



MEMORIA ANUAL 2014



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

Índice

Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos	5
1.1. Equipo directivo y divisiones o áreas de organización	6
1.2. Recursos humanos.....	7
1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza.....	9
1.2.2. Investigadores que pertenecen a otras entidades, pero vinculados directamente en el IUI BIFI:	11
Miembros adscritos y adscritos + prestatutarios	11
1.2.3. Otros miembros que no pertenecen a la Universidad de Zaragoza	11
1.2.4. Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2014.....	13
1.2.5. Bajas y motivo	13
Apartado 2. Líneas de investigación	14
2.1. Estructura de investigación en BIFI.....	15
2.2. Descripción de las áreas de investigación	15
2.3. Área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular	16
2.3.1. Células Madre y Apoptosis/Stem Cells and apoptosis.....	16
2.3.2. Vehiculización de fármacos/Drug Delivery.....	18
2.3.3. Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias/Genetic regulation and physiology of cyanobacteria.....	20
2.3.4. Microcistinas y su tecnología/Studies on microcystin and its technology	22
2.3.5. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology.	25
2.3.6. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design	28
2.4. Área de Física	29
2.4.1. Vidrios de spin/Spin glasses.....	30
2.4.2. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomolecules.....	33

2.4.3. Sistemas complejos y Redes/Complex Systems and networks	38
2.4.4. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic structure	44
2.4.5. Econofísica, modelos no-lineales y complejidad/Econophysics, nonlinear models and complexity.....	48
2.5. Área de Biofísica	49
2.5.1. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design	50
2.5.2. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology	50
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	52
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	56
2.6.1. High Performance Computing	56
2.6.2. Grid&Cloud Computing.....	59
2.6.3. Ciencia Ciudadana/Citizen science.....	61
2.6.4. Ordenadores dedicados/Special purpose computers	64
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.....	96
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	102
3.3.3. Proyectos de convocatorias autonómicas	103
3.3.4. Financiación obtenida de empresas	103
3.4. Estructura de gastos durante el año 2014.....	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.....	105
Proyectos financiados por entidades nacionales.....	107
Proyectos financiados por entidades autonómicas	110
4.1.2. Proyectos participados o liderados por investigadores pertenecientes al IUI financiados por empresas	112
4.2. Publicaciones	114
4.3. Comunicaciones a congresos.....	120
Conferencias invitadas	120
Comunicaciones orales	122
Posters	124
4.4. Congresos, cursos y jornadas organizados por el BIFI	126
4.4.1. Congresos, cursos y jornadas organizados por el IUI, talleres de trabajo	126
4.5. Conferencias	127

4.5.1. Organización de conferencias en las que participan Investigadores de otros centros de investigación.....	127
4.6. Patentes.....	128
4.7. Empresas SPIN-OFF.....	129
Apartado 5. Formación.....	130
5.1. Tesis dirigidas leídas, trabajos fin de grado, trabajos fin de máster y trabajos académicamente dirigidos en 2014.....	130
5.2. Becas de iniciación a la investigación.....	136
5.3. Cursos impartidos.....	137
5.4. Máster de Biotecnología Cuantitativa.....	138
Apartado. 6. Proyección Internacional.....	139
6.1. Colaboraciones externas.....	139
6.1.1. Colaboración con centros extranjeros:.....	139
6.1.2. Colaboraciones con centros españoles.....	143
6.2. Estancias en otros centros de investigación.....	146
6.2.1. Estancias de investigación en otros centros de investigadores del BIFI.....	146
6.2.2. Estancias de investigación realizadas por investigadores en el BIFI.....	148
Apartado 7. Interacción con la sociedad.....	151
Anexo I. Tabla resumen Actividades BIFI 2014 firmada por el director.....	168

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 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 en funciones Milagros Medina y, desde 2011, Alfonso Tarancón Lafita.

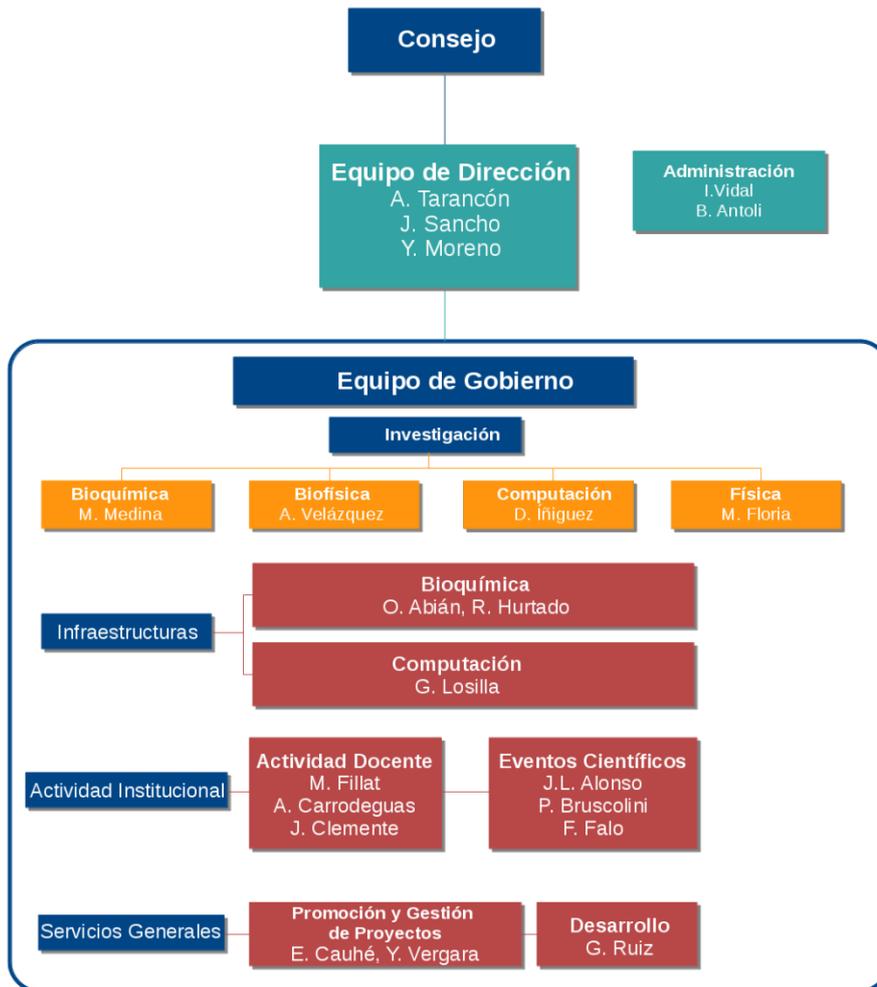
Este instituto nace con una vocación generada por el interés del estudio de moléculas de interés biológico y biotecnológico y de otros sistemas físicos complejos desde un punto de vista multidisciplinar y con el uso masivo de recursos de computación. Sin embargo, el IUI BIFI es un centro dinámico que pretende ir avanzando y adaptándose a la situación real del mismo y 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, que ha regido durante este año 2014, 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.

A final del año 2014 se ha aprobado en el Consejo de Instituto y de la Universidad de Zaragoza, el nuevo reglamento del BIFI, que debía ajustarse al

marco de los estatutos para Institutos Universitarios de la Universidad de Zaragoza.

Este nuevo reglamento implica algunos cambios importantes en los derechos y obligaciones de los miembros del Instituto que tienen como objeto asegurar una participación real en la vida del mismo. (Se adjuntan con esta memoria los nuevos Estatutos aprobados).

1.2. Recursos humanos

El nuevo Reglamento del BIFI que rige a partir de 2014 identifica miembros de diferente tipología. Se enumeran y definen cómo aparecen en la nueva normativa.

Miembros ordinarios propios (PDI y PI): Personal docente y personal investigador de la Universidad de Zaragoza, con dedicación total o parcial al Instituto; personal contratado por la Universidad de Zaragoza y financiado por el Instituto que desempeñe tareas de investigación e/o innovación).

Miembros ordinarios adscritos (OA): Personal contratado por otras entidades con las que el Instituto mantiene convenios oficiales, cuando desempeñen su trabajo en el Instituto.

Miembros ordinarios pre-estatutarios (OPRE): Aquellos doctores de la universidad de Zaragoza o de otras instituciones que adquirieron la condición de miembro en la fundación del Instituto o antes de la publicación del reglamento marco de los Institutos de Investigación de la Universidad de Zaragoza (19/10/2005).

Miembros propios en formación (PFOR): Personal investigador en formación, de la Universidad de Zaragoza, con dedicación total o parcial al Instituto.

Miembros asociados (ASOC): Doctores, investigadores y personal investigador en formación pertenecientes a otras universidades o centros de investigación españoles o extranjeros.

Personal de administración y servicios (PAS): Funcionarios de la universidad de Zaragoza o personal contratado para tareas de administración, servicios o de apoyo a la investigación que desempeñan su trabajo en el Instituto.

Según esto, el personal de la Universidad de Zaragoza incluye miembros ordinarios propios y adscritos, miembros propios en formación y personal de administración y servicios.

Por otra parte, en los miembros ordinarios adscritos se incluyen personas pertenecientes al BIFI que intervienen en la obtención y aplicación de los fondos del mismo cualquiera que sea su vinculación con la Fundación ARAID, IACS o con el CSIC.

Destacar que 3 de las personas del instituto que se incluirían en este grupo de miembros, también son miembros pre-estatutarios, con lo cual siempre tendrían los mismos derechos y obligaciones que los miembros ordinarios propios. Existe también en el instituto un nutrido grupo de investigadores que se incluyen en los grupos miembros denominados preestatutarios y asociados.

A continuación se presentan los parámetros cuantificables de los miembros del BIFI según el criterio solicitado:

- Personas pertenecientes a la Universidad de Zaragoza, que incluyen PDI, investigadores en formación, personal técnico y de apoyo a la investigación y personal de administración y servicios.
- Personas pertenecientes al BIFI con vinculación con la Fundación ARAID, IACS o con CSIC, que intervienen en la obtención y aplicación de los fondos del BIFI.
- Otros miembros que no pertenecen a la UNIZAR, ni al CSIC, ni a la Fundación ARAID, ni a la Fundación CIRCE. En el IUI BIFI existen 2 tipos de miembros que se incluye en este apartado, los miembros ordinarios preestatutarios, miembros del BIFI antes del 19 de octubre de 2005 y los asociados.

Una gran mayoría de los miembros del BIFI, 97 miembros, pertenecen a la Universidad de Zaragoza, en sus categorías de miembros ordinarios propios, miembros propios en formación y personal de administración y servicios (incluyendo personal técnico de apoyo y propio de administración). A estos ha que sumarle los 7 investigadores adscritos a entidades como ARAID, CSIC y IACS.

BIFI-UNIZAR		DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI y PI		54	0	54
Investigadores: OA		7	0	7
Investigadores: PFOR		0	22	22
PAS	Personal Técnico Lab y Apoyo a la investigación	2	9	11
	Administración	0	3	3
TOTAL UNIZAR		63	34	97

Los 7 miembros propios adscritos pertenecen a las entidades vinculadas con la Universidad de Zaragoza: CSIC, ARAID e IACS.

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
TOTAL ARAID	5	0	5
Personal IACS	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
Investigadores	1	0	1
TOTAL IACS	1	0	1

Como ya se ha comentado antes, existen 40 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. Estos miembros son los denominados Asociados (26 miembros) y Pre-estatutarios (14 miembros) en el nuevo Reglamento.

1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza

Durante este año 2014 el personal del BIFI que pertenecen a la Universidad de Zaragoza y los miembros vinculados a través de algún convenio (adscritos) se puede clasificar según se ve en la tabla siguiente:

Personal Docente e Investigador: PDI		DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica		21	0
Área de Biofísica		3	0
Área de Física		25	0
Área de computación		5	0
		54	0
Investigadores adscritos: OA		DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica		1	0
Área de Biofísica		2	0
Área de Física		4	0
Área de computación		0	0
		7	0
Investigadores: PFOR		DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica		0	12
Área de Biofísica		0	3
Área de Física		0	7
Área de computación		0	0
		0	22
PAS:	Personal Técnico Lab y Apoyo a la investigación	DOCTORES	NO DOCTORES
Área de Bioquímica		2	1
Área de Biofísica		0	0
Área de Física		0	0
Área de computación		0	8
		2	9
PAS:	Administración	DOCTORES	NO DOCTORES
Sin área asignada		0	3
		0	3
		63	34
TOTAL BIFI UZ		97	

En cuanto a los miembros del BIFI pertenecientes a la Universidad de Zaragoza y adscritos, destacamos que un 85,7 % de los doctores del instituto es personal docente investigador o personal investigador (PDI o PI).

Destacar este año la proporción las áreas de Bioquímica y Biofísica ha aumentando, siendo similar a la de Física que antes tenía porcentaje. Igualmente el PDI del área de computación también se ha visto incrementado.

En cuanto a la cantera de investigadores no doctores, como personal predoctoral en formación, pertenecen en su mayoría a las áreas de Bioquímica y Física, respecto a las otras áreas del instituto.

Otro detalle importante a comentar es la especialización del personal técnico del BIFI, que incluyen expertos técnicos, diplomados, licenciados y doctores que, aunque trabajan en las distintas áreas, es en la de computación en la que se puede observar su mayor proporción. Estos técnicos, incluidos en personal técnico, en muchos de los casos y en cuanto a su actividad, participan como responsables o coordinadores de líneas de investigación vinculados a un investigador senior del BIFI.

Por áreas los miembros del BIFI de la Universidad de Zaragoza se distribuyen de la siguiente manera:

BIOQUÍMICA: 37 miembros

BIOFÍSICA: 8 miembros

FÍSICA: 36 miembros

COMPUTACIÓN: 13 miembros

Además existen 3 personas miembros del BIFI sin adscripción a un área definida.

La siguiente tabla incluye a los miembros del BIFI y pertenecientes a la Universidad de Zaragoza y a los miembros adscritos que ejercen habitualmente su actividad en el Instituto:

ABIÁN FRANCO, OLGA MARIA	CARMONA MARTINEZ, JOSE MANUEL	FERNANDEZ-PACHECO PÉREZ, AMALIO
AINSA CLAVER, JOSÉ ANTONIO	CARRODEGUAS VILLAR, JOSÉ ALBERTO	FERREIRA NEILA, PATRICIA
ALIAS NIÑO, MIRIAM	CASTRO BARRIGÓN, ALBERTO	FERRER MARCO, ALFREDO
ALMUDÍ HIGUERAS, ISABEL	CATALÁN RODRÍGUEZ, MARÍA PILAR	FILLAT CASTEJON, MARIA F.
ALONSO BUJ, JOSE LUIS	CAUHE MARTIN, ELISA	FLORIA PERALTA, LUIS MARIO
ALTARRIBA FARRAN, JUAN	CLAVERÍA GIMENO, RAFAEL	GALANO FRUTOS, JUAN JOSÉ
ANTOLI OCA, BEATRIZ	CLEMENTE GALLARDO, JESUS JERONIMO	GARCIA ESTEVE, JOSE VICENTE VICTOR
ARRUEBO MUÑO, MARÍA	CONDE GIMÉNEZ, MARÍA	GARRIDO PÉREZ, NURIA
BAYONA BAFALUY, MARIA PILAR	CREMADES CASASIN, NUNILO	GIL NARVION, JOSE MIGUEL
BENAVIDES RIVEROS, CARLOS LEONARDO	CRUZ FLOR, ANDRES	GIMÉNEZ NADAL, JOSÉ IGNACIO
BERGUES PUPO, ANA LISA	DE LA RIVA GONZALEZ DE GARAY, MATILDE	GINER GRACIA, MANUEL ARTURO
BES FUSTERO, MARIA TERESA	ECHENIQUE ROBBA, PABLO	GOMEZ GARDEÑES, JESUS
BRUSCOLINI, PIERPAOLO	FALCETO BLECUA, FERNANDO	GONZÁLEZ ASENSIO, JESÚS
BUDAGOSKY MARCILLA, JORGE ALEJANDRO	FALO FORNIES, FERNANDO	GONZÁLEZ RODRÍGUEZ, ANDRÉS
CALVO SEIN ECHALUCE, VIOLETA	FERNÁNDEZ OTAL, ANGELA	GOPAR SÁNCHEZ, VÍCTOR ARTURO
	FERNANDEZ SILVA, PATRICIO	GRACIA BONDIA, JOSE

GRACIA LAZARO, CARLOS	MEADE HUERTA, PATRICIA	SANCHO SANZ, JAVIER
HERNANDEZ RUÍZ, CRISTINA	MEDINA TRULLENQUE, MILAGROS	SANZ REMON, JOAQUIN
HURTADO GUERRERO, RAMON	MELONI, SANDRO	SANZ SAIZ, GERARDO
IBAR YUBERO, JAIME	MOLINA CHUECA, JOSÉ ALBERTO	SEBASTIAN VALVERDE, MARIA
IÑIGUEZ DIESTE, DAVID	MORENO LOSHUERTOS, RAQUEL	SERRANO SANZ, FERMIN
JOVER GALTIER, JORGE ALBERTO	MORENO VEGA, YAMIR	TAPIA ROJO, RAFAEL
LATORRE MURO, PEDRO	NELO BAZÁN, MARIA ALEJANDRA	TARANCON LAFITA, ALFONSO
LEDESMA BENEDICTO, MERCEDES	PELEATO SANCHEZ, M ^a LUISA	VALERO GONZÁLEZ, JESSIKA
LIRA NAVARRETE, ERANDI	PELLICER LOSTAO, MARIA DEL CARMEN	VALLES PÉREZ, RUBEN
LOPEZ ALVAREZ, LAURA CATALINA	PÉREZ COLLAZOS, ERNESTO	VARONA AGUADO, LUIS
LOPEZ BUESA, PASCUAL LUIS	PÉREZ GAVIRO, SERGIO	VEGA SÁNCHEZ, SONIA
LOPEZ LORENTE, FRANCISCO JAVIER	PLO ALASTRUE, BLAS FERNANDO	VELÁZQUEZ CAMPOY, ADRIÁN
LOPEZ RUÍZ, RICARDO	POLO ORTIZ, VICTORIANO	VERGARA LARRAYAD, YOLANDA
LOSILLA ANADON, GUILLERMO	RIVERO GRACIA, ALEJANDRO ENRIQUE	VIDAL ÚRBEZ, ISABEL
MARTINEZ JULVEZ, MARTA MARIA	RODRÍGUEZ CÁRDENAS, ÁNGELA	VILLANUEVA LLOP, RAQUEL
MARTINEZ OLIVAN, JUAN ENRIQUE	RUÍZ MANZANARES, GONZALO	VIRUEL SANCHEZ, JUAN
MARTINEZ OVEJAS, PEDRO JESUS	SANCHO COHEN, RUBÉN	

1.2.2. Investigadores que pertenecen a otras entidades, pero vinculados directamente en el IUI BIFI: Miembros adscritos y adscritos + prestatutarios

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

Investigadores del CSIC

Pablo Echenique

Investigadores del IACS

Olga Abián Franco

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 UNIZAR 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.

En la siguiente tabla se recogen los miembros del BIFI Asociados y Prestatutarios.

INVESTIGADOR	ENTIDAD ACTUAL
ALVAREZ BAÑOS, RAQUEL	Rowstock, Oxfordshire, Reino Unido
BORGE HOLTHOEFER, JAVIER	Qatar Computing Research Institute
BOTELLO MORTE, LAURA	Universidad de Zaragoza
BROSET BLASCO, ESTHER	Grupo de Genética de Micobacterias CIBER de Enfermedades Respiratorias Departamento de Microbiología Facultad de Medicina. Universidad de Zaragoza
CALBET ALVAREZ, XAVIER HORACIO	Institution: EUMETSAT, Alemania. EUMETSAT (Organización Europea para la Explotación de Satélites Meteorológicos) Darmstadt (Alemania)
CAMPOS PLASENCIA, ISABEL	Instituto de Física de Cantabria CSIC. Santander
CASTEJÓN MAGAÑA, FRANCISCO	Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid
CONTRERAS MOREIRA, BRUNO	Estación Experimental Aula Dei. CSIC. Zaragoza
CUESTA RUÍZ, JOSÉ ANTONIO	Departamento de Matemáticas. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid
DE BUSTOS MOLINA, ANDRÉS	CIEMAT. Madrid
DIAZ PÉREZ, ANTONIO JOSE	profesor titular de Genética en la Universidad Central de Venezuela (UCV)
ESTRADA COLLADO, JORGE	Barcelona Supercomputing Center. Universidad de Barcelona. Barcelona
FERNÁNDEZ PÉREZ, LUIS ANTONIO	Universidad Complutense de Madrid
FERNÁNDEZ RECIO, JUAN	Barcelona Supercomputing Center. Universidad de Barcelona. Barcelona
FERNÁNDEZ ALVAREZ-ESTRADA, RAMÓN	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
FREIRE, ERNESTO	The Johns Hopkins University
GARCIA MATEU, MAURICIO	Centro de Biología Molecular Severo Ochoa. Universidad Autónoma de Madrid. Madrid
GARCIA RISUEÑO, PABLO	Institut für Physik und IRIS Adlershof, Theoretische Festkörperphysik. Humboldt-Universität zu Berlin. Germany
GORDILLO GUERRERO, ANTONIO	Universidad de Extremadura. Badajoz
IBÁÑEZ HERÁNDEZ, M CARMEN	Fundación Ibercivis
LAMAZARES ARCIA, EMILIO	Chile
LANS VARGAS, ISAIAS	Universidad Autónoma de Barcelona
LOSTAL LANZA, EDUARDO	Fundación Ibercivis
MACHICADO RIVERO, CLAUDIA	Laboratorios de Investigación y Desarrollo (LID)
MAIORANO, ANDREA	Universidad de Ferrara. Italia
MARINARI, ENZO	Universita di Roma La Sapienza
MARRO BORAU, JOAQUÍN	Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional. Universidad de Granada. Granada
MARTÍN MAYOR, VÍCTOR	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
MUÑOZ SUDUPE, ANTONIO	Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
NEIRA, JOSÉ LUIS	Química Física. Universidad Miguel Hernández. Elche
PONCELA CASASNOVAS, JULIA	Technological Institute. Northwestern University (Evanston, Illinois). Illinois
REY GAGO, ANTONIO	Química Física. Universidad Complutense de Madrid. Madrid
REYNOLDS BARREDO, JOSÉ MIGUEL	Universidad Carlos III Madrid
RUÍZ LORENZO, JUAN JESÚS	Física. Universidad de Extremadura. Badajoz
SÁNCHEZ SÁNCHEZ, ÁNGEL	Matemática Aplicada. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid
SANZ GARCÍA, FRANCISCO	Fundación Ibercivis
SAÑUDO ROMEU, JAIME	Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura. Badajoz
VAL GASCÓN, CARLOS	Fundación Ibercivis
YLLANES MOSQUERA, DAVID	TRIESTE o Universidad Complutense de Madrid
YRUELA GUERRERO, INMACULADA	Aula Dei. CSIC Zaragoza

1.2.4. Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2014

El año 2014, el balance de la captación de recursos humanos ha sido muy positivo en el instituto BIFI. Se ha llevado a cabo la contratación de 30 personas dedicadas a la realización de actividades científico/técnicas, distribuidas en las 4 áreas de investigación del BIFI, mayoritariamente en las áreas de Bioquímica y Computación.

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 2014 han realizado su proyecto fin de grado 11 estudiantes, otros 2 su proyecto fin de carrera y 17 su trabajo su trabajo fin de máster, repartidos entre las 4 áreas, aunque los investigadores de las áreas de Bioquímica y Biofísica son las que han dirigido la mayor parte de estos trabajos.

Durante este año 2014, se han incorporado como miembros del BIFI 4 investigadores con destacada actividad científica, pertenecientes a 2 importantes grupos de investigación de la Universidad de Zaragoza, que permiten complementar las líneas de investigación en las que ya trabaja el instituto. Por una parte, José Antonio Aínsa y Jesús Gonzalo que pertenecen al grupo reconocido del Gobierno de Aragón Genética de Micobacterias y por otra, José Alberto Molina e Ignacio Giménez del grupo de Economía familiar e industrial. El BIFI agradece su ingreso y cuenta con ellos como miembros propios ordinarios del instituto.

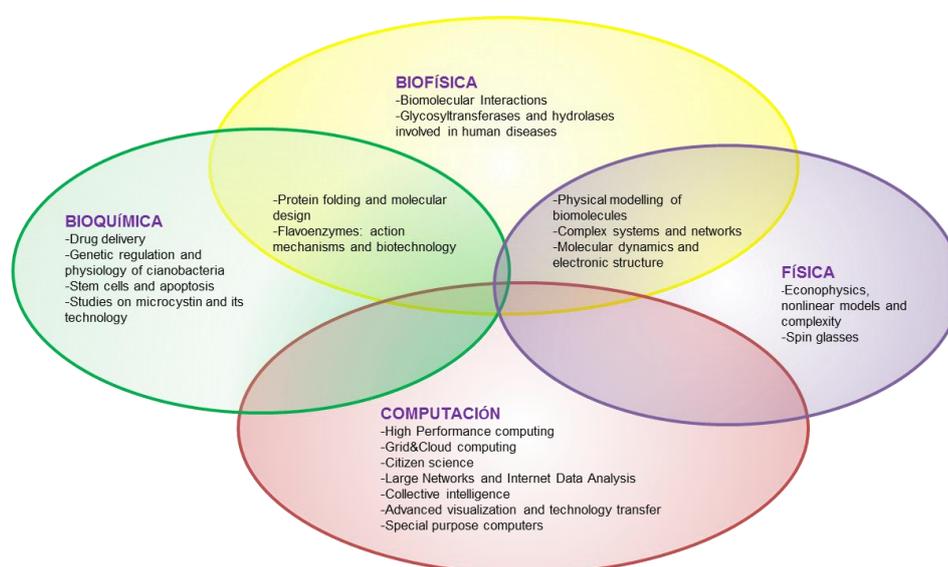
1.2.5. Bajas y motivo

Durante el año 2014 en el BIFI ha habido 15 altas como miembros del instituto. De acuerdo a los nuevos estatutos se está actualizando el censo del BIFI para verificar los miembros y redistribuir en la tipología que le corresponde.

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 no incluirlas en ninguna de las intersecciones, aunque realmente deberían aparecer solapadas con los otros 3 globos.



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 12 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
Consolidado	Ag. y Vet	A51	Tecnología y Genética Porcina
Consolidado	Biomédicas	B25	Genética de Micobacterias

Tanto este año 2014 como el anterior, el director del Instituto BIFI, Alfonso Tarancón ha pasado el testigo como investigador principal del grupo consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos 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 el investigador Luis Mario Floría, también miembro del BIFI.

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 como puede verse en el esquema del organigrama anterior, cada una de ellas coordinada por un investigador responsable. 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 2014 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 2014 y que pretenden continuar en 2015, 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.

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 Carrodeguas
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 2014

2.3.1. Células Madre y Apoptosis/Stem Cells and apoptosis.

IP. José Alberto Carrodeguas

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. En una tercera línea buscamos polimorfismos genéticos relacionados con la producción porcina, seleccionando aquellos que inducen cambios fenotípicos de interés y estudiándolos en profundidad para los mecanismos implicados desde el nivel molecular hasta el genético, extendiendo estos estudios también a humanos. Recientemente hemos comenzado a estudiar aplicaciones de puntos cuánticos de grafeno en biomedicina.

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 procariontas y eucariotas, distintos tipos de electroforesis, cromatografía, fluorimetría, luminiscencia, cultivos celulares y microscopía óptica avanzada combinada con análisis automático de imagen. Queremos desarrollar 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, los laboratorios de cultivos celulares, luminómetro, fluorímetros y espectrofotómetros, sistemas de expresión y purificación de proteínas (FPLC) 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
Investigación en Tecnología y genética porcina. OTRI/Instituto Aragonés de Fomento. 2012-2014	FITE
Creación de una línea materna porcina de alta prolificidad, longevidad y buena conformación mediante la selección basada en marcadores.	DGA. INNOVA-A1-091/13

Equipo de investigación:

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
José Alberto Carrodegua Villar/Profesor Contratado Doctor Investigador	B89-Grupo Protein Targets
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Pascual López Buesa/Profesor Titular Pedro Latorre Muro/Investigador predoctoral de la Fundación La Caixa. Cristina Hernández Ruíz/Técnico grupo B. Carmen Burgos Serrano/Investigador N3. Jorge Hidalgo Gracia/Investigador N3. María Alejandra Nelo Bazán/Becaria predoctoral Fundación Ayacucho de Venezuela.	A51-Tecnología y Genética Porcina A51-Tecnología y Genética Porcina B89-Grupo Protein Targets

Resultados y conclusiones destacados en 2014

- Conclusión del estudio de la implicación de Egr-1 en la expresión de Mtch1, en colaboración con la Universidad de Cantabria.
- Conclusión del estudio del knockout de Mtch1 en *Drosophila*, tanto en moscas como en cultivos celulares, en colaboración con la Universidad Autónoma de Madrid y el Instituto de Investigaciones Biomédicas del CSIC.
- Determinación de alteraciones catalíticas y estructurales producidas por el cambio de un aminoácido en la proteína PEPCCK, con implicaciones fenotípicas en porcino.

- Continuación del estudio de un nuevo producto antitumoral en células en cultivo y comienzo de los ensayos en ratones.
- Comienzo de una nueva línea de investigación centrada en el uso de puntos cuánticos de grafeno en biomedicina. Proyecto Explora solicitado.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

Alejandro Ansón-Casaos; José Miguel González-Domínguez; Ignacio Lafragüeta; José A. Carrodegua; M.Teresa Martínez. Optical absorption response of chemically modified single-walled carbon nanotubes upon ultracentrifugation in various dispersants. Carbon 66, 105-118. 2014.

López-Buesa P, Burgos C, Galve A, Varona L. Joint analysis of additive, dominant and first order epistatic effects of four genes (IGF2, MC4R, PRKAG3, LEPR) with known effects on fat content and fat distribution in pigs. Animal Genetics 45, 133-137. 2014.

Burgos C, Latorre P, Altarriba J, Carrodegua JA, Varona L, López-Buesa P. Allelic frequencies of NR6A1 and VRTN, two genes that affect vertebrae number in diverse pig breeds. Meat Science 100, 150-155. 2015.

Patentes

Inventores (p.o. de firma): López Buesa P, Carrodegua Villar JA, Varona Aguado Lm Burgos Serrano L.

Título: Method for the selection of suids with better meat quality base don a SNP in the gene that encodes cytosolic PEPCK

Nº de solicitud: PCT/EP2014/054097

País de prioridad: Varios

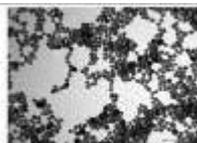
Fecha de prioridad: abril 2014

Entidad titular: Universidad de Zaragoza

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

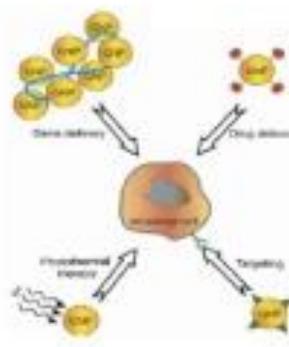
Objetivos y descripción

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
Maria Arruebo/ Becario Predoctoral Fis	B1-Patología Digestiva
Arturo Vinuesa/ Becario Predoctoral	No
Pilar María LanUNIZAR/ Estudiante Máster	No

Resultados y conclusiones destacadas 2014

- Desarrollo de un método sencillo para la cuantificación de nanopartículas en cultivo celular
- Estudios de actividad antiviral en cultivo celular de diversos complejos de fármacos anti HCV con nanogeles o hidrogeles estructurados y con nanopolímeros auto-ensamblados.
- Estudios con ImageStreamX cytometer de localización de nanopartículas en células

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

S. Vega, O. Abián, A. Velázquez-Campoy, A unified framework based on the binding polynomial for characterizing biological systems by isothermal titration calorimetry, *Methods* (2014), doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jymeth.2014.09.010>

Filice M, Romero O, Abián O, De las Rivas B and Palomo J.M Ionic liquids in water: a green and simple approach to improve activity and selectivity of lipases. *RSC Advances* 2014 DOI: 10.1039/c4ra07625g

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

IP. Maria 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 *Clostridium difficile*.

Objetivos específicos:

1.- *Estudio computacional y validación experimental del regulón de FurA en Anabaena PCC 7120.* Evaluar su posible función de FurA como transductor de señales redox a través de alguno de los dos motivos CXXC que presenta la proteína. Estudio de su mecanismo de actuación.

2.- *Análisis funcional de FurB y FurC en las cianobacterias Anabaena PCC 7120 y Microcystis aeruginosa PCC 7806.*

3.- *Explorar el uso de FurA como diana farmacológica en patógenos.* Se han purificado y caracterizado las proteínas Fur de *H. pylori* y *Clostridium difficile*. Actualmente se están iniciando los estudios de cribado.

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
Royalties por la explotación comercial de la patente US-6,781,034 "Stress resistant plants" y de su familia de patentes	Plant Bioscience Limited
Biología estructural	Gobierno de Aragón

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 2014

Los resultados más destacados se recogen en las publicaciones enumeradas en el siguiente apartado

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones de relevancia

Botello-Morte L, Bes MT, Heras B, Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF. <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24093463>>Unraveling the Redox Properties of the Global Regulator FurA from Anabaena<<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24093463>> sp. PCC 7120: Disulfide Reductase Activity Based on Its CXXC Motifs. Antioxid Redox Signal 20(9), 1396-406. 2014. Impacto ISI: 7.667.

Sein-Echaluze VC, González A, Napolitano M, Luque I, Barja F, Peleato ML, Fillat MF. <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25244409>>Zur (FurB) is a key factor in the control of the oxidative stress response in Anabaena<<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25244409>> sp. PCC 7120. Environ Microbiol. 2014 Sep 22. doi: 10.1111/1462-2920.12628. Impacto ISI: 6.240

González A, Angarica VE, Sancho J, Fillat MF. <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24503250>>The FurA regulon in Anabaena sp. PCC 7120: in silico<<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24503250>> prediction and experimental validation of novel target genes. Nucleic Acids Research 42(8), 4833-46. 2014. Impacto ISI: 8.278.

Pallarés MC, Marcuello C, Botello-Morte L, González A, Fillat MF, Lostao A. <<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24440406>> Sequential binding of FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120 to iron boxes: exploring regulation at the nanoscale. *Biochim Biophys Acta*. 2014 Mar;1844(3):623-31. doi: 10.1016/j.bbapap.2014.01.005. Impacto ISI: 3.191.

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

IP. Maria 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.

Este año 2014 se ha continuado prestando especial atención a la presencia de lindano y contaminantes emergentes en las aguas, y hemos llevado a cabo trabajo encaminado a la tolerancia de las cianobacterias tóxicas a los contaminantes emergentes y al lindano, así como su capacidad de degradar lindano. Las conclusiones de este trabajo son que tanto la tolerancia de *Microcystis* al lindano, como su capacidad de degradarlo son muy altas. Sin embargo, la síntesis de toxinas se ve acrecentada en presencia de lindano. Benceno y diversos tipos de fármacos (voltaren, ibuprofeno y otros), no afectan a los niveles de toxina producida.

También se ha abordado el estudio de la proteína Fur en el patógeno vegetal *Erwinia amylovora*, responsable de una enfermedad que está afectando a un gran número de frutales, el fuego bacteriano, y que causa un gran problema económico y social. Se ha obtenido la proteína Fur recombinante, y en estos momentos está en proceso de caracterización, para intentar usar esta proteína como blanco letal para *Erwinia*.

Ferrocenos obtenidos de un grupo colaborador han mostrado efectos sobre la actividad de la proteína Fur y sobre el crecimiento de la cianobacteria tóxica *Microcystis aeruginosa*.

Este año se han recibido "royalties" por un know how cedido a la empresa Zeu-immunotec, con la que se continúa colaborando habitualmente. En estos momentos se pretende poner a punto un método de obtención de microcistina marcada con nitrógeno 15, para uso como patrón en diversas técnicas de espectroscopía de masas.

Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Validación de un test para detección de microcistina en agua de boca - anexo	OTRI- ZEU INMUNOTEC
Biología Estructural	Gobierno de Aragón, Obra Social La Caixa

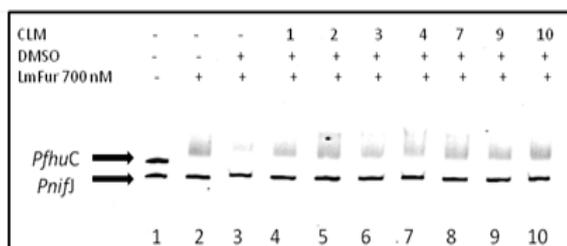
Equipo investigador

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 (solo parcialmente, actualmente becaria en Aula Dei)	Identificación Grupo B18-Biología Estructural

Resultados y conclusiones destacados 2014

1- Se ha clonado, sobreexpresado, purificado y comprobado la actividad de la proteína Fur de *Erwinia amylovora*. Se ha estudiado el efecto de algunos ferrocenos sobre la actividad de la proteína. La proteína une Zn

2- Los ferrocenos ensayados en proteínas Fur dan lugar a una disminución de la afinidad del regulador por el DNA



EMSA mostrando la movilidad de los complejos Fur-DNA en presencia de distintos ferrocenos.

2- Se ha estudiado mediante experimentos de doble híbrido la formación de dímeros y heterodímeros de las proteínas de la familia Fur

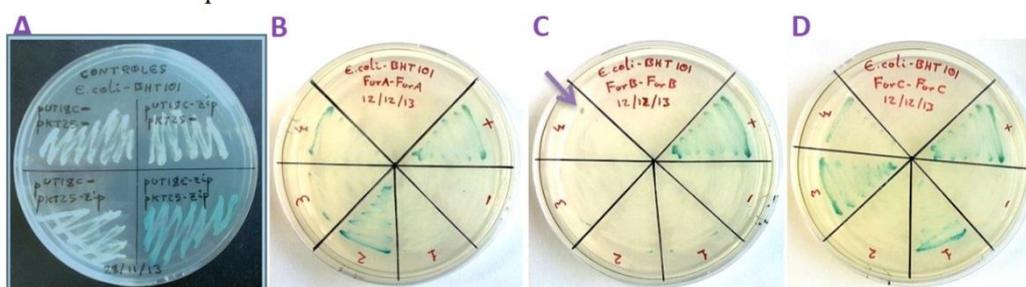


Figura 5.4. Resultados de la formación de homodímeros. Controles (A), FurA (B), FurB (C) y FurC (D). Secciones + : controles positivos, secciones - : controles negativos, secciones 1-4: combinaciones de plásmidos posibles para cada pareja.

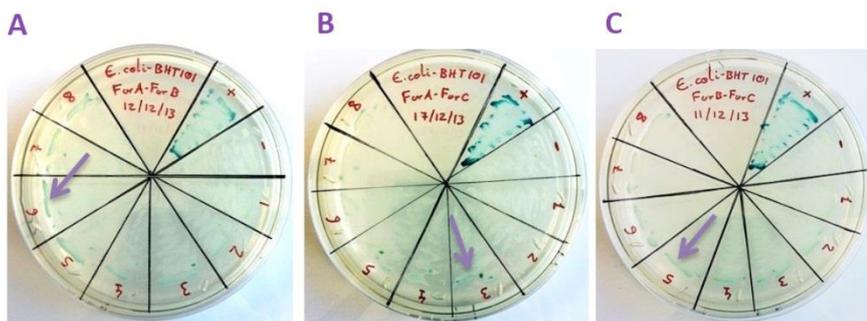
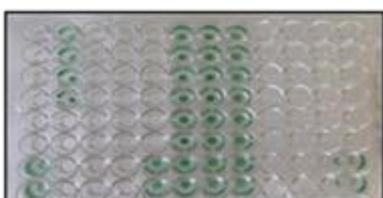
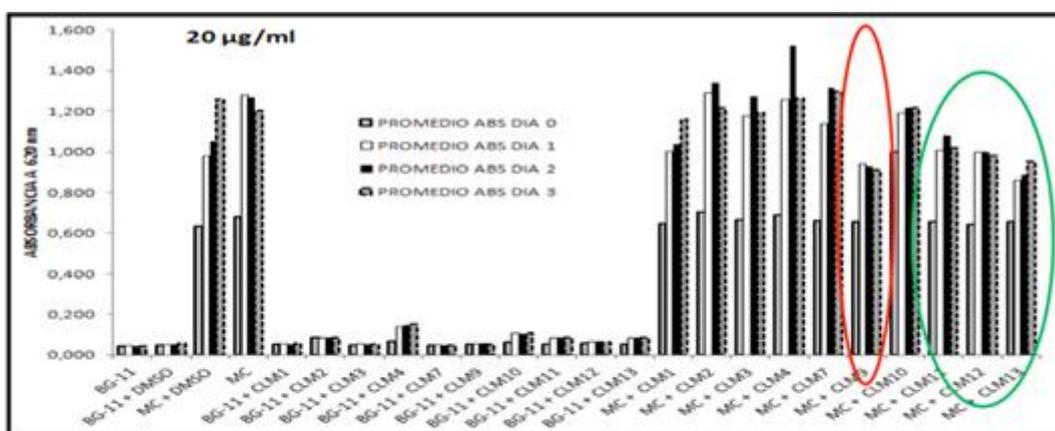


Figura 5.5. Resultados de la formación de heterodímeros. FurA-FurB (A), FurA-FurC (B), FurB-FurC (C).
 Secciones + : controles positivos, secciones - : controles negativos, secciones 1-8: combinaciones de plásmidos posibles para cada pareja.

3- Se ha purificado parcialmente microcistina-LR marcada con nitrógeno 15.

4- Algunos ferrocenos afectan al crecimiento de *Microcystis aeruginosa*



**CRECIMIENTO
 AFECTADO
 CON
 FERROCENO 9**

**CRECIMIENTO
 O MENOR
 CON
 FERROCENOS
 11, 12, 13**

Difusión de logros científicos destacados en 2014

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. En prensa en Limnetica. 2014

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. En prensa en Limnetica. 2014.

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 a nivel molecular de los mecanismos que implican a mutaciones en esta proteína relacionadas con diversas encefalopatías, así como de la relación que existe entre las actividades apoptótica y reductasa de esta proteína podrán ser utilizadas en el desarrollo de nuevos enfoques terapéuticos tanto en el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas como del cancer.

3-Exploración de otras flavoenzimas con interés biotecnológico.

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

Esta línea de investigación utiliza 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, métodos de cribado de alto rendimiento y métodos computacionales (docking, dinámica molecular MM y QM/MM). Además, algunos de los nuevos estudios que se incorporan en esta línea requieren también de métodos de Biología Celular.

Proyecto relacionado

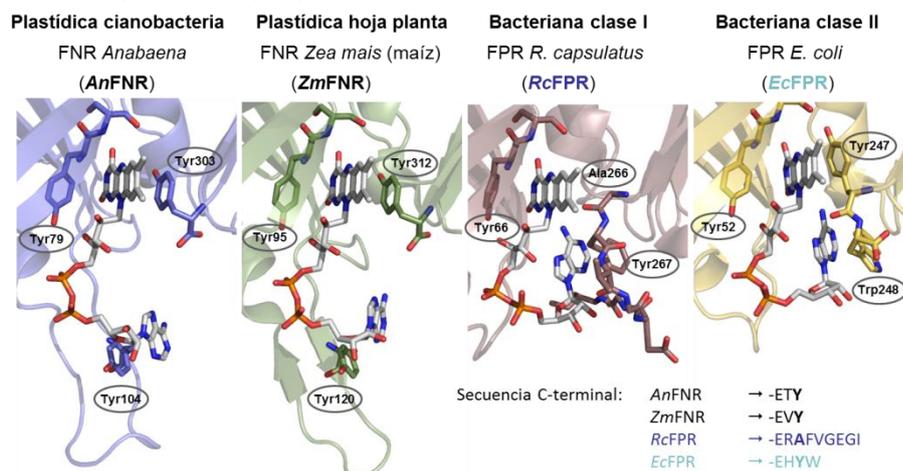
Título proyecto	Entidad Financiadora
Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica	Ministerio de Ciencia e Innovación
Flavoenzyme dependent systems: from action mechanisms to biotechnological and sanitary applications	Ministerio de Economía y Competitividad
Biología estructural	Gobierno de Aragón

Equipo de investigación

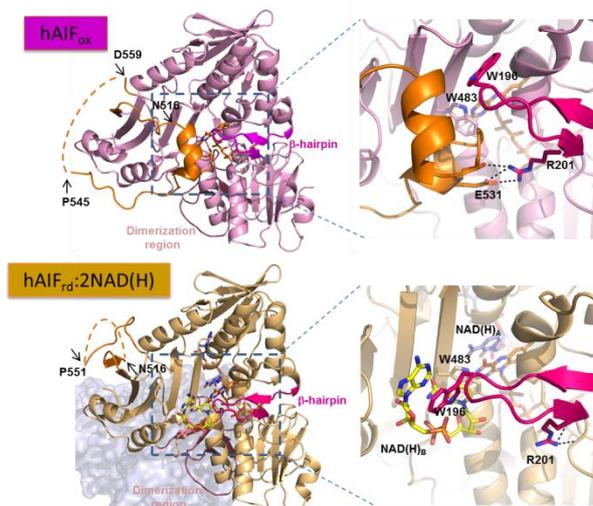
Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Milagros Medina Trullenque/Catedrático	B18-Biología Estructural
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Marta Martínez Júlvez/Profesor Titular	B18-Biología Estructural
Patricia Ferreira Neila/Profesor Ayudante Doctor	B18-Biología Estructural
Raquel Villanueva Llop/Contratado Predoctoral FPI	B18-Biología Estructural
María Sebastián Valverde/Contratado Predoctoral BIFI	B18 Biología Estructural
Inmaculada Yruela Guerrero/Investigador Científico CSIC	B18 Biología Estructural
Yohanna Alegre Martinez/Estudiante de Master	No
José Emilio Casaos Aznar/Estudiante de Master	No
Ione Medina Suarez/Estudiante de Master	No
Victor Gamez Visairas/Estudiante de Grado	No
David Vizarraga Revuelto/Estudiante de Grado	No
Sergio Carrazana Villalba/Estudiante de Grado	No

Resultados y conclusiones destacados 2014

- Se han llevado a cabo el cribado masivo de dos quimiotecas utilizando como diana, flavoenzimas y flavoreductasas de diferentes organismos patógenos de plantas y animales, y se han identificado potenciales inhibidores de sus actividades.
- Ferredoxina-NADP⁺ reductasa tipo bacteriano frente a eucariotas. Se han descrito a nivel molecular los determinantes de la eficiencia catalítica en las enzimas de tipo planta frente a las enzimas bacterianas. Nuestros datos indican que los sitios activos de las enzimas bacterianas son más rígidos y organizados que en las de tipo planta. Estas diferencias parecen el resultado de una adaptación a los diferentes requerimientos metabólicos de cada una de estas enzimas, que las han llevado a un equilibrio entre flexibilidad proteica y optimización funcional.



- **El factor de inducción de apoptosis humano (hAIF):** Se ha detectado un segundo sitio de unión para el coenzima NADH en hAIF. Se ha demostrado que la unión de NADH induce la transición monómer-dímero y produce importantes cambios conformacionales en el módulo apoptótico de esta proteína. Así mismo se ha demostrado que existe una correlación directa entre la capacidad de la proteína de dimerizar y su eficiencia como reductasa. Estos datos indican que tanto las funciones reductasa como apoptótica de hAIF se encuentran reguladas por la unión del coenzima.



Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

Sánchez-Azqueta A, Martínez-Júlvez M, Hervás M, Navarro JA, and Medina M. External loops at the ferredoxin-NADP⁺ reductase protein-partner binding cavity contribute to substrate allocation. *BBA-Bioenergetics* 1837, 296-305. 2014. Impacto ISI: 4.829

Ferreira P, Villanueva R, Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Marcuello C, Fernandez-Silva P, Cabon L, Hermoso JA, Lostao A, Susin SA and Medina M. Structural insights into the coenzyme mediated monomer-dimer transition of the pro-apoptotic Apoptosis Inducing Factor. *Biochemistry* 53, 4204-4215. 2014. Impacto ISI: 3.194

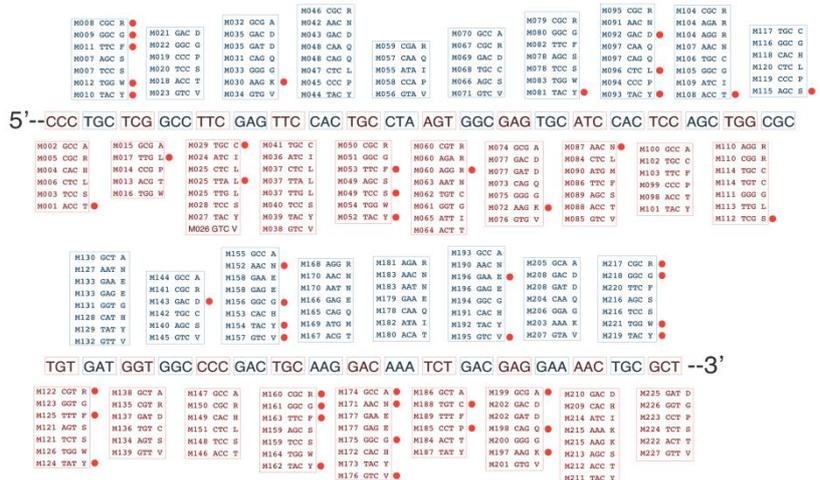
Sánchez-Azqueta A, Catalano-Dupuy DL, López-Rivero A, Tondo ML, Orellano EG, Ceccarelli EA, and Medina M. Dynamics of the active site architecture in plant-type Ferredoxin-NADP⁺ reductases catalytic complexes. *BBA-Bioenergetics* 1837, 1730-1738. 2014. Impacto ISI: 4.829

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

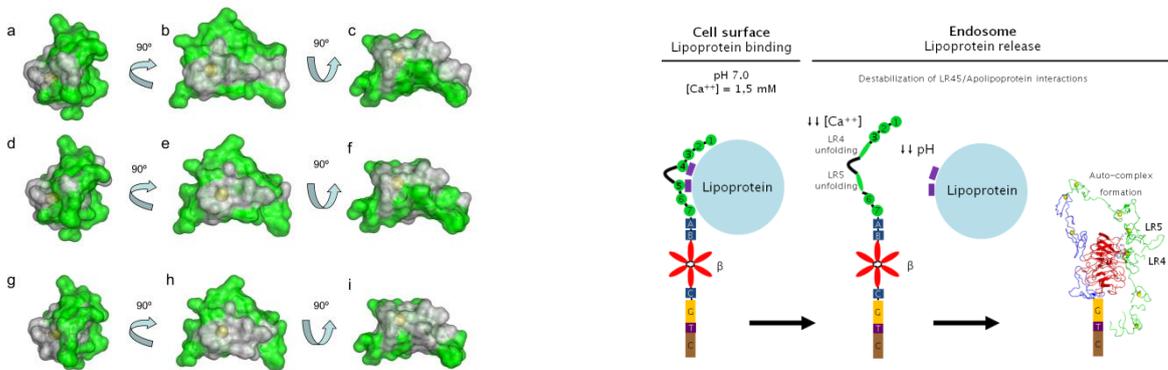
Objetivo y descripción

En computación, hemos publicado la base de datos y servidor de predicciones Prioscan (en colaboración con el Dr. S Ventura de la UAB) y (en colaboración con la Dra. M Fillar de la UZ), la predicción y validación experimental de nuevos genes regulados por FurA.

Por otro lado, hemos completado el análisis del mutoma completo del dominio LA5 del receptor de LDL que explica las causas moleculares de la hipercolesterolemia familiar asociadas a los distintos SNPs posibles.



En la parte biomédica, hemos contribuido a la comprensión del proceso de internalización y liberación en la célula de LDLs al determinar los sitios de unión de apo B y apo E al receptor, así como establecer que éste último actúa como un sensor de Ca^{++} en el endosoma.



Proyectos relacionados

Título proyecto	Entidad Financiadora
Estabilidad conformacional de proteínas: principios generales, análisis estabilidad función del r-LDL y búsqueda de nuevas chaperonas farmacológicas.	MINECO
Estabilidad de proteínas: Principios básicos de los estados (parcialmente) desplegados y estudios moleculares en enfermedades conformacionales	MINECO

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
Juan Martínez/Investigador Doctor	Identificación Grupo B89-Protein Targets
Angela Rodríguez/Becario predoctoral	B89-Protein Targets
Emilio Lamazares/Becario predoctoral	B89-Protein Targets
Juan J. Galano/Contratado Predoctoral	B89-Protein Targets

Resultados y conclusiones destacados 2014

Se ha culminado el análisis predictivo del mutoma completo del módulo LA5 del LDLR y la comprensión de su papel como sensor de calcio y de las interacciones del receptor con las apolipoproteínas presentes en sus dianas LDL y VLDL.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

J. Martínez-Oliván, X. Arias-Moreno, A. Velázquez-Campoy, O. Millet & J. Sancho. LDL receptor/lipoprotein recognition: endosomal weakening of apo B and apo E binding to the convex face of the LR5 repeat. *FEBS J.* 2014, 281: 1534-1546

V. E. Angarica, A. Angulo, A. Giner, G. Losilla, S. Ventura & J. Sancho. PrionScan: an online database of predicted prion domains in complete proteomes. *BMC Genomics* 2014, **15**:102 doi:10.1186/1471-2164-15-102

González, V. E. Angarica, J. Sancho & M. F. Fillat. The FurA regulon in *Anabaena* sp. PCC 7120: *in silico* prediction and experimental validation of novel target genes. *Nuc. Acid Res.* 2014, 42:4833-4846

J. Martínez-Oliván, Z. Rozado-Aguirre, X. Arias-Moreno, V. E. Angarica A. Velázquez-Campoy & J. Sancho. LDL receptor is a calcium/magnesium sensor: Role of LR4 and LR5 ion interaction kinetics in LDL release in the endosome. *FEBS J.* 2014, 281:2638-2658

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 Faló
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-Ruiz

Descripción de las líneas y sus principales logros 2014

2.4.1. Vidrios de espín/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	Ministerio de Economía y Competitividad
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
Victor Martín Mayor/UCM	NA
Juan Jesús Ruíz Lorenzo/UNEX	NA
David Íñiguez / ARAID. UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
David Yllanes/U.Sapienza,Roma	NA
Raquel Álvarez Baños/UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
José Miguel Gil Narvió/UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Antonio Gordillo Guerrero/UNEX	NA
Andrea Maiorano/U.Sapienza,Roma	NA
Jorge Monforte García/UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Sergio Pérez Gavero/ARAID. UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Beatriz Seoane/U.Sapienza,Roma	NA
Marco Baity-Jesi/UCM, U.Sapienza,Roma	NA

Resultados y conclusiones destacados 2014

Han sido varios los resultados relevantes relacionados con vidrios de espín en 2014, centrándose en el modelo de Edwards-Anderson.

Se ha estudiado el modelo de Edwards-Anderson en 3 dimensiones en con un campo magnético externo desde dos enfoques diferentes y complementarios, usando el ordenador dedicado Janus. El primer estudio se ha realizado a través de la dinámica de estos sistemas fuera del equilibrio, tanto a temperatura constante como usando un protocolo de annealing donde se va descendiendo la temperatura del sistema bajo un ratio determinado en el tiempo. Llegando a tiempos equivalentes a 0.01 segundos de experimentos reales, se ha estudiado la relajación de estos sistemas tanto a alta como a baja temperatura, identificando claramente un punto de transición dinámico.

Para el segundo, se ha aplicado la técnica del parallel-tempering, permitiendo un estudio dentro del equilibrio. Técnicas convencionales no muestran signo alguno de una transición de fase. Sin embargo, se han encontrado fluctuaciones en el comportamiento del modelo donde los promedios sobre todo el conjunto de datos sólo mostraban el comportamiento de una fracción pequeña del sistema. Para un estudio más profundo, se ha desarrollado una nuevo modo de análisis, donde se aplica un estudio de finite-size scaling basado en la probabilidad de la función de distribución del conditioning variate, que puede acelerar la convergencia al límite termodinámico. Gracias a ello, se ha podido estimar el intervalo de temperatura donde la transición de fase en presencia de campo externo debería aparecer. Este trabajo ha merecido una mención en la sección dedicada de la revista a los artículos con una particular calidad y relevancia para la comunidad científica

Mediante un análisis dependiente de cada muestra, basado en medias y cuantiles, se ha analizado el comportamiento de la distribución de probabilidad del overlap en el modelo de Sherrington-Kirkpatrick y en el modelo de Edwards-Anderson en 3 dimensiones. En este trabajo se encuentra una herramienta efectiva para distinguir entre el comportamiento RSB y el comportamiento Droplet que tratan de explicar el comportamiento de los vidrios de espín. Los resultados obtenidos son compatibles con un comportamiento tipo RSB en el modelo.

Respecto a otros trabajos que han sido enviados a revistas científicas:

- Recientemente se ha estudiado el modelo diluido de Levy spin glass en 1 dimensión cerca de la dimensión crítica inferior mediante una extrapolación a volumen infinito.
- También se ha estado trabajando en un método numérico para generar explícitamente muestras del árbol de estados de un vidrio de espín en campo medio, consiguiendo un método estable que permite la evaluación de observables sofisticados como las funciones de correlación.
- Se han observado numéricamente las propiedades de estructuras inherentes en temperatura infinita de estructuras de vectores spin glass de m componentes en 3 dimensiones.

Dichos trabajos está siendo evaluados en estos momentos por el comité científico y esperando su aprobación para una eventual publicación en revistas científicas de impacto.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

M. Baity-Jesi, R. Alvarez Baños, A. Cruz, L.A. Fernandez, J. M. Gil-Narvion, Gordillo-Guerrero, D. Iñiguez, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Pérez-Gaviro, M. Pivanti, J. J. Ruíz-Lorenzo, S.F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, F. Ricci-Tersenghi, R. Tripicciono, D. Yllanes. The three dimensional Ising spin glass in an external magnetic field: the role of the silent majority. *J. Stat. Mech.* (2014) P05014.

NOTA: publicación incluida en la sección "month's Highlight section" de diciembre de 2014 de la revista: <http://iopscience.iop.org/1742-5468/page/Highlights> (esta sección está dedicada a los artículos con una particular calidad y relevancia para la comunidad científica)

M. Baity-Jesi, R. Alvarez Baños, A. Cruz, L.A. Fernandez, J. M. Gil-Narvion, Gordillo-Guerrero, D. Iñiguez, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Pérez-Gaviro, M. Pivanti, J. J. Ruíz-Lorenzo, S.F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, F. Ricci-Tersenghi, R. Tripicciono, D. Yllanes. Dynamical Transition in the $D = 3$ Edwards-Anderson spin glass in an external magnetic field. *Phys. Rev. E* 89, 032140 (2014).

A. Billoire, A. Maiorano, E. Marinari, V. Martin-Mayor, D. Yllanes. The cumulative overlap distribution function in realistic spin glasses. *Phys. Rev. B* 90, 094201 (2014).

Comunicaciones Orales

Ruíz-Lorenzo J.J. (Janus Collaboration). New results on finite dimensional spin glasses. *Institute of Macromolecular Compounds (Russian Academy of Sciences (RAS))*. Saint Petersburg, 31 October, 2014.

Gordillo A. (Janus Collaboration). The Janus Project: boosting spin-glass simulations with FPGAs. *Institute of Macromolecular Compounds (Russian Academy of Sciences (RAS))*. Saint Petersburg, 31 October, 2014.

Hen I. and Martín-Mayor V. Classical versus Quantum annealing, the role of temperature chaos. *Critical Phenomena in Random and Complex Systems*. Anacapri, Italia, Septiembre de 2014.

Ruíz-Lorenzo J.J. (Janus Collaboration). The case for a three dimensional spin glass phase in presence of a magnetic field. *Critical Phenomena in Random and Complex Systems*. Capri, 9-12 September, 2014.

Hen I. and Martín-Mayor V. Quantum versus Thermal annealing (or D-wave versus Janus): seeking a fair comparison High performance computing. *From Clouds and Big Data to Exascale and Beyond*. Cetraro, Italia, Julio de 2014.

Martín-Mayor V. (Janus Collaboration). Taming extreme fluctuations in spin glasses: temperature chaos and magnetic fields. *MECO 39, the 39th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics*. Coventry, United Kingdom, April 2014

Pérez-Gaviro S. The Janus supercomputers: a special purpose computers for complex systems. *Charla invitada*. Barcelona Supercomputing Center / Centro Nacional de Supercomputación (BSC/CNS). Abril 2014.

Ruíz-Lorenzo J.J. (Janus Collaboration). The Last Survivor: a Spin Glass Phase in an External Magnetic Field. *FISES 2014*. Ourense, April 4, 2014

Yllanes D. (Janus Collaboration). The three-dimensional spin glass in an external magnetic field: the role of the silent majority. *March Meeting 2014 of the American Physical Society*. Denver (EE.UU.). Marzo de 2014

Pérez-Gaviro S. (Janus Collaboration). Janus II: the new generation Special Purpose Computer for spin-system simulations. *March Meeting 2014 of the American Physical Society*. Denver (EE.UU.). Marzo de 2014

Gordillo A. (Janus Collaboration). Scientific computing with FPGAs: the Janus machines. *XXIII Infoteh Simposium - Jahronina*. Bosnia-Herzegovina. Marzo 2014.

Posters

Pérez-Gaviro S. (Janus Collaboration). Dances with Spin Glasses: starring Janus. *VI International Conference BIFI2014: Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics*. Zaragoza, Enero 2014.

2.4.2. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomolecules.

IP Fernando Faló

Objetivo y descripción

El grupo de Modelado Físico de Biomoléculas se articula en torno a tres grupos de investigación que comparten el mismo enfoque en el estudio de la física de moléculas biológicas, así como en las técnicas de análisis mediante la mecánica estadística.

Grupo de Antonio Rey (UCM):

Utilizamos un método de simulación molecular y modelos de grano grueso (coarse-graining) para explorar el proceso de plegamiento de proteínas.

Diseñamos estos modelos para analizar los aspectos estructurales, termodinámicos y cinéticos del proceso. La parte más importante de este diseño

es el potencial de interacción que produce la estructura plegada. En los últimos 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:

Estudiamos el plegamiento de proteínas, su diseño, secuenciación o interacción con ligandos, utilizando modelos simplificados y métodos de la mecánica estadística, 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 pesar del enfoque teórico, el fin es proporcionar herramientas de cálculo que puedan utilizar los investigadores experimentales. En concreto, nuestra actividad se enfoca en:

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, en colaboración con L. Itzhaki (U. Cambridge) y A. Pelizzola (Politecnico de Turin). También, en colaboración con Ibercivis, hemos puesto en marcha un proyecto para implementar el modelo WSME en un servidor web.

b) 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 proteómicos. El método está implementado en un servidor web: <http://webapps.bifi.es/tnovoms/>

c) Estudio de las conformaciones de la GalNAc-Transferasa y de su mecanismo de interacción con los ligandos: en colaboración con el Dr. R. Hurtado, del BIFI, hemos desarrollado un modelo que explica la distribución fenomenológica de la enzima observada en experimentos de SAXS, y además las diferentes actividades

al variar la distancia en secuencia entre los dos puntos de glicosilación. Los resultados se recogen en un artículo en fase de revisión por pares.

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, en colaboración con el grupo de María Fillat del BIFI.

d) Análisis de experimentos "single molecule". Hemos iniciado una nueva línea para el análisis teórico de la respuesta de moléculas biológicas a fuerzas externa ("force spectroscopy"). Nos hemos centrado en el análisis de estructuras de DNA (G-quadruplex), proteínas y uniones proteína-ligando. Para ello estamos colaborando con grupos experimentales del IMDEA-Nanociencia (Madrid) y del INA de la Universidad de Zaragoza.

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

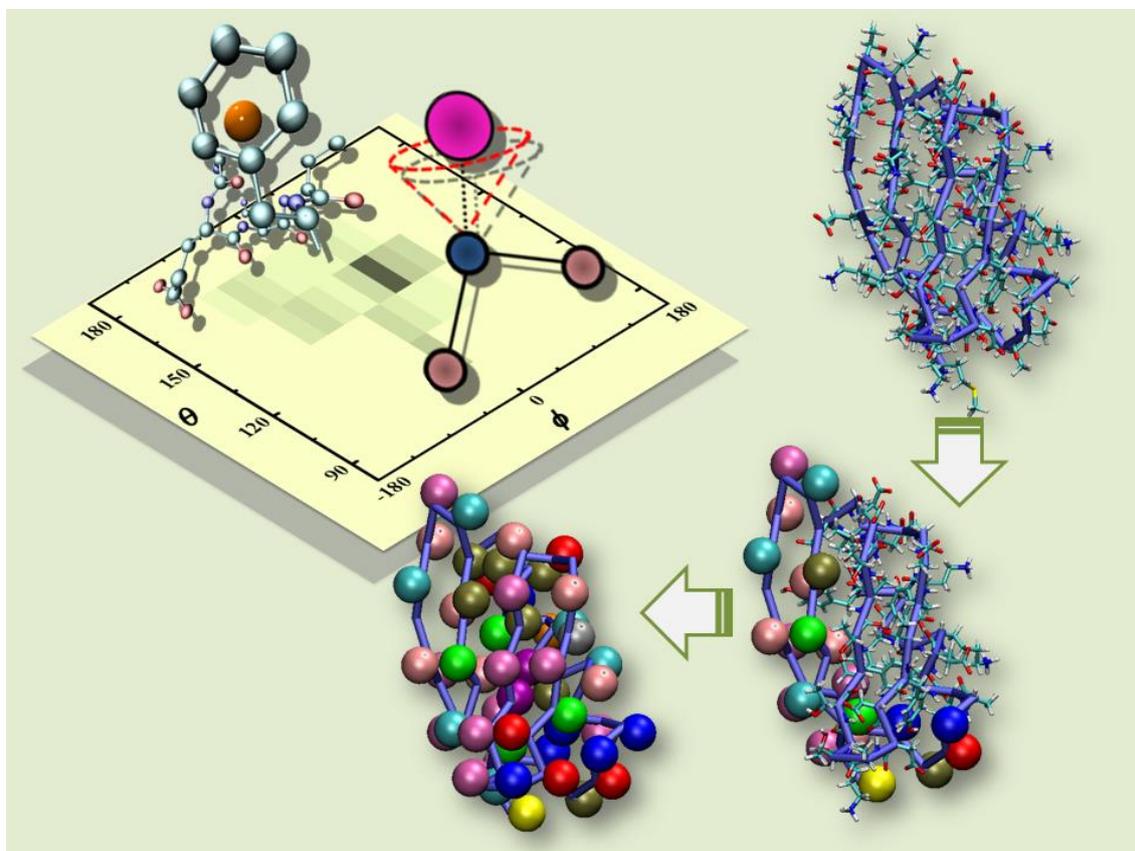
Equipo de investigación

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 Pérezzan, Estudiante de Doctorado (UCM)	NA
Vicente González 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 2014

1.- Hemos completado el diseño de una base de datos de rotámeros para representar las cadenas laterales de una cadena proteica en modelos de baja resolución. La librería resultante contiene suficiente flexibilidad como para reproducir, con mejores resultados de los existentes hasta el momento, la posición de los rotámeros, tanto en estructuras plegadas como en las conformaciones que aparecen a lo largo del proceso de plegamiento.

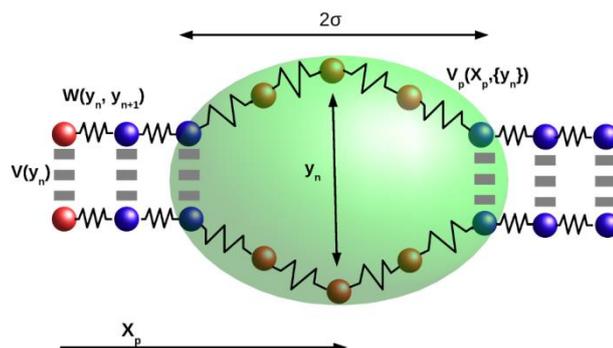
Larriva M., Rey A. Design of a Rotamer Library for Coarse-Grained Models in Protein-Folding Simulations. *Journal of Chemical Information and Modeling* **54**, 302-313 (2014).



Esquema del diseño de una librería de rotámeros para modelos de grano-grosso en proteínas.

2.- Hemos propuesto un modelo de interacción proteína-DNA que nos permite la predicción y localización de promotores en genomas. Hemos aplicado este modelo al estudio de 9 promotores de cianobacterias.

Tapia-Rojo R, Mazo JJ, Hernández JA, Peleato ML, Fillat MF, Falo F. Mesoscopic model and free energy landscape for protein-DNA binding sites: analysis of Cyanobacterial promoters. *PLoS Comput Biol* 10(10): e1003835. (2014).



Esquema del modelo mesoscópico de interacción proteína-DNA propuesto en el artículo.

3.- Hemos puesto en marcha un servidor web para implementar el método T-novoMS para secuenciación de péptidos, que traduce el problema de la interpretación de los espectros de masa en tandem al estudio del equilibrio de un modelo físico ad hoc, cuyas variables describen la posición de los sitios de fragmentación a lo largo de un índice de masa discreto. Este enfoque permite unificar un acercamiento "de-novo" y otro de búsqueda en base de datos.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

Larriva M., Rey A. Design of a Rotamer Library for Coarse-Grained Models in Protein-Folding Simulations. *Journal of Chemical Information and Modeling* **54**, 302-313 (2014). Impacto ISI: 4.068.

González-Charro V., Rey A. Intermediates in the folding equilibrium of repeat proteins from the TPR family. *European Biophysical Journal* **43**, 433-443 (2014). Impacto ISI: 2.474

Bergues-Pupo A E, Bergues J M, Falo F. Unzipping of DNA under the influence of external fields. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 396, 99-107 (2014). Impacto ISI: 1.722

Bergues-Pupo A E, Falo F and Fiasconaro A. Resonant optimization in the mechanical unzipping of DNA. *EPL* 105, 68005 (2014). Impacto ISI: 2.269

Tapia-Rojo R, Mazo JJ, Hernández JA, Peleato ML, Fillat MF, Falo F. Mesoscopic model and free energy landscape for protein-DNA binding sites: analysis of

Cyanobacterial promoters. *PLoS Comput Biol* 10(10): e1003835. (2014). Impacto ISI: 4.829

Tapia-Rojo R, Arregui S, Mazo JJ, Falo F. Mechanical unfolding of a simple model protein goes beyond the reach of one-Dimensional descriptions. *J. Chem. Phys.* 141,135102 (2014). Impacto ISI: 3.122

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 Union. Project 317614.
Foundational Research on multilevel complex networks and systems (MULTIPLEX).	European Union. 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)
Sergio Arregui	E19. Física Estadística y No Lineal (GEFENOL)

Resultados y conclusiones destacadas 2014

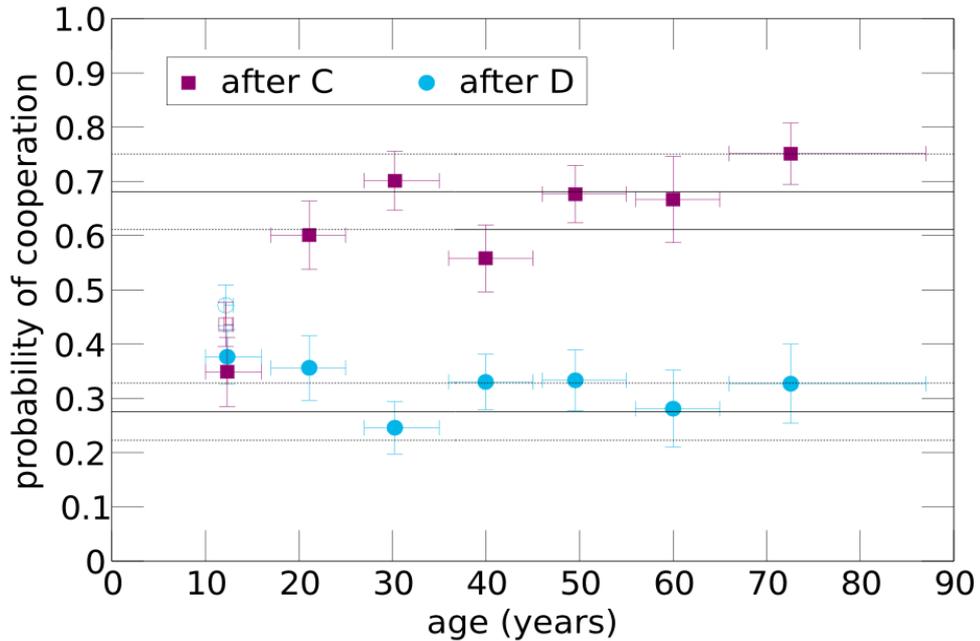
En la Línea de Redes y Sistemas Complejos, se ha trabajado tanto en modelos generales como en sus aplicaciones en diferentes áreas. A continuación se resumen las actividades principales realizadas en esta línea, divididas por subtemas.

