

Instituto de Biocomputación
y Física de Sistemas Complejos



Memoria de Actividades

Septiembre - 2004

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

INDICE

<u>PRESENTACIÓN.....</u>	<u>3</u>
<u>EL INSTITUTO.....</u>	<u>4</u>
<u>UBICACIÓN.....</u>	<u>5</u>
<u>PERSONAL.....</u>	<u>6</u>
<u>INVESTIGACIÓN.....</u>	<u>9</u>
<u>ACTIVIDADES.....</u>	<u>11</u>
<u>FINANCIACIÓN.....</u>	<u>13</u>
<u>PERSPECTIVAS.....</u>	<u>14</u>
<u>ANEXO 1.....</u>	<u>15</u>
<u>ACTIVIDADES DEL CENTRO DE COMPUTACIÓN DEL BIFI.....</u>	<u>15</u>
<u>La maquina completa constara de 16 tarjetas cada una con 16 componentes de</u> <u>Lógica Programable. Con los datos de que disponemos la potencia de SSUE</u> <u>para simulaciones de modelos de spines será equivalente a 10,000 PC tipo PIV</u> <u>actuales.....</u>	<u>19</u>
<u>ANEXO 2.....</u>	<u>20</u>
<u>LABORATORIO DE BIOQUÍMICA</u>	<u>20</u>
<u>ANEXO 3.....</u>	<u>23</u>
<u>PUBLICACIONES.....</u>	<u>23</u>
<u>ANEXO 4.....</u>	<u>29</u>
<u>SEMINARIOS IMPARTIDOS.....</u>	<u>29</u>

P R E S E N T A C I Ó N

Esta memoria pretende dar datos acerca de las actividades, proyectos, logros y perspectivas del BIFI. Tras su creación en octubre de 2002, el BIFI ha desarrollado una importante actividad en los aspectos organizativos, de infraestructura, personal e investigación.

Nos hemos ubicado en el Edificio Cervantes, donde se han equipado el Centro de Supercomputación, el Laboratorio de Bioquímica y Biofísica y el Laboratorio de Ordenadores Dedicados. Hemos habilitado despachos y puestos de trabajo para 19 investigadores propios, además de para otros miembros del BIFI que comparten su actividad en otros Centros de la Universidad de Zaragoza. Disponemos también de una Secretaría para las labores de administración.

El crecimiento en medios humanos y materiales ha sido rápido y constante. Hemos obtenido nuevos proyectos de investigación y establecido nuevas colaboraciones en torno a objetivos estratégicos como el Proyecto Internacional de Fusión ITER, o de interés específico en nuestra ciudad como el desarrollo de software libre por el Ayuntamiento de Zaragoza. Todo ello ha supuesto establecer y afianzar colaboraciones con importantes centros nacionales e internacionales.

Nuestra actividad, basada en la excelencia de nuestros investigadores está en la línea de los Centros de referencia en España y en el Mundo. Pretendemos continuar en esta línea para conseguir un Instituto competitivo y con repercusión en nuestra Comunidad.

Finalidades

El Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) es un Instituto de Investigación Universitario de la Universidad de Zaragoza.

El objetivo del BIFI es **realizar una investigación competitiva en el campo de la Biocomputación y la Física de los Sistemas Complejos**, que pueda derivar además en transferencia de resultados y tecnología al ámbito industrial.

Nuestro punto de partida es aunar diferentes disciplinas de investigación, en concreto Biólogos especialistas en estudio de proteínas y en diseño de fármacos, y Físicos especialistas en el campo de los Sistemas Complejos y las Simulaciones Numéricas.

Esta colaboración es natural dado que en la actualidad en el campo del estudio de las proteínas, los métodos numéricos, computacionalmente muy exigentes, son imprescindibles para avanzar en el conocimiento de estos sistemas. Los físicos poseen el background necesario para desarrollar este tipo de simulaciones. Dentro de este tema general, el tema del plegamiento de proteínas y el desarrollo de fármacos apoyados en las simulaciones numéricas son a los que prestaremos mayor atención.

Organización

El Instituto BIFI está dirigido por J. F. Sáenz Lorenzo junto con los directores científicos: E. Marinari (Universidad "La Sapienza", Roma) para el sector de física, y E. Freire (Johns Hopkins University, Baltimore) para el sector de biología. El director encabeza el Consejo de Dirección, compuesto por 12 miembros, que se ocupan de todas las decisiones estratégicas del Instituto.

Sede provisional “Edificio Cervantes”

En espera de la construcción en el Actur del edificio dedicado a los institutos universitarios, necesitábamos un lugar donde desarrollar las actividades de un número de investigadores en constante crecimiento.

Por eso, hemos logrado que la universidad nos permitiera ubicarnos en el edificio “Cervantes”, en c/ Corona de Aragón, donde nos hemos trasladado en diciembre 2003. Hemos reestructurado el edificio, equipando siete despachos, un aula para seminarios, una pequeña sala de reuniones, el laboratorio de Supercomputación (funcionando desde Junio), un laboratorio de Bioquímica y Biofísica ya equipado y uno de Ordenadores Dedicados (ver Anexos 1 y 2 para los detalles del equipamiento) .

Actualmente, diecisiete personas entre investigadores, personal administrativo y becarios trabajan cada día en el edificio, y el número subirá con la incorporación de los últimos “Cajales”.

El BIFI incorpora a jóvenes investigadores de todo el mundo...

Hemos apostado especialmente por los puestos Ramón y Cajal, dada la garantía de calidad que ofrecen los investigadores que los obtienen. Para ello hemos realizado una amplia difusión de nuestro Instituto entre investigadores y Centros de todo el mundo, lo que, además de darnos a conocer, ha permitido crear interés por nuestras investigaciones y actividades. Esto, unido al hecho de las colaboraciones ya iniciadas y al reconocimiento a nivel internacional de las investigaciones realizadas por miembros del BIFI previamente, nos ha permitido obtener **siete Investigadores del programa Ramón y Cajal** en las dos últimas convocatorias: investigadores cualificados, procedentes de muchos países, que, entre todos los Centros y Universidades de España, han elegido el Instituto BIFI de Zaragoza para desarrollar su actividad investigadora: una clara señal de la vitalidad y empuje de nuestro Instituto en el campo que le es propio.

Confiamos en ellos y por tanto, de acuerdo con su calidad investigadora, apoyamos su trabajo, facilitándoles el que soliciten y encabecen nuevos proyectos de I+D. De hecho, los dos solicitados en la convocatoria del 2004 del MCyT por los dos "Cajales" que se habían entonces incorporado, han sido financiados, con lo que ya disponen de fondos adicionales para su trabajo.

De los investigadores Ramón y Cajal, 2 son españoles (uno se formó en la Universidad de Zaragoza) y los demás proceden de fuera de España. La incorporación de estos investigadores en un amplio abanico de campos de alto interés científico ha supuesto un fuerte avance en nuestras investigaciones.

Convocamos dos plazas de Investigadores Doctores, con fondos propios, en Septiembre de 2003, con las que contratamos al responsable de Computación, Isabel Campos Plasencia, para poner en marcha los laboratorios de computación y de gestionar los proyectos en el área de ciencia computacional en el instituto. La otra plaza fue concedida a Olga Abián Franco, que es responsable de la puesta en marcha y mantenimiento del laboratorio de Bioquímica.

