colaboración: Interacciones enzima-inhibidor

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Cambridge (UK). Departamento de Química.

Investigador colaborador: Laura Itzhaki

Tipo de colaboración: Colaboración científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Politecnico di Torino (Italia). Departamento de Ciencia Aplicada y Tecnología.

Investigador colaborador: Alessandro Pelizzola

Tipo de colaboración: Colaboración científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centre de Recherche des Cordeliers. Paris, Francia.

Investigador colaborador: Dr. Santos Susín

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Sao Paulo, Sao Paulo, Brasil.

Investigador colaborador: Dra. Cristina Nonato

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Università degli Studi di Bari Aldo Moro, Bari. Italia.

Investigador colaborador: Dra. María Barile

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis. CSIC-Universidad de Sevilla. Sevilla.

Investigador colaborador: Dr. José A. Navarro

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro de Investigación Príncipe Felipe, Valencia.

Investigador colaborador: Dra. M.-Eugenia Armengod

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario. CONICET. Rosario. Argentina.

Investigador colaborador: Dr. Eduardo Ceccarelli

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Nacional de Rosario. Rosario. Argentina

Investigador colaborador: Dr. Néstor Cortez, Dra. Elena Orellano

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Nanociencia de Aragón. Zaragoza

Investigador colaborador: Dra. Anabel Lostao

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Química-Física Rocasolano. CSIC. Madrid

Investigador colaborador: Dr. Juan Hermoso

Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro de Investigaciones Biológicas. CSIC. Madrid
Investigador colaborador: Dr. Ángel T. Martínez
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Pablo de Olavide. Sevilla.
Investigador colaborador: Dra. Francisca Reyes
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Simon Fraser University/Química
Investigador colaborador: David Voadlo
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Copenhagen/Instituto de Glicómica
Investigador colaborador: Henrik Clausen
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Stony Brook University/Bioquímica
Investigador colaborador: Robert Haltiwanger
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Bath/Química farmacéutica
Investigador colaborador: Andy Watts
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Picardie/Química
Investigador colaborador: Aloysius Siriwardena
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Guanajuato/Microbiología
Investigador colaborador: Héctor Mora
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Kansas/Veterinaria
Investigador colaborador: Philip Hardwidge
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: CENTRO DE MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE CHILE
Investigador colaborador: Raúl Gouet
Tipo de colaboración: Proyectos y publicaciones conjuntas.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Ioannina, Department of Physics
Investigador colaborador: Ilias Amanatidis
Tipo de colaboración:

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Ioannina, Department of Physics
Investigador colaborador: Ioannis Kleftogiannis
Tipo de colaboración:

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Catania
Investigador colaborador: Mattia Frasca
Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Queen Mary University of London
Investigador colaborador: Vito Latora
Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Maribor
Investigador colaborador: Matjaz Perc
Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Strathclyde

Investigador colaborador: Ernesto Estrada
Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Physikalische und Theoretische Chemie/Universidad de Saarland
Investigador colaborador: Michael Springborg
Tipo de colaboración: Estudiar el quasipinning y el enredamiento en la serie isoelectrónica del litio así como en moléculas con tres electrones.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: CERN, Ginebra, Suiza
Investigador colaborador: Raymond Stora
Tipo de colaboración: Estudiar la renormalización causal en teoría cuántica de campos.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Physikalische und Theoretische Chemie/Universidad de Saarland
Investigador colaborador: Michael Springborg
Tipo de colaboración: Estudiar el quasipinning y el entrelazamiento en la serie iso-electrónica del litio.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Zentrum für Interdisziplinäre Forschung, Universidad de Bielefeld, Alemania
Investigadores colaboradores: Philippe Blanchard, Michael Dütsch, Florian Scheck, Joseph C. Várilly
Tipo de colaboración: Estudiar la renormalización causal en teoría cuántica de campos.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Vicerrectoría de Investigación, Universidad de Costa Rica
Investigador colaborador: Alicia Pérez
Tipo de colaboración: asesoría en la creación de un Instituto de Estudios Avanzados en la Universidad de Costa Rica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Lorentz Center, Leiden, Holanda
Investigador colaborador: Walter van Suijlekom
Tipo de colaboración: Organización del taller: "Noncommutative geometry and Particle Physics".

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Faculty of Natural Sciences and Mathematics. University of Maribor, Maribor, Slovenia.
Investigador colaborador: Matjaz Perc
Tipo de colaboración: Coautoría de un trabajo de Revisión.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Institute of Technical Physics and Material Science, Research Center for Natural Science, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary.
Investigador colaborador: Attila Szolnoki
Tipo de colaboración: Coautoría de un trabajo de Revisión.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Silesia, Faculty of Biology, Department of Plant Anatomy and Cytology
Investigador colaborador: Prof. Robert Hasterok
Tipo de colaboración: Proyecto International Brachypodium Initiative.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Aberystwyth- IBERS, Department of Plant Sciences
Investigador colaborador: Prof. John Doonan
Tipo de colaboración: Proyecto EPPN Brachy-Drought.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: USDA, ARS, Albany, CA
Investigador colaborador: Prof. John Vogel
Tipo de colaboración: Proyecto International Brachypodium Initiative.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Northeastern University, Boston, USA.
Investigador colaborador: Alessandro Vespignani