Teoría de Juegos Evolutivos.

En el ámbito teórico, se ha estudiado el comportamiento cooperativo en interacciones grupales a través del *Public Goods Game* (PGG). El PGG ha sido (y es) estudiado para reproducir escenarios de diferentes ámbitos, ya sean sociales, biológicos o económicos, donde la cooperación juega un papel esencial. En particular, hemos estudiado cómo influye el intercambio de información entre grupos en el nivel cooperativo, esto es, la importancia de la información que cada agente posee sobre las acciones de sus compañeros en otros grupos. Hemos encontrado que la información externa juega un papel positivo fundamental en la evolución de la cooperación, siendo este resultado válido para diferentes versiones del PGG y diferentes estructuras de la red de contactos. Esto implica que, en sistemas compuestos por muchos grupos locales, una estrategia eficiente para promocionar la cooperación es favorecer las vías de comunicación entre los distintos grupos de trabajo. Por otro lado, se han abierto nuevas líneas de trabajo en teoría evolutiva de juegos aplicada tanto a la innovación tecnológica como a la ecología y microbiología.

En lo que se refiere a juegos por parejas hemos estudiado cómo la volatilidad de las interacciones sociales (es decir, su carácter variante en el tiempo) influye en la emergencia de la cooperación. Para ello, hemos recopilado datos sobre interacciones humanas reales que incluyen la resolución temporal necesaria durante diferentes periodos de tiempo. Esto nos ha permitido entender que las correlaciones temporales presentes en las relaciones humanas y el grado de resolución son ingredientes fundamentales para entender la emergencia de la cooperación en el tiempo.

En el marco experimental, hemos proseguido con la realización de experimentos sobre cooperación humana complementando una investigación propia anterior sobre el comportamiento cooperativo en diferentes grupos de edad. Nuestros resultados muestran que el nivel de cooperación es independiente de la edad, excepto en el caso de la tercera edad donde se coopera más. Además, hemos encontrado que en la adolescencia tiene lugar una transición conductual, de manera que los niños presentan un comportamiento más volátil que los adultos, además de ser más influenciados por el entorno. Por otro lado, hemos realizado un metaanálisis sobre la cooperación humana en dilemas sociales y finalizado la investigación sobre cooperación en redes dinámicas. Finalmente, estamos diseñando experimentos para barrer sistemáticamente los parámetros de los juegos simétricos de dos jugadores con el fin de estudiar la respuesta cooperativa en función del estímulo, así como experimentos intergeneracionales para aislar las influencias de parentesco y edad en el comportamiento cooperativo.



Modelos epidemiológicos. Epidemiología de tuberculosis.

Durante el año se han completado y depurado las herramientas de modelización de epidemiología de la Tuberculosis que se iniciaron el año anterior, con el objetivo de aplicarlas a la evaluación de futuras vacunas. El comportamiento de los individuos frente a la Tuberculosis tiene una fuerte dependencia con la edad de los mismos, tanto a nivel de desarrollo de la enfermedad como en lo relativo a su posterior propagación. Nuestro modelo introduce una descripción exhaustiva en términos cuantitativos de estas dependencias con la edad, de forma que podamos evaluar correctamente el impacto de diferentes estrategias de vacunación aplicadas a diferentes edades y contribuir de esta forma al debate vigente a este respecto.

De forma paralela se han analizado los resultados de diferentes ensayos clínicos de la vacuna en vigor para la Tuberculosis (conocida como BCG), infiriendo de ellos los mecanismos que causan en ocasiones una eficacia insuficiente de dicha vacuna. Mediante una cuantificación de estos efectos podemos evaluar sus posibles consecuencias a nivel poblacional si se dieran en futuras vacunas, utilizando para ello el modelo epidemiológico antes comentado.

Modelos epidemiológicos en redes complejas.

En este marco hemos seguido en la línea empezada en los últimos años con la modelización de la interacción entre diferentes enfermedades que se desarrollan en la misma población con diferentes niveles de abstracción.

Por lo que concierne redes de contactos entre individuos a lo largo de este año se han desarrollado una serie de modelos que acoplan dos dinámicas epidémicas en una misma población. Tal clase de modelos teóricos ha permitido dar una estimación cuantitativa de los efectos de la interacción entre enfermedades que

puede tener repercusiones en casos reales como por ejemplo el desarrollo combinado de HIV y Tuberculosis en muchos países Africanos.

En escenarios más realistas se ha seguido con el desarrollo de modelos metapoblacionales que permite el estudio de la difusión de epidemias a larga escala. En este frente se ha desarrollado un modelo para el estudio de la competición y co-existencia entre distintas cepas de la misma enfermedad. Gracias a este estudio ha sido posible cuantificar los límites de infecciosidad y tiempo de recuperación de cada cepa para que se pueda reproducir la co-existencia observada en casos reales como por ejemplo el desarrollo anual de la gripe.

En paralelo, durante este año se ha abordado otro problema abierto en epidemiología matemática: la estacionalidad de muchas enfermedades infecciosas como por ejemplo la gripe. Aunque el problema es muy conocido en epidemiología clásica todavía no se han producido modelos que presenten emergencia de estacionalidad como resultado de la propia dinámica del sistema y no como un elemento externo. Para solucionar este problema a lo largo de este año se han desarrollado una serie de modelos metapoblacionales acoplados con una dinámica de tipo Sano-Infectado-Recuperado-Sano (SIRS). Resultados de esta clase de dinámicas demuestran que, para una selección de parámetros, es posible reproducir la estacionalidad observada en datos reales sin incluir estos elementos de forma explícita ofreciendo por primera vez una explicación a estos fenómenos.

Sincronización y dinámicas no-lineales.

Como es tradición, uno de los modelos estudiados por el grupo en el ámbito de la sincronización de sistemas no lineales ha sido el modelo de Kuramoto. Este año, se ha estudiado cómo las correcciones cuánticas influyen en la sincronización de un sistema. Para ello se ha derivado un modelo de Kuramoto semiclásico y se ha estudiado cómo el punto crítico a partir del cual emerge el estado sincronizado cambia al aumentar la cuanticidad en el sistema. Este trabajo supone el primer intento de cuantización de este paradigmático modelo no lineal y por tanto abre las puertas a su aplicación en sistemas trabajando en el régimen cuántico y donde se manifiesten fenómenos de sincronización.

A largo de este último año profundizamos en el estudio caracterización de modelos neuronales conocidos como integración-y-disparo (integrate-and-fire). En particular, la investigación se ha concentrado en una exhaustiva exploración del espacio de parámetros de dicha dinámica en aras de determinar las condiciones necesarias para la aparición de cascadas globales. En esta exploración, la topología juega una papel fundamental por lo que nuestras implementaciones abordar redes regulares, libres de escala, Erdos-Renyi, mundo pequeño, aleatorias regulares, etc. Como aplicación de nuestros resultados teóricos y numéricos, hemos desarrollado a lo largo de este año una novedosa interpretación sociológica que podría ser útil a la hora de modelizar sistemas socio-técnicos.

En paralelo, durante este año hemos adelantado el estudio de un modelo de fracturas conocido como "haz de fibras" (fiber bundle) en redes complejas poco densas en una y múltiples capas. Concretamente, es posible observar diversos

comportamientos de fallo de la red en función de la posible disipación de carga aplicada, la topología, y las reglas de interacción microscópicas (i. e. regla de transferencia de carga: 1. a primeros vecinos, llamada local, 2. a todos los supervivientes, conocida como regla global o 3. local para nodos no aislados y global para aquellos aislados, llamada mixta). Hemos observado que la componente gigante de la red experimenta transiciones de segundo orden siempre para el caso local cuando existe suficiente disipación, mientras que la regla global siempre implica transiciones discontinuas (incluso a alta disipación de carga). Por otra parte, la regla mixta induce transiciones abruptas a baja disipación y continuas a alta. Como posibles resultados empíricos de esta investigación es posible aplicar el modelo para predecir la aparición de grandes fallos en redes de suministro eléctrico y sistemas de transporte, entre otros.

Finalmente, hemos proseguido con la aplicación de herramientas heredadas del estudio de sistemas no lineales para la caracterización de redes. En particular, se ha logrado entender analíticamente los resultados (obtenidos numéricamente el año pasado) sobre la dimensión de correlación en redes.

Biología de Sistemas, redes biológicas.

Hemos estudiado la red compleja de interacciones proteína-proteína en *Mycobacterium Tuberculosis*, y hemos analizado como se adapta la misma a diferentes condiciones ambientales. El estudio de este sistema bajo el paradigma de las redes complejas multicapa, es capaz de revelar el importante rol de cierto conjunto de genes responsables de la adaptación del patógeno al medio fagosómico. El análisis realizado se puede trasladar a otros organismos con el objetivo de hallar tendencias generales en las respuestas transcripcionales a estreses similares así como relaciones entre dichas respuestas y el estilo de vida de los organismos y otras cuestiones biológicas relevantes.

Estructura y Dinámica de redes multicapa.

En este marco hemos seguido desarrollando medidas topológicas apropiadas a sistemas multicapas. En particular, hemos generalizado la noción de coeficiente de agrupamiento (clustering coefficient) haciendo particular énfasis en el hecho de que la simple extrapolación de medidas pensadas para redes monocapas a redes multicapas no suele dar buenos resultados. Al contrario, hemos demostrado que construir nuevas medidas a partir de nociones básicas (como la de caminos en este caso) es la manera correcta de proceder. En este sentido hemos diseñado una generalización de la comunicabilidad de un sistema multicapa que pone de manifiesto la emergencia del estado coordinado (entre capas) cuando los caminos entre parejas de nodos en una misma capa pueden incluir trayectorias en capas diferentes.

En la misma línea, hemos desarrollado una medida de correlaciones en redes multicapas que tenga en cuenta la existencia de dimensiones extra con respecto a las redes monocapa. Es preciso desarrollar medidas de correlaciones ya que múltiples estudios apuntan a que la existencia de correlaciones entre capas es responsable del comportamiento anómalo de muchos sistemas. Uno de esos ejemplos es la percolación k-core, donde hemos comprobado, generalizando este proceso de una a M capas, que la existencia de correlaciones entre los grados y conexiones de los nodos de una capa afectan a la robustez del sistema.

Asimismo, hemos demostrado analítica y numéricamente la existencia de una transición hasta el momento desconocida. Esta transición marca el punto a partir del cual el sistema multicapa es prácticamente indistinguible de sus versiones a dimensionalidad reducida.

Por último, queremos destacar que durante el año 2014 el grupo ha participado en los dos artículos de revisión más importantes sobre el tema, haciendo por tanto notoria su importancia dentro del campo y en los proyectos sobre el tema en los que participa.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Como resultado del trabajo realizado, se han publicado 14 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. A continuación se enumeran las publicaciones en estas líneas:

1- M. Gutiérrez-Roig, C. Gracia-Lázaro, J. Perelló, Y. Moreno, and A. Sánchez. Transition from reciprocal cooperation to persistent behaviour in social dilemmas at the end of adolescence. *Nature communications*, 5, 4362 (2014).

2- J. Grujić, C. Gracia-Lázaro, M. Milinski, D. Semmann, A. Traulsen, J.A. Cuesta, Y. Moreno, and A. Sánchez. "A comparative analysis of spatial Prisoner's Dilemma experiments: Conditional cooperation and payoff irrelevance" *Scientific Reports*, 4, 4615 (2014).

3. C. Gracia-Lázaro, J. Gómez-Gardeñes, L.M. Floría, and Y. Moreno. "Intergroup information exchange drives cooperation in the public goods game". *Physical Review E* 90, 4, 42808 (2014).

4. A. Cardillo, G. Petri, V. Nicosia, R. Sinatra, J. Gómez-Gardeñes, and V. Latora. "Evolutionary Dynamics of Time-resolved Social Interactions", *Physical Review E* 90, 052825 (2014).

5. P. Piedrahita, J. Borge-Holthoefer, Y. Moreno, and A. Arenas., "Modeling self-sustained activity cascades in socio-technical networks", *Europhysics Letters (EPL)* 104, 48004 (2013).

6. I. Hermoso de Mendoza , L. Pachón, J. Gómez-Gardeñes, and D. Zueco. "The Quantum Kuramoto Model", *Physical Review E* 90, 052904 (2014).

7. L. Lacasa, and J. Gómez-Gardeñes. "Analytical estimation of the correlation dimension of integer lattices", *CHAOS* 24, 043101 (2014).

8. E. Estrada, and J. Gómez-Gardeñes. "Communicability reveals a Transition to Coordinated behavior in Multiplex Networks", *Physical Review E* 89, 042819 (2014).

9. R. J. Sánchez-García, E. Cozzo, and Y. Moreno. "Dimensionality reduction and spectral properties of multilayer networks", *Physical Review E* 89, 052815 (2014).

10. N. Azimi-Tafreshi, J. Gómez-Gardeñes, and S. Dorogovtsev, "K-core Percolation in Multiplex Networks", *Physical Review E* 90, 032816 (2014).
11. M. Kivelä, A. Arenas, M. Barthelemy, J.P. Gleeson, Y. Moreno, and M.A. Porter, *Journal of Complex Networks* 2 (3), 203 – 271
12. S. Boccaletti, G. Bianconi, R. Criado, C.I. del Genio, J. Gómez-Gardeñes, M. Romance, I. Sendiña-Nadal, Z. Wang, and M. Zanin. "The Structure and Dynamics of Multilayer Networks", *Physics Reports* 544, 1- 122 (2014).
13. J. Sanz, C-Y Xia, S. Meloni, and Y. Moreno. Dynamics of Interacting Diseases. *Physical Review X* 4 041005 (2014).
14. Ch. Poletto, S. Meloni, A. Van Metre, V. Colizza, Y. Moreno, and A. Vespignani. "Characterising two-pathogen competition in spatially structured environments". *Scientific Reports* (aceptado).

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

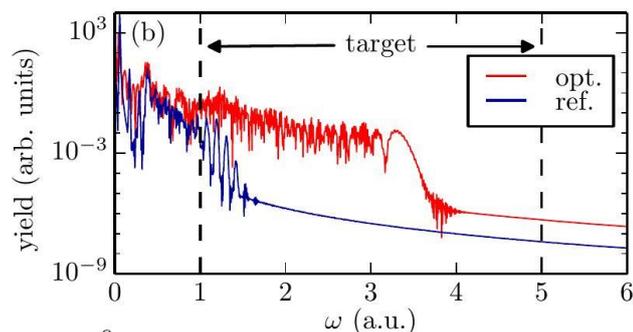
Título proyecto	Entidad Financiadora
Time dynamics and Control in nanostructures for magnetic recording and energy applications (CRONOS)	European Unión - FP7
Teoría de sistemas híbridos clásico-cuánticos: equilibrio, dinámica y control	MINECO
Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte	MINECO

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 2014

Teoría de control óptimo cuántico: Se ha conseguido la formulación de una teoría de control óptimo cuántico para sistemas híbridos clásico-cuánticos, modelados mediante la "ecuación de Schrödinger". Se ha terminado la implementación numérica de este esquema teórico. Asimismo, se ha demostrado la posibilidad de optimizar el espectro de emisión de armónicos altos, mediante el uso de nuestra metodología de control óptimo cuántico basado en la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo. Finalmente, hemos demostrado igualmente el control de espines en puntos cuántico creados en semiconductores, mediante el uso de campos eléctricos ultrarrápidos, acoplados al espín mediante el término de espín-órbita.



Ejemplo de optimización del espectro de emisión de armónicos altos, mediante nuestro formalismo de optimización cuántico. En este caso el objetivo era aumentar el "cut-off" del espectro, desde las 1.5 a.u. Del espectro de referencia (azul), hasta las 4 a.u. conseguidas finalmente.

Transporte electrónico: Dentro de la línea de investigación de la teoría cuántica del transporte electrónico, hemos estudiado los efectos del desorden (debido, por ejemplo, a la presencia de impurezas) en hilos cuánticos en la producción de entrelazamiento de electrones. Para este estudio hemos desarrollado modelos teóricos dentro de un marco de la teoría de matrices aleatorias. En este proyecto estuvieron involucrados estudiantes del grado en Física (Alberto Aleta, Hector Villarrubia-Rojo), así como del investigador de la Universidad de Sevilla, Diego Frustaglia. Los resultados de dicha investigación han sido publicados recientemente en la revista *Physical Review*.

Por otro lado, también hemos investigado las propiedades del transporte de electrones en hilos cuánticos con un tipo especial de desorden conocido como tipo Lévy. Originalmente dicho estudio fue enfocado al estudio del problema de transporte electrónico, pero recientemente se llevó a cabo una realización experimental del mismo problema utilizando una guía de microondas. Este trabajo se ha realizado en colaboración con un grupo de investigación de la Universidad de Valencia, así como de la Universidad de Puebla, México. Dicho trabajo ha sido enviado a *Physical Review* para su publicación.

Catálisis: Hoy en día, los estudios computacionales pueden ayudar a comprender por completo los mecanismos de reacción química, incluso para las reacciones químicas complejas que se estudian en el campo de la catálisis homogénea. Se precisa de este conocimiento microscópico, por ejemplo, para racionalizar la mejora de los catalizadores organometálicos para la hidrogenización de alquenos. Por ello, hemos investigado, usando metodologías "DFT", y en colaboración con grupos experimentales, la estructura electrónica y la reactividad de reacciones químicas de interés industrial, en las que los catalizadores son complejos metálicos ricos en electrones, basados en iridio y rodio. En concreto, hemos caracterizado la mecánica de reacción de las siguientes reacciones mediadas por complejos de Ir o Rh: i) hidrogenización catalítica de alquenos, ii) formación de enlaces de C-NH₂ usando NH₃ como reactante, iii) funcionalización selectiva de 2-(2-thienyl)pyridine, iv) producción de Hidrógeno a partir de Hidrosilanos y agua, y v) activación de enlaces P-H en fosfanos secundarios.

Fundamentos de mecánica estadística: Con la vista puesta en los sistemas híbridos clásico-cuánticos (para lo cual hemos conseguido financiación del MINECO a través de un nuevo proyecto), hemos proseguido el estudio de los

fundamentos de mecánica estadística. Se ha realizado el estudio teórico de un "ensemble" estadístico cuántico propuesto recientemente, y del que demostramos que no verifica algunas de las propiedades esenciales que debe verificar un buen ensemble termodinámico.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Mena I, Casado MA, Polo V, García-Orduña P, Lahoz FJ, and Oro, LA, C-NH₂ Bond Formation Mediated by Iridium Complexes, *Angewandte Chemie International Edition* 53 (2014) 9627.

Rubio-Pérez L, Iglesias M, Castarlenas R, Polo V, Pérez-Torrente JJ, and Oro LA, Selective CH Bond Functionalization of 2-(2-Thienyl)pyridine by a Rhodium N-Heterocyclic Carbene Catalyst, *ChemCatChem* 6 (2014) 3192.

Garcés K, Fernández-Alvarez FJ, Polo V, Lalrempuia R, Pérez-Torrente JJ, and Oro LA, Iridium-Catalyzed Hydrogen Production from Hydrosilanes and Water, *ChemCatChem* 6 (2014) 1691.

Mena I, Casado MA, Polo V, García-Orduña P, Lahoz FJ, and Oro LA, P-H activation of secondary phosphanes on a parent amido diiridium complex, *Dalton transactions* 43 (2014) 1609.

Polo V, Al-Saadi AA, and Oro, LA, Theoretical Studies on the Mechanism of Iridium-Catalyzed Alkene Hydrogenation by the Cationic Complex [IrH₂(NCMe)₃(PiPr₃)]⁺, *Organometallics* 33 (2014) 5156.

Aleta A, Villarrubia-Rojo H, Frustaglia D, and Gopar VA, Orbital entanglement and electron localization in quantum wires, *Phys. Rev. B* 89 (2014) 075429.

Gopar VA, Quantum transport through disordered 1D wires: Conductance via localized and delocalized electrons, *AIP Conf. Proc.* 21 (2014) 1579.

Fernández-Martín AA, Méndez-Bermúdez JA, Carbonell J, Cervera F, Sánchez-Dehesa JM, and Gopar VA, Beyond Anderson Localization in 1D: Anomalous Localization of Microwaves in Random Waveguides. Aceptado en *Physical Review Letters*.

Budagosky J and Castro A, Ultrafast single electron spin manipulation in 2D semiconductor quantum dots with optimally controlled time-dependent electric fields through spin orbit coupling, *Eur. Phys. J. B* (in press).

Castro A, Rubio A, and Gross, EKV, Enhancing and controlling single-atom high-harmonic generation spectra: a time-dependent density-functional scheme, submitted.

Solanpää J, Budagosky JA, Shvetsov-Shilovski, Castro A, Rubio A, and Räsänen E, Optimal control of high-order-harmonic generation by intense few-cycle pulses, *Phys. Rev. A* 90 (2014) 053402.

Castro A and Gross EKV, Optimal control theory for quantum-classical systems: Ehrenfest molecular dynamics based on time-dependent density-functional theory, *J. Phys. A: Math. Theor.* 47 (2014) 025204.

Alonso JL, Castro A, Clemente-Gallardo J, Cuchí JC, Echenique-Robba P, Esteve JG, and Falceto F, A recent quantum canonical ensemble based on a suggestion by Schrödinger produces non-extensive thermodynamic functions, submitted.

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 para estudiar el caos cuando el tiempo evoluciona hacia el pasado.
- Estudio de la complejidad en diferentes sistemas físicos, desde sistemas fuera del equilibrio hasta sistemas cuánticos. Hemos abordado en este apartado el problema de aplicar estos indicadores de complejidad a fenómenos que se producen con nuevos materiales tal como es el caso del grafeno.

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-Ruíz	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 2014

- Econofísica: Estudio de modelos de tipo gas.
- Mappings: modelo para gases ideales y caos hacia el pasado.
- Complejidad: cálculo en grafeno mono-capa.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Se han acabado de preparar los proceedings del Congreso NOMA'13, Zaragoza, 3-4 Setiembre 2013, ***Proceedings of the International Workshop NOMA'1***, que aparecerán prontamente en la serie Springer PROMS, Eds. R. López-Ruíz, D. Fournier-Prunaret, C. Gracio & N. Yoshifumi, en Enero 2015. El volumen de 280 páginas recoge la aportación de 36 investigadores de más de 10 países distintos que tuvieron ocasión de presentar sus trabajos en Zaragoza en dicho congreso. Otros trabajos publicados durante este periodo puede verse en la siguiente sección.

Publicaciones

López-Ruíz R and Shivanian E. A Nonlinear Map for the Decay to Equilibrium of Ideal Gases, Chapter in the book **NONLINEAR MAPS AND THEIR APPLICATIONS**, C. Grácio et al. (Eds.), Ch. 13, pp. 133-140, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics (PROMS), vol. 57, 2014.

López-Ruíz R and Sañudo J. Statistical measures and the Klein tunneling in single-layer graphene, *Physics Letters A* 378, 1005-1009 (2014).

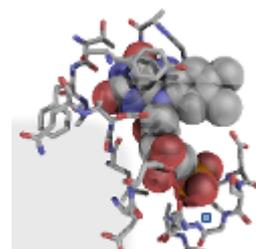
López-Ruíz R, Shivanian E and López JL. Random Market Models with an H-Theorem, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics (PROMS), Ch. 13, vol. 112, to appear in January 2015.

Pellicer-Lostao C and López-Ruíz R. The Importance of the Strategy in Backward Orbits, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics (PROMS), Ch. 9, vol. 112, to appear in January 2015.

Pomeau Y and López-Ruíz R. Study of a Model for the Distribution of Wealth, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics (PROMS), Ch. 1, vol. 112, to appear in January 2015.

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-Guerrero
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-Campoy

Descripción de las líneas de investigación y sus logros en 2014

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-Guerrero

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). PI: Ramón Hurtado-Guerrero	MICINN-MEC
Study of protein-carbohydrate interactions involved in human diseases. MEC, 2015-2017. PI: Ramón Hurtado-Guerrero (CTQ2013-44367-C2-2-P).	MICINN-MEC

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Ramón Hurtado-Guerrero/Investigador ARAID	B89-Protein Targets
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Erandi Lira-Navarrete/Becario	B89-Protein Targets
Jessika Valero-Gonzalez/Becario	B89-Protein Targets
Jorge Castro/Becario	B89-Protein Targets
Matilde de las Rivas/Becaria	B89-Protein Targets
Ana Imaz/Estudiante de máster	NO

Resultados y conclusiones destacadas 2014

Durante este año hemos conseguido publicar en la prestigiosa revista *Angewandte Chemie International Edition* el primer complejo ternario (en concreto un complejo de Michaelis) de una glicosiltransferasa. Gracias a este complejo hemos conseguido entender el mecanismo catalítico de una familia muy importante de glicosiltransferase en humanos, las GalNAc transferasas. Este estudio nos permitirá el diseño racional de los primeros compuestos inhibitorios para estas enzimas y su evaluación posterior en diversas enfermedades como cáncer, osteoporosis, etc.

También es importante mencionar que hemos descubierto un compuesto que actúa induciendo la apertura de un subsitio próximo al sitio de unión de colina en la colina quinasa. Esto es completamente novedoso ya que abre las puertas para explotar este subsitio, del cual se desconocía su existencia (trabajo publicado en

Journal of Medicinal Chemistry, 2014). Este descubrimiento nos permitirá diseñar nuevos compuestos para la inhibición de esta enzima y su posterior evaluación en líneas cancerígenas.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones (*corresponding autor)

A. Rubio Ruíz, A. Figuerola-Conchas, J. Ramos-Torrecillas, F. Capitán-Cañadas, P. Rios-Marco, M.P. Carrasco, M.A. Gallo, A. Espinosa, C. Marco, C. Ruíz, A. Entrena*, R. Hurtado-Guerrero* and A. Conejo-García*. Discovery of a new binding site on human choline kinase $\alpha 1$: design, synthesis, crystallographic studies and biological evaluation of asymmetrical bispyridinium derivatives. *Journal of Medicinal Chemistry* (2014) 57:507-515 (Highlighted in SciBX: <http://www.nature.com/scibx/journal/v7/n6/full/scibx.2014.165.html>)

B. Lira-Navarrete, J. Iglesias-Fernández, W.F. Zandberg, I. Compañón, Y. Kong, F. Corzana, B.M. Pinto, H. Clausen, J.M. Peregrina, D. Vocadlo, C. Rovira* and R. Hurtado-Guerrero*. Substrate-guided front-face reaction revealed by combined structural snapshots and metadynamics for the polypeptide N-acetylgalactosaminyltransferase 2. *Angewandte Chemie International Edition* (2014) 53:8206-8210

C. Madariaga, N. Martínez-Saéz, V. Somovilla, L. García, Á. Berbis, J. Valero-González, S. Martín-Santamaría, R. Hurtado-Guerrero, J.L. Asensio, J. Jiménez-Barbero, A. Avenoz, J.H. Busto, F. Corzana and J.M. Peregrina. Serine *versus* Threonine Glycosylation with α -O-GalNAc: Implications for the molecular recognition by lectins. *Chemistry – A European Journal* (2014) 20:12616-12627.

D. Noelia Blanco, et al, Ramon Hurtado-Guerrero* and Javier Arroyo*. Structural and Functional Analysis of Yeast Crh1 and Crh2 Transglycosylases. *FEBS Journal* (2014)

E. David Madariaga, et al, Filipa Marcelo, Ramon Hurtado-Guerrero, Francisco Corzana and Jesús Peregrina. Detection of Tumor-Associated Glycopeptides by Lectins: the Peptide Context Modulates Carbohydrate Recognition. *ACS Chemical Biology* (2014).

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

Ver área de Física

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

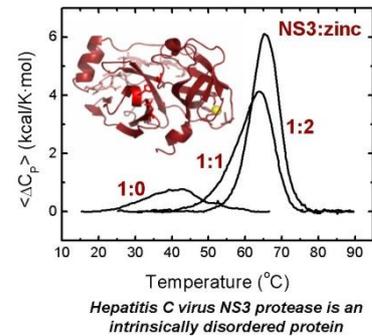
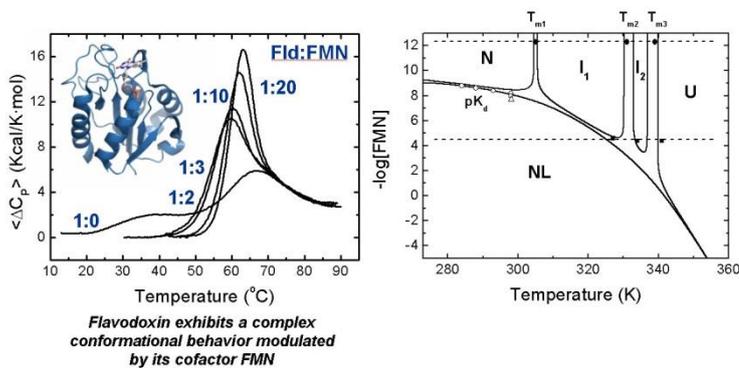
Ver área de Física

2.5.7. Interacciones biomoleculares/Biomolecular interactions IP Adrián Velázquez

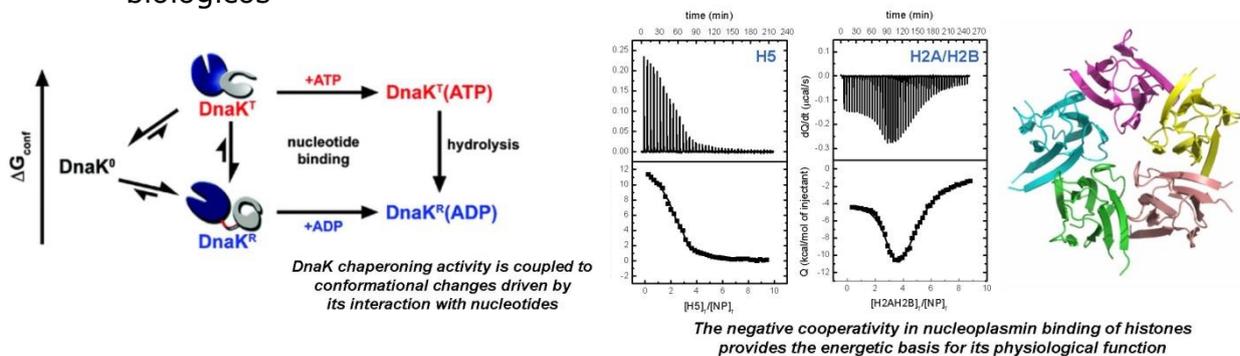
Objetivo y descripción

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:

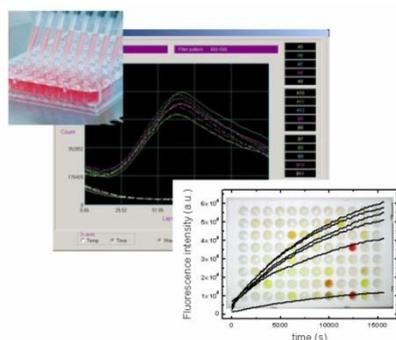
- Caracterizar estructural y energéticamente el paisaje conformacional, las interacciones con otras biomoléculas y los cambios conformacionales en proteínas con relevancia biomédica y/o biotecnológica



- 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
Estabilidad de proteínas: Principios básicos de los estados (parcialmente) desplegados y estudios moleculares en enfermedades conformacionales	Ministerio de Ciencia e Innovación BFU2013-47064-P
Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos	Ministerio de Ciencia e Innovación BFU2010-19451

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 Luis Neira Faleiro/Catedrático Universidad Miguel Hernández (Elche)	Identificación Grupo NA
Pilar María LanUNIZAR Morte/Estudiante de Máster	B89-Protein Targets
Rafael Clavería Gimeno/Becario	B89-Protein Targets

Resultados y conclusiones destacadas 2014

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 Ghent estamos realizando estudios in vivo con dichos inhibidores.

En colaboración con investigadores de la Universidad de Copenhagen hemos estudiado el efecto estabilizante de polímeros sobre proteínas para aplicaciones biotecnológicas en la industria farmacéutica-sanitaria y alimentaria.

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

En colaboración con investigadores de la Universidad Nacional Autónoma de México hemos continuado estudiando la interacción de subunidades de la F-ATPasa con nucleótidos.

En colaboración con investigadores de la Universidad de Sevilla-Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis-CSIC hemos estudiado nuevas interacciones de citocromo c con moléculas diana implicadas en apoptosis.

En colaboración con investigadores de otras líneas del Instituto BIFI hemos continuado el estudio del mecanismo de internalización de LDL's y del reciclado del receptor de LDL's, así como de aspectos funcionales de proteínas redox.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Publicaciones

P. Bernal-Bayard, V. Ojeda, M. Hervas, F.J. Cejudo, J.A. Navarro, A. Velázquez-Campoy, J.M. Pérez-Ruíz. Molecular recognition in the interaction of chloroplast 2-Cys peroxiredoxin with NADPH-thioredoxin reductase C (NTRC) and thioredoxin x. *FEBS Letters* 2014 (in press)

S. Vega, O. Abián, A. Velázquez-Campoy. A unified framework based on the binding polynomial for characterizing biological systems by isothermal titration calorimetry. *Methods* 2014 (in press)

J.J. Water, M.M. Schack, A. Velázquez-Campoy, M.J. Maltesen, M. van de Weert, L. Jorgensen. Complex coacervates of hyaluronic acid and lysozyme: Effect on protein structure and physical stability. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics* (2014) 88:325-331

B. Moreno-Beltran, A. Diaz-Quintana, K. Gonzalez-Arzola, A. Velázquez-Campoy, M.A. De la Rosa, I. Diaz-Moreno. Cytochrome c1 exhibits two binding sites for cytochrome c in plants. *Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics* (2014) 1837:1717-1729

J. Martinez-Olivan, Z. Rozado-Aguirre, X. Arias-Moreno, V. Angarica, A. Velázquez-Campoy, J. Sancho. LDL receptor is a calcium/magnesium sensor: Role of LR4 and LR5 ion interaction kinetics in LDL release in the endosome. *FEBS Journal* (2014) 281:2638-2658

J. Martinez-Fabregas, I. Diaz-Moreno, K. Gonzalez-Arzola, S. Janocha, J.A. Navarro, M. Hervas, R. Bernhardt, A. Velázquez-Campoy, A. Diaz-Quintana, M.A. De la Rosa. Structural and functional analysis of novel human cytochrome c targets in apoptosis. *Molecular & Cell Proteomics* (2014) 13:1439-1456

J. Martinez-Olivan, X. Arias-Moreno, A. Velázquez-Campoy, O. Millet, J. Sancho. LDL receptor/lipoprotein recognition: Endosomal weakening of apo B and apo E binding to the convex face of the LR5 repeat. *FEBS Journal* (2014) 281:1534-1546

A. Padavannil, C. Jobichen, Y. Qinghua, A. Velázquez-Campoy, L. Yang, S.Q. Pan, J. Sivaraman. Dimerization of VirD2 binding protein is essential for *Agrobacterium* induced tumor formation in plants. *PLoS Pathogens* (2014) 10:e1003948

G. Salcedo, P. Cano-Sanchez, M. Tuena de Gomez-Puyou, A. Velázquez-Campoy, E. Garcia-Hernandez. Isolated noncatalytic and catalytic subunits of F1-ATPase

exhibit similar, albeit not identical, energetic strategies for recognizing adenosine nucleotides. *Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics* (2014) 1837:44-50

A. Bortolotti, A. Sanchez-Azqueta, C.M. Maya, A. Velázquez-Campoy, J.A. Hermoso, M. Medina, N. Cortez. The C-terminal extension of bacterial flavodoxin-reductases: Involvement in the hydride transfer mechanism from the coenzyme. *Biochimica et Biophysica Acta – Bioenergetics* (2014) 1837:33-43

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 Ruíz
2.6.6. Análisis de Información en Internet y Grandes Redes. Inteligencia Colectiva	IP Alejandro Rivero

Descripción de las líneas y sus logros 2014

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
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
Cofinanciación para la reparación del SAI del CPD del BIFI	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
Alfonso Angulo Vela / contratado	
Sergio Andrés Muniesa / estudiante	

Resultados y conclusiones destacados 2014

En primer lugar cabe destacar que este año se ha superado el record de horas de cálculo servidas por los principales supercomputadores HPC que gestiona el grupo (MEMENTO/CAESARAUGUSTA Y TERMINUS). De esta manera, en 2014 se han contabilizado un total de 21,14 millones de horas de CPU consumidas por los investigadores del Instituto, sus colaboradores y otros usuarios externos.