Hemos ofrecido un contrato post doctoral, que nos permite traer a Zaragoza al Dr. Andrea Maiorano de la Universidad de Roma.

Hemos participado en el Programa Juan de la Cierva y contamos ahora con el Dr. Gregory Chass, de la Universidad de Toronto, Canada;

... e invierte en la formación de los futuros investigadores:

Mantenemos dos Becas para la realización de la Tesis Doctoral en Bioquímica y en Física, con fondos propios, homologadas en cuantía y prestaciones a las de la DGA.

Convocamos y financiamos "Becas de Iniciación a la Investigación", similares a las Becas de Colaboración, en un número variable dependiendo del número de candidatos, y que se aplican a estudiantes de toda España, avalados por miembros del BIFI.

Al BIFI se han incorporado numerosos doctorandos con becas de la DGA y del MCyT, así como becarios de programas internacionales IAESTE: estos

estudiantes tienen la posibilidad de acceso a los laboratorios del BIFI, donde pueden aprender no sólo a investigar, sino también a utilizar y mantener y supervisar el equipamiento, lo que es extremadamente valorado por las empresas.

El BIFI cuenta hoy con 76 miembros,

de los que 48 se encuentran en Zaragoza, 18 en el resto de España, y 10 extranjeros. 57 son doctores y 19 jóvenes en formación. La administración de este formidable conjunto es posible gracias al trabajo de nuestro Jefe de Negociado, Isabel Vidal.

No pondremos aquí abajo la lista de todos los miembros del Instituto: pretendemos sin embargo destacar nombres y procedencia de **aquellos que no estarían investigando o formándose en Zaragoza si el BIFI no existiera:**

2 Investigadores propios (Programa IBERCAJA Investigadores)

Isabel Campos Plasencia

Origen: Centro de Supercomputación "Leibniz", Munich, ALEMANIA

Olga María Abián Franco

Origen: Instituto de Catálisis y PetroleoQuímica (CSIC), Madrid

7 Investigadores RAMON Y CAJAL

Liliana Arrachea

Origen: Max Planck Institut für Physik Komplexer Systeme. Dresden, ALEMANIA

Pierpaolo Bruscolini

Origen: Departamento di Física, Politecnico di Torino. ITALIA

Luigi del Debbio

Origen: CERN. SUIZA

Jesús Clemente Gallardo

Origen: Departamento de Matemática. Universidade de Coimbra. PORTUGAL

Victor Gopar

Origen: Max Planck Institut für Physik Komplexer Systeme. Dresden, ALEMANIA

Yamir Moreno Vega

Origen: Departamento de Física Teórica. Universidad de Zaragoza. País de origen CUBA

Adrián Velázquez Campoy

Origen: Department of Biology. The Johns Hopkins University, Baltimore, EEUU

1 Investigador JUAN DE LA CIERVA

Gregory Chass

Origen: Universidad de Toronto. CANADA

1 becario postdoctoral

Andrea Maiorano

Origen: Universidad la Sapienza di Roma. ITALIA

1 Investigador en Comisión de Servicios

Joaquín Molla Lorente
CIEMAT, Madrid

2 Becarios predoctorales

José Luis Velasco Garasa (Zaragoza)
Sara Ayuso Tejedor (Burgos) (Programa CAI de formación)

2 Becarios IAESTE

Jian Lu (Zhejiang University, CHINA)
Olga Lobach (National Technical University, UCRANIA)

El BIFI pretende afirmarse como un centro de investigación interdisciplinario de excelencia en el marco de la investigación que se desarrolla en España. Por eso, en el BIFI se desarrollan líneas a la vanguardia entre los intereses actuales de la Bioquímica, Biofísica y Física de Sistemas Complejos. Destacamos en particular cinco macro-áreas:

Proteínas

En nuestros laboratorios clonamos y purificamos proteínas, caracterizamos experimentalmente la termodinámica y cinética de su plegamiento y desarrollamos e investigamos modelos teóricos, con un variado nivel de detalle, para interpretar y predecir los resultados experimentales. Paralelamente, nos fijamos en la caracterización, con diversas técnicas experimentales, de la interacción entre proteínas, especialmente las involucradas en el proceso de transferencia de electrones, y de la unión de pequeños péptidos y moléculas a proteínas. Aplicamos técnicas de biofísica y bioinformática y física computacional para el diseño racional de fármacos, fijándonos en particular en el desarrollo de fármacos inhibidores de la proteasa NS3 para el virus de la Hepatitis C.

Redes y dinámicas complejas

En el instituto estamos también investigando en el área de la biología desde el punto de vista de la estadística matemática. En concreto estamos desarrollando trabajos sobre dinámica de poblaciones y epidemiología en redes complejas. Estas técnicas de trabajo están teniendo mucho éxito para describir la complejidad de las relaciones entre especies, individuos, etc,... en redes biológicas, sociales y de comunicación. Actualmente estamos trabajando en modelos para describir la propagación de virus (biológicos o informáticos) a través de redes de comunicación y la expansión de epidemias.

Vidrios de Espines y Materiales Magnéticos

En el instituto se realizan investigaciones de las propiedades de los materiales magnéticos por medio de métodos computacionales. Tratamos de explicar las propiedades experimentales de estos materiales, especialmente de los spin glasses, y de predecir su comportamiento en condiciones de campo magnéticos extremos.

Ordenadores Dedicados

En el BIFI estamos diseñando un ordenador de propósito específico para simular vidrios de espín y materiales magnéticos: Super Spin Update Engine (SSUE). Este ordenador estará construido a base de lo que se denomina "Componentes de Lógica Programable", que permiten construir el hardware de la máquina de manera adaptada al problema que se quiere simular. En particular prevemos que SSUE de un rendimiento equivalente a 10,000 procesadores Pentium IV de hoy en día a la hora de simular materiales magnéticos.

Ciencia computacional

Además, gracias a nuestra experiencia en computación, en el BIFI somos conscientes del papel que el software y la capacidad de cálculo tienen en la moderna "sociedad de la información": por eso, el BIFI apuesta por el software libre, la tecnología de clusters de PCs, y desarrolla **software de utilidades tipo GRID Computing**, en colaboración con centros nacionales e internacionales.

Informaciones más detalladas se pueden encontrar en nuestra página web:
<http://bifi.unizar.es/investigacion/investiga.html>

Nuestro compromiso para la excelencia...

Todas las actividades desarrolladas en el BIFI pretenden consolidar el papel y la relevancia del Instituto como centro de investigación y de formación de nivel internacional, a través de la publicación de los resultados de nuestras investigaciones, del establecimiento de colaboraciones con centros españoles y extranjeros, de intercambio de científicos, de organización de seminarios y congresos que nos permiten traer a Zaragoza investigadores de nivel mundial, además de darnos a conocer y crear interés por nuestras investigaciones y actividades.