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: ETH Zurich, Suiza

Investigador colaborador: Frank Schweitzer

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: ISI Foundation, Turin, Italia

Investigador colaborador: Ciro Catutto

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Oxford

Investigador colaborador: Mason Porter

Tipo de colaboración: científica, proyecto europeo

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Limerick

Investigador colaborador: James P Gleeson

Tipo de colaboración: científica, proyecto europeo

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Queen Mary University

Investigador colaborador: Ginestra Bianconi

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: CEA, Paris, Francia

Investigador colaborador: Marc Barthelemy

Tipo de colaboración: científica, proyecto europeo

Centro de investigación/Departamento/Unidad: IMT Lucca, Italia

Investigador colaborador: Guido Caldarelli

Tipo de colaboración: científica, proyecto europeo

Centro de investigación/Departamento/Unidad: INSERM, Paris, Francia

Investigador colaborador: Vittoria Colizza

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: ISC, Florencia, Italia

Investigador colaborador: Stefano Boccaletti

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Maribor, Eslovenia

Investigador colaborador: Matjaz Perc

Tipo de colaboración: científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Max Planck Evolutionary Biology

Investigador colaborador: Manfred Milinski y Arne Traulsen

Tipo de colaboración: científica

6.1.2. Colaboraciones con centros españoles

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis, Universidad de Sevilla-CSIC, Sevilla

Investigador colaborador: Irene Días-Moreno, Antonio Díaz-Quintana

Tipo de colaboración: Interacciones en proteínas redox

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Departamento de Bioquímica y Biología Molecular y Celular, Universidad de Zaragoza, Zaragoza

Investigador colaborador: Julián Pardo

Tipo de colaboración: Interacción proteína-proteína

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Instituto de Biotecnología y Biomedicina, Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona

Investigador colaborador: David Reverter

Tipo de colaboración: Interacción proteína-proteína

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Biología Molecular y Celular, Universidad Miguel Hernández

Investigador colaborador: José Luis Neira

Tipo de colaboración: Interacciones proteína-proteína, proteína-ligando y descubrimiento de fármacos

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Instituto de Biotecnología y Biomedicina, Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona

Investigador colaborador: Salvador Ventura

Tipo de colaboración: Estabilidad y plegamiento de proteínas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Complutense de Madrid. Departamento de Química Física I.

Investigador colaborador: Antonio Rey Gayo

Tipo de colaboración: Colaboración científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de la Materia, CSIC, Madrid.

Investigador colaborador: Rafael A. Molina

Tipo de colaboración:

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Catania

Investigador colaborador: Mattia Frasca

Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Politécnica de Madrid

Investigador colaborador: Stefano Boccaletti lab.

Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Politécnica de Madrid

Investigador colaborador: Lucas Lacasa

Tipo de colaboración: Realización de tareas de investigación conjuntas

6.2. Estancias en otros centros de investigación

6.2.1. Estancias de investigación en centros extranjeros de investigadores del BIFI

Las estancias de investigación que se han realizado en centros extranjeros en el año 2013 se enumeran clasificadas por la duración de la estancia.

Estancias de >1 MES

Nombre del investigador: Raquel Villanueva Llop

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centre de Recherche des Cordeliers.

País: Francia

Duración: 3 meses

Fechas: 07/09/13 – 07/12/13

Nombre del investigador: Jesús Gómez Gardeñes

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Nacional (Bogota), Universidad Pedagógica y Tecnológica (Tunja), Universidad de Antioquia (Medellin), Universidad del Valle (Cali).

País: Colombia

Duración: 3 meses (15 días + 15 días + 1 mes + 1 mes)

Fechas: 9-22 Febrero, 1-14 Abril, 12 Ago.-9 Sept., 15 Nov.-15 Dic.

Nombre del investigador: Carlos Benavides-Riveros
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Physikalische und Theoretische Chemie/Universidad de Saarland
País: Alemania
Duración: >1 mes
Fechas: 15/04/2013-31/07/2013

Nombre del investigador: José Gracia Bondía
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Zentrum für Interdisziplinäre Forschung
País: Alemania
Duración: 2 meses
Fechas: 2 abr - 27 may

Nombre del investigador: José Gracia Bondía
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Universidad de Costa Rica
País: Alemania
Duración: Costa Rica
Fechas: 5 jul - 30 ago

Estancias de 15 a 30 días

Nombre del investigador: G. Sanz
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA. UNIVERSIDAD DE CHILE.
País: CHILE
Duración: 15-30 días
Fechas: Julio-Agosto 2013

Nombre del investigador: Jesús Gómez Gardeñes
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Universidad Rovira i Virgili (Tarragona)
País: España
Duración: 15 días
Fechas: 14-26 Octubre.