Otra de las principales novedades de 2014 ha sido el reconocimiento de la Red Española de Supercomputación (incluyendo nuestro supercomputador

Memento/Caesar Augusta), como Infraestructura Científico-Técnica Singular (ICTS) distribuida. Durante este año, se ha participado en varias reuniones con representantes del MINECO y del resto de nodos de la Red, para la elaboración de los estatutos de la RES. En estos momentos, ya se ha consensuado un primer borrador que ahora está siendo validado por los servicios jurídicos de los distintos organismos firmantes y se espera que en próximas fechas sea refrendado oficialmente. Esto permitirá la aprobación a todos los efectos de la RES como Infraestructura Científico-Técnica Singular (ICTS) de carácter distribuido, algo que ya ha contemplado el Gobierno de España a través del Consejo de Política Científica, Tecnológica y de Innovación, al incluirla en el nuevo mapa de ICTS, recientemente aprobado.

Respecto a nuevos proyectos y colaboraciones, a finales de este año el BIFI se ha incorporado como miembro de pleno derecho ("full member") a la plataforma tecnológica europea ETP4HPC (<http://www.etp4hpc.eu>). Este foro estratégico financiado por la Comisión Europea, reúne a los principales actores del ecosistema europeo de HPC (centros de supercomputación, investigadores, proveedores de hardware, desarrolladores) y nos va a permitir conocer de primera mano la evolución de la tecnología HPC así como los planes de financiación que para este campo se van diseñando desde la Comisión Europea. Previamente, en Abril asistimos en París a la asamblea general anual de ETP4HPC, donde además, personal de la Comisión y representantes de la plataforma presentaron entre otros el "HPC Public Private Partnership" firmado recientemente entre ambos para asesorar a la Comisión en los temas estratégicos de HPC a financiar en futuras convocatorias.

En cuanto a actividades organizadas, durante 2014 hemos co-organizado dos destacados eventos dentro del nuevo marco de colaboración establecido entre el Instituto y las empresas Fujitsu e Intel: la jornada "BIFI-I3A Fujitsu Innovation Day" el jueves 20 de Marzo y el workshop "Supercomputación y Almacenamiento hyperscale para HPC, Big Data y Cloud" el 27 de Noviembre. Los dos eventos se celebraron en el salón de actos del Edificio I+D, trataron diversos topics actualmente candentes en el mundo de la computación (HPC, Cloud, Big data, Horizon2020, Green Computing...) y ambos contaron con una notable asistencia (más de 40 participantes) de la comunidad local de I+D+I (investigadores y empresas).



Imágenes de las dos jornadas organizadas

Por último, una mejora técnica realizada durante este año ha sido el desarrollo y despliegue de una nueva herramienta basada en el protocolo BACnet/IP para mejorar la monitorización del doble sistema (climatización por agua fría + free-cooling) que refrigera nuestro data center. Esto ha permitido afinar la configuración del sistema de refrigeración, optimizando todavía más el consumo energético.

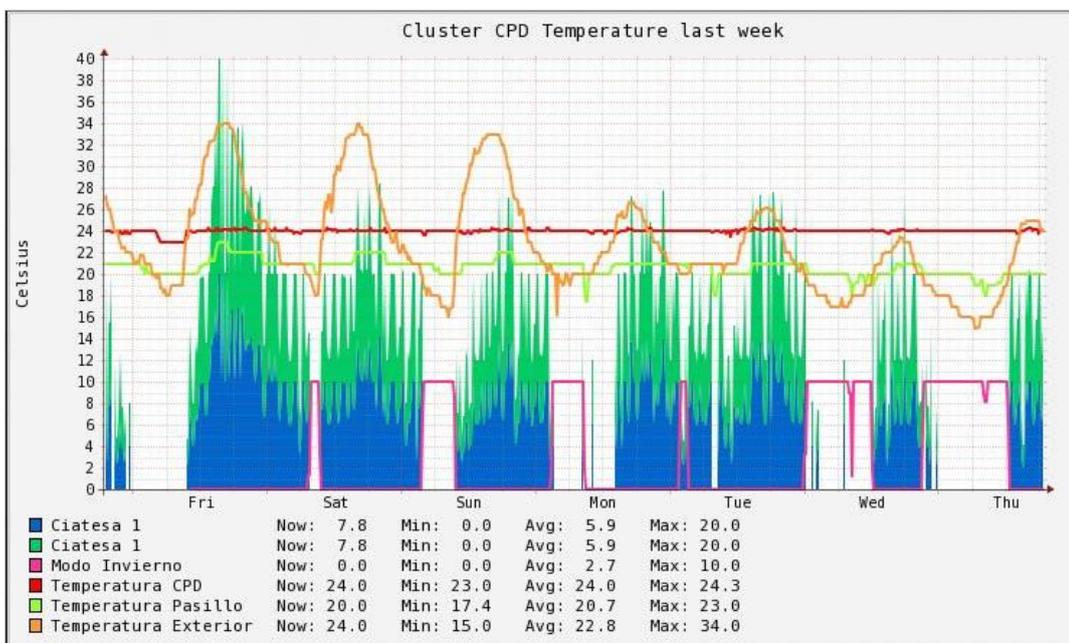


Imagen de la herramienta desarrollada

Difusión de logros científicos destacados en 2014

Angarica, V.E., Angulo, A., Giner, A., Losilla, G., Ventura, S., and Sancho, J. PrionScan: an online database of predicted prion domains in complete proteomes. BMC Genomics. 15: 102. 2014.

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 2014 la línea de trabajo cloud se ha visto asentada dentro del proyecto EGI-INSPIRE y su Federación de clouds en la que el BIFI aporta un total de casi 1000 cores de cálculo sumando dos instalaciones basadas en OpenStack, una versión Grizzly y la otra Havana.

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 de la tarea FedCloud en el proyecto EGI-InSPIRE es proveer los servicios cloud tanto de cálculo como de almacenamiento y dar soporte a los usuarios investigadores y empresas que lo requieran para su correcta utilización.

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.

Este año 2014 nos hemos unido como socios a un gran proyecto europeo de "Factories of the Future", llamado FORTISSIMO <http://www.fortissimo-project.eu/>, que posee una financiación total de unos 16 millones de euros. Nuestra principal tarea es colaborar con la empresa Schnell Software en la mejora de su software de optimización dotándolo de distribución en el cloud HPC de FORTISSIMO.

Un nuevo ejemplo de colaboración con empresas y acercamiento de las tecnologías cloud y la supercomputación a las PYMES, que permitirá a la empresa Schnell Software mejorar su modelo de negocio.

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
FORTISSIMMO	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 Fisica de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Jaime Ibar Yubero/ PTA MINECO	E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos
Carlos Gimeno Yáñez / contratado	

Resultados y conclusiones destacados 2014

- 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.
- Despliegue y administración de plataformas de cloud computing basadas en OpenStack que dan servicios a investigadores y empresas a nivel internacional.
- Participación en un gran proyecto europeo de HPC y cloud, como FORTISSIMO, con empresas dedicadas a la manufactura y la ingeniería.
- Desarrollo de interfaces web de usuario para facilitar el uso de las infraestructuras distribuidas, mediante nuestra participación en SCI-BUS (www.sci-bus.eu)

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 junto con 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 2014

- 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 2014

Citamos unos cuantos logros generales, aunque se detallarán algo más en el punto 7 de esta memoria.

- 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.

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

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
Victor Martín Mayor/UCM	NA
Juan Jesús Ruíz Lorenzo/UNEX	NA
Alfonso Tarancón Lafita / Catedrático UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
David Yllanes/U.Sapienza,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	NA
Andrea Maiorano/U.Sapienza,Roma	NA
Jorge Monforte García/UZ	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos
Beatriz Seoane/UCM	NA
Marco Baity-Jesi/UCM, U.Sapienza,Roma	NA

Resultados y conclusiones destacados 2014

Durante el año 2014 se ha seguido explotado el ordenador dedicado Janus por el grupo de investigación en Spin Glasses del BIFI en colaboración con la "Janus Collaboration". Nuevamente, ha sido una herramienta clave para la elaboración de diversas publicaciones científicas de impacto en ese ámbito.

Además, se ha estado trabajando en el testeo y puesta a punto de la nueva generación de supercomputadores dedicados, llamado Janus II, que ha sido financiado con una convocatoria de fondos FEDER para infraestructuras. Entre otras tareas, se han realizado comprobaciones de comunicación y consumo de todas las placas y nodos de cálculo, así como de las IOP y COM ("Computer On Module") de cada placa; se ha implementado en VHDL la primera programación de la lógica interna de las FPGAs (nodos de cálculo) para la simulación de spin glasses y se ha implementado una primera versión simplificada de un programa para simulación propia de estos sistemas, que sirve como primer chequeo de que toda la lógica interna programada en VHDL funciona correctamente; se está trabajando actualmente en la implementación del sistema operativo y gestión de colas de trabajo para comenzar la primera campaña masiva de simulación.

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 ello estamos en la línea de obtener unas prestaciones de un orden de magnitud mejores que en su predecesor Janus.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

PUBLICACIONES

M. Baity-Jesi, R. Alvarez Baños, A. Cruz, L.A. Fernandez, J. M. Gil-Narvion, Gordillo-Guerrero, D. Iñiguez, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Pérez-Gaviro, M. Pivanti, J. J. Ruíz-Lorenzo, S.F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, F. Ricci-Tersenghi, R. Tripiccion, D. Yllanes. The three dimensional Ising spin glass in an external magnetic field: the role of the silent majority. J. Stat. Mech. (2014) P05014.

NOTA: publicación incluida en la sección "month's Highlight section" de diciembre de 2014 de la revista: <http://iopscience.iop.org/1742-5468/page/Highlights> (esta sección está dedicada a los artículos con una particular calidad y relevancia para la comunidad científica)

M. Baity-Jesi, R. A. Baños, A. Cruz, L. A. Fernandez, J. M. Gil-Narvion, A. Gordillo-Guerrero, D. Iñiguez, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Pérez-Gaviro, M. Pivanti, F. Ricci-Tersenghi, J. J. Ruíz-Lorenzo, S. F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, R. Tripiccion, D. Yllanes. Janus II: a new generation application-driven computer for spin-system simulations. Computer Physics Communications 185, 550-559 (2014).

M. Baity-Jesi, R. Alvarez Baños, A. Cruz, L.A. Fernandez, J. M. Gil-Narvion, Gordillo-Guerrero, D. Iñiguez, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Pérez-Gaviro, M. Pivanti, J. J. Ruíz-Lorenzo, S.F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, F. Ricci-Tersenghi, R. Tripiccion, D. Yllanes. Dynamical Transition in the $D = 3$ Edwards-Anderson spin glass in an external magnetic field. Phys. Rev. E 89, 032140 (2014).

COMUNICACIONES ORALES

Ruíz-Lorenzo J.J. (Janus Collaboration). New results on finite dimensional spin glasses. *Institute of Macromolecular Compounds (Russian Academy of Sciences (RAS))*. Saint Petersburg, 31 October, 2014.

Gordillo A. (Janus Collaboration). The Janus Project: boosting spin-glass simulations with FPGAs. *Institute of Macromolecular Compounds (Russian Academy of Sciences (RAS))*. Saint Petersburg, 31 October, 2014.

Hen I. and Martín-Mayor V. Classical versus Quantum annealing, the role of temperature chaos. *Critical Phenomena in Random and Complex Systems*. Anacapri, Italia, Septiembre de 2014.

Ruíz-Lorenzo J.J. (Janus Collaboration). The case for a three dimensional spin glass phase in presence of a magnetic field. *Critical Phenomena in Random and Complex Systems*. Capri, 9-12 September, 2014.

Hen I. and Martín-Mayor V. Quantum versus Thermal annealing (or D-wave versus Janus): seeking a fair comparison High performance computing. *From Clouds and Big Data to Exascale and Beyond*. Cetraro, Italia, Julio de 2014.

Martín-Mayor V. (Janus Collaboration). Taming extreme fluctuations in spin glasses: temperature chaos and magnetic fields. *MECO 39, the 39th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics*. Coventry, United Kingdom, April 2014

Pérez-Gaviro S. The Janus supercomputers: a special purpose computers for complex systems. *Charla invitada*. Barcelona Supercomputing Center / Centro Nacional de Supercomputación (BSC/CNS). Abril 2014.

Ruíz-Lorenzo J.J. (Janus Collaboration). The Last Survivor: a Spin Glass Phase in an External Magnetic Field. *FISES 2014*. Ourense, April 4, 2014

Yllanes D. (Janus Collaboration). The three-dimensional spin glass in an external magnetic field: the role of the silent majority. *March Meeting 2014 of the American Physical Society*. Denver (EE.UU.). Marzo de 2014

Pérez-Gaviro S. (Janus Collaboration). Janus II: the new generation Special Purpose Computer for spin-system simulations. *March Meeting 2014 of the American Physical Society*. Denver (EE.UU.). Marzo de 2014

Gordillo A. (Janus Collaboration). Scientific computing with FPGAs: the Janus machines. *XXIII Infoteh Simposium - Jahronina*. Bosnia-Herzegovina. Marzo 2014.

POSTERS

Pérez-Gaviro S. (Janus Collaboration). Dances with Spin Glasses: starring Janus. *VI International Conference BIFI2014: Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics*. Zaragoza, Enero 2014.

DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Pérez-Gaviro S. La Computación en la Ciencia y en nuestras vidas. *Club de Física, Colegio Sansueña de Zaragoza, Zaragoza (España)*. Octubre 2014.

Pérez-Gaviro S. La Supercomputación y el BIFI. *Bifi Scientific Dissemination Visit. Bifi, Zaragoza (España)*. Octubre 2014.

Pérez-Gaviro S. La computación en la Ciencia. *Semana Inmersión en Ciencias 2014, Universidad de Zaragoza. Zaragoza (España)*. Junio 2014.

Pérez-Gaviro S. Supercomputación con clusters y ordenadores dedicados. *Circuitos Científicos 2014, Universidad de Zaragoza. Bifi, Zaragoza (España)* Abril 2014.

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, métodos, etc. para el desarrollo de los mismos.
- Desarrollo de proyectos en 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 - INNFACTO
Realidad Aumentada	FECYT
SCI-BUS	FPVII
SOCIETIC	FPVII
Global Excursion	FPVII
CloudSME	FPVII
Unidad didáctica sobre el sistema solar con Kinect	Cátedra Juan De LanUNIZAR
Realización de experimentos colectivos en redes complejas	BIFI - U3C
Adaptación WEB de la aplicación TNOVO	BIFI
Experimentos de inteligencia colectiva ThinkHub	BIFI

Equipo investigador

Investigador responsable/coordinador	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Gonzalo Ruíz Manzanares / Contratado	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos
Investigadores implicados	Pertenece a Grupo DGA Identificación Grupo
Alfredo Ferrer Marco / Contratado Xavier Mellado Esteban/Contratado (6 meses) David Iñiguez Dieste/ARAID	E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos

Resultados y conclusiones destacados 2014

- Creación de la spin-off Kampal, empresa dedicada al análisis de redes complejas formadas por datos procedentes tanto de Internet como de bases de datos propias de empresas, instituciones, etc.
- 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 INNFACTO) y OpenSocialData de la DGA
- Durante el año 2014 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 2014

- Ruíz G. Charla sobre el desarrollo de proyectos en empresas por parte de alumnos de CFGS. Instituto Los Enlaces, Zaragoza. 21 de mayo de 2014.
- Ruíz G. Charla sobre Aragón Open Social Data. 1 año de Aragón Open Data. Zaragoza. 6 de febrero de 2014.
- Participación en el desarrollo del experimento de creación de música colectiva en SONAR+D del 12 al 14 de junio de 2014 en Barcelona.
- Alcolea A, Rivero A, Ruíz G. Taller sobre scraping y Aragon Open Social Data. Miembro del jurado en el 1er Jacathon Aragón Open Data. Jaca. 25-28 de octubre de 2014.
- Ruíz G. Charla sobre Scraping. Bilbao International Music Experience. Bilbao. 31 de octubre de 2014.
- PFC Aragón Open SocialData del alumno Alberto Alcolea Ursua. Director Gonzalo Ruíz Manzanares. Fue defendido el 8 de julio de 2014 y obtuvo la calificación de 8.0.
- TFM Sistema Experto de Probabilidad y Severidad en Red, del alumno Gonzalo Ruíz Manzanares, director David Iñiguez Dieste. Fue defendido el 10 de julio de 2014 y obtuvo la calificación de 8.0.

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
Socientize	VII FP
SEPS	INNPACTO
Aragón Open Social Data	Diputación General de Aragón

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
Alfredo Ferrer Marco	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 2014

En la línea de inteligencia colectiva, se han desarrollado varios experimentos basados en los que ha intervenido la sociedad para obtener resultados, como son Collective Music Experiment realizado en el Sonar Music Festival de 2014.

En Análisis de Información, se ha terminado un proyecto conjuntamente con la DGA para la elaboración de un programa de recogida de mensajes sobre Aragón que se producen en diferentes fuentes de internet, y que ha tenido gran repercusión social teniendo presencia en eventos como el 1er Jacathon Aragón Open Data, o el BIME (Bilbao International Music Event) Hackday.

Difusión de logros científicos destacados en 2014

- Participación en el evento "Un año de Aragón Open Data"
- Realización del experimento Collective Music Experiment en el Sonar Music Festival de 2014
- Organización del 1er Jacathon Aragón Open Data
- Impartición de una charla en BIME (Bilbao International Music Event) Hackday

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 equipamientos 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 cluster 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/infrastructures/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 cuál 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 256 cores, que se ofrece sin coste alguno a cualquier proyecto de investigación con base en Aragón.

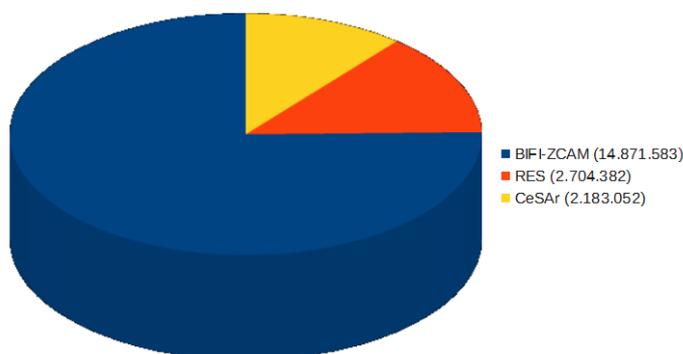
Dichos recursos, que de alguna manera son el embrión de un proyecto futuro denominado CeSAr (Centro de Supercomputación de Aragón), son asignados (625.000 horas de CPU cada cuatro meses) por un Comité de Acceso local que evalúa las solicitudes recibidas en cada periodo cuatrimestral (coincidentes con los de la RES): Marzo-Junio, Julio-Octubre y Noviembre-Febrero.

Acceso vía CECAM

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

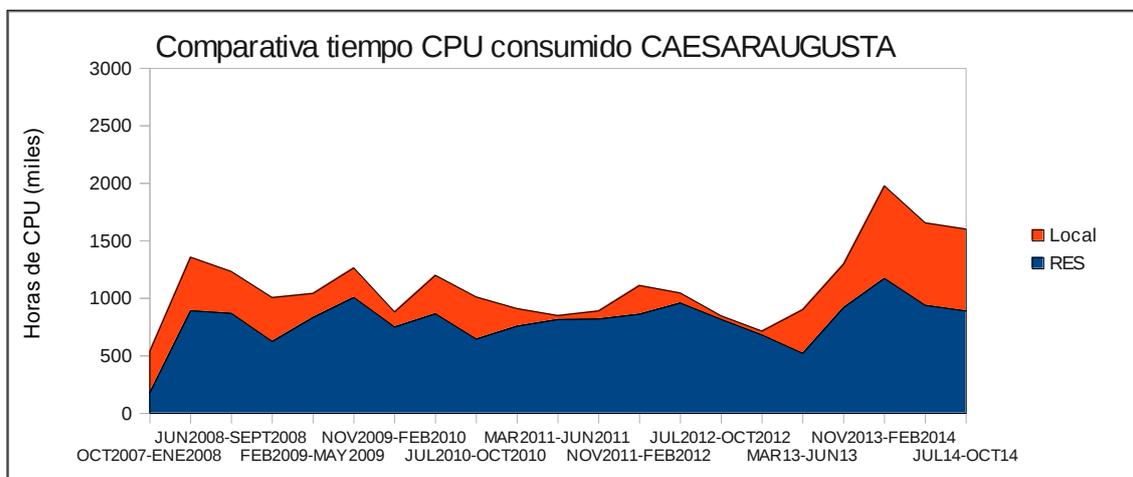
Comentarios de interés. Memento es actualmente la plataforma de cómputo más potente alojada en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI (Edificio I+D) y uno de los supercomputadores más potentes de España. Técnicamente, se trata de una máquina de memoria compartida híbrida con una potencia de cálculo 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 Diciembre de 2014, en Memento se han computado un total de 19.759.017 horas de CPU, lo que supone un 75% del máximo teórico (sin contar paradas por mantenimiento ni fallos hardware), reflejando el elevadísimo nivel de utilización y uso eficiente de este sistema de cálculo. 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-Dic 2014)

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 2014)

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 cluster 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 cuál 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 cluster de memoria distribuida bajo

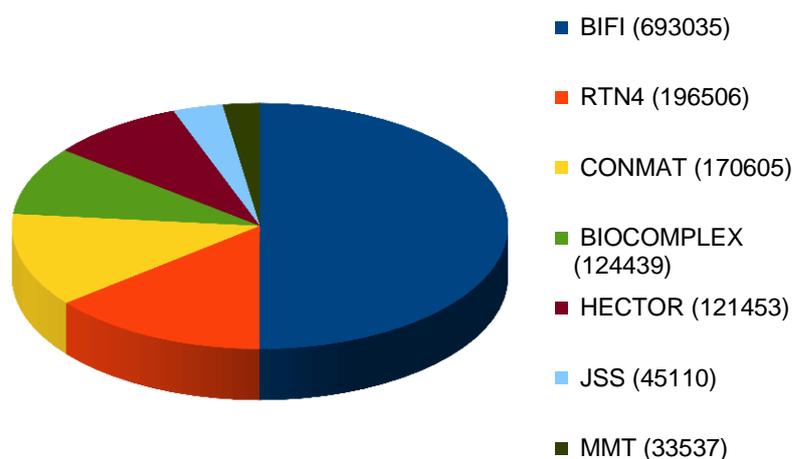
OpenSUSE GNU/Linux con 3 TB de memoria RAM (distribuida), 12 TB de almacenamiento sobre Lustre y redes Infiniband y Gigabit Ethernet, que en estos momentos cuenta ya con más de 950 procesadores, todos de arquitectura de doble precisión ("em64t" = 64-bit). En total se cuenta con una potencia de cálculo (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 Diciembre de 2014, en el sistema se han computado un total de 1.384.686 horas de CPU. La distribución del consumo de horas de CPU por hosted cluster en el mismo periodo se muestra en el siguiente gráfico:



Consumo de horas de CPU en Terminus por hosted cluster (Enero-Diciembre 2014)

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 y Carlos Gimeno Yáñez

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 1000 cores de cálculo.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Rubén Vallés Pérez

Investigadores/Técnicos implicados. Jaime Ibar Yubero y Carlos Gimeno Yáñez

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 han sido migrados a cloud por su gran versatilidad , aportando un total de unos 900 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/> , CloudSME <http://cloudsme.eu/> , FORTISSIMO <http://www.fortissimo-project.eu/> , CloudFlow <http://www.eu-cloudflow.eu/> y en la Federación de Clouds perteneciente a EGI <https://www.egi.eu/infrastructure/cloud/>) 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 2014 dos de los racks que componen AraGrid implementan soluciones cloud basadas en las versiones Grizzly y Havana de OpenStack y sirven 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

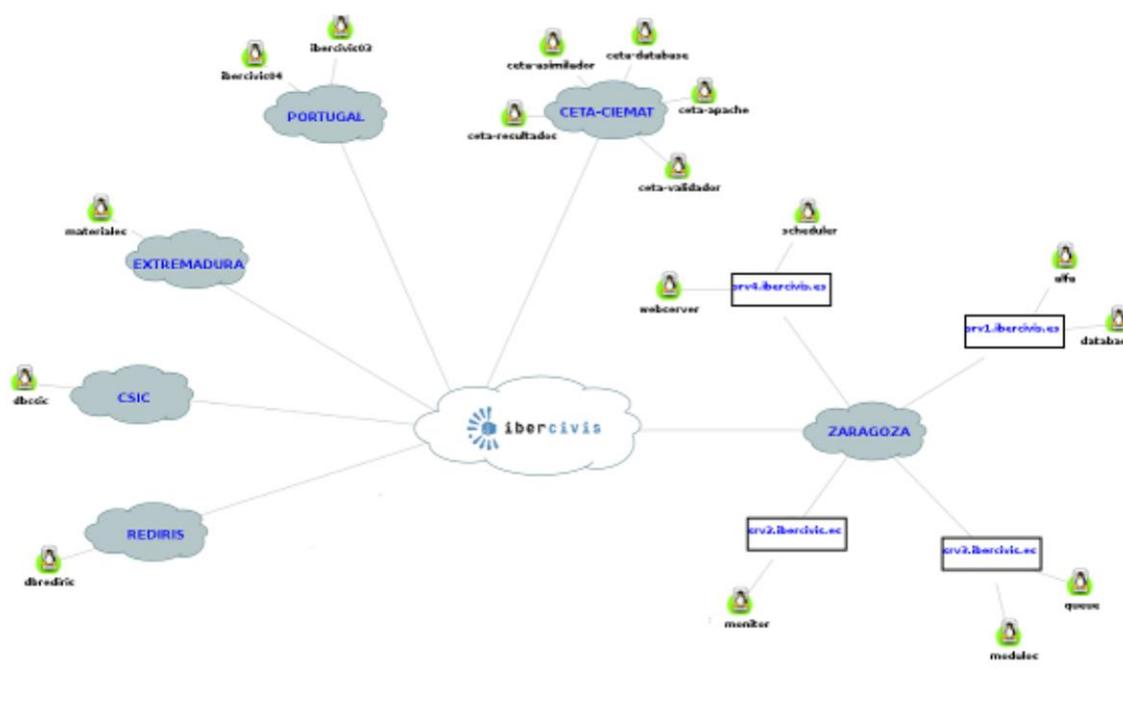
Metodología y técnicas disponibles. Ibercivis es una plataforma de computación voluntaria dirigida a investigadores de diferentes áreas cuyas necesidades de cálculo son elevadas.

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 colabrá 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. Sergio Pérez Gaviro

Investigadores/Técnicos implicados. David Iñiguez Dieste, Alfonso Tarancón Lafita, Jorge Monforte, Raquel Álvarez, José Miguel Gil

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 cluster

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. Sergio Pérez Gaviro

Investigadores/Técnicos implicados. David Iñiguez Dieste, Alfonso Tarancón Lafita, Jorge Monforte, Raquel Álvarez, José Miguel Gil

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 última fase de verificación de la máquina y de implementación del software necesario para hacerla funcionar en un ambiente cómodo para el usuario. Además se están escribiendo los programas para la primera simulación masiva de la máquina. Dada la experiencia previa con Janus de nuestro grupo, estimamos que en los próximos 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 mas gafas activas)
- Infraestructura de inmersión e interacción (cámaras infrarrojos, indicadores, altavoces, mando bluetooth wiimote y dispositivo Kinect)

El sistema completo permite visualizar en estéreo y posicionarse dentro diversas escenas, en tiempo real o mediante un vídeo. En el ordenador se generan dos imágenes equivalentes, una para el ojo izquierdo y otra para el ojo derecho. Cada imagen se muestra con un proyector y se visualizan en la misma pantalla. La luz de la imagen izquierda pasa por un filtro polarizador, y la luz de la imagen derecha pasa por otro filtro polarizado ópticamente ortogonal al primero. Este sistema utiliza gafas con cristales de polarización circular: el ojo derecho ve la imagen creada para el ojo derecho y el ojo izquierdo su correspondiente. El sistema de posicionamiento óptico con 12 cámaras infrarrojas permite ubicar al

usuario en la escena y junto a un mando bluetooth permite interactuar con la aplicación. Se ha incorporado un método alternativo de posicionamiento e interacción consistente en la realización de gestos reconocidos por Kinect. También hay 6 altavoces situados alrededor del sistema que permiten un sonido envolvente.



Investigador/Técnico responsable/coordinador. Gonzalo Ruíz

Investigadores/Técnicos implicados. Xavier Mellado

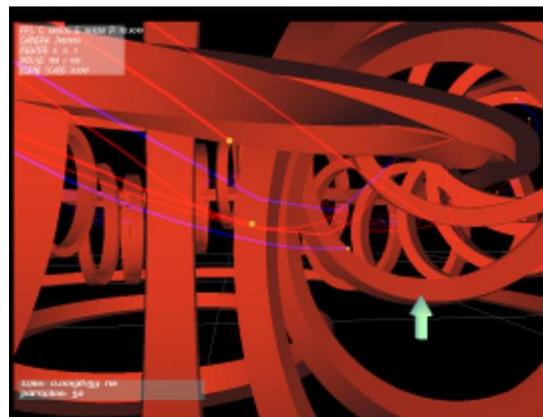
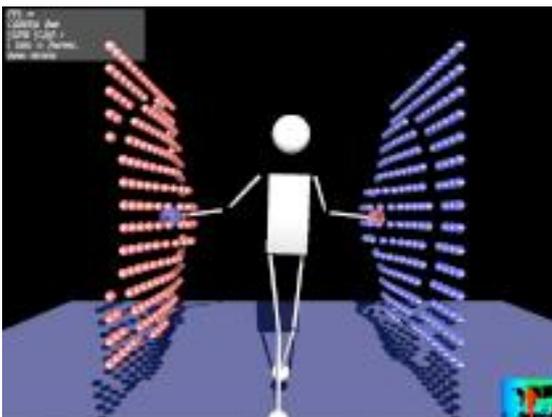
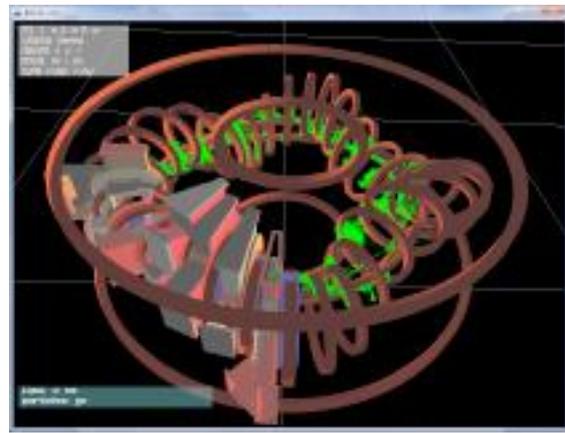
Metodología y técnicas disponibles. El BIFI ha desarrollado su propio entorno de desarrollo software que permite la creación de aplicaciones gráficas de manera sencilla. Durante finales del 2010 se crearon dos que integraban conceptos físicos básicos (una de gravitación universal, y otra de campo eléctrico 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 LanUNIZAR 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 elementos 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 Ruíz

Investigadores/Técnicos implicados. Alfredo Ferrer

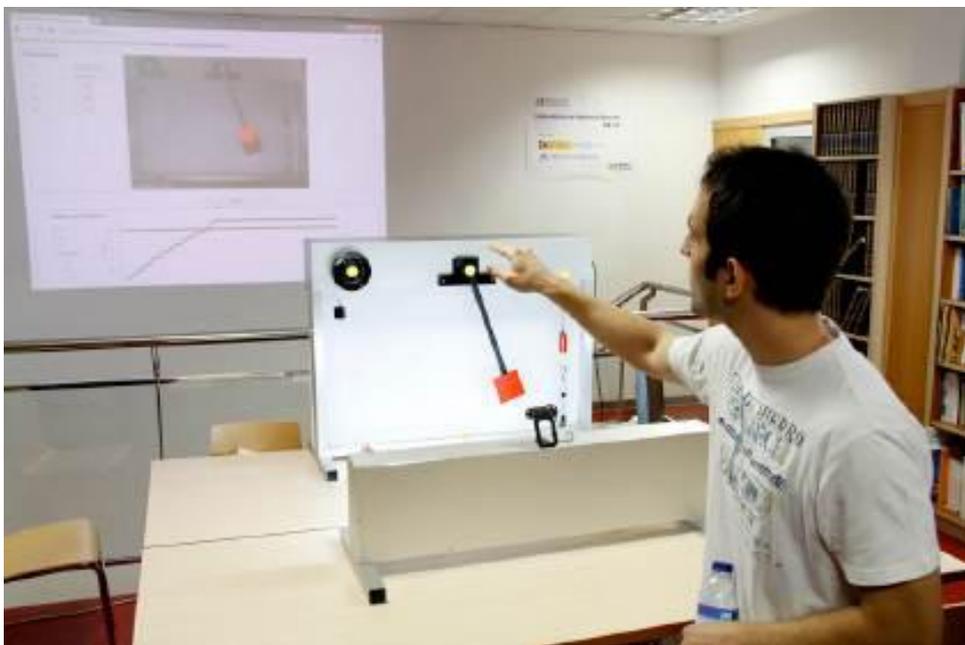


Metodología y técnicas disponibles. El laboratorio está compuesto por dos elementos, el dispositivo físico, y el servidor con nuestra aplicación, que permite el acceso remoto al mismo.

- 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 entra en el sistema, se le pide realizar una serie de 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.