El abanico de nuestras actividades

está en continua expansión, a medida que nuevas personas y nuevas ideas se van apuntando. Nuestros logros, hasta ahora, incluyen:

- **84 publicaciones en 2003-2004** en revistas científicas internacionales (con "referee") en las que el autor declara la afiliación al BIFI (Anexo 4)
- **La organización de una serie de Seminarios periódicos**, en los que participan investigadores españoles y extranjeros de prestigio internacional (Anexo 5). Estos seminarios forman parte de un **Programa de Doctorado con la Mención de Calidad de la ANECA**, y cubren prácticamente todos los campos de actividad del BIFI.
- **El establecimiento de colaboraciones científicas con:** Universidad Complutense de Madrid, Centro de Astrobiología de Madrid, IMEDEA, CIEMAT, Università di Firenze, Politecnico di Torino, Universidad de Santander, ... Además, participamos en la iniciativa IRISGRID para crear una infraestructura nacional de centros de e-ciencia capaz de compartir recursos computacionales

Colaboración Bifi-Ciemat:

El objetivo de esta colaboración consiste en la resolución de problemas planteados en el campo de la fusión termonuclear desde la simulación y el cálculo numérico. Inicialmente se han identificado varios temas de posible colaboración y en dos de ellos se están produciendo avances significativos. Por un lado Daniel Fernández Fraile se encuentra en el Ciemat, con una Beca de Colaboración del Bifi, estudiando el confinamiento de partículas en plasmas de Fusión bajo la codirección de Victor Martín Mayor, miembro del BIFI, y Francisco Castejon, investigador del Laboratorio Nacional de Fusión (perteneciente al CIEMAT). Por otro lado, Joaquin Mollá, investigador del Ciemat, se encuentra en el BIFI estudiando problemas relacionados con la difusión de tritio en materiales, problema abierto en tecnología de Fusión, enfocándolo desde la perspectiva de simulación de materiales y contando con la colaboración de miembros del BIFI.

- **La participación en Proyectos de Investigación:** contamos con más de 15 proyectos aprobados y financiados, de los que dos son propuestos por los dos "Cajales" que se habían ya incorporado al BIFI en la fecha de la última convocatoria del MCyT:

- "Desarrollo de inhibidores de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C". Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy
- "Caracterización y análisis de fenómenos cooperativos en sistemas complejos ideales y reales". Investigador principal: Pierpaolo Bruscolini.

Proyecto coordinado BIFI-UNIVERSIDAD COMPLUTENSE - IMEDEA -
CENTRO DE ASTROBIOLOGIA.

- **La invitación de científicos extranjeros**, para estancias de algunas semanas, en las que contribuyen a las actividades del BIFI: I. Cizmádia, E. Freire, E. Marinari
- **La integración de nuestro Instituto en el entorno de Zaragoza**, a través de proyectos con el Ayuntamiento de Zaragoza para el desarrollo de software libre y de una “grid” ciudadana
- **El establecimiento de contactos con las empresas:** AIA (Barcelona) y Unión FENOSA.
- **La organización de Congresos Nacionales e Internacionales**, con frecuencia bianual, que permiten fortalecer la visibilidad del BIFI y de la Universidad de Zaragoza a nivel mundial.
Las actas e informaciones sobre el Congreso Nacional BIFI 2003 y el Congreso Internacional BIFI 2004 se pueden encontrar en la página <http://bifi.unizar.es/conferencias/conferencias.html>
Actualmente estamos preparando el congreso nacional 2005, y hemos propuesto organizar en Zaragoza el Congreso Internacional de BioCalorimetría de 2006, de importancia mundial.
- **La visibilidad del Instituto y de nuestras actividades** a través de nuestra página web <http://bifi.unizar.es>, y de participación en encuentros de divulgación, como por ejemplo la feria de muestras en Zaragoza, durante las fiestas del Pilar.

Captación de financiación externa.

En el BIFI trabajamos para conseguir financiación desde entidades y instituciones diferentes, estableciendo contactos formales y convenios con otros centros y participando, en régimen de competencia, en las convocatorias nacionales, regionales y universitarias de proyectos de investigación. Nuestros logros, hasta hoy, incluyen:

- **Convenio** Marco con **Ibercaja**
- **15 Proyectos de investigación MCyT** de los que subrayamos aquí los dos que no se habrían conseguido sin el BIFI :
- **Proyecto de investigación:** “*Desarrollo de inhibidores de la proteasa NS3 del virus de la hepatitis C*”. Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy, investigador Ramón y Cajal. Financiado por el MEC. Importe: 140.550 Euros
- **Proyecto de investigación:** “*Caracterización y análisis de fenómenos cooperativos en sistemas complejos ideales y reales*”. Investigador principal: Pierpaolo Bruscolini, investigador Ramón y Cajal. Financiado por el MEC. Importe: 105.620 Euros. Proyecto coordinado **BIFI - UNIVERSIDAD COMPLUTENSE - IMEDEA - CENTRO DE ASTROBIOLOGIA**
- **Convenio** con el **Ayuntamiento de Zaragoza** para el “*Desarrollo de software libre y de una grid ciudadana*”
- **Participación como Miembro de la iniciativa IRISGRID** para crear una infraestructura nacional de centros de **e-ciencia** capaz de compartir recursos computacionales
- **Convenio** de colaboración **BIFI-CIEMAT** en torno a la fusión en el proyecto ITER.
- **Proyecto** de Infraestructura de **Fondos FEDER**
- Inicio de colaboraciones con **AIA** (Barcelona) y **Unión FENOSA**.
- Participación en el nodo de Bioinformática y modelado de proteínas del **Instituto Nacional de Bioinformática**.
- Grupos consolidados **DGA**:
 - Biocomputación y Física de Sistemas Complejos
 - Biología Estructural

P E R S P E C T I V A S

Unas cuantas actividades futuras están ya planeadas y en fase de preparación:

- Congreso Nacional BIFI 2005 (Bianual)
- Congreso Internacional BIFI 2006 (Bianual)
- Congreso Internacional de BioCalorimetría 2006
- Becas BIFI predoctorales y de colaboración
- Seminarios del BIFI

Además, hemos participado en la convocatoria de la UZ para nuevas ayudas a proyectos de investigación, y en las convocatorias ministeriales de Acciones Integradas, con el fin de intercambiar investigadores y doctorandos con nuestros colaboradores en Italia. Pretendemos también participar en la convocatoria para ayudas del ministerio a la Movilidad de Investigadores, para traer científicos a Zaragoza para estancias largas (algunos meses).

Al mismo tiempo, estamos trabajando para firmar nuevos convenios con el ayuntamiento de París y las Universidades de París y Roma para desarrollar proyectos de tráfico peatonal y de vehículos, simulación de comportamientos colectivos (por ej. movimiento de personas en catástrofes), optimización de recursos en redes de comunicación, etc.

El BIFI ha crecido mucho desde su nacimiento hace dos años: con la incorporación, dentro de pocos meses, de los últimos investigadores RyC y la consolidación de las actividades actuales, nuevos proyectos y desafíos se plantearán y se llevarán a cabo.

A N E X O 1

ACTIVIDADES DEL CENTRO DE COMPUTACIÓN DEL BIFI

El Centro de Computación del BIFI pretende dar el soporte necesario a los investigadores del instituto para realizar el trabajo numérico que requieren sus proyectos de investigación. Dicho centro se está construyendo con proyectos de infraestructura provenientes de fondos FEDER, junto con aportaciones de proyectos de investigación de miembros del instituto.

El Centro de Computación se está estructurando como un cluster de ordenadores bajo el sistema operativo Linux. Se pretende que el centro esté dotado de máquinas representativas de lo que es en cada momento la tecnología punta en ordenadores dedicados al cálculo científico.

En lo que sigue se detalla el estado del centro de computación en los aspectos hardware y software, y describimos algunos proyectos de investigación en ciencia computacional que se están llevando a cabo en el BIFI.