Nombre del investigador: José Gracia Bondía
Centro de investigación/Departamento/Unidad: CERN
País: Suiza
Duración: 15 días
Fechas: 17 feb - 2 mar

Estancias de 0 a 15 días

Nombre del investigador: Adrián Velázquez Campoy
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Chemistry Department FCTUC, Universidade de Coimbra
País: Portugal
Duración: 5 días
Fechas: 20 Mayo – 24 Mayo 2013

Nombre del investigador: Jesús Clemente Gallardo
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Dipartimento de Física, Università Federico II di Napoli
País: Italia
Duración: 6 días
Fechas: 30/06/2013-05/07/2013

Nombre del investigador: Jesús Clemente Gallardo
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Departamento de Matemática, Universidade de Coimbra
País: Portugal
Duración: 6 días
Fechas: 04/11/2013-09/11/2013

Nombre del investigador: Milagros Medina
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: University of Bergen.
País: Noruega
Duración: 2 días
Fechas: 23/10/13 – 15/10/13

Nombre del investigador: F. J. López Lorente
Centro de investigación/Departamento/Unidad: DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA. UNIVERSIDAD DE CHILE.
País: CHILE
Duración: 0-15 días
Fechas: Mayo 2013

Nombre del investigador: Víctor A. Gopar
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro Internacional de Ciencias
País: México
Duración: 6 días
Fechas: 1 al 7 de septiembre, 2013.

Nombre del investigador: José Gracia Bondia
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Lorentz Center, Universidad de Leiden
País: Holanda
Duración: 1 semana
Fechas: 13 - 19 oct

6.2.2. Estancias de investigación realizadas por investigadores extranjeros en el BIFI

Las estancias de investigación que realizadas por investigadores extranjeros en el BIFI en el año 2013 se enumeran clasificadas por la duración de la estancia.

Estancias >1 MES

Nombre del investigador: Irina Ionescu
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Germany
Duración: 6 meses
Fechas: 04/02/13-31/07/13
Investigador responsable del BIFI: Milagros Medina

Nombre del investigador: Francesco Chiaravalloti
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidad de Calabria, Italia
Duración: 6 meses
Fechas: 20/11/2013, estancia en curso.
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno

Estancias de 15 a 30 días

Nombre del investigador: Isabel Nogués González
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Consiglio Nazionale delle Ricerche, Istituto di Biología Agroambientale e Forestale, Monterotondo Scalo, Roma, Italy
Duración: 20 días
Fechas: 1/09/13 – 21/09/13
Investigador responsable del BIFI: Milagros Medina

Estancias de 0 a 15 días

Nombre del investigador: María Joao Moreno
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Chemistry Department FCTUC, Universidade de Coimbra
Duración: 9 días
Fechas: 29 Junio – 7 Julio
Investigador responsable del BIFI: Adrián Velázquez Campoy

Nombre del investigador: Prof. Robert Hasterok
Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Silesia, Faculty of Biology, Department of Plant Anatomy and Cytology
Duración: 8 días
Fechas: 10-17/05/2013
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

Nombre del investigador: Dr Alexander Betekhtin
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: University of Silesia, Faculty of Biology, Department of Plant Anatomy and Cytology
Duración: 8 días
Fechas: 10-17/05/2013
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

Nombre del investigador: Fernando Lledo
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Lorentz Center, Instituto de Ciencias Matemática y Universidad Carlos III, Madrid
País: España
Duración: 1 semana
Fechas: 10 - 15 jun

Nombre del investigador: Chiara Poletto
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: INSERM, Paris, Francia
Duración: 7 días
Fechas: 9/09/2013 al 16/09/2013
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno

Nombre del investigador: Mikko Kivela

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidad de Oxford, UK.

Duración: 7 días

Fechas: 14/10/2013 al 20/10/2013

Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno

Nombre del investigador: Guilherme Ferraz de Arruda

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidad de Sao Paulo, Brazil

Duración: 7 días

Fechas: 29/09/2013 al 5/10/2013

Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno

Nombre del investigador: Raúl Gouet

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidad de Chile

Duración: 0-15 días

Fechas: Febrero-Marzo 2013

Investigador responsable del BIFI: Gerardo Sanz

Nombre del investigador: Ilias Amanatidis

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: University of Ioannina, Department of Physics

Duración: 8 días

Fechas: 8 al 15 de junio, 2013

Investigador responsable del BIFI: Víctor A. Gopar

Nombre del investigador: Ioannis Kleftogiannis

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: University of Ioannina, Department of Physics

Duración: 8 días

Fechas: 8 al 15 de junio, 2013

Investigador responsable del BIFI: Víctor A. Gopar

Apartado 7. Interacción con la sociedad

El Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos tiene una fuerte tradición de interacción con la sociedad a través de diferentes canales y actividades. En 2013 se han realizado numerosas actividades no solo en el contexto regional o nacional, sino que la participación en proyectos europeos con colaboradores de diferentes países ha permitido ampliar la visibilidad del centro y la actividad investigadora que se realiza.

Uno de los medios más utilizados para la difusión y divulgación es su página web, donde se pueden encontrar noticias, eventos, ofertas de trabajo así como una descripción de las áreas de investigación y trabajo del instituto. En enero de 2013 se ha planteado que es necesario renovar y adaptar de nuevo la página web, con diseño más actual y creando otros espacios que se han valorado que aportarán valor añadido a la página.

Circuitos científicos



A lo largo del 2013 el BIFI ha participado por cuarto año consecutivo en los circuitos científicos de la Universidad de Zaragoza acogiendo visitas de diferentes institutos de secundaria rurales de la comunidad de Aragón. El objetivo de esta actividad era fomentar las vocaciones científicas entre los más jóvenes.