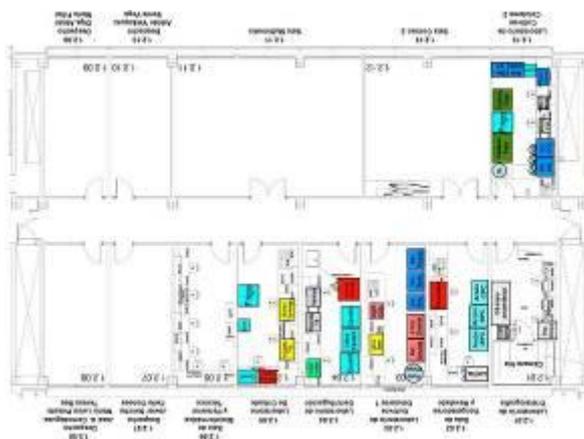
Comentarios de interés. Como se trata de un sistema real, sólo puede haber 3 alumnos utilizándolo simultáneamente, uno por cada experimento, con intervalos de 10 minutos para que hagan las pruebas que necesiten, y cuando su turno termine, pasará a manejarlo el siguiente que haya accedido a la plataforma 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 LanUNIZAR 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 Chirscan (Applied Photophysics)** con control preciso de la temperatura mediante un módulo Peltier y que permite caracterizar la estructura de proteínas y estudiar la estabilidad estructural y sus interacciones con otras biomoléculas, tanto en ensayos de equilibrio como cinéticos (mediante un módulo de stopped-flow) mediante 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.

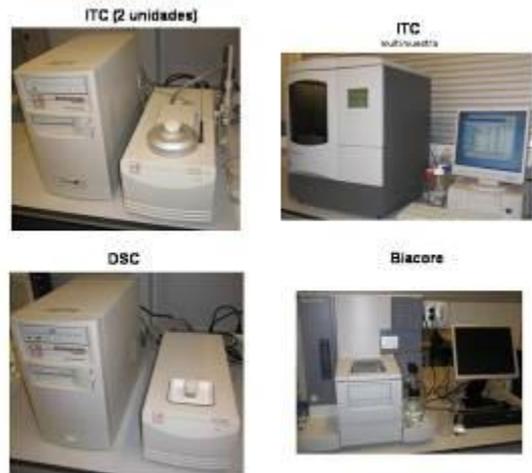
LABORATORIO DE CALORIMETRÍA Y SPR

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 desnaturizante.
- Estas técnicas permiten el estudio de proteínas y ácidos nucleicos basándose en su tamaño/forma y carga eléctrica. El sistema de electroforesis 2D permite la realización de experimentos en el campo de la proteómica.
- **Un electroporador**. Permite la transfección de células eucariotas y la transformación de procariontes con ácidos nucleicos.
- **Un sistema de purificación de agua Elix 3 (Millipore)** y un **sistema de ultra-purificación de agua MilliQ Reference (Millipore)**.
- **Máquina de hielo**
- **Cabina para manipulación de levaduras**
- **Cabina de seguridad química.**

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 tres 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.



la

- **Cámara fría**, para almacenar reactivos y realizar ensayos de cristalización a 4° C.

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 termostatzados.**

- **Incubador orbital de sobremesa.**

- **Dos estufas de incubación termostatzadas.**

- **Autoclave**, para esterilizar por calor medios de cultivo y el material de vidrio y plástico utilizado en experimentación.

- **Espectrofotómetro visible/ultravioleta Ultrospec 6300 (GE Healthcare)** para medidas espectrofotométricas relacionadas con el cultivo celular.



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 Mx3005p (Agilent)**, 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 Alias

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, procesamiento 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

Servicio	Coste
Servicios High Performance Computing	
Servicio de cálculo en clúster HPC de memoria distribuida/compartida*	0,03€ / hora de CPU
Servicio de alojamiento de hardware para supercomputación**	86,40€ / core al año
Servicio housing servidores (no incluye mantenimiento ni integración en clúster HPC)***	179,63€ / servidor al año
Servicios Grid & Cloud Computing	
Servicio de cálculo en grid & cloud computing	0,035€ / hora de CPU
Servicios Transferencia Tecnológica	
Servicio de desarrollo web	25€ / hora
Servicio de desarrollo de aplicaciones móviles	30€ / hora

(*) El cliente solicita acceso al servicio a través de un formulario. Con esa información, el personal técnico del BIFI crea la cuenta de usuario en el supercomputador más adecuado para el cálculo a realizar e instala en el mismo el software/programas requeridos por el cliente. A partir de ese momento, el cliente ya puede utilizar el programa accediendo remotamente al cluster correspondiente vía Internet. Se factura por tiempo de uso de CPU consumido.

Si el software requerido es "de pago" (típicamente software propietario), el cliente debe aportar la licencia correspondiente. En caso de que ya esté instalado previamente en alguno de nuestros supercomputadores, se comprueba si la licencia permite el uso por parte del cliente.

(**) El cliente trae sus servidores/nodos de cálculo, que son integrados en uno de nuestros clusters HPC, aunque son suyos y se contrata el mantenimiento de los mismos, pudiendo aplicarse diversos descuentos según el nivel de "compartición" de los recursos con el resto de usuarios del Instituto. Se factura por core y año.

(***) El usuario trae su servidor para alojarlo en el data center del Instituto de forma independiente (se facilita IP pública). Como una opción adicional, puede contratarse la administración del sistema.

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, 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, así como otras ayudas a contrataciones y proyectos cofinanciados por la propia Universidad de Zaragoza. 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 2014 en el BIFI se han desarrollado con éxito un buen número de proyectos con implicación autonómica, nacional e internacional, como se ha podido comprobar en la descripción de los avances en las líneas de investigación descritos en el apartado 2.

También en 2014 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 7 años. Importante destacar que el resultado de un proyecto de transferencia ha sido la creación de una spin off, denominada Kampal Data Solutions, SL.

El esquema siguiente recoge la estructura de financiación del BIFI en el año 2014, donde puede observarse los volúmenes económicos aportados por las distintas vías de financiación y los % respecto al total de recursos de financiación del 2014:

TIPO DE PROYECTOS	Aportación en presupuesto BIFI 2014 (€)	% Presupuesto total del BIFI
NÓMINAS PERSONAL UZ	2.554.641	22,9
APOYO A IUI	93.000	0,8
PROYECTOS UNIZAR	22.000	0,2
AUTONÓMICOS	1.177.603	10,6
NACIONALES	4.187.830	37,6
EUROPEOS	2.420.669	21,7
EMPRESAS	683.083	6,1
TOTAL FINANCIACIÓN BIFI 2014	11.138.826	

Para la elaboración de esta tabla se han tenido en cuenta los importes de proyectos OTRI que son los datos que aparecen en los contratos firmados entre ambas partes, la empresa, el investigador principal que participa y la Vicerrectora de Transferencia e Innovación de la Universidad de Zaragoza, representada, Pilar Zaragoza.

En cuanto a los proyectos obtenidos por concurrencia competitiva tanto a nivel nacional, autonómico y europeos, se incluyen los importes concedidos en la resolución de todos los proyectos vivos en 2014, tanto los que ya habían comenzado en años anteriores, pero que su duración llegaba hasta la anualidad 2014 o más, como los concedidos durante esta anualidad. Por esta razón puede haber diferencias con otros análisis que utilicen otros criterios, por ejemplo, si se mostrara la financiación proveniente de proyectos considerando únicamente el importe de los proyectos concedidos durante este año 2014.

Teniendo en cuenta estas premisas que hemos establecido para evaluar la financiación del BIFI en la anualidad 2014, se va a mostrar desglosados los datos.

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 0,8 % de la financiación total.

APOYO GOBIERNO DE ARAGÓN AL BIFI	Importe ayuda 2014 (€)
Instituto BIFI	93.000

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 22,9 % de la global del instituto.

Puede comentarse que este año se ha incrementado el importe de esta partida porque se ha incrementado el número de miembros del BIFI pertenecientes a la Universidad de Zaragoza.

APORTACIÓN UNIZAR	Importe 2014 (€)
NÓMINAS PERSONAL BIFI DE LA UZ*	2.554.641

*Estimación con un salario bruto medio de 40.549,86€ para los miembros del instituto pertenecientes a la plantilla de la Universidad de Zaragoza

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 de la investigación en el Instituto BIFI procede de las ayudas obtenidas en convocatorias públicas y de concurrencia competitiva. La financiación gracias a esta fuente ha sido del 70,1 %, entre proyectos europeos, uno internacional, proyectos nacionales, autonómicos y de la propia Universidad de Zaragoza. Señalar que alrededor de un 35 % de esta financiación de proyectos proviene de concesión en esta anualidad y el resto de proyectos europeos, nacionales, autonómicos y con empresas concedidos en convocatorias anteriores a esta anualidad.

En la dinámica de búsqueda de investigación es frecuente que un investigador tenga en marcha varios proyectos solapados en el tiempo, con lo que el trabajo de investigación debe desarrollarse también solapadamente y desarrollarlos con éxito. De acuerdo con esto, es normal que unos años se obtenga más financiación a diferencia de otros en los que, con la financiación cubierta, debe dedicarse a llevar a cabo las actividades previstas para su avance. Todo esto implica también que la financiación se solapa en el tiempo y por lo tanto se considera que la financiación de un proyecto plurianual debe tenerse en cuenta en cada uno de los años de duración. Considerando esto se presenta la tabla de aportación a la financiación del BIFI durante el 2014 de las ayudas a proyectos. Se detalla a continuación la financiación según la tipología de los proyectos.

3.3.1. Proyectos de carácter europeo

En la tabla siguiente puede verse la financiación que proviene de proyectos europeos que ha financiado las actividades del BIFI en 2014.

PROYECTOS EUROPEOS	Importe ayuda 2014 (€)
<i>SCI-BUS</i>	241.230,00
<i>SOCIENTIZE</i>	174.000,00
<i>GLOBAL EXCURSION</i>	110.000,00
<i>CRONOS</i>	237.080,00
<i>PLEXMATH</i>	352.176,00
<i>MULTIPLEX</i>	309.306,00
<i>SCC COMPUTING</i>	47.824,00
<i>EGI-InSPIRE</i>	141.000,00
<i>CLOUDSME</i>	266.350,00
<i>Brachypodium adaptation to drought stress across different geographic and ecological clines</i>	50.000,00
<i>NEUROMED - Diagnosis and treatment of three neurodegenerative diseases (Parkinson, Phenylketonuria and TTR amyloidosis)</i>	238.702,78
<i>Structure-based drug design for diagnosis and treatment of neurological diseases: dissecting and modulating complex function in the monoaminergic systems of the brain. CM1103</i>	3.000,00
<i>More medicines for tuberculosis</i>	250.000,00
TOTAL PROYECTOS EUROPEOS	2.420.668,78

3.3.2. Proyectos de convocatorias nacionales

Los proyectos financiados a través de convocatorias nacionales durante el 2014 suponen un 37,6 % de la financiación total del BIFI. Los títulos de los proyectos en vigor durante 2014, se pueden ver en la tabla siguiente:

MICINN/MINECO	Importe ayuda 2014 (€)
<i>Estabilidad de proteínas: principios básicos de los estados (parcialmente) desplegados y estudios moleculares en enfermedades conformacionales</i>	240.000,00
<i>Flavoenzyme dependent systems: from action mechanisms to biotechnological and sanitary applications. BIO2013-42978-P</i>	137.000,00
<i>Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica. BIO2010-14983</i>	220.000,00
<i>Study of protein-carbohydrate interactions involved in human diseases</i>	76.000,00
<i>Red temática de biotecnología de materiales lignocelulósicos: retos enzimáticos, químicos y moleculares para su aplicación industrial, energética y medioambiental. Ref. BIO2011-15394-E</i>	900,00
<i>Protein O-fucosylation: in search of inhibitors for T cell acute lymphatic leukaemia and Multiple sclerosis</i>	120.000,00
<i>Science in your mobile</i>	21.950,00
<i>La ciudad es agua: MAPsCLOR</i>	16.000,00
<i>Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos</i>	90.000,00
<i>La superfamilia de reguladores Fur: análisis funcional en cianobacterias, potenciales aplicaciones en biotecnología y como diana terapéutica en patógenos.</i>	98.000,00
<i>SEPS: Sistema experto de probabilidad y severidad de incidentes en red</i>	174.000,00
<i>FIS2012-35719-C02-02 Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte</i>	93.000,00
<i>FIS2011-25167.Redes, biofísica y ciencia no lineal</i>	259.000,00
<i>CTQ2012-35665 Diseño de catalizadores organometálicos para la activación y funcionalización de amoníaco: estudios computacionales y experimentales</i>	69.000,00
<i>Física del Modelo Estándar y sus posibles extensiones</i>	221.000,00
<i>Genómica comparada, biogeografía y evolución floral y adaptativa de gramíneas modelo. CGL2012-39953-C02-01</i>	110.000,00
<i>Transferencias intergeneracionales y el bienestar de la población</i>	15.500,00
<i>Métodos Geométricos en integrabilidad y teoría de control</i>	66.000,00
<i>Teoría de sistemas híbridos clásico-cuánticos: equilibrio, dinámicas y control</i>	38.000,00
<i>Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón. CeSAr</i>	1.000.000,00
<i>Navegación Cuántica en Redes de Información</i>	33.400,00
<i>Estabilidad conformacional de proteínas: principios generales, análisis estabilidad función del r-LDL y búsqueda de nuevas chaperonas farmacológicas.</i>	157.300,00
<i>Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas y sistemas de muchos agentes</i>	313.390,00
<i>Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal</i>	313.390,00
<i>Aplicaciones biomédicas de AS-48: una proteína con amplio espectro de actividad antimicrobiana</i>	130.000,00
SUBTOTAL	4.012.830,00
Carlos III	Importe ayuda 2014 (€)
<i>Nanopartículas multifuncionales para el transporte y liberación selectiva de fármacos frente al virus de la hepatitis C (VHC)</i>	100.000,00
<i>Generación de modelos y ensayo de terapia génica para enfermedades OXPHOS</i>	75.000,00
SUBTOTAL	175.000,00
TOTAL PROYECTOS NACIONALES	4.187.830,00

3.3.3. Proyectos de convocatorias autonómicas

Los proyectos financiados a través de convocatorias autonómicas suponen un 10,6% de la financiación del BIFI durante el 2014, teniendo en cuenta que se ha incluido la ayuda para la cofinanciación de la infraestructura CeSar, ayuda que fue concedida desde el MINECO en 2010 y cuya cofinanciación fue aprobada en el 2014.

GOBIERNO DE ARAGÓN	
Convenio	Importe ayuda 2014 (€)
Convenio de colaboración entre el gobierno de aragón, y la universidad de Zaragoza (BIFI) para el soporte del nodo de aragón de la red española de supercomputación (RES) PARA 2014.	18.000
CeSar (cofinanciación de la ayuda Feder concedida por el MINECO)	1.000.000
SUBTOTAL	1.018.000
GRUPOS RECONOCIDOS	
	Importe ayuda 2014(€)
Grupo Consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (E24/3)	23.365
Grupo Consolidado Protein Targets (B89)	3.738
Grupo Consolidado Biología Estructural (B18)	10.609
Grupo de Investigación: Física Estadística y No Lineal (E19)	12.576
Física Matemática y Teoría de Campos (E24/1)	3.936
Patología Digestiva (B01)	12.000
Grupo Teórico de Altas Energías (E24/2)	12.459
Catálisis Homogénea por Compuestos Organometálicos(E07)	22.623
Modelos Estocásticos (E22)	6.630
Bioflora (A52)	4.630
Genética de Micobacterias (B25)	12.037
SUBTOTAL	124.603
Licitación pública	
	Importe ayuda 2014 (€)
Aragón Open Social Data	35.000
SUBTOTAL	35.000
TOTAL	1.177.603

3.3.4. Financiación obtenida de empresas

El volumen de financiación por empresas durante el 2014 ha sido el que aparece en la tabla siguiente. Puede observarse que supone un menor porcentaje que los otros tipos de proyectos.

Hay que tener en cuenta que no está determinado el importe de los proyectos que derivan de la explotación de unos resultados obtenidos en proyectos con las empresas anteriores.

Proyectos con empresas	Importe ayuda (€) 2014
2014/0271. Desarrollo de procedimientos de estabilización de proteínas con actividad retrotranscriptasa encaminados al diseño de nuevos test de diagnóstico molecular. Contrato de investigación y desarrollo entre la Universidad de Zaragoza y CERTEST BIOTEC SL. "NUEVAS PRUEBAS DE DIAGNÓSTICO MOLECULAR-CDTI"	35.000,00
Colectiva-mente	10.000,00
Zeu inmunotec	ND
Royalties por la explotación comercial de la patente US-6,781,034 "Stress resistant plants" y de su familia de patentes. Plant Bioscience Limited, SL	
Determinación de exopolisacáridos en extractos bacterianos. Exopol, SL	5.830,00
PROYECTO DE INVESTIGACION	79.376,00
PROYECTO DE INVESTIGACION	1.800,00
Análisis y Evaluación de la potencia antimicrobiana de una serie de compuestos suministrados por la empresa (addenda al contrato)	84.700,00
Convenio de Colaboración entre el Instituto Aragonés de Fomento y la Universidad de Zaragoza para regular con cargo al fondo de inversiones de Teruel, el apoyo a la investigación de la Universidad de Zaragoza: "Investigación de Tecnología y Genética Porcina".	260.000,00
Desarrollo del esquema de mejora genética en la raza ovina ojinegra de Teruel	
Análisis y modelo relacional del sistema SMART TEST	45.980,00
Convenio de colaboración entre la Diputación Provincial De Zaragoza, el GOBIERNO DE ARAGÓN y LA UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA para el desarrollo de un proyecto de producción y difusión de estadística local para el año 2014.	74.284,20
Dirección técnica del programa de mejora de la raza navarra	3.388,00
Índices de selección de los individuos de raza pirenaica	27.725,00
OPEN DIGITAL SCIENCE - SMART 2014/0007	55.000,00
TOTAL PROYECTOS CON EMPRESAS	683.083,20

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 2014

Durante el año 2014 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 alrededor de un 40% del gasto total. El resto de los gastos se reparten según la siguiente tabla:

Etiquetas de fila	Suma de IMPORTE_TOTAL	Suma de IMPORTE_IVA	Suma de IMPORTE_PROYECTO
Equipo Laboratorio	110.438,64	18.630,69	91.807,95
Fungible	243.688,80	36.909,22	201.141,76
Gastos Generales	834.509,32	22.559,29	812.205,52
Informática	53.784,37	9.325,11	44.459,26
Libros	1.868,63	71,88	1.796,75
MOVILIDAD - BOLSAS VIAJE	21.379,00	0,00	21.379,00
Personal	845.624,17	0,00	845.624,17
Viajes	190.958,28	3.725,14	186.612,70
Total general	2.302.251,21	91.221,33	2.205.027,11

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. Aunque el comienzo de estas colaboraciones es complicado, deben instaurarse de una forma estable y durante el 2014 se han realizado acciones encaminadas a ese objetivo.

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 2014, 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

Durante el año 2014, 13 proyectos de investigación financiados por entidades europeas han sido concedidos o han estado en vigor y han servido para financiar en buena parte las actividades de investigación 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 2014 un 26,5 % de la total del Instituto.

Se enumeran a continuación, indicando los principales datos de los mismos:

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 €
Investigador principal: Pilar Catalán

Líder o socio del proyecto: Líder

Título: NEUROMED. Diagnóstico y combate molecular de tres enfermedades neurodegenerativas (parkinson, fenilcetonuria y amiloidosis TTR)

Entidad financiadora: Interreg-SUDOE

Duración: 2014-2015

Importe total del proyecto: 1.014.843,30 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 238.702,78

Investigador principal: Javier Sancho

Líder o socio del proyecto: Coordinador general

Título: Structure-based drug design for diagnosis and treatment of neurological diseases: dissecting and modulating complex function in the monoaminergic systems of the brain. CM1103

Entidad financiadora: EU. COST ACTION

Duración: 28 November 2011 - 27 November 2015

Importe total del proyecto: 50.000 €

Importe del proyecto al BIFI: 3.000 € (Milagros Medina)

Investigador principal: Milagros Medina/Rona Ramsay

Líder o socio del proyecto: Socio de University of St. Andrews

Título: More medicines for tuberculosis

Entidad financiadora: Comisión europea VII FP

Duración: 2011-2016

Importe total del proyecto:

Importe del proyecto al BIFI: 250.000 €

Investigador principal: José Antonio Aínsa

Líder o socio del proyecto: socio

Proyectos financiados por entidades nacionales

En cuanto a los proyectos de investigación del BIFI que han sido financiados por entidades nacionales han sido 27 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), y otras de concurrencia competitiva.

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

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

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:* 66.000 €

Investigador principal: José F. Cariñena Marzo

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

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: 2014

Importe total del proyecto: 28.000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 28.000€

Investigador principal: Susana Camero Fernández

Título: O-fucosilación de proteínas: buscando inhibidores para la leucemia linfática celular aguda y para la esclerosis múltiple.

Entidad financiadora: MICINN

Duración: 2011-2014 (ampliado)

Importe total del proyecto: 120000 €. *Importe del proyecto al BIFI:* 12000 €

Investigador principal: Ramón Hurtado-Guerrero

Título: MTM2010-15972. MODELOS ESTOCASTICOS Y APLICACIONES.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad

Duración: 2011-2014

Importe total del proyecto: 32500€

Investigador principal: Gerardo Sanz

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: 1.000.000 €

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:* 33400

Investigador principal: Jesús Gómez Gardeñes

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

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

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

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

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

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

Título: Teoría de sistemas híbridos clásico-cuánticos: equilibrio, dinámica, y control

Entidad financiadora: MINECO

Duración: 3 años

Importe total del proyecto: 38000€

Importe del proyecto al BIFI: 38000€

Investigador principal: Pablo Echenique & Alberto Castro

Título: Study of protein-carbohydrate interactions involved in human diseases.

Entidad financiadora: MINECO

Duración: 3 años, 2015-2018

Importe total del proyecto: 76000 €

Importe del proyecto al BIFI: 76000€

Investigador principal: Ramón Hurtado-Guerrero

Título: Science in your mobile

Entidad financiadora: FECYT

Duración: 12 meses

Importe total del proyecto: 60650 €

Importe del proyecto al BIFI: 21920€

Investigador principal: David Iñiguez

Título: La ciudad es agua: MAPsCLOR
Entidad financiadora: FECYT
Duración: 9 meses
Importe total del proyecto: 33400 €
Importe del proyecto al BIFI: 16000 €
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Física del Modelo Estándar y sus posibles extensiones
Entidad financiadora: MINECO
Duración: 2013 – 2015
Importe total del proyecto: 221.000 €
Importe del proyecto al BIFI: 221.000 €
Investigador principal: Vicente Azcoiti

Título: Estabilidad de proteínas: Principios básicos de los estados (parcialmente) desplegados y estudios moleculares en enfermedades conformacionales
Entidad financiadora: MICINN (BFU2013-47064-P)
Duración: 2014-2017
Importe total del proyecto: 240.000 €
Importe del proyecto al BIFI: 240.000 €
Investigador principal: Co-IP: Adrián Velázquez-Campoy/Javier Sancho

Título: Transferencias intergeneracionales y el bienestar de la población
Entidad financiadora: Ministerio de Economía
Duración: 36 meses
Importe total del proyecto: 15.500 €
Importe del proyecto al BIFI: 15.500€
Investigador principal: José Alberto Molina

Título: Aplicaciones biomédicas de AS-48: una proteína con amplio espectro de actividad antimicrobiana
Entidad financiadora: MINECO
Duración: 36 meses
Importe total del proyecto: 130.000€
Importe del proyecto al BIFI: 130.000€
Investigador principal: José Antonio Aínsa

Título: Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos
Entidad financiadora: MICINN (BFU2010-19451)
Duración: 2011-2014
Importe del proyecto al BIFI: 90.000 €
Investigador principal: Adrián Velázquez Campoy

Proyectos financiados por entidades autonómicas

La financiación por entidades autonómicas en 2014 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 anualmente con el Gobierno de Aragón para soporte de CeSAr.

Por otro lado, los investigadores pertenecen en 12 de los grupos de investigación reconocidos por el Gobierno de Aragón, que reciben subvención anual y de la que disponen para gastos de los investigadores de su grupo.

En esta tipo de proyectos la partida de cofinanciación aceptada por el Gobierno de Aragón como ayuda para el proyecto de infraestructuras CeSar concedido por el MINECO.

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 2014)

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: 2014

Subvención: 23.365 €

Investigador principal: David Iñiguez

Título Grupo Consolidado Protein Targets

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2014

Subvención: 3738€

Investigador principal: Javier Sancho Sanz

Título: Grupo Consolidado Biología Estructural (B18)

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón

Duración: 2014

Subvención: 10.609 €

Investigador principal: M^a Luisa Peleato

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

Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.

Duración: 2014

Subvención: 12.576 €

Investigador principal: Dr. Luis Mario Floría Peralta.

Título: Física Matemática y Teoría de Campos

Entidad financiadora: DGA

Duración: 2014

Subvención: 3.936€

Investigador principal: Manuel Fernández Rañada

Título: Grupo DGA de Patología Digestiva

Entidad financiadora: DGA

Duración: 2014

Subvención: 12.000€

Investigador principal: Ángel Lanás

Título: Bioflora
Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.
Duración: 2014
Subvención: 4.630 €
Investigador principal: Pilar Catalán.

Título: Genética de micobacterias
Entidad financiadora: Diputación General de Aragón.
Duración: 2014
Subvención: 12.037 €
Investigador principal: Carlos Martín.

PROYECTOS FINANCIADOS POR LA UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Título: La FAD sintetasa de *Listeria monocytogenes* como diana terapéutica para el cribado de fármacos en el tratamiento de listeriosis (una enfermedad de origen alimentario con mayor prevalencia en mujeres embarazadas)

Entidad financiadora: Universidad de Zaragoza
Duración: Enero 2014 - Diciembre 2014
Importe total del proyecto: 1.500 €
Investigador principal: Patricia Ferreira Neila

Título: Estudio de la actividad de bombas de eflujo de *Mycobacterium tuberculosis* en un modelo de *Escherichia coli*

Entidad financiadora: Universidad de Zaragoza
Duración: Enero 2014 - Diciembre 2014
Importe total del proyecto: 1.500 €

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 2014 se pueden citar estos proyectos que se han llevado a cabo, aunque no aparecen todos por motivos de confidencialidad:

Título: Royalties por la explotación comercial de la patente US-6,781,034 "Stress resistant plants" y de su familia de patentes
Empresa: Plant Bioscience Limited
Duración: 16/07/2009-31/12/2021
Importe total del proyecto: 40% a UNIZAR
Investigador principal: María F. Fillat

Título: Determinación de exopolisacáridos en extractos bacterianos
Empresa: EXOPOL SL
Duración: 01/06/2014-31/07/2014
Importe total del proyecto: 5.830 €
Investigador principal: María F. Fillat
Líder o socio del proyecto: María F. Fillat

Título: Aragón Open Social Data
Entidad financiadora: DGA
Duración: 2013-2014
Importe total del proyecto: 35.000 €
Investigador principal: David Íñiguez Dieste

Título: Desarrollo de procedimientos de estabilización de proteínas con actividad retrotranscriptasa encaminados al diseño de nuevos test de diagnóstico molecular. CERTEST BIOTEC SL. "NUEVAS PRUEBAS DE DIAGNÓSTICO MOLECULAR-CDTI"
Entidad financiadora: CERTEST BIOTEC SL
Duración: 2014-2015
Importe total del proyecto: 35.000 €
Investigador principal: Javier Sancho

Título: Validación de un test para detección de microcistina en agua de boca
Entidad financiadora: Zeu inmunotec
Duración: 2014
Importe total del proyecto: ND
Investigador principal: María Luisa Peleato Sánchez

Título: Colectiva-mente
Entidad colaboradora: Obra Social la Caixa
Duración: 3 meses
Importe total del proyecto: 30.000 €
Importe del proyecto al BIFI: 10.000 €
Investigador principal: Alfonso Tarancón

Título: Proyecto de investigación
Entidad colaboradora: empresa sin identificar
Duración: 2012-2014
Importe total del proyecto: 73.376 €
Importe del proyecto al BIFI: 73.376 €
Investigador principal: José Antonio Aínsa

Título: Análisis y Evaluación de la potencia antimicrobiana de una serie de compuestos suministrados por la empresa (addenda al contrato)
Entidad colaboradora: empresa sin identificar
Duración: 2014-2016
Importe total del proyecto: 84.700 €
Importe del proyecto al BIFI: 84.700 €
Investigador principal: José Antonio Aínsa

Título: Proyecto de investigación
Entidad colaboradora: empresa sin identificar
Duración: 2014-2015
Importe total del proyecto: 1.800 €
Importe del proyecto al BIFI: 1.800 €
Investigador principal: José Antonio Aínsa

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 2014 publicados en revistas de difusión internacional y su índice de impacto reconocido según el Institute for Scientific Information-ISI.

Acín-Pérez R, Carrascoso I, Baixauli F, Roche-Molina M, Latorre-Pellicer A, Fernández-Silva P, Mittelbrunn M, Sanchez-Madrid F, Pérez-Martos A, Lowell CA, Manfredi G, Enríquez JA. 2014. ROS-triggered phosphorylation of complex II by F₁F₀ ATP synthase regulates cellular adaptation to fuel use. *Cell Metab.* 19(6):1020-33. Impacto ISI: 16.750

Aleta A, Villarrubia-Rojo H, Frustaglia D, Gopar VA. 2014. *Phys. Rev. B*, 89:075429. Impacto ISI: 3.660

Angarica, VE, Angulo A, Giner A, Losilla G, Ventura S, Sancho J. 2014. PrionScan: an online database of predicted prion domains in complete proteomes. *BMC Genomics* 2014, 15:102. Impacto ISI: 4.041

Ansón-Casaos A, González-Domínguez JM, Lafragüeta I, Carrodeguas JA, Martínez MT. 2014. Optical absorption response of chemically modified single-walled carbon nanotubes upon ultracentrifugation in various dispersants. *Carbon* 66:115-118. Impacto ISI: 6.160

Antonini LV, Peregrina JR, Angulo J, Medina M, Nieto PM. 2014. A STD-NMR Study of the interaction of the Anabaena Ferredoxin-NADP+ reductase with the coenzyme. *Molecules* 19:672-685. Impacto ISI: 2.095

Azimi-Tafreshi N, Gómez-Gardeñes J, Dorogovtsev SN. 2014. K-core Percolation in Multiplex Networks. *Physical Review E* 90(3):032816. Impacto ISI: 2.326

Baity-Jesi M, Alvarez-Baños R, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz-Siduepe A, Navarro D, Parisi G, Pérez-Gaviro S, Pivanti M, Ruíz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancon A, Ricci-Tersenghi F, Tripicciono R, Yllanes D. 2014. Dynamical Transition in the D = 3 Edwards-Anderson spin glass in an external magnetic field. *Phys. Rev. E* 89:032140. Impacto ISI: 2.326

Baity-Jesi M, Alvarez-Baños R, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-

Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz-Siduepe A, Navarro D, Parisi G, Pérez-Gaviro S, Pivanti M, Ruíz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancon A, Ricci-Tersenghi F, Tripicciono R, Yllanes D. 2014. The three dimensional Ising spin glass in an external magnetic field: the role of the silent majority. *J. Stat. Mech.* P05014. Impacto ISI: 2.056

Baity-Jesi, M, Alvarez-Baños R, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero A, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz-Siduepe A, Navarro D, Parisi G, Pérez-Gaviro S, Pivanti M, Ricci-Tersenghi F, Ruíz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancon A, Tripicciono R, Yllanes D. 2014. Janus II: a new generation application-driven computer for spin-system simulations. *Computer Physics Communications* 185:550-559. Impacto ISI: 2.407

Benavides-Riveros CL, Toranzo IV, Dehesa JS. 2014. Entanglement in N-harmonium: bosons and fermions. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 47(19):195503. Impacto ISI: 1.916

Bergues-Pupo AE, Bergues JM, Falo F. 2014. Unzipping of DNA under the influence of external fields. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 396:99-107. Impacto ISI: 1.722

Bergues-Pupo AE, Falo F, Fiasconaro A. 2014. Resonant optimization in the mechanical unzipping of DNA. *EPL* 105:68005. Impacto ISI: 2.269

Bernal-Bayard P, Ojeda V, Hervas M, Cejudo FJ, Navarro JA, Velázquez-Campoy A, Pérez-Ruiz JM. 2014. Molecular recognition in the interaction of chloroplast 2-Cys peroxiredoxin with NADPH-thioredoxin reductase C (NTRC) and thioredoxin x. *FEBS Letters*. 588:4342-4347. Impacto ISI: 3.341

- Boccaletti S, Bianconi G, Criado R, del Genio CI, Gómez-Gardeñes J, Romance M, Sendiña-Nadal I, Wang Z, Zanin M. 2014. The Structure and Dynamics of Multilayer Networks. *Physics Reports* 544(1):1- 122. Impacto ISI: 22.910
- Borge-Holthoefer J, González-Bailón S, Rivero A, Moreno Y. 2014. The Spanish Indignados Movement: Time dynamics, geographical distribution, and recruitment mechanisms, Chapter contribution to *Online Collective Action*, in press.
- Bortolotti A, Sanchez-Azqueta A, Maya CM, Velázquez-Campoy A, Hermoso JA, Medina M, Cortez N. 2014. The C-terminal extension of bacterial flavodoxin-reductases: Involvement in the hydride transfer mechanism from the coenzyme. *Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics*. 1837:33-43. Impacto ISI: 4.829
- Botello-Morte L, Bes MT, Heras B, Fernández-Otal A, Peleato ML, Fillat MF. 2014. 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*. 20(9):1396-406. Impacto ISI: 7.667
- Botello-Morte L, Fillat MF. 2014. Thiol-Based Redox Regulators in prokaryotes: The relevance of the CXXC motifs. *Open Access Biochemistry*. 2(1):1
- Cardillo A, Petri G, Nicosia V, Sinatra R, Gómez-Gardeñes J, Latora V. 2014. Evolutionary Dynamics of Time-resolved Social Interactions. *Physical Review E* 90(5):052825. Impacto ISI: 2.326
- Castro A, Gross EKV. 2014. Optimal control theory for quantum-classical systems: Ehrenfest molecular dynamics based on time-dependent density-functional theory. *J. Phys. A: Math. Theor*. 47:025204. Impacto ISI: 1.687
- Catalan P, Chalhoub B, Chochois V, Garvin DF, Hasterok R, Manzaneda AJ, Mur LAJ, Pecchioni N, Rasmussen SK, Vogel JP, Voxeur A. 2014. Update on genomics and basic biology of *Brachypodium*. *Trends in Plant Science* 19:414-418. Impacto ISI: 13.479
- Catalán P, Gonzalez-Candelas F. 2014. Phylogenetic techniques and markers. Chapter in (Vargas P, Zardoya R, eds.) *The tree of life: systematics and evolution of living organisms*. Chapter 53. Sinauer. ISBN: 978-1-60535-229-9
- Ceballos L, Calvo L, Bes MT, Fillat MF, Peleato ML. Effect of several emerging contaminants on growth and microcystin production in *Microcystis aeruginosa* PCC 7806. *Limnetica*, en prensa. Impacto ISI: 0.776
- Diaz-Pérez A, Sharifi-Tehrani M, Inda LA, Catalán P. 2014. Polyphyly, gene-duplication and extensive allopolyploidy framed the evolution of the ephemeral *Vulpia* grasses and other fine-leaved *Loliinae* (Poaceae). *Molecular Phylogenetics and Evolution* 79:92-105. Impacto ISI: 4.018
- Duarte R, Escario JJ, Molina JA. 2014. Are estimated peer effects on smoking robust? Evidence from adolescent students in Spain. *Empirical Economics* 46:1167-1179. Impacto ISI: 0.628
- Dundar E, Bush D, Catalan P. 2014. Plant phylogenetics and molecular genetics in the new era of genomics: commentary on the first special issue of the *Turkish Journal of Botany*. *Turkish Journal of Botany* 38: I-II. Impacto ISI: 1.600
- Estrada E, Gómez-Gardeñes J. 2014. Communicability reveals a Transition to Coordinated behavior in Multiplex Networks. *Physical Review E* 89(4):042819. Impacto ISI: 2.326
- Fernández-Marín AA, Méndez-Bermúdez JA, Carbonell J, Cervera F, Sánchez-Dehesa J, Gopar VA. 2014. *Phys. Rev. Lett.* 113:233901. Impacto: 7.720
- Ferraz de Arruda G, Luiz Barbieri A, Martin-Rodríguez P, Moreno Y, da Fontoura Costa L, Rodrigues FA. 2014. The role of centrality for the identification of influential spreaders in complex networks. *Physical Review E* 90:032812. Impacto ISI: 2.326
- Ferreira P, Martínez-Júlvez M, Medina M. 2014. Electron transferases. *Methods in Molecular Biology* 1146:79-94
- Ferreira P, Villanueva R, Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Marcuello C, Fernandez-Silva P, Cabon L, Hermoso JA, Lostao A, Susin SA, Medina M. 2014. Structural insights into the coenzyme mediated monomer-dimer transition of the pro-apoptotic apoptosis inducing factor. *Biochemistry* 53(25):4204-15. Impacto ISI: 3.200