HARDWARE

El BIFI cuenta con la siguiente infraestructura

Linux cluster de 72 nodos con las siguientes características

Procesador Pentium IV a 3,20 Ghz
60 nodos tienen 1GB de RAM y 12 tienen 2GB de RAM
Cada uno cuenta con un disco duro de 120 GB, lo que significa una capacidad de almacenamiento global de más de 70 Terabytes
Red interna de Comunicaciones. El cluster posee dos redes internas de comunicación:
Red rápida, Gigabit Ethernet (1000 Mb/s) que sirve de soporte a la comunicación necesaria en los programas que necesitan cálculo paralelo
Una red independiente de servicio, Fast Ethernet (100 Mb/s) dedicada a las tareas de administración del sistema.
Dos servidores que gestionan el cluster con las siguientes características

Procesador Pentium IV a 3,20 Ghz y 2GB de RAM
Dos discos SCSI de 160 GB en configuración replicada para salvaguardar al sistema de fallos

Uno de los servidores realiza la gestión y administración del cluster, y el otro sirve de interface para los usuarios.

La potencia pico del cluster del BIFI es de alrededor de 400GFlop/s (test de operaciones en coma flotante linpack), constituyendo la mayor fuente de potencia de cálculo de la Universidad de Zaragoza. Una información más detallada sobre el cluster se puede encontrar en la página web del instituto:

<http://bifi.unizar.es/computing/linuxcluster.html>

El cluster del BIFI se duplicará entre finales de este año y principios del que viene por medio de financiación proveniente de fondos FEDER.

Servidor de Instalación de Ordenadores

La instalación del sistema operativo Linux en el BIFI se realiza de modo automático a través de la red por medio de un servidor automático de instalaciones. Esta máquina es capaz de instalar remotamente sin intervención manual tanto los PCs personales de los investigadores del BIFI, como los nodos de computación que componen el cluster.

Mirror del Sistema Operativo SuSE

Dentro del convenio de colaboración firmado entre el BIFI y el Ayuntamiento de Zaragoza se contempla la instalación de un intercambiador de software libre. Para ello se ha puesto en marcha la compra de una máquina con gran capacidad de almacenamiento para albergar una copia del sistema operativo SuSE, uno de los más desarrollados en la actualidad entre los sistemas basados en el kernel de Linux. Las negociaciones con los managers de SuSE ya se han llevado a cabo, y el servidor de intercambio suse.unizar.es se instalará próximamente.

DESARROLLO DE SOFTWARE

El Centro de Computación del BIFI desarrolla software enfocado a aplicaciones científicas. Este software es primero implementado en el BIFI para probar su funcionalidad y posteriormente se hará accesible públicamente para su uso por la comunidad científica. Las líneas de trabajo son las siguientes

Sistemas de monitorización en clusters bajo Linux

En el BIFI hemos desarrollado un software de monitorización de redes de PCs, que controla diferentes aspectos de hardware y de software, el **BIFI-MONITOR**. Este software chequea en tiempo real aspectos como:

Estado Operacional de las máquinas

- Estado de los discos duros: Chequeo de errores de hardware y ocupación
- Memoria RAM detectada por el sistema
- Temperatura de operación de la CPU y del chasis
- Velocidad de los ventiladores internos
- Chequeo de accesibilidad a través de la red interna del cluster.
- Otros parámetros relacionados con el sistema operativo (kernel, runlevel, etc...)

Estado de las simulaciones numéricas que se están realizando

Los investigadores del BIFI usan el cluster para realizar simulaciones numéricas. Para usar los recursos del cluster de manera eficiente, un sistema de colas de batch se encarga de distribuir los trabajos en el cluster. El sistema de monitor incluye una visión global del estado del uso del cluster, con informaciones sobre quién esta usando las máquinas en cada momento y para qué tarea en concreto, así como la carga de trabajo de cada nodo.

Sistema de detección de intrusiones

En un cluster de ordenadores de esta complejidad se hace necesario establecer una política muy restrictiva de seguridad frente a posibles ataques externos. En particular los usuarios están autorizados a conectarse solo al servidor interactivo del cluster anteriormente descrito, que es la única máquina accesible desde la red exterior. El servidor interactivo tiene instalados los mecanismos de seguridad estándar en Linux, como son TCP/Wrappers y Corta Fuegos.

Sin embargo, para proteger al centro de fallos en estos mecanismos estándar, en el BIFI hemos desarrollado un sistema de detección de intrusiones especialmente adaptado a nuestras necesidades, es el **BIFI-IDS (BIFI-Intrusion Detection System)**.

El BIFI-IDS es un software instalado en el servidor de instalaciones, que detecta cambios en los ficheros del sistema operativo producidos

por ataques externos (por ejemplo hackers) o incluso por errores del administrador del sistema.

Cuando BIFI-IDS detecta una inconsistencia en algún fichero del sistema, envía un mensaje de error por e-mail al administrador del cluster y/o trata de corregir el error por sí mismo.

El sistema de monitorización del BIFI se puede ver en la link <http://bifi.unizar.es/computing/monitor.html> accesible mediante password a todos los miembros del instituto.

GRID Computing

El término GRID computing se refiere a una filosofía de trabajo que envuelve el uso compartido de recursos computacionales que están dispersos geográficamente. Dada la naturaleza del trabajo que se realiza en el BIFI, y la dispersión de muchos de sus colaboradores, una parte del esfuerzo en ciencia computacional en el instituto se dedica a desarrollar aplicaciones en esta área.

El BIFI forma parte de la iniciativa IRISGRID, que pretende crear a nivel nacional una infraestructura de GRID en los centros de investigación compartiendo recursos.

Los proyectos que se están realizando en el BIFI relacionados con GRID computing son los siguientes

GRID @ BIFI

El proyecto [GRID@BIFI](#) pretende desarrollar utilidades de software que permitan un aprovechamiento máximo de los recursos de CPU del instituto. En efecto, aparte del cluster bajo Linux, hay un numero considerable (alrededor de 20 sólo en la sede del BIFI del Edificio Cervantes) de PCs en los despachos de los investigadores, que están infrautilizados cuando el investigador no esta (noches, periodos de vacaciones, etc...).

Mediante este software pretendemos crear un interface de uso nocturno de esas maquinas. En este proyecto esta envuelto personal del BIFI y 2 estudiantes de colaboración de IAESTE (International Association for the Exchange of Students for Technical Experience).

Una primera versión de este software esta en fase de test en el BIFI, y a continuación pretendemos hacerla accesible a los centros y departamentos universitarios interesados en ello.

ZGRID

El proyecto ZGRID se enmarca dentro del convenio de colaboración que el BIFI ha suscrito con el Ayuntamiento de Zaragoza. El fin de este proyecto es investigar la posibilidad de usar las ideas y filosofía del GRID computing en un entorno ciudadano de intercambio de software libre.

BIFI-LRZ

Recientemente se ha iniciado un proyecto conjunto entre el BIFI y el Centro de Computación Leibniz en Munich (LRZ). Este centro de computación proporciona soporte computacional a universidades y centros de investigación alemanes, siendo uno de los mayores centros de computación del mundo.