Congreso anual BIFI

A finales de enero tuvo lugar el VI Congreso Nacional del BIFI que, si bien tiene carácter científico, su difusión a través de distintos canales de prensa, tanto internos como externos a la Universidad de Zaragoza, hace que la opinión pública se haga eco del evento y se diseminen la dimensión y las conclusiones del mismo. Este año se celebró el 10º aniversario del BIFI lo que contribuyó a dar mayor relevancia al evento científico y por consiguiente al propio instituto.

El formato del congreso incluyó sesiones plenarias, con invitados y voluntarios, charlas, así como bosquejos cortos de los avances en cada línea de investigación del Instituto, proporcionando a la audiencia una introducción sobre lo que se ejecutó posteriormente en dos sesiones paralelas, dedicadas a "Bioquímica, Biofísica y Biología Celular Molecular" y "Física y Computación". El programa también incluyó presentaciones y tutoriales acerca de las instalaciones experimentales y computacionales del instituto.

Kampal Mapa de investigación de la Universidad de Zaragoza

Unos de los eventos destacados de este año 2013 es una muestra interesante de los resultados de un importante, meticuloso y arduo proyecto de investigación, denominado Kampal, llevado a cabo en el Instituto BIFI de la Universidad de

Zaragoza y realizado por el grupo de investigación liderado por el catedrático de la propia universidad y director del instituto, Prof. D. Alfonso Tarancón Lafita.

El lunes 18 de noviembre de 2013, a las 19 horas, en el Aula Magna del Edificio Paraninfo y bajo la presidencia del rector de la Universidad de Zaragoza y del consejero de Industria e Innovación del Gobierno de Aragón, tuvo lugar el acto de presentación de Kampal, Mapa de Investigación de la Universidad de Zaragoza.



Por la mañana se realizó una rueda de prensa en la que comparecieron el Vicerrector de Política Científica y el Director del BIFI.



Kampal es una herramienta informática creada por el Instituto Universitario de Investigación en Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) a iniciativa del Vicerrectorado de Política Científica que permite generar Mapas de Investigación de diferentes colectividades de la Universidad de Zaragoza en los cuales es posible visualizar gráficamente la productividad de sus investigadores y la intensidad de sus colaboraciones, concretadas en artículos publicados en revistas científicas y proyectos y contratos de investigación.

La aplicación proporciona, utilizando la información contenida en la base de datos Sideral de la Universidad de Zaragoza, estudios e informes tanto estáticos, ya precargados por la aplicación, como personalizados, obtenidos según los criterios definidos por el usuario seleccionando la colectividad de su interés y una serie de variables para su visualización.

Además, esta herramienta nace con un espíritu doblemente abierto. Por una parte en cuanto a su utilización, ya que, en aplicación de los compromisos con el Open Access de la Universidad de Zaragoza, la aplicación estuvo disponible a través de internet desde el momento mismo de su presentación. Por otra, en cuanto a su mantenimiento, ya que está previsto ir incorporando más funcionalidades atendiendo a nuevas necesidades detectadas y sugerencias recibidas.

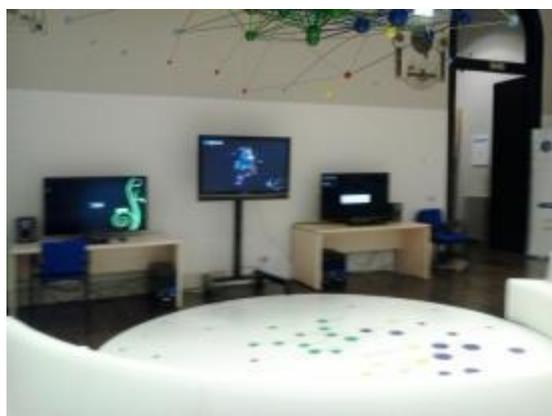


Los responsables universitarios están convencidos de que esta aplicación será de gran utilidad para la comunidad universitaria y para todos aquellos que tienen responsabilidades relacionadas con la política científica.

Tras la presentación, tuvo lugar la inauguración en la Sala África Ibarra, igualmente en el Edificio Paraninfo, de una exposición en la que se pudo contemplar, a modo de ejemplo, una amplia colección de mapas de investigación obtenidos con Kampal.



La muestra del proyecto Kampal finalizó con éxito tras 3 semanas abierta para público en general. Aproximadamente 500 personas han visitado presencialmente la exposición y han mostrado verdadero interés en el tema.



Por otra parte, se ha notado un importante movimiento en la web de Kampal (<http://kampal.unizar.es>) con 1500 visitas durante el tiempo que ha durado la muestra y con 1700 mapas generados.

Una de las innovaciones que aporta Kampal es que por primera vez el análisis de la investigación de una institución académica se realiza como si de una red social se tratara. Esta herramienta informática, única en el mundo, es capaz de mapear su investigación de forma instantánea.

Gracias a la aplicación de una serie de algoritmos, esta herramienta es capaz de analizar y cruzar datos relativos a una red con más de 10.000 personas y cientos de miles de colaboraciones, respetando en todo momento lo establecido por la legislación sobre protección de datos.

Jornadas BIFI-entidades empresariales

Durante este año 2013 se han promovido 3 jornadas de encuentro entre investigadores del instituto y clústers, entidades empresariales y fundaciones con actividad en I+D+i en el área de Bioquímica y Biotecnología.