- Filice M, Romero O, Abián O, De las Rivas B, Palomo JM. 2014. Low ionic liquid concentration in water: a green and simple approach to improve activity and selectivity of lipases. *RSC Advances* 4:49115-49122. Impacto ISI: 3.708
- Fillat MF. 2014. The FUR (ferric uptake regulator) superfamily: diversity and versatility of key transcriptional regulators. *Arch Biochem Biophys.* 546:41-52. Impacto ISI: 3.370
- Galbete A, Moler JA, Plo F. 2014. A response-driven adaptive design based on the Klein urn. *Methodology and Computing in Applied Probability* 16(3):731-746. Impacto ISI: 0.778
- Gimenez-Nadal JI, Molina JA. 2014. Commuting Time and Labor Supply in the Netherlands: A Time Use Study," *Journal of Transport Economics and Policy* 48(3):409-426. Impacto ISI: 0.592
- Gimenez-Nadal JI, Molina JA. 2014. Regional unemployment, gender and time allocation of the unemployed. *Review of Economics of the Household* 12(1):105-127. Impacto ISI: 1.204
- Giménez-Nadal JI, Sevilla A. 2014. Total work time in Spain: evidence from time diary data," *Applied Economics* 46(16):1894-1909. Impacto ISI: 0.518
- González A, Angarica VE, Sancho J, Fillat MF. 2014. The FurA regulon in *Anabaena* sp. PCC 7120: in silico prediction and experimental validation of novel target genes. *Nucleic Acids Research.* 42(8):4833-46. Impacto ISI: 8.278
- González-Bailón S, Borge-Holthoefer J, Moreno Y. 2014. Online Networks and the Diffusion of Protest. Chapter contribution to *Analytical Sociology: Norms, Actions and Networks.*
- González-Bailón S, Wang N, Rivero A, Borge-Holthoefer J, Moreno Y. 2014. Assessing the Bias in Samples of Large Online Networks. *Social Networks* 38:16-27. Impacto ISI: 2.138
- Gracia-Bondía JM, Gutiérrez H, Várilly JC. 2014. Improved Epstein–Glaser renormalization in x-space versus differential renormalization. *Nuclear Physics B* 886:824–869. Impacto ISI: 3.946
- Gracia-Lazaro C, Gomez-Gardenes J, Floria LM, Moreno Y. 2014. Intergroup information exchange drives cooperation in the public goods game. *Physical Review E* 90(4):42808. Impacto ISI: 2.326
- Grujić J, Gracia-Lázaro C, Milinski M, Semmann D, Traulsen A, Cuesta JA, Moreno Y, Sánchez A. 2014. A comparative analysis of spatial Prisoner's Dilemma experiments: Conditional cooperation and payoff irrelevance. *Scientific Reports* 4:4615. Impacto ISI: 5.078
- Gutiérrez-Roig M, Gracia-Lázaro C, Perelló J, Moreno Y, Sánchez A. 2014. Transition from reciprocal cooperation to persistent behaviour in social dilemmas at the end of adolescence. *Nature Communications* 5:4362. Impacto ISI: 10.742
- Hermoso de Mendoza I, Pachón L, Gómez-Gardeñes J, Zueco D. 2014. The Quantum Kuramoto Model. *Physical Review E* 90(5):052904. Impacto ISI: 2.326
- Hori C, Ishida T, Igarashi K, Samejima-Hitoshi-Suzuki M, Master E, Ferreira P, Ruíz-Dueñas FJ, Held B, Canessa PF, Larrondo L, Schmoll M, Druzhinina I, Kubicek C, Gaskell J, Kersten P, John FS, Glasner J, Sabat G, Bondurant S, Syed K, Yadav J, Kovalchuk A, Asiegbu F, Lackner G, Hoffmeister D, Barry K, Riley R, Grigoriev I, Henrissat B, Kues U, Berka RM, Martinez AT, Covert S, Blanchette B, Cullen D. 2014. Insight into the colonization of softwood gained through analyses of the *Phlebiopsis gigantea* genome, transcriptome and secretome. *Plos Genetics* 10(12):e1004759. Impacto ISI: 8.167
- Inda LA, Sanmartin I, Buerki S, Catalán P. 2014. Mediterranean origin and Miocene-Holocene Old World diversification of meadow fescues and ryegrasses (*Festuca* subgen. *Schedonorus* and *Lolium*). *Journal of Biogeography* 41:600-614. Impacto ISI: 4.969
- Kivelä M, Arenas A, Barthelemy M, Gleeson JP, Moreno Y, Porter MA. 2014. *Journal of Complex Networks* 2(3):203-271
- Lacasa L, Gómez-Gardeñes J. 2014. Analytical estimation of the correlation dimension of integer lattices. *Chaos* 24(4):043101 Impacto ISI: 1.761

- Lee RE, Hurdle JG, Liu J, Bruhn DF, Matt T, Scherman MS, Vaddady PK, Zheng Z, Qi J, Akbergenov R, Das S, Madhura DB, Rathi C, Trivedi A, Villellas C, Lee RB, Rakesh, Waidyarachchi SL, Sun D, McNeil MR, Ainsa JA, Boshoff HI, Gonzalez-Juarrero M, Meibohm B, Böttger EC, Lenaerts AJ. 2014. Spectinamides: a new class of semisynthetic antituberculosis agents that overcome native drug efflux. *Nature Medicine* 20(2):152-158. Impacto ISI: 28.054
- Liggi S, Drakakis G, Koutsoukas A, Cortes-Ciriano I, Martínez-Alonso P, Malliavin TE, Velázquez-Campoy A, Breweton SC, Bodkin MJ, Evans DA, Glen RC, Carrodegua JA, Bender A. 2014. Extending in silico mechanisms-of-action analysis by annotating targets with pathways: application to cellular cytotoxicity readouts. *Fut. Med. Chem.* 6(18):2029-56. Impacto ISI: 4.000
- Lira-Navarrete E, Iglesias-Fernández J, Zandberg WF, Compañón I, Kong Y, Corzana F, Pinto BM, Clausen H, Peregrina JM, Vocado D, Rovira C, Hurtado-Guerrero R. 2014. Combined structural snapshots and metadynamics reveal a substrate-guided front-face reaction for polypeptide GalNAc-transferase T2. *Angewandte Chemie International Edition* 53(31):8206-10. Impacto ISI: 11.330
- López-Ruiz R, Fournier-Prunaret D, Gracio C, Nishio Y (Eds.). 2014. *Nonlinear Maps and Their Applications*. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics
- Luo X, Ainsa JA, Gracia B, Paterna A, Reis M, Mulhovo S, Ferreira MJU. 2014. Antimycobacterial potential of benzophenanthridine-based derivatives. 62nd International Congress and Annual Meeting of the Society of Medicinal Plant and Natural Product Research (Guimaraes, Portugal). *Planta Medica* 80(16):1421-1421. Impacto ISI: 2.339
- Madariaga D, Martínez-Saéz N, Somovilla V, García L, Berbis A, Valero-González J, Martín-Santamaría S, Hurtado-Guerrero R, Asensio JL, Jiménez-Barbero J, Avenoza A, Busto JH, Corzana F, Peregrina JM. 2014. Serine versus Threonine Glycosylation with α -O-GalNAc: Implications for the molecular recognition by lectins. *Chem. Eur. J.* 20: 12616-12627. Impacto ISI: 5.690
- Martínez JI, Alonso PJ, García-Rubio I, Medina M. 2014. Methyl rotors in flavoproteins. *Physical Chemistry Chemical Physics* 16:26203-26212. Impacto ISI: 4.198
- Martínez-Fabregas J, Díaz-Moreno I, Gonzalez-Arzola K, Janocha S, Navarro JA, Hervas M, Bernhardt R, Velázquez-Campoy A, Diaz-Quintana A, De la Rosa MA. 2014. Structural and functional analysis of novel human cytochrome c targets in apoptosis. *Molecular & Cell Proteomics* 13:1439-1456. Impacto ISI: 7.254
- Martínez-Olivan J, Arias-Moreno X, Velázquez-Campoy A, Millet O, Sancho J. 2014. LDL receptor/lipoprotein recognition: Endosomal weakening of apo B and apo E binding to the convex face of the LR5 repeat. *FEBS Journal* 281:1534-1546. Impacto ISI: 3.986
- Martínez-Olivan J, Rozado-Aguirre Z, Arias-Moreno X, Angarica V, Velázquez-Campoy A, Sancho J. 2014. LDL receptor is a calcium/magnesium sensor: Role of LR4 and LR5 ion interaction kinetics in LDL release in the endosome. *FEBS Journal* 281:2638-2658. Impacto ISI: 3.986
- Martín-Luna B, Sevilla E, Bes MT, Fillat MF, Peleato ML. 2014. Salinity decreases transcription of *mcyd* and microcystin-LR synthesis in *Microcystis aeruginosa* PCC 7806. *Limnetica*, en prensa. Impacto ISI: 0.776
- Molina JA. 2014. Altruism and monetary transfers in the household: inter- and intra-generation issues. *Review of Economics of the Household* 12(3):407-410. Impacto ISI=1.204
- Moreno-Beltran B, Diaz-Quintana A, Gonzalez-Arzola K, Velázquez-Campoy A, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. 2014. Cytochrome c1 exhibits two binding sites for cytochrome c in plants. *Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics* 1837:1717-1729. Impacto ISI: 4.829
- Padavannil A, Jobichen C, Qinghua Y, Velázquez-Campoy A, Yang L, Pan SQ, Sivaraman J. 2014. Dimerization of VirD2 binding protein is essential for *Agrobacterium* induced tumor formation in plants. *PLoS Pathogens* 10:e1003948. Impacto ISI: 8.057
- Pallarés MC, Marcuello C, Botello-Morte L, González A, Fillat MF, Lostao A. 2014. Sequential binding of FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120 to iron boxes: Exploring regulation at the nanoscale. *Biochim. Biophys. Acta* 1844(3):623. Impacto ISI: 3.191
- Pesini A, Iglesias E, Garrido N, Bayona-Bafaluy MP, Montoya J, Ruiz-Pesini E. 2014. OXPPOS, pyrimidine nucleotides, and

Alzheimer's disease: a pharmacogenomics approach. *J Alzheimers Dis.* 42(1):87-96. Impacto ISI: 3.612

Rubio Ruíz B, Figuerola-Conchas A, Ramos-Torrecillas J, Capitán-Cañadas F, Rios-Marco P, Carrasco MP, Gallo MA, Espinosa A, Marco C, Ruíz C, Entrena-Guadix A, Hurtado-Guerrero R, Conejo-García A. 2014. Discovery of a new binding site on human choline kinase $\alpha 1$: design, synthesis, crystallographic studies and biological evaluation of asymmetrical bispyridinium derivatives. *Journal of Medicinal Chemistry* 57(2):507-15. Impacto ISI: 5.400

Salcedo G, Cano-Sanchez P, Tuena de Gomez-Puyou M, Velázquez-Campoy A, García-Hernandez E. 2014. Isolated noncatalytic and catalytic subunits of F1-ATPase exhibit similar, albeit not identical, energetic strategies for recognizing adenosine nucleotides. *Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics* 1837:44-50. Impacto ISI: 4.829

Sánchez-Azqueta A, Catalano-Dupuy DL, López-Rivero A, Tondo ML, Orellano EG, Ceccarelli EA, Medina M. 2014. Dynamics of the active site architecture in plant-type Ferredoxin-NADP⁺ reductases catalytic complexes. *BBA-Bioenergetics* 1837:1730-1738. Impacto ISI: 4.829

Sánchez-Azqueta A, Herguedas B, Hurtado-Guerrero R, Hervás M, Navarro JA, Martínez-Júlvez M, Medina M. 2014. A hydrogen bond network in the active site of Anabaena Ferredoxin-NADP⁺ reductase modulates its catalytic efficiency. *BBA-Bioenergetics* 1837:251-263. Impacto ISI: 4.829

Sánchez-Azqueta A, Martínez-Júlvez M, Hervás M, Navarro JA, Medina M. 2014. External loops at the ferredoxin-NADP⁺ reductase protein-partner binding cavity contribute to substrate allocation. *BBA-Bioenergetics* 1837:296-305. Impacto ISI: 4.829

Sánchez-García R, Cozzo E, Moreno Y. 2014. Dimensionality reduction and spectral properties of multilayer networks. *Physical Review E* 89(5):052815. Impacto ISI: 2.326

Sanz F, Serrano F, Mercadal MA, Cuevas R. 2014. Collective Music Experiment. *Sónar+D.* Barcelona

Sanz J, Xia CY, Meloni S, Moreno Y. 2014. Dynamics of Interacting Diseases. *Physical Review X* 4:041005. Impacto ISI: 8.463

Sañudo J, López-Ruíz R. 2014. Statistical measures and the Klein tunneling in single-layer graphene. *Physics Letters A* 378:1005-1009. Impacto ISI: 1.626.

Sein-Echaluze VC, González A, Napolitano M, Luque I, Barja F, Peleato ML, Fillat MF. 2014. Zur (FurB) is a key factor in the control of the oxidative stress response in *Anabaena* sp. PCC 7120. *Environ. Microbiol.* doi: 10.1111/1462-2920.12628. Impacto ISI: 6.240

Shivanian E, López-Ruíz R. 2014. A Nonlinear Map for the Decay to Equilibrium of Ideal Gases. Chapter in *Nonlinear Maps and Their Applications* (Grácio et al. eds.). Chapter 13, pp. 133-140

Silva CG, Monteiro A, Lostal-Lanza E, Val-Gascón C, Sanz F, Farias-Leal JA, Furtado A, Andrade N, Gama-Mota P, Manahl C, Holocher-Ertl T, Brasileiro F, Brito RMM, Serrano-Sanz F. 2014. SOCIENTIZE: Participatory experiments, dissemination and networking activities in perspective. *Human Computation* 3:5:101-104 CC-BY-3.0

Solanpää J, Budagosky JA, Shvetsov-Shilovski, Castro A, Rubio A, Räsänen E. 2014. Optimal control of high-order-harmonic generation by intense few-cycle pulses, *Phys. Rev. A* 90:053402. Impacto ISI: 2.991

Tapia-Rojo R, Arregui S, Mazo JJ, Falo F. 2014. Mechanical Unfolding of a Simple Model Protein Goes Beyond the Reach of One-Dimensional Descriptions. *J. Chem. Phys.* 141:135102. Impacto ISI: 3.122

Tapia-Rojo R, Mazo JJ, Hernández JA, Peleato ML, Fillat MF, Falo F. 2014. Mesoscopic model and free energy landscape for protein-DNA binding sites: analysis of Cyanobacterial promoters. *PLoS Comput Biol* 10(10):e1003835. Impacto ISI: 4.829

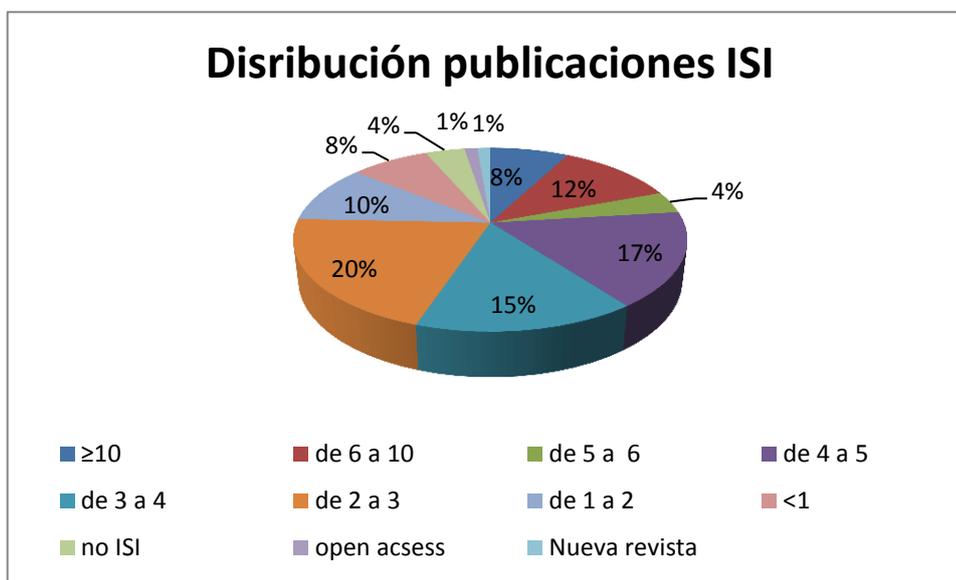
Viruel J, Catalán P, Segarra-Moragues JG. 2014. Latitudinal environmental niches and riverine barriers shaped the phylogeography of the central Chilean endemic *Dioscorea humilis* (Dioscoreaceae). *PLoS ONE* 9(10):e110029. Impacto ISI: 3.534

Water JJ, Schack MM, Velázquez-Campoy A, Maltesen MJ, van de Weert M, Jorgensen L. 2014. Complex coacervates of hyaluronic acid and lysozyme: Effect on protein structure and physical stability. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics.* 88:325-331. Impacto ISI: 4.245

Analizando los datos que se muestran en la tabla sobre el factor de impacto de las publicaciones realizadas por el instituto durante el 2014 puede observarse que de las 78 publicaciones en revistas con distinto impacto ISI, 1 revista no tienen aún asignado ISI porque tiene menos de 2 años de existencia, otra es una publicación open Access y el resto están publicadas en revistas y libros de relevancia, pero sin tener clasificación por impacto JCR.

La distribución de la clasificación por índice de impacto puede verse en la tabla y la figura siguientes:

Rango ISI	Nº public	%
≥10	6	7,69%
de 6 a 10	9	11,54%
de 5 a 6	3	3,85%
de 4 a 5	13	16,67%
de 3 a 4	12	15,38%
de 2 a 3	16	20,51%
de 1 a 2	8	10,26%
<1	6	7,69%
no ISI	3	3,85%
open access	1	1,28%
Nueva revista	1	1,28%
Nºpublicaciones 2014	78	



Subrayar que hay 6 publicaciones que destacan por tener un índice superior a 10, dos de ellas superan el índice de impacto de 20. La mayoría de de las publicaciones tiene un ISI asignado entre 2 y 5 suponiendo un 52% de las publicaciones del 2014.

Otras publicaciones

También durante el año 2014 se han publicado en otros medios distintos de revistas. A continuación se enumeran algunas de ellas:

Proceedings

Editor Proceedings Internacionales:

López-Ruíz R, Fournier-Prunaret D, Gracio C, Nishio Y (Eds.). 2014. Nonlinear Maps and Their Applications. Springer Proceedings in Mathematics & Statistics.

Proceedings en Congresos Internacionales:

A Nonlinear Map for the Decay to Equilibrium of Ideal Gases, E. Shivanian and R. López-Ruíz, Chapter in the book Nonlinear Maps and Their Applications, et al. (Eds.), Ch. 13, pp. 133-140, PROMS, vol. 57, 2014.

Publicaciones en libros

Se citan a continuación algunas publicaciones en formato libro que también han realizado los investigadores del BIFI durante el 2014.

Catalán P, Gonzalez-Candelas F. 2014. Phylogenetic techniques and markers. In: Vargas P, Zardoya R (eds.): The tree of life: systematics and evolution of living organisms. Chapter 53. Sinauer. ISBN: 978-1-60535-229-9. Text book chapter (<http://www.sinauer.com/the-tree-of-life-629.html>).

Shivanian E. and R. López-Ruíz,. Chapter in the book Nonlinear Maps and Their Applications, Grácio et al. (Eds.), Ch. 13, pp. 133-140, PROMS, vol. 57, 2014. A Nonlinear Map for the Decay to Equilibrium of Ideal Gase.

4.3. Comunicaciones a congresos

4.3.1. Presentaciones durante el año 2014 en congresos, talleres, seminarios

Conferencias invitadas

El personal del BIFI ha participado en 28 conferencias como invitados. De estas 13 han sido como invitados a distintos eventos nacionales y 15 en eventos internacionales, lo que da idea de la internacionalización y actividades de colaboración internacionales del instituto BIFI.

Eventos Nacionales

"On the recursive evaluation of Feynman amplitudes in x -space: Differential versus Epstein–Glaser methods", en la conferencia "Quantum mathematical physics. A bridge between mathematical and physics", Regensburg, Alemania, del 29 de septiembre al 2 de octubre 2014.

Botello-Morte L, Bes MT, Heras B, Peleato ML, Fillat MF. Disulfide reductase activity and redox properties of the global regulator FurA: a novel CXXC-based redox sensor? Congreso: Gordon Research Seminar: Probing the Thiol Proteome. Girona, España. Julio 2014

Catalan P. Genética del paisaje y ecología de la conservación de pastos subalpinos pirenaico-cantábricos de Festuca (Festuca sect. Eския, Poaceae). XIX curso sobre Flora y Vegetación pirenaicas (IPE-CSIC). Jaca (España). Julio 2014.

Catalan P. Procesos de especiación y evolución en plantas del valle del Ebro y del Mediterráneo. Seminarios científicos de la Universitat de Lleida. Lleida (España). Marzo 2014.

Congreso: XIVth International Congress of Sociedad de Biofísica de España. Alcalá de Henares (España)2014

Gimenez-Nadal, JI., y A. Sevilla. "Job Routinization and Work Rhythms in the UK" Seminario en la Universidad de Murcia, Junio.

Medina M. Flavoproteins and Flavoenzymes: use of spectroscopy in the elucidation of action mechanisms. 19th ETSF Workshop on Electronic Excitations. Zaragoza (Spain). Septiembre 23-26, 2014

Pérez Pérez P, López López L, and Sánchez Sánchez S. El mejor artículo del mundo mundial. Congreso. Zaragoza (España). Octubre 2014

Pérez-Gavira S. El método científico en la Red. Conferencia de clausura para el concurso "Reporteros en la Red 2013-2014". Sede Ibercaja Zentrum, Zaragoza (España). Mayo 2014.

Pérez-Gavira S. El rol de la computación en nuestras vidas. Ciclo de Conferencias. De la genética a la computación: un gran reto para la Ciencia. Sede Ibercaja Zentrum, Zaragoza (España). Marzo 2014.

Pérez-Gavira S. The Janus supercomputers: a special purpose computers for complex systems. Charla invitada. Barcelona Supercomputing Center / Centro Nacional de Supercomputación (BSC/CNS). Abril 2014.

Velázquez-Campoy A. ITC: Facts and caveats. Widen ITC - International Workshop on Isothermal Titration Calorimetry Developments. Santiago de Compostela (España). Septiembre 2014

Yruela I, Ferreira P, Contreras-Moreira B, Medina M. Predicted structure and function of divergent members of prokaryotic flavin adenine dinucleotide synthetase (FADS) proteins. XXXVII Congreso de la SEBBM (España). 9-12 Septiembre 2014.

Eventos Internacionales

Congreso: 10th International Conference on Protein Stabilisation. Stresa (Italia)2014

Congreso: European Society of Phenylketonuria: E.S.PKU Conference 2014. Zagreb (Croacia)

Fermín Serrano: Citizen Science: enriching outreach and inreach. COFET2020 Conference. Pisa. Enero 2014

Gimenez-Nadal, JI., y J.A. Molina. "Voluntary Work and Daily Happiness in the US" Frontiers on Time Use Research, Atelier Labex OSE, Paris (Francia), Junio.

Martínez JI, Alonso PJ, García-Rubio I, and Medina M. Tunnelling reorientation of a methyl group of the flavin ring characterized by pulse ENDOR. *IXth EF-EPR conference*. Marsella(Francia). Septiembre 2014

Medina M, Alonso PJ, García-Rubio I, Martínez JI. Tunnelling reorientation of the C8 methyl group in the flavin ring of *Anabaena* flavodoxin characterized by Electron-Nuclear Double Resonance (ENDOR). *18th International Symposium on Flavins and Flavoproteins*. Pechaburi (Tailandia). 27 Julio-1 Agosto 2014

Medina M, Serrano A, Sebastián M, Velázquez-Campoy A, Beatriz Herguedas, Marta Martínez-Júlvez: Conformational flexibility and quaternary organization as modulators of prokaryotic FAD synthetase catalytic activities: *18th International Symposium on Flavins and Flavoproteins*. Pechaburi (Tailandia). 27 Julio-1 Agosto 2014

Medina M. The apoptosis induction factor: Structural insights into its implication in neurological disorders. COST-CM1103 Action WG3-WG4. Evaluation of New Molecules for treatment of Neurological Diseases. Siena (Italy). Mayo 30-31, 2014

Serrano A, Carro J, Ferreira P, Martinez AT. Screening of *Pleurotus ostreatus* genome and selection for heterologous expression of new aryl alcohol oxidases. *18th International Symposium on Flavins and Flavoproteins*. Pechaburi (Tailandia). 27 Julio-1 Agosto 2014

Velázquez-Campoy A. Calorimetry of protein-dependent biological systems. Biomolecular Interactions Analysis: From Molecules to Cells (EMBO Practical Course). Porto (Portugal). Noviembre 2014

Yamir Moreno. • Contributed Talk, "Dynamic Systems: From Statistical Mechanics to Engineering Applications". Zurich, Switzerland, January 2014.

Yruela I, Contreras-Moreira B. Contribution of disorder / ductility to plant proteomes. *Gordon Research Conferences. Frontiers of Science*. Easton (EEUU). Julio 2014.

Comunicaciones orales

Se han presentado 31 comunicaciones orales en congresos nacionales e internacionales. 17 de las mismas se mostraron en eventos internacionales y entre ellos destacar las participaciones en el *VII National Conference*. Zaragoza (España) en enero de 2014. Se listan a continuación dichas comunicaciones, con los autores y las fechas y lugares de celebración.

Abián, O. Pancreatic Ductal Adenocarcinoma (PDAC): Identification of compounds that inhibit NUPR1 protein function in cell culture. CONGRESO: JSGE 2014 (The 100th General Meeting of the Japanese Society of Gastroenterology).Tokio, Japón.2014

Alcolea A, Rivero A, Ruíz G. Taller sobre scraping y Aragon Open Social Data. Miembro del jurado en el 1er Jacathon Aragón Open Data. Jaca. 25-28 de octubre de 2014.

Bernal P, Hervas M, Cejudo FJ, Velázquez-Campoy A, Navarro JA. Reconocimiento molecular en la interacción de la NADPH-tiorredoxina-reductasa cloroplástica (NTRC) con 2-Cys peroxirredoxina. XXXVII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular. Granada (España). Septiembre 2014

Botello-Morte L, Bes MT, Heras B, Peleato ML, Fillat MF. The two faces of cyanobacterial FurA: a global regulator and a novel redox sensor. Congreso: X Reunión de Microbiología Molecular, Grupo Especializado de la SEM. Segovia, España. Junio 2014

Cauhe E. CloudSME dissemination. I4MS Advisory Board. Bruselas. 20 octubre 2014.

-
- Cauhe E. CloudSME dissemination. ICT Proposers' Day. Florencia. 9-10 octubre 2014.
-
- Cauhe E. CloudSME project. MANU-KET technological platform. Gijón (España). Abril 2014
-
- Contreras-Moreira B, Cantalapiedra C, López-Alvarez D, Sancho R, Gordon S, Vogel J, Catalán P. Phylogenetic analysis of resequenced organelle genomes: the case of the *Brachypodium distachyon* complex chloroplasts. VI National Conference BIFI. Zaragoza (España). Enero 2014
-
- Eduardo Lostal: "Enabling the new way for the Citizen Science in Europe". ESOF2014, Copenague, Junio 2014
-
- FERMÍN SERRANO, Moderador de la discusión online
-
- Fermín Serrano: C... what it takes to change. Future Innovators Summit. Linz (Austria). Septiembre 2014.
-
- Fermín Serrano: Citizen-science. Digital Action Day 2014. Bruselas. Septiembre 2014.
-
- Fermín Serrano: Collective Music Experiment. Ars Electronica. Linz (Austria). Septiembre 2014
-
- Fermín Serrano: White Paper of the Citizen Science in Europe. Conference on Citizen Science for Europe. Bruselas. Septiembre 2014.
-
- Ferreira P, Carro J, Martínez AT. An in silico search for glucose-methanol-choline oxidoreductases with interesting features in ten Polyporales genomes. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014
-
- Gonzalez-Arzola K, Martinez-Fabregas J, Diaz-Quintana A, Janocha S, Bernhardt R, Velázquez-Campoy A, Diaz-Moreno I, De la Rosa MA. A common signalosome for programmed cell death in humans and plants. XXXVII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular. Granada (España). Septiembre 2014
-
- Moreno-Beltran B, Gonzalez-Arzola K, Diaz-Quintana A, Velázquez-Campoy A, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. A "floating boat bridge" of cytochrome c molecules in plant respirasome. 14th FEBS Young Scientist's Forum. París (France). 2014
-
- Pérez-Gavira S. Janus II: the new generation Special Purpose Computer for spin-system simulations. APS March Meeting 2014, Denver, Colorado (USA), Marzo 2014.
-
- Pérez-Gavira S. La computación en la Ciencia. Semana Inmersión en Ciencias 2014, Universidad de Zaragoza. Zaragoza (España). Junio 2014.
-
- Pérez-Gavira S. La Supercomputación y el BIFI. Bifi Scientific Dissemination Visit. Bifi, Zaragoza (España). Octubre 2014.
-
- Pérez-Gavira S. Supercomputación con clusters y ordenadores dedicados. Circuitos Científicos 2014, Universidad de Zaragoza. Bifi, Zaragoza (España) Abril 2014.
-
- Ruíz G. Charla sobre Aragón Open Social Data. 1 año de Aragón Open Data. Zaragoza. 6 de febrero de 2014.
-
- Ruíz G. Charla sobre el desarrollo de proyectos en empresas por parte de alumnos de CFGS. Instituto Los Enlaces, Zaragoza. 21 de mayo de 2014.
-
- Ruíz G. Charla sobre Scraping. Bilbao International Music Experience. Bilbao. 31 de octubre de 2014.
-
- Sebastián-Valverde M, Lira-Navarrete E, Vizarraga D, Serrano A, Hurtado-Guerrero R, Martínez-Júlvez M, and Medina M. Structural basis for the interaction of the FAD synthetase from the human pathogen *Streptococcus pneumoniae* with its ligands. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014
-
- Valles R. CloudSME project. CloudPYME Info Day: Oportunidades para PYME de la Eurorregión Galicia-Norte de Portugal. Santiago de Compostela (España). Junio 2014
-
- Valles R. CloudSME project. CloudPYME Info Day: Oportunidades para PYME de la Eurorregión Galicia-Norte de Portugal. Santiago de Compostela (España). Junio 2014

Villanueva R, Ferreira P, Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Cabon L, Fernandez-Silva P, Hermoso JA, Susin S, and Medina M. Structural insights into the role of the coenzyme mediated monomer-dimer transition of the Apoptosis Inducing Factor. 18th International Symposium on Flavins and Flavoproteins. Pechaburi (Tailandia). 27 Julio-1 Agosto 2014

Villanueva R, Ferreira P, Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Marcuello C, Fernandez-Silva P, Hermoso JA, Cabon L, Lostao A, Susin S, and Medina M. Structural insights into the role of the coenzyme mediated monomer-dimer transition of the pro-apoptotic Apoptosis Inducing Factor. Red Nacional de Proteínas. Madrid (España). Abril 2014

Yruela I, Contreras-Moreira B. Protein structure features inferred from sequence can change significantly with database growth over time. XII Symposium on Bioinformatics. Sevilla (España). Septiembre 21-24, 2014

Posters

Durante el 2014, se han presentado varios posters a eventos nacionales e internacionales. En total 28 posters que indican una importante actividad científica de difusión del BIFI durante este año 2013.

Ferreira P, Hernández-Ortega A, Lucas F, Carro J, Guallar V, Martínez AT, and Medina M. Aromatic stacking interactions govern catalysis in aryl-alcohol oxidase. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014

Lans I, Martínez-Júlvez M, Herguedas B, Bruscolini P, and Medina M. Theoretical models in the study of the catalytic mechanism of the riboflavin kinase activity of a bifunctional FAD synthetase. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014

Yruela I, Ferreira P, Martínez-Júlvez M, Contreras-Moreira B, and Medina M. Predicted structure and function of FADS-type II protein from *Listeria monocytogenes*. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014

Lans I, Rosta E, Hummer G, Lluch JM, González-Lafont A, Garcia-Viloca M, and Medina M. QM/MM methods in the analysis of the mechanisms of hydride transfer processes between flavoreductases and pyridine nucleotides. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014

Villanueva R, Ferreira P, Herguedas B, Martínez-Júlvez M, Yruela I, and Medina M. Binding of the second molecule of coenzyme to the Apoptosis Inducing Factor: Docking analysis and sequence identification of disordered regions. VI International BIFI Conference. Zaragoza (España). Enero 2014

Ferreira P, Carro J, Martínez AT. An in silico search for glucose-methanol-choline oxidoreductases with interesting features in ten Polyporales genomes. Exploring the role of the computation in Science: from Biology to Physics. 12th European Conference on Fungal Genetics (ECFG12). Sevilla (España). Marzo 2014

Ferreira P, Hernández-Ortega A, Lucas F, Carro J, Guallar V, Martínez AT, and Medina M. Aromatic stacking interactions govern catalysis in aryl-alcohol oxidase. 18th International Symposium on Flavins and Flavoproteins. Pechaburi (Tailandia). 27 Julio-1 Agosto 2014

Arruebo M., Lanas A., Neira J.L., Iovana J., Velázquez-Campoy, A., and Abián O. Identification of Nupr1 ligands using High-Throughput Screening(HTS). SEBBM 2014. Granada, Spain.2014

Velázquez-Campoy, A.,Vega, S.,García-González,M.A. Lanas A., Abián.O. Clasificación de pacientes con cáncer gástrico mediante el análisis de termogramas calorimétricos de muestras de suero sanguíneo: Un análisis preliminar. XVII REUNION ANUAL DE LA ASOCIACION ESPAÑOLA DE GASTROENTEROLOGIA (AEG).Madrid.2014

Clavería, R., Velázquez-Campoy, A., Abián, O. Rescuing the antiviral activity in cell culture of selected in vitro compounds against Hepatitis C virus using cyclodextrins. VI International Conference BIFI 2014.Zaragoza. 2014

LanUNIZAR PM, Vega S, Abián, O and Velázquez-Campoy, A. "Rett Syndrome: Structural and Functional Characterization of MeCP2 and Search for Pharmacological Chaperones.VI International

Conference BIFI 2014. Zaragoza. 2014

Hurtado-Guerrero R. XI Jornadas de Carbohidratos, Logroño, 2014.

Pérez-Gaviro S. Dances with Spin Glasses: starring Janus. VI International Conference BIFI2014: Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics. Zaragoza (España). Enero 2014.