La colaboración con el BIFI se concreta en un proyecto para el cluster bajo Linux del LRZ con el cluster del BIFI, usando para ello las técnicas habituales

de GRID computing. En una primera fase se instalara un sistema mediante el cual usuarios de LRZ podrán enviar trabajos al cluster del BIFI, y viceversa. A partir de este punto se harán estudios para establecer las necesidades de anchura de banda y mecanismos de seguridad necesarios para establecer este tipo de colaboraciones entre instituciones académicas a nivel Europeo.

LABORATORIO DE ORDENADORES DEDICADOS

Nuestro Grupo ha venido trabajando en los últimos años en el desarrollo de ordenadores dedicados para simular sistemas simples a velocidades muy superiores a la de los ordenadores convencionales.

Ahora hemos iniciado un proyecto, en colaboración con otras universidades europeas para construir una nueva generación que nos permita resolver problemas de alto interés científico, problemas abiertos dada su gran complejidad.

El objetivo del proyecto es construir un ordenador de propósito específico para realizar simulaciones de vidrios de spin. Este ordenador pretende ser una versión más avanzada de SUE (Spin Update Engine) que fue construido en el Departamento de Física Teórica de la Universidad de Zaragoza hace 6 años.

Para esta nueva máquina, Super SUE (SSUE) se pretende utilizar una nueva generación de Dispositivos de Lógica Programable (PLD) que introduce mejoras muy significativas en lo que concierne a capacidad, frecuencia y memoria. Gracias a estas mejoras es ahora posible integrar en un componente tres partes que estaban separadas en SUE: El generador de números RANDOM, la lógica de Update y el almacenamiento en memoria de Spins y Couplings.

La máquina completa constará de 16 tarjetas cada una con 16 componentes de Lógica Programable. Con los datos de que disponemos la potencia de SSUE para simulaciones de modelos de spines será equivalente a 10,000 PC tipo PIV actuales.

A N E X O 2

LABORATORIO DE BIOQUÍMICA

El Instituto BIFI dispone de un Laboratorio Experimental de Bioquímica y Biofísica equipado con tecnología de vanguardia enfocado en el trabajo de caracterización de estabilidad y plegamiento de proteínas y de interacciones macromoleculares.

En él es posible realizar proyectos de investigación básica, dentro de los campos de Biología Molecular y Estructural, y de investigación aplicada, dentro los campos de Diseño de Fármacos e Ingeniería de Proteínas, propios o en colaboración con entidades y grupos externos, que abarquen desde la expresión y purificación de proteínas de interés biomédico hasta la caracterización bioquímica, biofísica y estructural de tales proteínas.

Para la consecución de tales objetivos el Instituto BIFI dispone de personal cualificado para llevar a cabo las tareas de investigación y el desarrollo de tales proyectos.

Este Laboratorio proporciona a los miembros del Instituto un entorno adecuado para desarrollar investigación básica y aplicada en el campo de la biotecnología y la biomedicina. La instalación y el equipamiento de este laboratorio han sido financiados con fondos del propio Instituto, en una parte muy significativa, y con proyectos de infraestructura provenientes de fondos FEDER y aportaciones de proyectos de investigación de miembros del Instituto.

Está constituido por tres secciones básicas y complementarias:

- **Biología Molecular**
Se dispone de toda la infraestructura necesaria para llevar a cabo la clonación, la expresión y la purificación de proteínas de interés biotecnológico y/o biomédico.
- **Bioquímica y Biofísica**
Se dispone de equipos para estudiar estabilidad y plegamiento de proteínas, caracterizar interacciones macromoleculares (proteína-ligando, proteína-proteína) y caracterización enzimática. Las áreas instrumentales más importantes son las de espectroscopía y calorimetría. Nos permite obtener información acerca de la energía puesta en juego en procesos biológicos a nivel molecular y atómico.
- **Cristalografía**
Determinación de estructura tridimensional de proteínas. Ésta es una herramienta indiscutible en el estudio de las interacciones intra- e intermoleculares, ya que proporciona información estructural a nivel atómico de la estructura de proteínas y su interacción con otras biomoléculas. Tanto el diseño molecular racional y el estudio de la relación estructura-función en proteínas se basan en la integración óptima de información energética y estructural.

I. EQUIPAMIENTO

En lo que sigue se detalla el equipamiento actual de cada sección experimental:

1. Biología Molecular

Equipo de PCR
Electroforesis de DNA y proteínas
Congeladores
Autoclave
Incubador Orbital
Sistema de Documentación de Geles

Estufa Calefactora
pHmetro
Balanzas de Precisión
Colector de Fracciones y Bomba Peristáltica
Cabina Flujo Laminar
Centrífuga de Alta Velocidad
Microcentrífugas
Sistema Ultrasonicación
Sistema de Purificación de Agua

2. Bioquímica y Biofísica

Espectrómetro de Absorbancia UV/VIS
Espectrómetro de Fluorescencia (Lector de Placas)
Espectrómetro Dicroísmo Circular, UV/VIS y Fluorescencia (Stopped Flow)

3. Cristalografía Macromolecular

Refrigerador
Estereomicroscopio

En los próximos meses se tiene previsto ampliar el equipamiento a través realizar las siguientes adquisiciones:

2 Calorímetros Isotérmicos de Valoración^{1,2}
2 Calorímetros Diferenciales de Barrido^{2,3}
1 Sistema de Cromatografía HPLC/FPLC²
1 Espectrómetro de Fluorescencia²
1 Sistema de Difracción de Rayos X²

¹ con cargo con cargo a proyecto SAF2004-07722 (M.E.C.)

² con cargo a proyecto de infraestructura del M.E.C. 2005

³ con cargo a ayudas de infraestructura de la Universidad de Zaragoza 2004

II. PROYECTOS I+D

Como resultado de la participación en la convocatoria de 2004 de Ayudas a Proyectos de Investigación I+D del M.E.C., se ha obtenido financiación para la realización de un proyecto propio del BIFI: **Desarrollo de Inhibidores de la Proteasa NS3 del Virus de la Hepatitis C** (SAF2004-07722, IP: Dr. Adrián Velázquez Campoy, investigador Ramón y Cajal).

III. REUNIONES Y CONGRESOS

En colaboración con la empresa Microcal LLC (Northampton, EEUU), estamos comenzando la organización de un Congreso Internacional de Biocalorimetría que tendrá lugar en 2006. Nos permitirá dar a conocer al Instituto como un centro de referencia en biocalorimetría y establecer contactos y colaboraciones con investigadores de otros centros.

A N E X O 3

PUBLICACIONES

En lo que sigue detallamos las publicaciones de los años 2003 y 2004 en las que los autores mencionan su afiliación al BIFI. Claramente, éste es un subconjunto de todas las publicaciones de los investigadores, que se han incorporado al BIFI a lo largo de los años 2003-2004.