- I Jornada BIFI-Arabiotech
- I Jornada BIFI-WorldPathol
- I Jornada BIFI-METDIS

Ciencia ciudadana

Durante el 2013 se ha consolidado la Fundación Ibercivis como una referencia nacional e internacional en la ciencia ciudadana, con participación influyente en distintos foros de ciencia-política-sociedad a nivel europeo: ciencia digital, ciencia abierta, ciencia 2.0, ciencia emergente, ciencia responsable....



Durante este año 2013 se ha publicado el **Libro Verde de la Ciencia Ciudadana: *Citizen Science for Europe*** Towards a better society of empowered citizens and enhanced research.



Portada Libro Verde Ciencia Ciudadana www.societize.eu

Se ha participado con diferentes experimentos/pruebas enmarcados en eventos con grupos y entidades a escala nacional y europea.

Se pueden destacar algunos ejemplos:

- Test de Turing con I3A,
- Biosoft con la EHU-CSIC,
- Bindsurf con la UCAM,
- HappyUp con la USJ y Simply,
- Liga Energética Edificio I+D con HowLab y GEE,
- IbercivisLab con etopia_,
- Células con DGA...

Se ha contado con un papel destacado en el mayor evento TIC de Europa: ICT2013 en Vilna, Lituania, donde se contó con un stand permanente y con una sesión de networking, con más de 5.000 profesionales registrados.

Otros eventos con repercusión en la ciudadanía en general han sido dos Hackathons en Zaragoza y en Madrid involucrando a un buen número de participantes.

A través de Ibercivis se han impartido y participado en cursos, conferencias, workshops, festivales, jornadas, ferias, etc, abiertas a diferentes tipos de públicos.

A continuación se comentan algunas de estos eventos:

- Presentación de Gripenet en Madrid (en 2012 se realizó en Zaragoza) del 25 de noviembre de 2013. Se trata de un proyecto de participación ciudadana en Ciencia. Si la meteorología es capaz de predecir el comportamiento de tormentas y huracanes, con datos suficientes y un modelo adecuado la ciencia también puede llegar a anticipar la evolución de una epidemia. Eso ayuda a reducir sus efectos y a mejorar las respuestas del sistema público de salud ante la enfermedad. La iniciativa realiza un seguimiento de los niveles de incidencia del virus de la gripe en España mediante la colaboración de voluntarios que, de forma anónima y a través de internet, informan regularmente a los investigadores de su estado de salud.
- Jornadas D+I. Divulgación científica para todos los públicos organizadas en octubre de 2013 y que tuvieron lugar en Etopia, Centro de Arte y Tecnología que reúne las iniciativas más innovadoras para divulgar la ciencia. Junto a las sesiones profesionales, hay un programa in vivo, abierto al público y gratuito.
- En mayo de 2013 se llevó a cabo un durante 2 días un Hackfest de Ciber ciencia Ciudadana en Madrid en el que participaron científicos amateurs, humanistas, tecnólogos, desarrolladores, diseñadores, estudiantes y científicos creando nuevos prototipos de proyectos/aplicaciones científicas, compartiendo sus conocimientos y



mostrando las herramientas de software libre que utilizan en sus proyectos científicos ([Epicollect](#), [PyBossa](#) y/o BOINC). Se mostró el potencial que la Ciencia Ciudadana brinda a los ciudadanos así como a científicos profesionales gracias a las nuevas tecnologías. En el evento se mostraron herramientas sobre *volunteer sensing*: adquisición de datos con teléfonos móviles para proyectos científicos, *volunteer thinking*: resolución de problemas científicos desde tu navegador web y *volunteer computing*: donde tu ordenador contribuye sus recursos ejecutando simulaciones científicas.

- El 31 de mayo tuvo lugar una presentación en el Aula 13 del pabellón 5 de la Universidad Católica San Antonio de Murcia (UCAM), las jornadas 'La supercomputación al servicio de la Bioinformática'.
- El 29 de junio tuvo lugar otro Hack Day Ciencia Ciudadana en Zaragoza, edificio CIEM (Avda. Autonomía). En él participaron científicos ciudadanos, personas humanas, tecnólogos, diseñadores, estudiantes, científicos, humanistas y todos los que sienten curiosidad por diversos temas. Se reunieron en el mismo espacio físico durante un breve pero intenso periodo de colaboración, afrontando retos colectivos. Se consiguió queremos concentrar a personas con ideas o bien dispuestos a unirse a las propuestas que se manifiesten, con ilusión de trabajo en equipo y voluntad para integrar sus diversos intereses sociales, tecnológicos, de diseño, comunicación, etc.
- BIFI participó indirectamente en la noche de los investigadores del 27 de septiembre a través de Ibercivis.

Se ha conseguido ampliar la difusión de ciencia ciudadana a través de diferentes vías. Por una parte, se ha alcanzado una fuerte presencia en redes sociales, twitter, facebook, linkedin, google+, youtube, vimeo, flickr, blogs, foros, etc.