Guerra-Castellano A, Moreno-Beltran B, Lopez-Prados J, Rivero-Rodriguez F, Nieto PM, Velázquez-Campoy A, Diaz-Quintana A, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. How phosphorylation affects cytochrome c structure and function. XXXVII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular. Granada (España). Septiembre 2014

Moreno-Beltran B, Diaz-Quintana A, Gonzalez-Arzola K, Guerra-Castellano A, Velázquez-Campoy A, Nieto PM, Ubbink M, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. How redox proteins form transient complexes in photosynthesis and respiration. XXXVII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular. Granada (España). Septiembre 2014

Arruebo M, Lanas A, Neira JL, Iovanna JL, Velázquez-Campoy A, Abián O. Identifying protein-protein interaction inhibitors for NUPR1, a key therapeutic target in pancreatic cancer. XXXVII Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular. Granada (España). Septiembre 2014

Guerra-Castellano A, Moreno-Beltran B, Lopez-Prados J, Rivero-Rodriguez F, Nieto PM, Velázquez-Campoy A, Diaz-Quintana A, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. Structure, dynamics and function of phosphomimetic mutants of respiratory cytochrome c. FEBS EMBO 2014 Conference. París (France). Septiembre 2014

Moreno-Beltran B, Gonzalez-Arzola K, Diaz-Quintana A, Velázquez-Campoy A, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. A "floating boat bridge" of cytochrome c molecules in plant respirasome. FEBS EMBO 2014 Conference. París (France). Septiembre 2014

Moreno-Beltran B, Diaz-Moreno I, Gonzalez-Arzola K, Velázquez-Campoy A, De la Rosa MA, Diaz-Quintana A. Plant cytochrome c1 exhibits two binding sites for cytochrome c with distinct affinities. XIII Congress of the Spanish Biophysical Society – SBE Alcalá de Henares 2014. Alcalá de Henares (España). Junio 2014

Moreno-Beltran B, Diaz-Quintana A, Gonzalez-Arzola K, Velázquez-Campoy A, De la Rosa MA, Diaz-Moreno I. Cytochrome c1 exhibits two binding sites for cytochrome c in plants, as revealed by NMR in solution. 4th Annual User Group Meeting of Bio-NMR. Warsaw (Poland). Mayo 2014

Abián O, Velázquez-Campoy A, Vega S, Garcia-Gonzalez MA, A Lanas. Clasificación de pacientes con cáncer gástrico mediante el análisis de termogramas calorimétricos de muestras de suero sanguíneo: Un análisis preliminar. XVII Reunión Anual de la Asociación Española de Gastroenterología. Madrid (España), Marzo 2014

López-Alvarez D, López-Herranz ML, Catalán P. Phylogeny and biogeography of the grass model genus *Brachypodium*. VI National Conference BIFI. Zaragoza (España). Enero 2014

González A; Botello-Morte L; Bes MT; Peleato ML, Fillat MF. Understanding multifunctionality of FurA in *Anabaena*: CXXC-based redox activity, heme sensing and novel insights into its regulon. Congreso: 9th European Workshop on Molecular Biology of Cyanobacteria. Texel, Holanda. Septiembre 2014.

C. Sein-Echaluce V., Napolitano M, Peleato ML, Luque I, Fillat MF. Understanding the contribution of FurB/Zur to the enhancement of the oxidative stress tolerance in *Anabaena* sp. PCC 7120. Congreso: 9th European Workshop on Molecular Biology of Cyanobacteria. Texel, Holanda. Septiembre 2014

Botello-Morte L, Bes MT, Peleato ML, Fillat MF. Identification of new interacting partners of the global regulator FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120. Congreso: VI International Conference BIFI 2014- Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics. Zaragoza, España Febrero 2014

Ceballos L, Calvo L, Bes MT, Fillat MF and Peleato ML. γ -Lindane induces nirA in *Microcystis aeruginosa* PCC 7806, involved in the degradation of the pesticide. Congreso: VI International Conference BIFI 2014- Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics.

Zaragoza, España. Febrero 2014

Laura Ceballos, María Teresa Bes, María F. Fillat and María Luisa Peleato. A hypothetic concanavalin A-like protein binds to mcy bidirectional promoter in *Microcystis aeruginosa* PCC 7806 assay. CONGRESO: VI International conference BIFI2014. Zaragoza. Febrero 2014

Laura Ceballos, Míriam Alías, Laura Calvo, María Luisa. Peleato. Study of the interaction between NtcA and mcyAD promoter from *Microcystis aeruginosa* PCC 7806 in the presence of amino acids: a Surface Plasmon Resonance approach. VI International conference BIFI2014. Zaragoza. Febrero 2014

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 11 importantes eventos científicos por el instituto BIFI durante el año 2014. A continuación se recogen la información básica de los mismos, su duración y la fecha y lugar de celebración.

Título: 18th International Symposium on Flavins and Flavoproteins.

Miembro del comité científico internacional: Milagros Medina

Fecha y Lugar de celebración: July 27- August 1, 2014 Pechaburi (Thailand).

Título: IX Olimpiada Española de Biología.

Miembro del Comité Académico: Patricia Ferreira.

Fecha y Lugar de celebración: 24-26 de Marzo de 2014. Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza.

SEMINARIOS

Título: 3D-QSAR Study of Novel Donepezil-Indolyl Hybrids as Multipotent Cholinesterase/Monoamine Oxidase Inhibitors for the Treatment of Alzheimer's Disease". Dr. Slavica V. Filipić. Department of Pharmaceutical Chemistry Faculty of Pharmacy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia.

Zaragoza. 29 de Septiembre 2014.

Título: Workshop on Policy recommendations to support Citizen Science in Europe. Citizen Cyberscience Summit.

Duración: 3 días

Londres. Febrero 2014.

Título: Open consultation for the White Paper on Citizen Science in Europe

Duración: 2 meses

Online

Título: Mice with a humanized liver: Applications

Ponente: Philip Meuleman (University of Ghent, Belgium)

Fecha y Lugar de celebración: 11 de marzo de 2014. BIFI, Zaragoza

Título: VI International Conference BIFI 2014- Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics

Fecha y Lugar de celebración: 22/01/2014-24/01/2014. BIFI Zaragoza

Título: Stand del proyecto SCI-BUS en EGI Community Forum 2014

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: 19-23 Mayo 2014. Helsinki (Finlandia)

Título: Difusión del proyecto CloudSME en Fostering Digital Industrial Innovation in Europe

Duración: 2 días

Fecha y Lugar de celebración: 17-18 Junio 2014. Berlín (Alemania)

Satellites Chair of the NetSci 2014 Conference, Berkeley, California, June 2-6, 2014.

Título: IV Summer School on Statistical Physics of Complex and Small Systems *Ponente:* Pedro Tarazona, Arkady Pikovsky, Emilio Hernández-García, Daniel Walgraef, Jordi Ortín, Víctor Eguiluz.

Fecha y Lugar de celebración: 8-19 Septiembre 2014, Mallorca (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 2014 se pueden citar las siguientes:

Título: VI International Conference BIFI 2014

Ponente: -

Fecha y Lugar de celebración: 22-24 enero de 2014 Zaragoza (España)

VI International Conference BIFI 2014

Exploring the role of computation in Science: from Biology to Physics

List of Participants

Last Name	Name	Institution/ Company	Country	Last Name	Name	Institution/ Company	Country
Abián	Olga	IACS-IIS ARAGON	Spain			Zaragoza	
Alías Niño	Miriam	BIFI-Universidad de Zaragoza	Spain	Carloni	Paolo	Forschungszentrum Jülich GmbH, RWTH Aachen University	Germany
Alonso	Jose Luis	Universidad de Zaragoza	Spain	Carro	Juan	Centro de Investigaciones Biológicas- CSIC	Spain
Alvarez	Raquel	BIFI	Spain	Aramburu	Juan	BIFI. Universidad de Zaragoza	Spain
Antoli	Beatriz	Universidad de Zaragoza	Spain	Carrodegua	José	ARAID / BIFI	Spain
Arenas	Alex	URV	Spain	Cauhe	Elisa	BIFI	Spain
Arregui	Sergio	BIFI / Universidad de Zaragoza	Spain	Ceballos Laita	Laura	Universidad de Zaragoza	Spain
Arruebo	Maria	Instituto Aragonés De Ciencias De La Salud (IACS)	Spain	Clavería	Rafael	BIFI	Spain
Artacho	Emilio	Ikerbasque Universidad	Spain	Clemente-Gallardo	Jesús	Universidad de Zaragoza	Spain
Baity Jesi	Marco	Complutense de Madrid	Spain	Contreras-Moreira	Bruno	Estación Experimental de Aula Dei-CSIC	Spain
Bergues Pupo	Ana Elisa	Universidad de Zaragoza	Spain	Cozzo	Emanuele	BiFi	
Bes	María Teresa	Universidad de Zaragoza	Spain	Dopazo	Joaquin	Centro de Investigación Príncipe Felipe, Valencia	Spain
Borau	Carlos	University of Zaragoza	Spain	Duch	Jordi	Universitat Rovira Virgili	Spain
Botello-Morte	Laura	University of Zaragoza	Spain	Echenique-Robba	Pablo	Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)	Spain
Brey Abalo	J. Javier	University of Sevilla	Spain	Faccin	Mauro	ISI Foundation	Italy
Broset Blasco	Esther	Universidad de Zaragoza	Spain	Falo	Fernando	BIFI- University of Zaragoza	Spain
Bruscolini	Pierpaolo	University of Zaragoza	Spain	Fernandez Otal	Angela	IACS	Spain
Calvo	Violeta	University of	Spain				

Last Name	Name	Institution/ Company	Country	Last Name	Name	Institution/ Company	Country
Ferreira Neila	Patricia	Universidad de Zaragoza	Spain	Ordejon	Pablo J.	Catalan Institute Of Nanotechnology	Spain
Ferrer Marco	Alfredo	BIFI	Spain	Orozco	Modesto	IRB Barcelona - UB.	Spain
Fillat	María F.	University of Zaragoza-BIFI	Spain	Pagonabarraga	Ignacio	Universitat de Barcelona	Spain
Galano	Juan José	BiFI/Universidad de Zaragoza	Spain	Peleato	María Luisa	Universidad de Zaragoza	Spain
Garcia	Alberto	ICMAB-CSIC Estación	Spain	Pérez	Ruben	Universidad Autonoma de Madrid	Spain
García Pereria	María Jesús	Experimental de Aula Dei, CSIC	Spain	Pérez-Gaviro	Sergio	ARAID / BIFI	Spain
Garma	Leonardo	Biocenter Oulu and the University of Oulu	Finland	Piedrahita Salom	Pablo	BIFI	Spain
Gil Narvion	Jose Miguel	BIFI	Spain	Preatoni	Roberto	LINK ENGINEERING SRL	Italy
Gil Sepúlveda	Victor Alejandro	Barcelona Supercomputing Center	Spain	Procaccia	Itamar	The Weizmann Institute of Science	Israel
Giner Gracia	Arturo	BIFI-UNIZAR	Spain	Rivero	Alejandro	Universidad de Zaragoza	Spain
Gómez	Sergio	Universitat Rovira i Virgili	Spain	Roche	Stephan	Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology-ICN2	Spain
González	Andrés	University of Zaragoza	Spain	Romero-García	Javier	Institut Químic de Sarrià	Spain
Gracia	Carlos	BIFI	Spain	Rubio	Angel	Universidad del Pais Vasco	Spain
Hernandez Ruíz	Cristina	BIFI	Spain	Ruíz	Gonzalo	Bifi	Spain
Hess	Wolfgang	University of Freiburg	Germany	Ruíz-Montero	Maria J. Javier	University of Sevilla UNIZAR	Spain
Hurtado-Guerrero	Ramón	BIFI/Universidad de Zaragoza	Spain	Sancho	Javier	UNIZAR	Spain
Ibáñez	Mari Carmen	Ibercivis	Spain	Sandri	Mauro	LINK ENGINEERING SRL	Italy
Ibar	Jaime	BIFI	Spain	Santos	Patricia	BIFI	Spain
Janke	Wolfhard	Universität Leipzig	Germany	Sanz	Joaquín	BIFI and University of Zaragoza	Spain
Khalil	Nagi	Universidad de Extermadura	Spain	Sebastián	María	BIFI	Spain
Rodriguez	Isaias	UAB	Spain	Tapia-Rojo	Rafael	BIFI-Universidad de Zaragoza	Spain
Lans Vargas LanUNIZAR	Pilar Ma	BIFI	Spain	Tarancon Lafita	Alfonso	BIFI	Spain
Latorre Muro	Pedro	Universidad de Zaragoza	Spain	Valero	Jessika	BIFI	Spain
Lopez-Gomollon	Sara	EEAD-CSIC	Spain	Gonzlaez	Ruben	BIFI	Spain
López-Pérez	Diana	University of Zaragoza	Spain	Valles	Sonia	Institute BIFI	Spain
Losilla Anadón	Guillermo	BIFI-UNIZAR	Spain	Vega	Adrian	Institute BIFI	Spain
Mareschal	Michel	ZCAM-ARAID-BIFI	Spain	Velázquez-Campoy	Adrian	Institute BIFI	Spain
Martínez-Júlvez	Marta	University of Zaragoza	Spain	Vergara Larrayad	Yolanda	IUI BIFI. Universidad de Zaragoza	Spain
Martínez-Olivan	Juan	BIFI	Spain	Vidal	Isabel	BIFI	Spain
Medina	Milagros	Universidad de Zaragoza	Spain	Vilhena	Guilherme	Consejo Superior de Investigaciones Científicas - CSIC	Spain
Meloni	Sandro	Universidad de Zaragoza	Spain	Villanueva Llop	Raquel	University of Zaragoza-BIFI	Spain
Monasson	Remi	CNRS and Ecole Normale Supérieure	France	Yruela	M. Inmaculada	CSIC	Spain
Moreno	Yamir	Universidad de Zaragoza, Instituto BIFI	Spain				
Nakajima	Chihiro	WPI-AIMR, Tohoku	Japan				

4.6. Patentes

Durante 2014, por una parte, se han solicitado estas 2 patentes desde el área de Bioquímica y por otra citar que 2 patentes de la Universidad de Zaragoza, derivadas de la investigación de 2 investigadores del BIFI, están generando royalties de know how. Estos datos revelan que resultados de investigación han sido transferidos desde la universidad a empresas con interés en su explotación.

Título: Derivados de benzo[c][1,2,5]oxadiazol para el tratamiento de enfermedades causadas por Helicobacter

Autores: J. Sancho, A. Velázquez-Campoy, N. Cremades, M. Alias, J.J. Galano, E. Touati, V. Michel
Nº solicitud: PCT/ES2014/070011 - No. prioridad: 20140109

Fecha concesión:

País de prioridad: España

Entidad titular: Universidad de Zaragoza, Fundación ARAID, Institut Pasteur

Título: Method for the selection of suids with better meat quality based on an SNP in the gene that encodes cytosolica PEPCCK

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

Nº solicitud: PCT/EP2014/054097

Fecha concesión: 3-3-14

País de prioridad: Varios

Entidad titular: Universidad de Zaragoza

4.7. Empresas SPIN-OFF

Durante el año 2014 se ha creado una empresa cuyo objetivo es explotar y comercializar los resultados de un proyecto realizado en el IUI BIFI, liderado por el Profesor Alfonso Tarancón. Este investigador está acompañado de un plantel importante y destacado de investigadores y técnicos que, con su afán de ir más allá de la investigación, han impulsado la creación de la misma y considerando que este era el mecanismo adecuado para transferir la tecnología desarrollada al mercado para cubrir sus necesidades. La primera aproximación fue el año 2013 con el desarrollo y presentación de Kampal, Mapa de Investigación de la Universidad de Zaragoza y, a partir de esta, se han ampliado los estudios de distintos mapas de otros sistemas complejos.

La empresa se denomina Kampal Data Solutions, SL (<http://kampal.com/>) y nace como spin-off del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. En este instituto multidisciplinar, la unión de expertos en física junto con ingenieros en informática ha dado como resultado una empresa innovadora que aplica técnicas de sistemas complejos para resolver problemas que hasta ahora nunca se habían utilizado. Esto da como resultado dos productos que permiten analizar el contenido de redes sociales y diferentes fuentes heterogéneas. Además, la pasión de sus trabajadores por las nuevas tecnologías hace que la empresa también esté al orden del día en desarrollo de aplicaciones web y móviles, utilizando siempre las herramientas más punteras disponibles.

Apartado 5. Formación

5.1. Tesis dirigidas leídas, trabajos fin de grado, trabajos fin de máster y trabajos académicamente dirigidos en 2014

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 2014 han sido 9 tesis defendidas, además de 9 tesis en curso, próximas a defender.

A continuación se especifican cada una de ellas con su título, doctorando, director/es de tesis, fecha de lectura y la calificación.

Tesis defendidas

Título: Biología evolutiva y genética de la conservación del grupo endémico chileno Epipetrum (Dioscoreaceae)
Doctorando: Juan Viruel Sánchez
Director/es: Pilar Catalán, José Gabriel Segarra-Moragues
Universidad: Universidad de Zaragoza / Escuela Politécnica Superior de Huesca
Fecha de defensa: 14/02/2014
Calificación: Sobresaliente cum laude

Título: A bioinformatics study of protein conformational flexibility and misfolding
Doctorando: Vladimir Espinosa
Universidad: Zaragoza
Facultad/escuela: Ciencias
Año: 2014
Calificación: SOBRESALIENTE cum laude

Título: Mecanismo de incorporación celular de LDL y β -VLDL: análisis estructural y funcional de la región extracelular del receptor de LDL
Doctorando: Juan Martínez Oliván
Universidad: Zaragoza
Facultad/escuela: Ciencias
Año: 2014
Calificación: SOBRESALIENTE cum laude

Título: Probabilistic analysis of adaptive experimental designs
Doctorando: Arkaitz Galbete Jiménez
Director/es: José Antonio Moler Cuiral; Fernando Plo Alastrué
Universidad: Universidad Pública de Navarra
Fecha de defensa: 26/02/2014
Calificación: Sobresaliente por unanimidad

Título: Redox properties of the global regulator FurA from Anabaena sp. PCC 7120 and their functional implications
Doctorando: Laura Botello-Morte
Director/es: María F. Fillat y M. Teresa Bes
Universidad: Zaragoza
Fecha de defensa: 14 de julio de 2014
Calificación: Sobresaliente cum laude

Título: Collective behavior and information structure in socio-technical networks: Analysis and models

Doctorando: Raquel Álvarez Baños

Director/es: Javier Borge-Holthoefer y Yamir Moreno

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 11 de Julio de 2014

Calificación: Máxima Calificación

Título: Tackling Complexity in Biological Systems: multi-scale approaches to tuberculosis infection

Doctorando: Joaquín Sanz Remón

Director/es: Yamir Moreno

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 22 de Octubre de 2014

Calificación: Máxima Calificación

Título: Beyond simple complex-networks: coevolution, multiplexity, and time-varying interactions

Doctorando: Alessio Vincenzo Cardillo

Director/es: Jesús Gómez Gardeñes y Sandro Meloni

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 4 de Julio de 2014

Calificación: Máxima Calificación

Título: (DOCTORADO) Beyond simple complex-networks: coevolution, multiplexity, and time-varying interactions

Doctorando: Alessio V. Cardillo

Director/es: Jesús Gómez Gardeñes y Sandro Meloni

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 4 de Julio 2014

Calificación: Sobresaliente Cum Laude

Tesis en curso

Título: Cribado virtual de bibliotecas de ligandos para el diseño semiautomático de inhibidores de proteínas.

Doctorando: Jorge Estrada

Universidad: Zaragoza

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: En curso. Lectura prevista en 2014.

Título: Identificación de biomoléculas activas mediante cribado experimental y computacional de quimiotecas.

Doctorando: Laura López

Universidad: Zaragoza

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: En curso

Título: Estabilidad de proteínas y enfermedades conformacionales

Doctorando: Renzo Torreblanca

Universidad: Zaragoza

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: En curso

Título: Estudios de molécula sencilla de estabilidad y plegamiento de flavodoxina

Doctorando: Emilio Lamazares

Universidad: Zaragoza

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: En curso

Título: Estudios computacionales de estabilidad de proteínas e interacción proteína/ligando

Doctorando: Juan José Galano Frutos

Universidad: Zaragoza

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: En curso

Título: Rescate conformacional de mutantes de la proteína PTEN implicados en patologías humanas

Doctorando: Angela Rodríguez

Universidad: Zaragoza

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: En curso

Título: Chaperonas farmacológicas para combatir fenilcetonuria
Doctorando: María Conde
Universidad: Zaragoza
Facultad / Escuela: Ciencias
Fecha: En curso

Título: La FAD sintetasa procariota: mecanismo de acción y diana terapéutica
Doctorando: María Sebastián
Universidad: Zaragoza
Facultad / Escuela: Ciencias
Fecha: En curso

Título: El factor de inducción de apoptosis humana: actividades reductasa y apoptótica
Doctorando: Raquel Villanueva
Universidad: Zaragoza
Facultad / Escuela: Ciencias
Fecha: En curso

En este apartado se han incluido una parte de actividad investigadora y académica que por los nuevos planes de estudios es necesario incluir en la formación de los estudiantes de la universidad. Estos son los trabajos fin de grado, los trabajos fin de máster y los trabajos académicamente dirigidos, que son muchas veces la primera formación en investigación que tienen los alumnos y que luego pueden seguir con la carrera investigadora.

Trabajos fin de grado:

Título: Sincronización en Redes Complejas: Teoría y Aplicaciones.
Doctorando: Andrea Girón Dolader
Director/es: Jesús Gómez Gardeñes
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: Septiembre de 2014
Calificación: 9

Título: Residuos clave en la oligomerización de FAD sintetasa
Estudiante: Nuria Moreno Berdejo
Director/es: Milagros Medina y María Sebastián
Universidad: Universidad de Zaragoza
Curso: 2013-14
Facultad: Facultad de Ciencias
Calificación: Sobresaliente

Título: Identificación del sitios de unión de potenciales inhibidores de la FAD sintetasa de patógenos para humanos mediante métodos de docking
Estudiante: David Vizarraga
Director/es: Milagros Medina y María Sebastián
Universidad: Universidad de Zaragoza
Curso: 2013-14
Facultad: Facultad de Ciencias
Calificación: Sobresaliente

Título: Caracterización mediante cinéticas rápidas en estado pre-estacionario del mecanismo cinético de las actividades riboflavina kinasa y FMN adenililtransferasa de la FAD sintetasa procariota.
Estudiante: Victor Gámez
Director/es: Milagros Medina y María Sebastián
Universidad: Universidad de Zaragoza
Curso: 2013-14
Facultad: Facultad de Ciencias
Calificación: Notable

Título: Estudio de las interacciones de FurA y otros reguladores transcripcionales implicados en el metabolismo del hierro y del nitrógeno

Estudiante: Blasco Lavilla, Nuria

Director/es: M^a Luisa Peleato

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14. Junio 2014

Facultad: Facultad de Ciencias

Calificación: Matrícula de Honor

Título del trabajo: Obtención y caracterización de proteínas Fur de microorganismos de interés biotecnológico y sanitario

Estudiante: Alvaro Artiga

Director/es: Laura Botello-Morte y María F. Fillat

Fecha de defensa: Septiembre 2014

Título del trabajo: Obtención y caracterización de mutantes bacterianos de interés biotecnológico y sanitario

Estudiante: Alejandro Asensio Calavia

Director/es: Andrés González y María Teresa Bes

Fecha de defensa: Junio 2014

Título: Aragón Open SocialData

Alumno: Alberto Alcolea Ursua

Director/es: Gonzalo Ruíz Manzanares

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 8 de julio de 2014

Calificación: 8.0

Título: Modelización computacional de nanoestructuras: introducción a la espectroscopia

Alumno: Andrés María Belaza

Director/es: José Luis Alonso y Alberto Castro *Universidad:* Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Curso 2013-2014

Calificación: 9.5

Título: Estructura electrónica en átomos, moléculas y nanoestructuras: Métodos de simulación computacional

Alumno: Adrián Gómez Pueyo

Director/es: José Luis Alonso y Alberto Castro *Universidad:* Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Curso 2013-2014

Calificación: 9.5

Título: "Efecto fenotípico de variantes polimórficas del mtDNA"

Doctorando: Isabel Franco Castillo (TFG)

Director/es: Patricio Fernández Silva / Raquel Moreno Loshuertos

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Septiembre 2014

Calificación: Sobresaliente

Título: "Uso de ácidos grasos Omega-3 en cáncer: una revisión sistemática"

Doctorando: Myrian González Álvarez (TFG)

Director/es: Raquel Moreno Loshuertos

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Septiembre 2014

Calificación: Notable

Título: "Estudio de la actividad y estabilidad del sistema OXPHOS en mutantes de AIF"

Doctorando: Marta Sandoval Torrientes (TFG)

Director/es: Patricio Fernández Silva / Raquel Moreno Loshuertos

Universidad: Universidad de Zaragoza

Proyectos fin de carrera

Título: Desarrollo de una plataforma para la elaboración de experimentos participativos de índole sociológica

Doctorando: Julio Alberto Arenere Mendoza

Director/es: Francisco Sanz García

Ponente: Javier Campos Laclaustra

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 25 de septiembre del 2014

Calificación: 9

Título: Caracterización genético-molecular de modelos celulares para el estudio de la enfermedad de Alzheimer.

Doctorando: Carmen Josefina Hernández Aínsa

Director/es: M^o Pilar Bayona Bafaluy y Nuria Garrido Pérez

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 10.07.2014

Calificación: Matrícula de Honor

Trabajos fin de máster

Título: Efectos de algunos ferrocenos sobre la supervivencia de bacterias y cianobacterias

Estudiante: Blasco Lavilla, Nuria

Director/es: M^a Luisa Peleato

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14. Junio 2014

Facultad: Facultad de Ciencias

Calificación: Sobresaliente

Título: Cristalización y difracción de rayos X para la resolución de estructuras de proteínas y complejos proteicos

Estudiante: José Emilio Casaos

Director/es: Marta Martínez Júlvez

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14

Facultad: Facultad de Ciencias/BIFI

Calificación: Sobresaliente

Título: Evaluación del efecto de un potencial inhibidor de las actividades mitocondrial y apoptótica del factor de inducción de apoptosis humano

Estudiante: Yohana Alegre Martínez

Director/es: Patricia Ferreira y Raquel Villanueva

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14

Facultad: Facultad de Ciencias

Calificación: Sobresaliente

Título: Identificación bioinformática de moléculas y proteínas con afinidad por los diferentes dominios del factor de inducción de apoptosis humano

Estudiante: Edgar Fernández Alonso

Director/es: Inmaculada Yruela y Patricia Ferreira

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14

Facultad: Facultad de Ciencias

Calificación: 9.3 Sobresaliente

Título: Residuos clave en el factor de inducción de apoptosis humano

Estudiante: Ione Medina Suárez

Director/es: Milagros Medina y Patricia Ferreira

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14

Facultad: Facultad de Ciencias/BIFI

Calificación: 8.6 Notable

Título: Rett Syndrome: Structural and Functional Characterization of MeCP2 and Search for Pharmacological Chaperones

Calificación: Matrícula de Honor

Estudiante: Pilar LanUNIZAR Morte

Director/es: Adrián Velázquez y Olga Abián

Universidad: Universidad de Zaragoza

Curso: 2013-14

Facultad: Facultad de Ciencias/BIFI

Calificación: Matrícula de Honor

Título: Estudios de las bases moleculares de la interacción entre anticuerpos monoclonales y lectinas con péptidos glicosilados

Doctorando: Jessika Valero González

Director/es: Ramón Hurtado Guerrero

Universidad: Zaragoza

Fecha de defensa: 25-09-14

Calificación: 9.0

Título: Clonaje, expresión y purificación del factor de virulencia NleB y de las isoformas T3, T7 y T10 de las GalNAc transferasas

Doctorando: Sofía Macías Redondo

Director: Ramón Hurtado Guerrero

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 09-07-2014

Calificación: 9,1

Título: Estudios moleculares del perfil de glicosilación de la GalNAcT2

Doctorando: Matilde de las Rivas González de Garay

Director/es: Ramón Hurtado Guerrero y Erandi Lira Navarrete

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 09 de Julio de 2014

Calificación: 9.0, Sobresaliente

Título: Sistema Experto de Probabilidad y Severidad en Red

Alumno: Gonzalo Ruíz Manzanares

Director/es: David Íñiguez Dieste

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: 10 de julio de 2014

Calificación: 8.0

Título: Sincronización cuántica, redes complejas y propuestas Experimentales

Doctorando: Ignacio Hermoso de Mendoza

Director/es: Jesús Gómez Gardeñes y David Zueco

Universidad: Universidad de Zaragoza

Fecha de defensa: Septiembre de 2014

Calificación: Sobresaliente

Título:

Doctorando: Joaquín Marco Brualla(TFM)

Director/es: Alberto Anel Bernal / Raquel Moreno Loshuertos

Universidad: Universidad de Zaragoza

Título: Terapia de fallos en el complejo IV mitocondrial mediante xenoexpresión de AOX.
Doctorando: Bárbara Ibarzo Yus (TFG)
Director/es: Patricia Meade Huerta / Patricio Fernández Silva
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: 10/07/2014
Calificación: Sobresaliente

Título: bases genéticas de la obesidad: nutrigenética, epigenética, metagenoma y obesidad.
Doctorando: Mariama Cire Bah (TFG)
Director/es: Patricia Meade Huerta
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: 24/09/2014
Calificación: Sobresaliente

Título: Metabolismo energético en células de túbulo proximal cultivadas en condiciones de flujo apical.

Doctorando: Beatriz Martín Gracia
Director/es: Patricia Meade Huerta / Ignacio Giménez López
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: 26/09/2014
Calificación: Sobresaliente

Título: La proteína AOX como terapia génica para enfermedades mitocondriales.

Doctorando: Julia Marquina Reglero (TFM)
Director/es: Patricia Meade Huerta / Patricio Fernández Silva
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: 25/09/2014
Calificación: Sobresaliente

Título: Estudio de factores que afectan a casos esporádicos de la enfermedad de Parkinson.

Doctorando: Sheila Sánchez García
Director/es: M^o Pilar Bayona Bafaluy y Nuria Garrido Pérez
Universidad: Universidad de Zaragoza
Fecha de defensa: 25.09.2014
Calificación: Matrícula de Honor

5.2. Becas de iniciación a la investigación

Durante este año, en el BIFI son 4 personas las que han disfrutado de una beca de iniciación a la investigación y un estudiante una beca de colaboración.

Se muestran a continuación citando también los proyectos en los que han participado:

Título proyecto: El formalismo geométrico de la Mecánica Cuántica y sus aplicaciones
Beneficiario: Diego Medrano Jiménez
Calificación: M. H.

Título proyecto: "Efecto fenotípico de variantes polimórficas del mtDNA"
Beneficiario: Pablo Montañés Agudo
Entidad financiadora: Ministerio Economía y competitividad
Fecha de comienzo: Septiembre 2014

Título proyecto: Formalismo geométrico de la Mecánica Cuántica y sus aplicaciones
Beneficiario: Diego Medrano Jiménez
Entidad financiadora: Mineco
Fecha de comienzo: Septiembre 2013-Junio 2014

Título proyecto: Formalismo geométrico de la Mecánica Cuántica
Beneficiario: Adrián Franco Rubio
Entidad financiadora: Mineco
Fecha de comienzo: Septiembre 2014

BECARIO DE COLABORACIÓN
- Pablo Montañés Agudo

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 2014.

Título: Técnicas Básicas de Laboratorio en Biología General. Programa de Planes de formación del Personal de Administración y Servicios de la Universidad de Zaragoza.
Duración: 30 horas totales, Patricia Ferreira 7.5 horas.
Fecha y Lugar de celebración: 26 de Mayo al 10 de Junio. Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza

Título: Ensayos de extracción e identificación de biomoléculas. Organizado por CIFE Huesca
Duración: 20 horas totales, Marta Martínez 2 horas y Raquel Villanueva 6 horas
Fecha y Lugar de celebración: 23-26 junio 2014. Facultad de Ciencias (Universidad de Zaragoza)

Título: Asignatura "Álgebra II" (problemas y prácticas), 1º curso del Grado en Física, Universidad de Zaragoza.
Duración: curso 2013-2014 (2º cuatrimestre)
Fecha y Lugar de celebración: curso 2013-2014 (2º cuatrimestre), Universidad de Zaragoza.

Título: Workshop on Policy recommendations to support Citizen Science in Europe. Citizen Cyberscience Summit.
Duración: 3 días
Londres. Febrero 2014.

Título: Open consultation for the White Paper on Citizen Science in Europe
Duración: 2 meses
Online

Título: "Algebras de operadores en física teórica de partículas"
Duración: 3,5 meses
Fecha y Lugar de celebración: agosto — noviembre, Universidad de Costa Rica (UCR)

Título: Biomolecular Interactions Analysis: From Molecules to Cells (EMBO Practical Course)
Duración: Miembro del Comité Organizador
Fecha y Lugar de celebración: 24-28 de noviembre de 2014

Título: Plant phylogenetics and population genetics
Duración: 40 horas
Fecha y Lugar de celebración: 16-20/06/2014, Tomsk State University, Tomsk (Rusia)

Título: Videoconferencias con escuelas de Portugal para diseminación del experimento "Cell spotting"
Duración: 1 hora cada una
Fecha y Lugar de celebración: 4 de febrero y 8 de mayo desde el BIFI con la Basic and Secondary School of Machico (Madeira), y la Secondary School Jaime Cortesão (Coimbra).

Título: CMMP Autumn School: Basics of Electronic Structure Calculations

Duración: 3 días

Fecha y Lugar de celebración: 12-14 de Noviembre de 2014, Tampere University of Technology, Tampere (Finlandia)

Título: 4 Lecciones sobre Teoría de Redes Complejas

Duración: 6 horas en total.

Fecha y Lugar de celebración: Escuela temática de redes complejas (Les Huouches), Francia, 7-18 Abril de 2014

Título: Complex Networks: Structure & Dynamics. SUPA Distinguished Visitors Programme.

Duración: 5 días

Fecha y Lugar de celebración: University of Aberdeen (Escocia). 13-17 Enero 2014.

5.4. Máster de Biotecnología Cuantitativa

Además del buen número de tesis, trabajos fin de grado, fin de licenciatura, de máster, durante 2014 se ha dado desde el instituto un impulso a la creación de un nuevo máster de la UZA definido directamente desde un instituto de investigación titulado Biotecnología Cuantitativa. El proceso de tramitación se encuentra esperando respuesta de la ANECA para su verificación y confiando poder comenzar en el curso 2015/2016.

Este Máster está diseñado para proporcionar a los egresados una formación muy completa. Para desempeñar esta tarea se cuenta con los profesores e investigadores del Instituto de Biocomputación y Física de los Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza (BIFI), así como con su infraestructura de laboratorios y clústeres de computación.

El BIFI es único a nivel nacional en reunir a investigadores de áreas de conocimiento como la Física, las Matemáticas, la Computación, la Bioquímica y la Biología Molecular y Celular. Esto nos sitúa en una posición óptima para impartir un Máster multidisciplinar en el que se integren aspectos de todas esas ramas del conocimiento, diferenciándose claramente de las posibilidades de otros centros nacionales e incluso internacionales. La singular naturaleza del BIFI lo convierte en el centro idóneo para impulsar un Máster focalizado en Biotecnología cuantitativa fundada en la combinación de técnicas instrumentales y metodologías experimentales y computacionales orientadas al desarrollo de herramientas o productos biotecnológicos y a la fundación de empresas biotecnológicas.

Las especiales características integradoras del Instituto permitirán, en caso de su verificación positiva por parte de la ANECA, proporcionar a los titulados una oferta docente casi única en el contexto nacional y bastante singular en el contexto internacional. La combinación transversal de enfoques biotecnológicos basados en la modelización y el experimento orientados a comprender el funcionamiento de la empresa biotecnológica es de gran novedad.