2004

- Analysis of PIN1 WW domain through a simple Statistical Mechanics Model, P. Bruscolini, F. Cecconi, Biophys. Chem, special issue for the Proceedings of the BIFI Intl. Conference, 2004, in press.
- Local versus global knowledge in the Barabasi-Albert scale-free network model. J. Gomez-Gardeñes Y. Moreno, Physical Review E 69, 037103 (2004).
- Efficiency and reliability of epidemic data dissemination in complex networks. Y. Moreno, M. Nekovee, A. Vespignani, Physical Review E 69, 055101R (2004).
- Dynamics of rumor spreading in complex networks. Y. Moreno, M. Nekovee, A. F. Pacheco, Physical Review E 69, 066130 (2004).
- Fitness for synchronization of network motifs. Y. Moreno, M. Vazquez-Prada, A. F. Pacheco, Physica A 343, 279 (2004).
- Synchronization of kuramoto oscillators in scale-free networks. Y. Moreno, A. F. Pacheco, Europhysics Letters, in press (2004).
- Improved routing strategies for internet traffic delivery. P. Echenique, J. G. Gardeñes, Y. Moreno, Physical Review E, in press (2004).
- Modeling and simulations of the impact of network topology on epidemic protocols. M. Nekovee, Y. Moreno, Proceedings of International Conference on Complex Systems 2004, Boston, USA, in press (2004).
- On the robustness of complex heterogeneous gene expression networks. J. Gomez-Gardees, Y. Moreno, Luis M. Floria, BIFI 2004-Biophysical Chemistry special issue, in review (2004).
- Phase Transition in Tensionless surfaces, R. Cuerno, E. Moro, J.J. Ruiz-Lorenzo, and A. Sanchez, Submitted Biophysical Chemistry
- Low temperature properties of Ising spin glasses: (some) numerical simulations, J. J. Ruiz-Lorenzo, Review article in "Advances in Condensed Matter and Statistical Mechanics", Ed. E. Korutcheva and R. Cuerno. Published by Nova Science Publishers. ISBN 1-59033-899-5 (2004)
- Role of *Anabaena* Flavodoxin Hydrophobic Residues in Protein-protein Interaction and Electron Transfer to Ferredoxin-NADP⁺ Reductase, Susana Frago, Guillermina Goñi, Ana Serrano, Stephen G. Mayhew, Carlos Gómez-Moreno and Milagros Medina, Capítulo del libro: "*Photosynthesis: Fundamental Aspects to Global Perspectives*"., En prensa 2004
- Specificity for the coenzyme in ferredoxin-NADP⁺ reductase: an attempt to create a NAD⁺/H dependent enzyme, Marta Martínez-Júlvez, Jesús Tejero, José Ramón Peregrina, Carlos Gómez-Moreno and Milagros Medina, Capítulo del libro: "*Photosynthesis: Fundamental Aspects to Global Perspectives*". En prensa (2004)
- Role of neighbouring FMN side-chains in the modulation of flavin reduction potentials and in the energetics of the FMN:apoprotein interaction in *Anabaena* Flavodoxin, Isabel Nogués, Luis A. Campos, Stephen Mayhew, Javier Sancho, Carlos Gómez-Moreno and Milagros Medina, Biochemistry. En prensa 2004
- Role of the C-terminal tyrosine of ferredoxin-nicotinamide adenine dinucleotide phosphate reductase in the electron transfer processes with its protein partners ferredoxin and flavodoxin, Nogues I, Tejero J, Hurley JK, Paladini D, Frago S, Tollin G, Mayhew SG, Gomez-Moreno C, Ceccarelli EA, Carrillo N, Medina M., Biochemistry. (2004) 43:6127-37.

- Do proteins always benefit from a stability increase? Relevant and residual stabilization in a three-state protein by charge optimization, Luis A. Campos, Maria M. Garcia-Mira, Raquel Godoy-Ruiz, Jose M. Sanchez-Ruiz and Javier Sancho, *J. Mol.Biol.* (2004) *In Press*.
- Structure of stable protein folding intermediates by equilibrium? analysis: the apoflavodoxin thermal , intermediate, Luis A. Campos, Marta Bueno, Jon Lopez-Llano, María Ángeles Jiménez and Javier Sancho, *J. Mol.Biol.* (2004) *In Press*.
- The long and short flavodoxins. II: role of the differentiating loop in apoflavodoxin stability and folding mechanism, J. López-Llano, S. Maldonado, S. Jain, A. Lostao, R. Godoy-Ruiz, J.M. Sanchez-Ruiz, M. Cortijo, J. Fernández-Recio & J. Sancho, *J. Biol. Chem.* (2004). *In Press*
- The long and short flavodoxins. I: role of the differentiating loop in apoflavodoxin structure and FMN binding, J. López-Llano, S. Maldonado, M. Bueno, A. Lostao, M.A. Jiménez, M. P. Lillo , J. Sancho, . *Biol. Chem.* (2004). *In Press*.
- Asymptotic aging in structural glasses, T. S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio, *Phys. Rev. B* 70, 014202 (2004)
- "Neutron Fibres and Possible Applications to NCT", R. F. Alvarez-Estrada and M. L. Calvo, *Applied Radiation and Isotopes*.(Elsevier), Vol. 61, 841-844 (2004)
- " Flexible Macromolecular Chains with Constraints: A Quantum-Mechanical Approach", R. F. Alvarez-Estrada and G. F. Calvo, *J. Physics: Condensed Matter (Institute of Physics)*, Vol. 16 , S2037-S2046 (2004)
- A General Clustering Approach With Application to the Miyazawa-Jernigan Potentials for Amino Acids, J. G. Esteve and F. Falceto, *Proteins:Structure, Function and Bioinformatics*, 55:999-1004, (2004)
- Phase diagram of the (bosonic) Double-Exchange Model, J. L. Alonso, A. Cruz, L. A. Fernandez, S. Jimenez, V. Martin-Mayor, J. J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancon, *Enviado a Phys. Rev. B*
- Hpr as a model in protein folding and stability studies, Azuaga, A. I., Neira, J.L. and van Nuland, N. A.J., *Current protein and peptide science letters*, en prensa
- "The Frenkel-Kontorova Model", L.M. Floria, C. Baesens and J. Gomez-Gardenes, *Capitulo del libro "Coupled Map Lattices". Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag (En prensa)
- "Localization and Mobility in Nonlinear Schrodinger Lattices", J. Gomez-Gardenes, L.M. Floria and F. Falo, *Aceptado en Physics Letters A*
- "Non-integrable Schrodinger Discrete Breathers", J. Gomez-Gardenes, L.M. Floria, M. Peyrard and A.R. Bishop, *Aceptado en CHAOS*
- "Bound states of breathers in the Frenkel-Kontorova model", M. Meister and L.M. Floria, *Eur. Phys. J. B* 37, 213-221 (2004).
- "Directed transport of modulated structures in the Frenkel-Kontorova model with a pulsated coupling". L.M. Floria, P.J. Martinez, S. Flach and M.V. Fistul, *Physica D* 187, 100-107 (2004).
- Estrategias, Ideas y Problemas Recursivos, Ricardo López-Ruiz, *Anales del Centro Asociado de la UNED de Calatayud*, 1, (2004).
- Complex behaviour in a discrete logistic model for the simbiotic interaction of two species, R. López-Ruiz and D. Fournier-Prunaret, *Mathematical Biosciences and Engineering* 1 (2), 307-324 (2004).
- A Model of Characteristic Earthquakes and its Implications for regional Seismicity, R. López-Ruiz, M. Vázquez-Prada, J.B. Gómez and A.F. Pacheco, *Terra Nova* 16 ,116-120 (2004).
- Symmetry induced Oscillations in four-dimensional Models deriving from the van der Pol equation , R. López-Ruiz, *Chaos, Solitons and Fractals* 21, 55-61 (2004).
- Symmetry induced Heteroclinic Cycles in a CO2 Laser , R. López-Ruiz

and S. Boccaletti, *Int. J. of Bifurcation and Chaos* 14, 1121-1127 (2004)