Y por otra parte, se han creado varios videos explicativos, entre los que cabe destacar el video sobre el experimento de análisis de células, y el video promocional de Ibercivis con una novedosa técnica de parpadeo y música original, que transmiten los valores de la ciencia ciudadana. <http://www.ibercivis.es/>

Proyectos

La participación en proyectos europeos consorciados lleva a que durante el año 2013 investigadores del BIFI hayan participado en reuniones workshops, etc. Alguna muestra se ilustra en las siguientes fotos:

Reunión Interna Proyecto SCI-BUS,
Alemania, Abril 2013





Lanzamiento del proyecto CloudSME, Londres, Julio 2013

BIFI en los medios

Se ha realizado una recopilación de notas de prensa y aparición del BIFI en los medios durante el año 2013, en su mayoría en prensa escrita.

BIFI en general

28/01/2013. El BIFI celebra esta semana su VI Congreso Nacional
<http://www.aragondigital.es/noticia.asp?notid=103840&secid=9>

17/03/2013. Rubalcaba visita mañana el BIFI de la Universidad de Zaragoza.
http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/aragon/rubalcaba-visita-manana-bifi-universidad-zaragoza_839354.html

13/10/2013. El instituto BIFI trabaja sobre las bases del Nobel de Química.
http://prensa.unizar.es/noticias/1310/131014_z1_nobel.pdf

07/03/2013. Investigación de Universidad de Zaragoza distinguida en revista internacional.
http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/aragon/investigacion-universidad-zaragoza-distinguida-revista-internacional_836579.html

29/01/2013. Varios institutos de secundaria se suman al ciclo de conferencias de los Circuitos Científicos de la UZ y Ciencia Viva.
http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/aragon/varios-institutos-secundaria-suman-ciclo-conferencias-circuitos-cientificos-uz-ciencia-viva_825817.html

11/10/2013. La feria acerca la ciencia a los más pequeños.
http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/fiestasdelpilar/feria-acerca-ciencia-mas-pequenos_889931.html

Proyecto y exposición kampil

18/11/2013. Crean una herramienta pionera capaz de medir producción científica de la UZ. http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/aragon/crean-herramienta-pionera-capaz-medir-produccion-cientifica-uz_899986.html

18/11/2013. Kampil, una herramienta para medir la investigación de la Universidad de Zaragoza. http://www.zaragozavirtual.net/news/view/kampil_una_herramienta_para_medir_la_investigacion_de_la_universidad_de_zaragoza

18/11/2013. La UZ crea una aplicación para conocer el estado de la investigación. http://www.heraldo.es/noticias/aragon/2013/11/18/la_crea_una_aplicacion_para_conocer_estado_investigacion_257465_300.html

18/11/2013. Kampil, una herramienta para medir la investigación de la Universidad de Zaragoza. <http://www.aragonhoy.net/index.php/mod.noticias/mem.detalle/id.140770>

19/11/2013. La aplicación on line Kampil muestra las colaboraciones científicas en tiempo real. <http://www.agenciasinc.es/Noticias/La-aplicacion-on-line-Kampil-muestra-las-colaboraciones-cientificas-en-tiempo-real>

19/11/2013. El mapa de la investigación en Zaragoza. <http://magazin.caipuntojoven.com/2013/11/19/el-mapa-de-la-investigacion-en-zaragoza/>

19/11/2013. La Universidad de Zaragoza presenta Kampil, el Mapa de Investigación del campus público aragonés. <http://www.aragoninvestiga.org/la-universidad-de-zaragoza-presenta-kampil-el-mapa-de-investigacion-del-campus-publico-aragones/>

19/11/2013. La aplicación on line Kampil muestra las colaboraciones científicas en tiempo real. http://www.tendencias21.net/La-aplicacion-on-line-Kampil-muestra-las-colaboraciones-cientificas-en-tiempo-real_a27365.html

19/11/2013. Kampil, una herramienta para medir la investigación de la Universidad de Zaragoza. <http://www.arredol.com/kampil-una-herramienta-para-medir-la-investigacion-de-la-universidad-de-zaragoza/>

21/11/2013. La App Kampil muestra las colaboraciones científicas en tiempo real. <http://www.iber-campus.es/la-app-kampil-muestra-las-colaboraciones-cientificas-en-tiempo-real-26213.htm>

Boletín iUnizar y kampil

<http://www.unizar.es/actualidad/vernoticia.php?id=14550&idh=4382#>

<http://www.unizar.es/actualidad/vernoticia.php?id=14791&idh=4410#>

http://prensa.unizar.es/noticias/1311/131118_z1_25.pdf

http://prensa.unizar.es/noticias/1311/131119_z1_17.pdf

http://prensa.unizar.es/noticias/1311/131119_z0_7.pdf

Proyecto CloudSME

24/07/2013. Inycom, Podoactiva y el BIFI participan en un proyecto europeo para el desarrollo de herramientas de computación en Cloud para pymes. <http://www.aragoninvestiga.org/inycom-podoactiva-y-el-bifi-participan-en-un-proyecto-europeo-para-el-desarrollo-de-herramientas-de-computacion-en-cloud-para-pymes/>

24/07/2013. PODOACTIVA EN EL PROYECTO "CLOUDSME". <http://www.sientelainnovacion.com/?p=462>

28/07/2013. Las empresas Inycom, Podoactiva y el BIFI participan en un proyecto europeo. http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/economia/empresas-inycom-podoactiva-bifi-participan-proyecto-europeo_872177.html