- Indirect Allee Effect, Bistability and Chaotic Oscillations in a Predator-Prey Discrete Model of Logistic Type. R. Lopez-Ruiz, D. Fournier-Prunaret. <http://arxiv.org/abs/nlin.CD/0406019>
- Three Logistic Models for the Two-Species Interactions: Symbiosis, Predator-Prey and Competition. R. Lopez-Ruiz, D. Fournier-Prunaret. <http://arxiv.org/abs/nlin.AO/0406020>
- Awakening and Sleeping a Complex Network, R. Lopez-Ruiz, Y. Moreno, S. Boccaletti, D.-U. Hwang, A. F. Pacheco <http://arxiv.org/abs/nlin.AO/0406053>
- The conformational stability of the *Streptomyces coelicolor* histidine-phosphocarrier protein. Characterization of cold denaturation and urea-protein interactions. José L. Neira and Javier Gómez. *Eur. J. Biochem.* **271**, 2165-2181 (2004)
- The dimerization domain of the HIV-1 capsid protein binds a capsid protein-derived peptide: A biophysical characterization. María T. Garzón, María C. Lidón-Moya, Francisco N. Barrera, Alicia Prieto, Javier Gómez, Mauricio G. Mateu, and José L. Neira. *Protein Science*, **13**, 1512-1523 (2004).
- Chaotic Dynamics of a Gene Expression Model in Complex Heterogeneous Networks. J. G. Gardeñes, Y. Moreno, and L. M. Floria. Submitted for publication (2004).
- Synchronization of Coupled Oscillators in Complex Networks. Y. Moreno, and A. F. Pacheco. Submitted for publication (2004).
- An approach to the problem of generating irreducible polynomials over the finite field GF(2) and its relationship with the problem of periodicity on the space of binary sequences Ricardo Lopez-Ruiz, Enero 2004.
- Complex Behaviour in a Discrete Coupled Logistic Model for the Symbiotic Interaction of Two Species Ricardo Lopez-Ruiz and Daniele Fournier-Prunaret, Enero 2004.

2003

- Phase diagram and influence of defects in the double perovskites, J.L. Alonso, L.A. Fernandez, F. Guinea, F. Lesmes, V. Martin-Mayor, *Phys. Rev. B* 67, 214423 (2003)
- Off-equilibrium fluctuation-dissipation relations in the 3d Ising Spin Glass in a magnetic field, A. Cruz, L. A. Fernandez, S. Jimenez, J. J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancon, *Phys. Rev. B* 67, 214425 (2003)
- Binding of the c-terminal sterile {alpha} motif (sam) domain of human p73 to lipid membranes, Barrera, F. N., Poveda, J. A., González-Ros, J. M. and Neira, J. L. , *Journal Biological Chemistry* 278, 46878-46885, 2003
- The inactivating factor of glutamine synthetase is a "natively unfolded" protein, M;uro-Pastor, M.I., Barrera, F. N., Reyes, J. C., Florencio, F. J. and Neira, J. L. , *Protein science*, 12, 1443-1454, 2003
- The histidine phosphocarrier protein of *streptomyces coelicolor* folds by a partially folded species at low pH, Fernandez-Ballester, G., Maya, J., Martin, A., Parche, S., Gomez, J, Titgemeyer, F. and Neira, J. L., *European Journal of Biochemistry*, 270, 2254-2267, 2003
- Structure and dynamics of the potato carboxypeptidases inhibitor by 1h and 15n, gonzalez, c., Neira, J. L., Ventura, S., Bronsoms, S., Rico, M. and

- Aviles, X., Proteins: structure, function and genetics, 50, 410-422, (2003)
- Aging in Spin Glasses in three, four and infinite dimensions, S. Jimenez, V. Martin-Mayor, G. Parisi, A. Tarancon, *J. Phys. A: Math. and Gen.* 36, 10755 (2003).
 - The three-dimensional randomly dilute Ising model: Monte Carlo results, P. Calabrese, V. Martin-Mayor, A. Pelissetto, E. Vicari, *Phys. Rev. E* 68, 036136 (2003).
 - Brillouin and Boson peaks in Glasses from vector Euclidean Random Matrix Theory, S. Ciliberti, T.S.Grigerá, V.Martin-Mayor, G.Parisí, P.Verrocchio, *J. Chem. Phys.* 119, 8577 (2003).
 - Dynamic structure factor of the Ising model with purely relaxational dynamics, P. Calabrese, V. Martin-Mayor, A. Pelissetto, E. Vicari, *Phys. Rev. E* 68, 016110 (2003).
 - Phonons in supercooled liquids: a possible explanation for the Boson Peak, T. S. Grigera, V. Martin-Mayor, G. Parisi, P. Verrocchio *Nature* 422, 289 (2003).
 - Resilience to damage of graphs with degree correlations. A Vazquez, Y. Moreno, *Physical Review E* 67, 015101R (2003).
 - Disease spreading in structured scale-free networks. Y. Moreno, A. Vazquez, *European Physical Journal B* 31, 265 (2003)
 - Topology and correlations in structured scale-free networks. A. Vazquez, M. Boguñá, Y. Moreno, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, *Physical Review E* 67, 046111 (2003).
-
- Critical load and congestion instabilities in scale-free networks. Y. Moreno, R. Pastor-Satorras, A. Vazquez, A. Vespignani, *Europhysics Letters* 62, 292 (2003).
 - Strength distribution in natural fiber composites. G. Dill-Langer, R. Cruz, F. Kun, Y. Moreno, S. Aicher, H. J. Herrmann, *Physica A* 325, 547 (2003).
 - Time evolution of damage under variable ranges of load transfer. O. E. Yewande, Y. Moreno, F. Kun, R. Cruz, H. J. Herrmann, *Physical Review E* 68, 026116 (2003).
 - Creep rupture has two universality classes. F. Kun, Y. Moreno, R. Cruz, H. J. Herrmann, *Europhysics Letters* 63, 347 (2003).
 - Error diagrams and temporal correlations in a fracture model with characteristic and power-law distributed avalanches. Y. Moreno, J. B. Gomez, M. Vazquez-Prada, A. F. Pacheco, *European Physical Journal B* 34, 489 (2003).
 - Epidemic incidence in correlated complex networks. Y. Moreno, J. B. Gomez, A. F. Pacheco, *Physical Review E* 68, 035103R (2003).
 - Registering Seconds with a Conic Clock Ricardo Lopez-Ruiz and Amalio F. Pacheco, Noviembre 2003.
 - Shannon information, LMC complexity and Renyi entropies: a straightforward_approach Ricardo Lopez-Ruiz, Diciembre 2003.
 - Localized excitations in Josephson arrays. Part I: Theory and modeling. Juan J. Mazo, in *Energy Localisation and Transfer*, to appear in *Advanced Series in Nonlinear Dynamics*. World Scientific, 2003 (formato pdf).
 - Ageing in spin-glasses in three, four and infinite dimensions. S. Jiménez, V. Martín-Mayor, G. Parisi and A. Tarancón. *J. Phys. A*, **36**, 10755-10771 (2003).
 - Incidence in Correlated Complex Networks Y.Moreno, J. B. Gomez, A. F. Pacheco. *Physical Review E*, **68**, 035103(R) (2003).
 - Diagrams and Temporal Correlations in a Fracture Model with Characteristic and Power-Law Distributed Avalanches Y.Moreno, M. Vazquez-

Prada, J. B. Gomez, A. F. Pacheco. *European Physical Journal B* , **34**, 489 (2003).