Empresas: Worldpathol

21/07/2013. I+D como receta para la crisis. http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/economia/i-d-receta-crisis_870496.html

24/07/2013. "A veces te sabe mal decir que a ti tampoco te va mal y lo dices con la boca pequeña". <http://aragondigital.es/noticia.asp?notid=110176&secid=6>

Gripenet

25/11/2013. GripeNet predice la incidencia de la gripe en tiempo real con datos de los ciudadanos. <http://www.agenciasinc.es/Noticias/GripeNet-predice-la-incidencia-de-la-gripe-en-tiempo-real-con-datos-de-los-ciudadanos>

25/11/2013. Presentación del proyecto GripeNet en Madrid < Ibercivis <http://www.scoop.it/t/las-aplicaciones-de-salud>

25/11/2013. Crean una plataforma 'online' para que los ciudadanos ayuden a monitorizar los datos de incidencia de la gripe. http://www.heraldo.es/noticias/suplementos/salud/2013/11/25/crean_una_plataforma_online_para_que_los_ciudadanos_ayuden_monotorizar_los_datos_incidencia_gripe_258303_1381024.html

25/11/2013. Instituto De Biocomputación Y Física De Sistemas Complejos. http://noticias.lainformacion.com/instituto-de-biocomputacion-y-fisica-de-sistemas-complejos/O_PzN5jXCKxywknIMVVkoBv6/

Ciencia ciudadana e Ibercivis

<http://tupiensas.com/tag/ibercivis/>

<http://www.abc.es/agencias/noticia.asp?noticia=1448464>

http://www.elperiodicodearagon.com/noticias/aragon/una-jornada-de-fusion-para-mentes-inquietas_865617.html

Hoy por hoy Zaragoza cadena Ser http://www.ivoox.com/280613-viernes-audios-mp3_rf_2175985_1.html

<http://www.ibercivis.es/wp-content/uploads/2013/05/Convenio-USJ-Ibercivis.pdf>

<http://www.rtve.es/alacarta/videos/la-aventura-del-saber/aventura-del-saber-20-02-13/1695218/>

<http://www.rivasaldia.tv/inicio/?idvideo=919>

<http://www.ibercivis.es/wp-content/uploads/2013/05/Noticia-Celulas.pdf>

<http://www.rtve.es/alacarta/audios/siglo-21/siglo-21-vanessa-paradis-17-05-13/1823809/>

<http://aragonhoy.aragon.es/index.php/mod.noticias/mem.detalle/id.133728>

<http://www.cermiaragon.es/noticias/aragon/estudiantes-aragoneses-contribuyen-en-la-investigacion-de-tratamientos-contra-el-can>

http://www.ibercivis.es/wp-content/uploads/2013/10/2013-09_Las-ciencias-y-las-letras-salen-a-las-calles-de-Zaragoza.pdf

http://www.ibercivis.es/wp-content/uploads/2013/11/Vilnius_Heraldo_131112_z0_8.pdf

<http://www.ibercivis.es/wp-content/uploads/2013/11/AragonDigital-131112.pdf>

http://sociedad.elpais.com/sociedad/2013/11/14/actualidad/1384383731_820058.html

http://www.ibercivis.es/wp-content/uploads/2013/11/Heraldo-de-Arg%C3%B3n-22_11_2013.jpg

Anexo I. Tabla resumen Actividades BIFI 2013 firmada por el director

Instituto de Biocomputación de Física de Sistemas Complejos (BIFI)
C/ Mariano Esquillor, s/n
50018 Zaragoza
Tfno. 976762989
bifi@bifi.es

1. Personal contabilizado EJC

1.1.

1.1.1. Miembros pertenecientes a la Universidad de Zaragoza contabilizados EJC

Personal UZA	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI	44	0	44
Investigadores	3	18	21
PTA	5	24	29
PA	0	2	2
TOTAL Personal UZA	52	44	96

1.1.2. Miembros pertenecientes al CSIC contabilizados EJC

CSIC	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI	1	0	1
TOTAL CSIC	1	0	1

1.1.3. Miembros pertenecientes al ARAID contabilizados EJC

ARAID	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
Investigadores	5	0	5
ARAID	5	0	5

1.1.4. Número total de miembros pertenecientes al Instituto contabilizados EJC

BIFI	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI	45	0	45
Investigadores	8	18	26
PTA	5	24	29
PA	0	2	2
TOTAL MIEMBROS BIFI UZA	58	44	102