- Size Dependency of Tension Strength in Natural Fiber Composites. G. Dill-Langer, R. Cruz, F. Kun, Y. Moreno, S. Aicher, and H. J. Herrmann. *Physica A*, **325**, 547 (2003).

- Load and Traffic Instabilities in Scale-Free Networks Y. Moreno, R. Pastor-Satorras, A. Vazquez, A. Vespignani. *Europhysics Letters* , **62**, 292 (2003).

- Symmetry induced Dynamics in four-dimensional Models deriving from the van der Pol Equation. Ricardo Lopez-Ruiz. Septiembre 2003.

- Asymptotic Behavior of a Model of Characteristic Earthquakes and its Implications for Regional Seismicity. R. Lopez-Ruiz, M. Vazquez-Prada, J.B. Gomez, A.F. Pacheco. Julio 2003.

- Dynamical generation of a gauge symmetry in the Double-Exchange model. J.M. Carmona, A. Cruz, L.A. Fernandez, S. Jimenez, V. Martin-Mayor, A. Munoz-Sudupe, J. Pech, J.J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancon, P. Tellez. *Phys.Lett. B* **560** (2003) 140-148.

- Low Temperature Properties of Finite Dimensional Ising Spin Glasses: (some) Numerical Simulations. J.J. Ruiz-Lorenzo. Junio 2003.

- The histidine-phosphocarrier protein of *Streptomyces coelicolor* folds by a partially folded species at low pH. Gregorio Fernández-Ballester, Javier Maya, Alejandro Martín, Stephan Parche, Javier Gómez, Fritz Titgemeyer, and José L. Neira. *Eur. J. Biochem* 270, pp. 2254-2267, 2003 (formato pdf).

- Discrete breathers in Josephson arrays. J. J. Mazo, and T. F. Orlando. *Chaos* 13, pp. 733-743, 2003 (formato pdf).

- Dissipative discrete breathers: Periodic, quasiperiodic, chaotic and mobile. P.J. Martínez, M. Meister, L. M. Floría, and F. Falo. *Chaos* 13, 2003, to appear

- How FMN binds to Anabaena apoflavodoxin: a hydrophobic encounter at an open binding site. A. Lostao, F. Daoudi, M.F. Irún, A. Ramón, C. Fernández-Cabrera, A. Romero and J. Sancho. *J. Biol. Chem.*, 2003, in press (formato pdf).

- Basin Bifurcations in a Two-Dimensional Logistic Map. Daniele Fournier-Prunaret, and Ricardo Lopez-Ruiz. Abr 2003.

- The active site of pepsin is formed in the intermediate conformation dominant at mildly acidic pH. L.A. Campos and J. Sancho. *FEBS Letters* **589**:89-95. 2003 (formato pdf).

- Complex Patterns on the Plane: Different Types of Basin Fractalization in a Two-Dimensional Mapping. R. López-Ruiz, and D. Fournier-Prunaret. *Int. J. of Bifurcation and Chaos* **13**, 287-310, 2003.

- Number and Amplitude of Limit Cycles emerging from Topologically equivalent Centers. J. L. López, and R. López-Ruiz. *Chaos, Solitons and Fractals* **17**, 135-143, 2003.

A N E X O 4

SEMINARIOS IMPARTIDOS

El BIFI ha organizado una serie de Seminarios periódicos en los que participan investigadores de prestigio Nacionales e Internacionales. Se han cubierto prácticamente todos los campos de actividad del BIFI. Estos seminarios forman parte de un Programa de Doctorado con la mención de Calidad de la ANECA.

"IN SILICO" PHARMACOLOGY: FROM VIRTUAL SCREENING TO STRUCTURE-BASED QSAR AND DESIGN"

Federico Gago.

Departamento de Farmacología, Universidad de Alcalá.

"FUNCTIONAL COMPLEXITY IN HARD, SOFT AND BIOLOGICAL MATTER"

R. Bishop.

Jefe de la División Teórica de Los Álamos National Laboratory, EEUU.

"NONLINEAR DYNAMICS AND STATISTICAL PHYSICS OF DNA"

Michel Peyrard.

Ecole Normale Supérieure de Lyon, Francia.

"RETOS BIOINFORMÁTICOS EN EL DISEÑO DE NUEVOS FÁRMACOS"

Modesto Orozco.

Dpto. de Bioquímica y Biología Molecular. Univ. de Barcelona.

"PATTERN FORMATION: FROM DIFFUSION LIMITED AGGREGATION TO FRACTURE"

Francisco Guinea.

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC).

"EI "ACQUA VITAE" DE LA BIOQUÍMICA. UNA VISIÓN TEÓRICA"

Modesto Orozco.

IRBB-Parc Científic de Barcelona. Grupo de Reconocimiento Molecular.

"EL MODELO DE ISING CON CAMPO MAGNÉTICO ALEATORIO"

Juan Jesús Ruiz Lorenzo.

Departamento de Física. Universidad de Extremadura.

"EL MODELO MINIMALISTA DE TERREMOTOS CARACTERÍSTICOS"

Amalio Fernández Pacheco.

Departamento de Física Teórica de la Universidad de Zaragoza.

"FOLDED TO BIND: THE ROLE OF SIDE CHAINS IN MOLECULAR RECOGNITION"

Carlos Camacho.

Department of Biomedical Engineering, Boston University, EEUU.

"TOWARD A COMPUTED STRUCTURE DATABASE: EFFECTIVE COMPUTATIONAL METHODS IN THE QUEST FOR SYNERGY BETWEEN EXPERIMENT AND COMPUTATION BIFI"

Gregoy A. Chass.

Universidad de Zaragoza.

"DIFUSIÓN DE TRITIO EN VENTANAS DE DIAMANTE: UN PROBLEMA EN TECNOLOGÍA DE FUSIÓN"

Joaquín Molla.

C.I.E.M.A.T.

"HIGH PERFORMANCE COMPUTING AT THE LEIBNIZ COMPUTER CENTER"

Reinhold Bader.

Centro de Computación Leibniz, Munich, Alemania.

“APLICACIÓN DE LOS "MICROARRAYS" AL ESTUDIO DEL CROMOSOMA DE LA BACTERIA ESCHERICHIA COLI”

F. Javier Arsuaga.

UCSF (University of California at San Francisco), Comprehensive Cancer Center, EEUU.

“COMPUTATIONAL STUDIES OF PROTEIN FOLDING AND EVOLUTION”

Hugo Bastolla

Centro de Astrobiología INTA-CSIC (Madrid)

“SINCRONIZACIÓN ANTICIPADA EN MODELOS DE NEURONAS”

Raúl Total

IMEDEA, Instituto Mediterráneo de Estudios

“SYNCHRONIZATION OF CHAOTIC AND COMPLEX SYSTEMS”

Stéfano Boccaletti

Instituto Nazionale di Ottica Applicata, Florence

“APLICACIÓN DE AUTÓMATAS CELULARES A RIESGOS NATURALES”

Bruce Malamud

King's Collage, London & Oxford University

“CAMBIOS DE FASE EN AUTÓMATAS NEURONALES”

Joaquín Marro

Instituto Carlos I, Universidad de Granada