1.2. Otros miembros no pertenecientes a ninguno de los Organismos anteriores

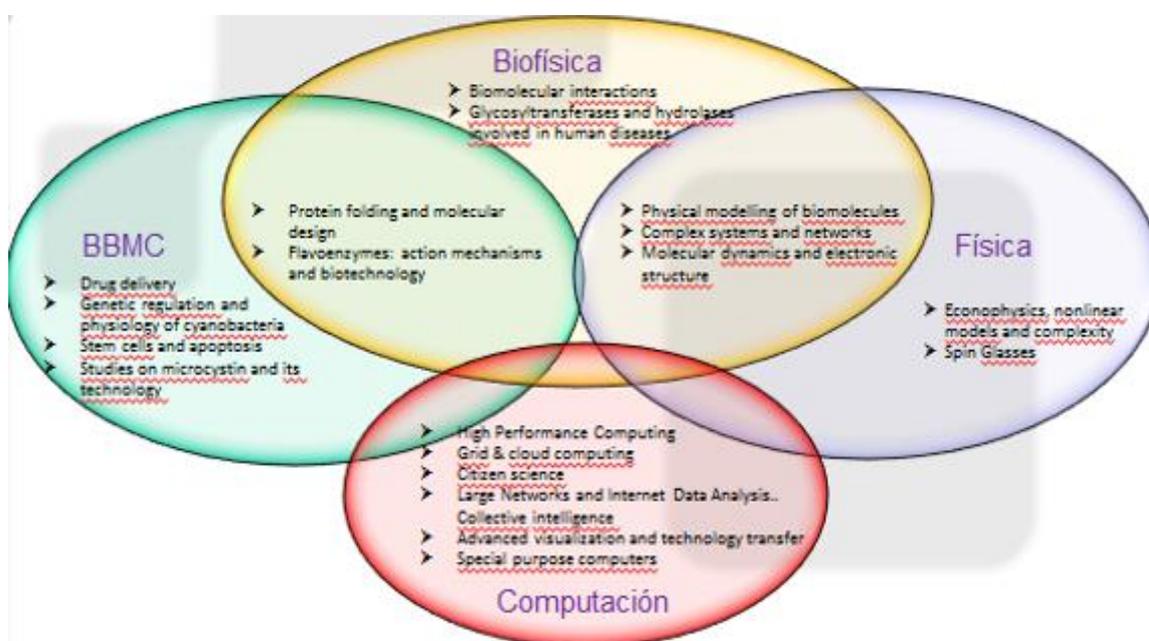
MIEMBROS COLABORADORES EXTERNOS	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
	90	0	90
TOTAL MIEMBROS BIFI NO-UZA	90	0	90

EJC=Equivalente en Jornada Completa

2. Líneas de investigación

Siguiendo con los objetivos generales que se planteó en 2011 el BIFI en cuanto a mejora estratégica respecto a etapas anteriores, se ha conseguido interrelacionar la actividad científica entre las 4 áreas de investigación del instituto.

El esquema siguiente recoge dicha actividad conexas, complementaria y sinérgica entre las áreas de investigación del BIFI. Puede apreciarse que, aunque en las áreas hay líneas de investigación específicas, se destaca una importante actividad científica en este instituto que utiliza la colaboración como herramienta y aporta el potencial científico que supone una estrategia de colaboración de investigadores con experiencia investigadora multidisciplinar. En el esquema de conjuntos, las líneas del área de computación no se incluyen en ninguna de las intersecciones porque se considera que participa en todas las áreas. Se ha optado por incluirlas en ninguna de las intersecciones, aunque realmente deberían aparecer solapadas con los otros 3 globos.



3. Estructura de financiación: captación de recursos y destino de los mismos

3.1.

3.1.1. Financiación gestionada a través de la UZA

FB_GA	FB_UZ	F_AU_CC	F_ES_CC	F_EU_CC	F_Empresas	Total
128.396	1.672.995	107.111	622.260	572.502	295.720	3.363.091

Leyenda

FB_GA=Financiación Basal (FB) Proporcionada en 2013 por el Gobierno de Aragón de Apoyo a los IUIs
 FB_UZ= Financiación Basal (FB) Proporcionada en 2013 por la Universidad de Zaragoza (nóminas profesores)
 FB_AU_CC= Financiación obtenida en 2013 en convocatorias autonómicas
 FB_ES_CC =Financiación obtenida en 2013 en Convocatorias estatales
 FB_EU_CC =Financiación obtenida en 2013 en Convocatorias europeas
 FB_Empresas= Financiación obtenida en 2013 de empresas

3.2. Estructura de costes

G_Personal	G_Fungible	G_Rep	Viaj&Dieta	G_Generales	Total
1.013.980,89	173.529,07	9.167,17	183.315,38	1.164.240,45	2.544.232,96

G_Personal=Gastos de Personal

G_Fungible=Gasto de fungible

G_Rep=Gastos Asociados a la Reparación de equipos=Equipos Laboratorio

Viaj&Dieta=Viajes y dietas

G_Generales=Gastos Generales=Gastos generales+libros+informática+mobiliario+conf No UZ

Asig. Pers- Confe NO UZ	Gastos generales	Informática	Libros	Mobiliario
2.200,00	733.286,89	421.512,44	1.450,06	5.791,06

4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

4.1. Resumen de Publicaciones en Revistas Científicas

Rango ISI	Nº publicaciones	%
≥10	2	2,38
de 6 a 10	5	5,95
de 5 a 6	4	4,76
de 4 a 5	13	15,48
de 3 a 4	20	23,81
de 2 a 3	19	22,62
de 1 a 2	12	14,29
<1	2	2,38
Nueva revista	2	2,38
no ISI	5	5,95
Nºpublicaciones 2013	84	

Índice de impacto reconocido según el Institute for Scientific Information

En Zaragoza, a 28 de enero de 2014



Fdo. Alfonso Tarancón Lafita
Director IUI BIFI