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 2014 87 colaboraciones, de las que 27 son con centros españoles y 60 internacionales, que, salvo alguna que no se ha incluido, se enumeran a continuación:

6.1.1. Colaboración con centros extranjeros:

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 Paolo, Sao Paolo, 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. Maria Barile
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: USDA Institute of Microbial and Biochemical Technology, Madison. USA
Investigador colaborador: Dr. Daniel Cullen
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Clark en Worcester (USA).
Investigador colaborador: Dr. David Hibbett
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Belgrade /Department of Pharmaceutical Chemistry
Investigador colaborador: Katarina Nikolić
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: CRCM, Cancer Research Center of Marseille
Investigador colaborador: Juan Iovanna
Tipo de colaboración: Realización de experimentos de forma compartida (celular en el BIFI y animal en Marsella)

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Center for Vaccinology Ghent University, Bélgica
Investigador colaborador: Philip Meuleman
Tipo de colaboración: Realización de trabajos en ratones para completar la experimentación necesaria para la explotación de una patente.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Cambridge/Department of Chemistry
Investigador colaborador: Gonçalo Bernardes
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Copenhagen/Medicine Department
Investigador colaborador: Henrik Clausen
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Simon Fraser University Copenhagen/Department of Chemistry
Investigador colaborador: David Vocadlo
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Picardie Copenhagen/Department of Chemistry
Investigador colaborador: Aloysius Siriwardena
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Dundee/ Molecular Microbiology
Investigador colaborador: Daan van Aalten
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Università di Roma "La Sapienza" / Dipartimento di Fisica
Investigador colaborador: Andrea Maiorano
Tipo de colaboración: colaboración proyecto Janus

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidade de Coimbra / Departamento de Química
Investigador colaborador: Dra. Maria Joao Moreno
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Biological Science / National University of Singapore
Investigador colaborador: Dr. Jayaraman Sivaraman
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Copenhagen / Department of Pharmacy
Investigador colaborador: Dr. Marco van de Weert, Dra. Lene Jorgensen
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Nacional Autónoma de México / Instituto de Química
Investigador colaborador: Dr. Enrique García-Hernández
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Center for Molecular Informatics, Department of Chemistry. University of Cambridge
Investigador colaborador: Andreas Bender
Tipo de colaboración: Aportación de datos sobre compuestos químicos que inducen muerte celular por apoptosis.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad LaTrobe. Melbourne. Dpto. Bioquímica
Investigador colaborador: Dr. Begoña Heras
Tipo de colaboración: Caracterización de la actividad reductasa de FurA

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Marsella. Laboratorio de Química bacteriana

Investigador colaborador: Dr. Amel Latifi

Tipo de colaboración: estudio transcriptómico de cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Ginebra. Dpto. de Botánica y Biología de plantas. Unidad de Microbiología

Investigador colaborador: Dr. Francois Barja

Tipo de colaboración: Microscopía electrónica (SEM y TEM) de cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Midwestern University. Glendale, Arizona. Dpto. Biochemistry

Investigador colaborador: Dr. Jose Angel Hernández

Tipo de colaboración: Determinación TSS furB

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Mitochondrial Biology Unit-MRC

Investigador colaborador: Massimo Zeviani

Tipo de colaboración:

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Queen Mary University of London

Investigador colaborador: Vito Latora, Lucas Lacasa y Enzo Nicosia

Tipo de colaboración: Elaboración de dos artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidade de Aveiro (Portugal)

Investigador colaborador: Nahid Azimi-Tafreshi y Sergei N. Dorogovtsev

Tipo de colaboración: Elaboración de un artículo de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Strathclyde (Glasgow, Escocia, UK).

Investigador colaborador: Ernesto Estrada

Tipo de colaboración: Elaboración de un artículo de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Università di Catania (Italia) *Investigador colaborador:* Mattia Frasca

Tipo de colaboración: Elaboración de varios artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidade Federal de Bahia (UFBA), Salvador (Brasil)

Investigador colaborador: Roberto Andrade y Suani Pinho

Tipo de colaboración: Elaboración de varios artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Nacional de Colombia.

Investigador colaborador: Rafael Hurtado

Tipo de colaboración: Elaboración de varios artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Antioquia (Medellín).

Investigador colaborador: Leonardo Pachón

Tipo de colaboración: Elaboración de un artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Aberdeen (Escocia, UK).

Investigador colaborador: Francisco Pérez-Reche

Tipo de colaboración: Elaboración de un artículo de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Ginebra. Dpto. de Botánica y Biología de plantas. Unidad de Microbiología

Investigador colaborador: Dr. Francois Barja

Tipo de colaboración: Microscopía electrónica (SEM y TEM) de la cianobacteria tóxica *Microcystis*

Centro de investigación/Departamento/Unidad: University of Dundee, Economic Studies

Investigador colaborador: Yu Zhu

Tipo de colaboración: Co-autoría de trabajo de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Tomsk State University (TSU) / Biology / BioClimLand

Investigador colaborador: Prof. Pilar Catalán

Tipo de colaboración: Profesora investigadora visitante en TSU; contrato de reclutamiento de científicos extranjeros del Gobierno de Rusia.

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: Universidad de Costa Rica / Departamento de Física

Investigador colaborador: José M. Gracia Bondía

Tipo de colaboración: Investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Saarland (Alemania) / PhysTheoChemie

Investigador colaborador: Michael Springborg

Tipo de colaboración: Investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Oxford / Atomic and Molecular Physics

Investigador colaborador: Christian Schilling

Tipo de colaboración: Investigación.

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

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Center for Molecular Informatics, Department of Chemistry. University of Cambridge
Investigador colaborador: Andreas Bender
Tipo de colaboración: Aportación de datos sobre compuestos químicos que inducen muerte celular por apoptosis.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad LaTrobe. Melbourne. Dpto. Bioquímica
Investigador colaborador: Dr. Begoña Heras
Tipo de colaboración: Caracterización de la actividad reductasa de FurA

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Marsella. Laboratorio de Química bacteriana
Investigador colaborador: Dr. Amel Latifi
Tipo de colaboración: estudio transcriptómico de cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Ginebra. Dpto. de Botánica y Biología de plantas. Unidad de Microbiología
Investigador colaborador: Dr. Francois Barja
Tipo de colaboración: Microscopía electrónica (SEM y TEM) de cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Midwestern University. Glendale, Arizona. Dpto. Biochemistry
Investigador colaborador: Dr. Jose Angel Hernández
Tipo de colaboración: Determinación TSS furB

6.1.2. Colaboraciones con centros españoles

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Unidad de Biofísica. (CSIC, UPV/EHU).
Investigador colaborador: Dr. Félix Goñi
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Complutense de Madrid / Departamento de Física I
Investigador colaborador: Víctor Martín Mayor, Luis Antonio Fernández
Tipo de colaboración: colaboración proyecto Janus + colaboración artículo

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Biofísica Vegetal y Fotosíntesis – Universidad de Sevilla
Investigador colaborador: Dr. Irene Díaz-Moreno
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Biofísica Vegetal y Fotosíntesis – Universidad de Sevilla
Investigador colaborador: Dr. José A. Navarro
Tipo de colaboración: Investigación

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Rovira i Virgili
Investigador colaborador: Alex Arenas, Sergio Gómez y Jordi Duch
Tipo de colaboración: Elaboración de varios artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Rey Juan Carlos de Madrid
Investigador colaborador: Javier Buldú, Irene Sendiña, Miguel Romance y Regino Criado
Tipo de colaboración: Elaboración de varios artículos de investigación.

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Zaragoza/ Departamento de Química
Investigador colaborador: Pedro Merino
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de La Rioja/ Departamento de Química
Investigador colaborador: Francisco Corzana
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de La Autónoma de Madrid/ Departamento de Microbiología
Investigador colaborador: Francisco Javier Arroyo
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Granada/ Departamento de Química Farmacéutica
Investigador colaborador: Ana Conejo
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Barcelona/ Departamento de Química
Investigador colaborador: Carme Rovira
Tipo de colaboración: Científica

Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI-Universidad de Zaragoza, Dpto Física de la materia condensada
Investigador colaborador: Dr. Fernando Falo Forniés
Tipo de colaboración: Desarrollo de un modelo computacional para la detección de TSS en cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: INA-Universidad de Zaragoza. Investigador colaborador: Dr. Ana Isabel Gracia Lostao
Tipo de colaboración: Estudio de la oligomerización de microcistina-LR

Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI-Universidad de Zaragoza. Línea de investigación: Interacción proteína-ligando. Grupo DGA: Protein targets
Investigador colaborador: Dr. Adrián Velázquez-Campoy
Tipo de colaboración: Estudio de la interacción de microcistina-LR con diversos metales

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Confederación Hidrográfica del Ebro
Línea de investigación: Departamento de análisis
Investigador colaborador: Dr. Luis Rodríguez
Tipo de colaboración: Estudio de la capacidad de degradación de lindano por Microcystis aeruginosa PCC7806

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Centro de Investigación y Tecnología Agroalimentaria (CITA)
Línea de investigación: Unidad de Sanidad Vegetal
Investigador colaborador: Dra. Ana Palacio
Tipo de colaboración: Estudio de la proteína Fur de Erwinia amylovora

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Laboratori d' Espectrometria de Masses/Dioxines/Contaminants Orgànics
Línea de investigación: Laboratorio de Espectroscopia de Masas

Investigador colaborador: Dr. Josep Caixac

Tipo de colaboración: Estudios de masas de microcistina marcada

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Dto de Química Inorganica. Universidad de Barcelona

Línea de investigación: Organometalicos

Investigador colaborador: Dra. Concepción López

Tipo de colaboración: Síntesis de compuestos para inactivación de Fur.

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

Investigador colaborador: Dr. Ignacio Luque

Tipo de colaboración: estudio de las funciones de FurB (Zur) en cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Miguel Hernández, Dpto Bioquímica

Investigador colaborador: Dr. José Luis Neira

Tipo de colaboración: Estudio de la estabilidad de mutantes del regulador FurA

Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI-Universidad de Zaragoza, Dpto Física de la materia condensada

Investigador colaborador: Dr. Fernando Falo Forniés

Tipo de colaboración: Desarrollo de un modelo computacional para la detección de TSS en cianobacterias

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto de Biología Molecular y celular de plantas. Universidad de Valencia

Investigador colaborador: Dr. José Miguel Mulet

Tipo de colaboración: Fenotipo de levaduras sobreexpresando reguladores transcripcionales bacterianos

Centro de investigación/Departamento/Unidad: IACS-Universidad de Zaragoza.

Investigador colaborador: Dr Ángel Lanas Arbeloa

Tipo de colaboración: Estudios con el regulador Fur de patógenos del aparato digestivo

Centro de investigación/Departamento/Unidad: INA-Universidad de Zaragoza. Investigador colaborador: Dr. Ana Isabel Gracia Lostao

Tipo de colaboración: Estudio de la interacción FurA-DNA mediante AFM

Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI-Universidad de Zaragoza. Dpto Bioquímica y Biología Molecular y celular. Línea de investigación: Interacción proteína-ligando. Grupo DGA: Protein targets

Investigador colaborador: Dr Javier Sancho Sanz

Tipo de colaboración: Estudio computacional del regulón de FurA. Estudios de cribado con Fur de patógenos

Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI-Universidad de Zaragoza. Línea de investigación: Interacción proteína-ligando. Grupo DGA: Protein targets

Investigador colaborador: Dr. Adrián Velázquez-Campoy

Tipo de colaboración: Análisis de la interacción de FurA con metales de mediante ITC

Centro de investigación/Departamento/Unidad: IACS-BIFI-Universidad de Zaragoza. Línea de investigación: Interacción proteína-ligando. Grupo DGA: Protein targets

Investigador colaborador: Dr Olga Abián

Tipo de colaboración: Estudio de mutantes de FurA mediante dicroísmo circular

Centro de investigación/Departamento/Unidad:

Universidad de Granada / Departamento de Física Atómica

Investigador colaborador: Jesús Sánchez Dehesa

Tipo de colaboración: Investigación.

6.2. Estancias en otros centros de investigación

6.2.1. Estancias de investigación en otros centros de investigadores del BIFI

Las estancias de investigación que se han realizado en centros extranjeros en el año 2014 se enumeran clasificadas por la duración de la estancia.

Estancias de >1 MES

Nombre del investigador: Pablo Piedrahita
Centro de investigación/Departamento/Unidad: MACSI- University of Limerick
País: Irlanda
Duración: 75 días
Fechas: 12 de Mayo – 27 de Julio de 2014
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno

Nombre del investigador: Patricio Fernández Silva
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Mitochondrial Biology Unit-MRC
País: (Cambridge) Reino Unido
Duración: 6 meses
Fechas: Julio-Diciembre

Nombre del investigador: Jesús Gómez Gardeñes
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidade Federal de Bahia, Salvador
País: Brasil
Duración: 9 semanas
Fechas: 3-27 de Mayo 2014 y 11 Octubre a 22 Noviembre 2014.

Nombre del investigador: Jose Alberto Molina
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Department of Economics, National University of Ireland
País: Irlanda
Duración: 1 mes
Fechas: Julio

Nombre del investigador: Carlos L. Benavides-Riveros
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Costa Rica.
País: Costa Rica
Duración: > 1 mes
Fechas: 25/02/2014 – 05/04/2014 y 22/10/2014 – 09/11/2014

Nombre del investigador: Carlos L. Benavides-Riveros
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Saarland.
País: Alemania
Duración: > 1 mes
Fechas: 15/04/2014 – 30/08/2014

Unidad: UCR
Investigador colaborador: José M. Gracia Bondía (con licencia en 2014)
Tipo de colaboración: Investigación y Administración

Estancias de 15 a 30 días

Nombre del investigador: Sergio Arregui
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Escuela temática de redes complejas (Les Huouches)

País: Francia
Duración: 12 días
Fechas: 7-18 de Abril de 2014

Nombre del investigador: Pilar Catalán
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Tomsk State University / Biology / BioClimLand
País: Rusia
Duración: 22 días
Fechas: 1-21/06/ 2014

Estancias de 0 a 15 días

Nombre del investigador: Carlos L. Benavides-Riveros
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Granada.
País: España
Duración: 0-15 días
Fechas: 16/01/2014 – 28/01/2014

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Università di Roma "La Sapienza" / Dipartimento di Fisica
Investigador colaborador: Andrea Maiorano
Tipo de colaboración: colaboración proyecto Janus
Nombre del investigador: Sergio Pérez-Gaviro
Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI
País: ITALIA
Duración: 7 días
Fechas: 18-24 septiembre 2014

Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad Complutense de Madrid / Departamento de Física I
Investigador colaborador: Víctor Martín Mayor, Luis Antonio Fernández
Tipo de colaboración: colaboración proyecto Janus + colaboración artículo

Nombre del investigador: Sergio Pérez-Gaviro
Centro de investigación/Departamento/Unidad: BIFI
País: ESPAÑA
Duración: 2 días
Fechas: 24-26 septiembre 2014

Nombre del investigador: Sandro Meloni
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Instituto ISI, Turin
País: Italia
Duración: 5 días
Fechas: 14-19 Julio

Nombre del investigador: Sandro Meloni
Centro de investigación/Departamento/Unidad: INSERM & UPMC, Paris
País: Francia
Duración: 3 días
Fechas: 17-19 Septiembre

Nombre del investigador: Pablo Piedrahita
Centro de investigación/Departamento/Unidad: EURANDOM- Eindhoven University of Technology
País: Holanda
Duración: 5 días
Fechas: 13-17 de Enero de 2014

Nombre del investigador: Pablo Piedrahita
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Escuela temática de redes complejas (Les Huouches)
País: Francia

Duración: 12 días
Fechas: 7-18 Abril de 2014

Nombre del investigador: Carlos L. Benavides-Riveros
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Friburgo.
País: Alemania
Duración: 0-15 días
Fechas: 07/08/2014 – 08/08/2014

Nombre del investigador: Carlos L. Benavides-Riveros
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Universidad de Oxford.
País: Inglaterra
Duración: 0-15 días
Fechas: 02/12/2014 – 18/12/2014

Nombre del investigador: Jesús Clemente Gallardo
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Dipartimento de Fisica, Università Federico II di Napoli
País: Italia
Duración: 6 días
Fechas: 10/11/2014-15/11/2014

Nombre del investigador: Jesús Clemente Gallardo
Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia: Departamento de Matematica, Universidade de Coimbra
País: Portugal
Duración: 5 días
Fechas: 01/12/2014-05/12 /2014

6.2.2. Estancias de investigación realizadas por investigadores en el BIFI

Las estancias de investigación que realizadas por investigadores extranjeros en el BIFI en el año 2014 se enumeran clasificadas por la duración de la estancia.

Estancias >1 MES

Nombre del investigador: Renata Almeida
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Laboratorio de Cristalografía de Proteínas Facultad de Ciencias Farmacéuticas del Ribeirao Preto, Universidad de Sao Paulo, Brasil.
Duración: 3 meses
Fechas: 11 de Enero de 2014 y el 9 de abril de 2014
Investigador responsable del BIFI: Patricia Ferreira

Nombre del investigador: Juan Carro
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: CIB-CSIC
Duración: 1 mes
Fechas: Mayo 2014
Investigador responsable del BIFI: Patricia Ferreira

Nombre del investigador: Slavica V. Filipić
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: University of Belgrade/Department of Pharmaceutical Chemistry
Duración: 21 días
Fechas: 14 Septiembre-4 Octubre 2014
Investigador responsable del BIFI: Milagros Medina

Nombre del investigador: José M. Gracia Bondía
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Cátedra von Humboldt, UCR
País: Costa Rica
Duración: 12 meses
Fechas: 1.1.2014 – 31.12.2014

Nombre del investigador: Dra. Maria Joao Moreno
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidade de Coimbra / Departamento de Química
Duración: > 1 mes
Fechas:
Investigador responsable del BIFI: Adrián Velázquez-Campoy

Nombre del investigador: Irene Villa Machío
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Real Jardín Botánico de Madrid (CSIC)
Duración: 3 meses
Fechas: 16/05/2014 -15/08/2014
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

Nombre del investigador: Valeria Shiposha
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Tomsk State University / Biology / BioClimLand
Duración: 35 días
Fechas: 05/11/2014 -10/12/2014
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

Nombre del investigador: Natalia Mezina
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Tomsk State University / Biology / BioClimLand
Duración: 35 días
Fechas: 05/11/2014 -10/12/2014
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

Nombre del investigador: Evgenii Baiakhmetov
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Tomsk State University / Biology / BioClimLand
Duración: 35 días
Fechas: 05/11/2014 -10/12/2014
Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

Nombre del investigador: Quantong Guo
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: School of Mathematics and Systems Science, Beihang University, Beijing 100191, China
Duración: 1 año
Fechas: 28/9/2014 hasta 28/9/2015
Investigador responsable del BIFI: Yamir Moreno

Nombre del investigador: Laura Lotero
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidad Nacional de Colombia (sede de Medellín). Departamento de Ciencias de la Computación y Decisión
Duración: 5 meses
Fechas: Febrero – Junio de 2014
Investigador responsable del BIFI: J. Gómez Gardeñes

Nombre del investigador: Heliana Arias Castro
Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Universidad Nacional del Valle (Cali, Colombia), Departamento de Matemáticas.
Duración: 4 meses
Fechas: Abril - Mayo 2014 y Septiembre – Octubre de 2014
Investigador responsable del BIFI: J. Gómez Gardeñes

Estancias de 15 a 30 días

Nombre del investigador: José M. Gracia Bondía

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Instituto Max Planck "Matemáticas en las Ciencias", Leipzig

País: Alemania

Duración: >15 días

Fechas: 3.10.2014 — 18.10.2014

Estancias de 0 a 15 días

Nombre del investigador: Marta G. Lete

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Unidad de Biofísica. (CSIC,UPV/EHU).

Duración: 6 días

Fechas: 10-18 Marzo 2014

Investigador responsable del BIFI: Milagros Medina

Nombre del investigador: Andrea Maiorano

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Università di Roma "La Sapienza" / Dipartimento di Fisica

Duración: 4 días

Fechas: 2-6 junio 2014

Investigador responsable del BIFI: Sergio Pérez Gaviro

Nombre del investigador: Dr Emma Aronson

Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: University of California-Riverside / Plant pathology and microbiology /

Duración: 10 días

Fechas: 12-22/05/2014

Investigador responsable del BIFI: Pilar Catalán

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 2014 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 anuncios de seminarios, congresos noticias, eventos, ofertas de trabajo así como una descripción de las áreas de investigación y trabajo del instituto. En 2014 se ha emprendido la tarea de mejora de la misma para hacerla más útil e intuitiva, así como aportarle un diseño más actual y creando otros espacios que se han valorado que aportarán valor añadido a la página.

Congreso anual BIFI

Del 22 al 24 de enero de 2014, tuvo lugar el VI Congreso Internacional 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.

El objetivo de este encuentro internacional es reunir a investigadores de cualquier disciplina donde se requieren exigentes simulaciones por ordenador como una herramienta fundamental de la investigación. El enfoque se centró en las técnicas (Monte Carlo, dinámica molecular, química cuántica, autómatas...) para que los investigadores de diferentes campos puedan aprender de los otros el enfoque y los métodos. Se prestó una atención especial a la interacción entre las técnicas de simulación y los nuevos paradigmas de computación de alto rendimiento.

Los principales temas que se tratarán durante la reunión: Modelado Molecular, Sistemas Biológicos, Física Computacional

Con este fin, el formato del Congreso incluyó sesiones plenarias y charlas cortas, además de presentación de posters. Las charlas cortas se seleccionaron entre las contribuciones de carteles.



Jornadas BIFI-entidades empresariales

Relaciones con clusters empresariales.

Desde el BIFI consideramos los clústeres empresariales como una herramienta integradora de las capacidades tecnológicas que ofrece el instituto y excelentes aliados estratégicos en materia de innovación. No sólo los clústeres empresariales, también las alianzas y grupos tecnológicos suponen un pilar clave en las actividades de innovación del instituto.

Además de la propia colaboración como medio integración investigación y empresa, los clústeres y asociaciones tecnológicas suponen una fuente de información para identificar y analizar las necesidades y tendencias del mercado, permitiendo a las líneas de investigación y desarrollo del instituto que están más próximas a la transferencia, adaptar su enfoque científico a los requerimientos empresariales.

Tabla de actividades

Entidad	Acción
MANUKET	<ul style="list-style-type: none"> Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics, Open Call de proyecto CloudSME (Cloud Simulations for Manufacturing and Engineering). Abril 2014. Alta como socios Junio 2014.
PLATEA	<ul style="list-style-type: none"> Participación en las Jornada Platea Junio 2014. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics, Alta como socios en Julio 2014
IDIA	<ul style="list-style-type: none"> Reunión para plantear una posible colaboración con General Motors para analizar datos relacionados con el proceso de pintura de vehículos. Presentación de la colaboración Universidad de Zaragoza e IDIA con el caso Aragón Region en el Research e-infrastructures and innovation clusters" workshop a través de Aragón Exterior
IK4	Realización de varias reuniones informativas sobre las capacidades del Instituto y valoración posibilidades de colaboración. Junio 2014, Julio 2014, Septiembre 2014
I JORNADA INTERCLUSTERS ARAHEALTH - BIOGA - BIOTECYL.	<ul style="list-style-type: none"> Promoción de un espacio para sumar avances y aprovechar las sinergias de la cooperación. Se presentaron varias intenciones de interés a través de Teresa Higuera que fue la persona que asistió. Parque Tecnológico de Boecillo, Boecillo (Valladolid). 20 de febrero de 2014



Elisa Cauhé en la presentación de las actividades del Instituto en la Joranda Manuket, Gijón, Abril 2014

La participación del Instituto en actividades con clústeres y asociaciones empresariales ha fomentado la participación búsqueda de nuevas fuentes de financiación. Dada la actual situación económica, el escenario más común ha sido la familiarización de las entidades para una búsqueda de proyectos nacionales y europeos donde encajar la temática de la colaboración en detrimento de una colaboración directa de la empresa con la Universidad a través de un contrato.

La labor de participación y comunicación con clústeres empresariales es una labor necesaria que da sus frutos a medio-largo plazo, por lo que esperamos poder realizar colaboraciones directas con algunas de sus empresas en un futuro gracias a un mayor acercamiento a realizar durante el próximo año.

Relaciones con empresas

Las relaciones con las empresas suponen, por una parte, una fuente de financiación para el instituto y por otra, un canal de transferencia y de innovación para conseguir que la investigación repercuta en beneficio de la sociedad.

Las empresas contactadas provienen de diferentes sectores, tanto electrónica como ganadería o energías renovables. Esta gran variedad de aplicaciones tiene su razón de ser en el carácter multidisciplinar del instituto y de las Tecnologías de la Información y la comunicación que hoy en día juegan un papel esencial en cualquier sector empresarial.

Tabla de actividades

Entidad	Acción
Electrónica Cerler	<p>Enero 2014. Reunión presencial. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics.</p> <p>Contrato para el desarrollo de un sistema análisis estadísticos y desarrollo de modelos de previsión de fallos para su sistema de producción de componentes electrónicos.</p>
EXOPOL	<p>Enero 2014. Reuniones en las que una vez planteada la necesidad/idea de la empresa se le ofrece desde el Instituto las posibles colaboraciones. Destacar la presencia en las reuniones de investigadores de las distintas áreas del Instituto: computación, bioquímica y física.</p>
EVERIS	<p>Enero 2014. Reunión presencial para la posibilidad de participar en un proyecto conjunto Retos Colaboración 2014.</p>
FCC	<p>Enero 2014, Madrid. Contacto en Jornada Interplataformas Retos Colaboración 2014</p> <p>Reunión presencial. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics para el desarrollo de un sistema de previsión de fallos para aerogeneradores.</p> <p>Participación conjunta en una convocatoria de nuevos socios para integración proyectos de simulación basados en infraestructura cloud.</p>
Navantia	<p>Febrero 2014. Tras el foro Transfiere de Malaga, múltiples contactos se realizaron para intentar realizar un proyecto de colaboración en torno a la previsión de fallos en motores.</p>
FUJITSU	<p>Marzo 2014. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics,</p>

SCHNELL SOFTWARE	Junio 2014. Participación conjunta en una convocatoria de nuevos socios para integración de proyectos de simulación basados en infraestructura HPC.
IKERLAN	Junio 2014. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics,
NABLADOT	Septiembre 2014. Participación conjunta en una convocatoria de nuevos socios para integración proyectos de simulación basados en infraestructura cloud.
INDITEX	Septiembre 2014. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics,
ARC Ingeniería	Septiembre 2014. Reunión presencial. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics aplicado a su estudio de ingeniería y simulaciones de estructuras.
Scien Analytics	Enero- Octubre 2014. Estudio de las posibilidades de colaboración en proyectos nacionales y europeos.
SIMPLY	Septiembre 2014. Reunión presencial. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics.
Scien Analytics	Enero- Octubre 2014. Estudio de las posibilidades de colaboración en proyectos nacionales y europeos.
Inycom	Enero- Octubre 2014. Estudio de las posibilidades de colaboración en proyectos nacionales y europeos.
General	Enero- Octubre 2014. Uso de la web y de Social Media (Twitter) para promocionar las actividades del Instituto y contribuir a una mayor visibilidad de la Universidad de Zaragoza en general.

Las reuniones y contactos con empresas han dado como fruto la firma de varios contratos directos para la realización de proyectos conjuntos o para el alquiler de máquinas y equipos, y por otro lado, suponen un conjunto de entidades dispuestas a colaborar en proyectos de investigación. Basándonos en nuestra experiencia y dada la actual crisis económica, podemos destacar que en la actualidad las empresas están más inclinadas a solicitar proyectos de financiación conjuntos que a realizar un contrato directo con centros de investigación.

Redes sociales

Finalmente destacamos también el uso que el instituto BIFI hace en las redes sociales (Facebook y principalmente Twitter) con la publicación de noticias y eventos e interactuando con otras personas y entidades relacionadas de la Universidad de Zaragoza. En Octubre de 2014, la cuenta de Twitter del BIFI es seguida por más de 700 personas.



Perfil de BIFI_Instituto en Twitter, Octubre 2014

Eventos de difusión

Los eventos de difusión hacen posible dar a conocer de forma rápida las principales actividades del instituto. Este tipo de actividades normalmente permiten un primer acercamiento a posibles interesados en las líneas del BIFI, en ocasiones demasiado breve como para poder profundizar en las necesidades reales de las empresas. Sin embargo sigue siendo una buena oportunidad para conocer diferentes empresas y sectores que de otra forma no sería abordables desde un punto de vista operativo.

Tabla de actividades

Entidad	Acción
Horizon 2020. Societal Challenge 2 - BIOECONOMY	13 de enero de 2014. PCTAD. Zaragoza Contactos con empresas del sector biotecnológico y agroalimentario.
Jornada Interplataformas Retos Colaboración 2014.	17 Enero 2014. Asistencia a Jornadas informativas sobre la convocatoria Retos Colaboración 2014. Encuentros bilaterales con las empresas: FCC, FICOSA, CIBER, AIJU y Centro Nacional de Biotecnología (CNB-CSIC)
Presentación Aragón Open Social Data	Febrero 2014. Presentación por parte del BIFI de su desarrollo llevado a cabo dentro del proyecto denominado Aragón Open Social Data. Empresas y emprendedores asistieron al evento con el fin de conocer su funcionamiento y poder integrarlo con sus desarrollos.
Foro Transfiere Málaga	12, 13 Febrero 2014. Asistencia a Foro Transfiere Málaga para la Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica. <ul style="list-style-type: none"> • Contacto con Navantia para el desarrollo de herramientas Big Data en construcciones navales.
Jornada con Fujitsu	20 de marzo 2014. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics. <ul style="list-style-type: none"> • Posibilidades de colaboración y patrocinio.
VII Foro de Innovación en Biomedicina: "Cesta de productos alimenticios cardio-saludables de Aragón"	25 de marzo de 2014. BioMed. Zaragoza
Jornada Manuket	Abril 2014. Presentación del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza. Presentación de las líneas de investigación del instituto y de

	capacidades de transferencia tecnológica: Infraestructuras de computación, Big Data y analytics
Evento Fostering Fostering Digital Industrial Innovation in Europe	Berlin, 17 y 18 de Junio 2014. Evento de innovación organizado por Innovalia en el marco de un proyecto europeo, con participación de diversas empresas y centros tecnológicos españoles.
European Science Open Forum	21-26 Junio Copenhague. Jornadas científicas destinadas a un amplio público con sesiones enfocadas a la innovación y a la búsqueda colaboradores.
H2020: Salud, cambio demográfico y bienestar. Jornada de Presentación de las Convocatorias 2015	8 de octubre de 2014. CDTI. Madrid Contactos con empresas del sector salud.
ICT 2014 Info Day	Florenia, 8-10 de Octubre de 2014. Jornadas de presentación de las convocatorias ICT de H2020, algunas de las cuales financiadas bajo la modalidad Instrumento Pyme.
Info Day PPP Factories of the Future	21 de octubre de 2014, Bruselas. Jornada de presentación de las convocatorias de liderazgo industrial organizada por consorcios público-privados (PPP).
Jornada de "Supercomputación y Almacenamiento hyperscale para HPC, Big Data y Cloud" con Fujitsu	27 Noviembre 2014, BIFI, Zaragoza. El BIFI en colaboración con las empresas FUJITSU e INTEL, organizó el evento sobre temas actualmente de interés en el mundo de la Computación.

La asistencia a eventos ha contribuido a aumentar la visibilidad del instituto y ha resultado en la oportunidad para conocer otros centros de investigación y sobre todo empresas que están interesadas en nuestro sector.

La participación en este tipo de eventos, no solo a nivel nacional, sino también en eventos organizados por la Comisión Europea, nos ha facilitado la búsqueda de posibles socios para colaborar en proyecto conjuntos. Además con la nueva política de H2020 y su insistencia en crear innovación para la Industria, multitud de propuestas van ligadas al Instrumento Pyme, una nueva vía de financiación a las empresas con posibilidad de colaboración para los centros tecnológicos y Universidad como agentes de innovación.



Elisa Cauhé, miembro OTRI del BIFI con Miguel Subirá de la empresa aragonesa PodoActiva y Nicola Fantini, CEO de la empresa suiza ScaleTools en el evento Fostering Digital Industrial Innovation in Europe en Berlín, junio de 2014.



Instituto Universitario de Investigación de Ingeniería de Aragón Universidad Zaragoza

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

Fujitsu Innovation Day
Jueves 20 de Marzo de 2014

El BIFI y el ISA de la Universidad de Zaragoza en colaboración con Fujitsu e Intel, tienen el placer de invitarle el próximo 20 de Marzo a la Jornada sobre Innovación, Programas Europeos y Green Computing. Compartiremos con usted los avances más relevantes que nuestras organizaciones están realizando en estos campos, así como, una mirada hacia los planes futuros.

Agenda

09:30 - 10:00	Recepción y bienvenida
10:00 - 10:20	Introducción Fujitsu Rosa Capel, Directora Comercial Sector Público Fujitsu
10:20 - 10:40	Computing the Ideal Future Adriano Galano, Director HPC & Big Data Fujitsu
10:40 - 11:00	Computación en el BIFI: proyectos, servicios e infraestructuras. Guillermo Lallina, Responsable infraestructuras de cálculo de BIFI
11:00 - 11:40	Café
11:40 - 12:00	ISA: HPC al servicio de la Investigación en Ingeniería Antonio Sanz, Responsable de sistemas de ISA.
12:00 - 12:40	Caminando juntos hacia el "Horizonte 2020" Marcel Valdemoros, Experto en C.E. Miembro High Level Groups CE
12:40 - 13:00	Intel
13:00 - 13:20	Green Computing. Eficiencia energética en los Data Centers Javier Lopez, Director Data Center de Fujitsu

Colaboran: FUJITSU, intel

Durante el evento se sorteará un escáner ScanSnap S1100

LUGAR DE CELEBRACION
Universidad de Zaragoza
Edificio I4+I
C/Mariano Esquivel s/n
50016, Zaragoza

Programa del evento Fujitsu Innovation Day, marzo de 2014.

Proyectos

La participación en proyectos europeos consorciados lleva a que durante el año 2014 investigadores del BIFI hayan participado en reuniones kick-off, workshops, etc. Alguna muestra se ilustra en las siguientes fotos:

El proyecto Neuromed está financiado por STC SUDOE y reúne a investigadores de España de Francia y de Portugal para abordar el desarrollo de métodos de diagnóstico temprano de Parkinson y de nuevas chaperonas farmacológicas para combatir la fenilcetonuria y la amiloidosis familiar no neuropática.



UE/EU-FEDER/ERDF



Profesor investigador Javier Sancho como beneficiario principal y el Vicerrector de Política Científica de esta universidad el Profesor Luis Miguel García Vinuesa

La principal actividad de comunicación que se ha realizado en el proyecto está relacionada con la prensa. Con el objetivo de difundir Neuromed, tras conocer la noticia de su concesión se presentó en el marco de la Universidad de Zaragoza, se realizó una nota de prensa y una rueda de prensa previa a la reunión de inicio de Neuromed. A la misma asistieron como representantes el Profesor Javier Sancho y el Vicerrector de Política Científica de la Universidad de Zaragoza, Luis Miguel García Vinuesa. Se incluyen la foto anterior de dicho evento y la repercusión que desencadenó en un buen número medios y en asociaciones.

<http://www.unizar.es/prensa?idnotaprensa=3762>

<http://unizar.es/prensa/noticias?id=3770>

<http://www.cadishuesca.es/>

<http://www.parkinsonaragon.com/category/sin-categoria/>

http://www.infogerontologia.com/nuevas_secciones/articulos_actualidad/2014/07_julio14.html

<http://www.uab.cat/web/sala-de-prensa/detalle-noticia-1345667994339.html?noticiaid=1345673872219>

<http://estaestuobra.es/fedesparkinson/2014/07/04/investigadores-espanoles-lideran-un-proyecto-europeo-sobre-el-parkinson/>

http://www.parkinsonasturias.org/archivos/464_317925200.pdf

A estos medios hay que añadir la presencia en un programa de RTVE y otro en la cadena autonómica Aragón TV. Igualmente aparecieron intervenciones en Radio Nacional, en la Cadena SER (Zaragoza) y en Radio Intereconomía (estamos intentando recuperar todos los vídeos y audios, pero de momento solo disponemos de la entrevista en Radio Nacional en formato MP3 por si necesitan disponer de ella)



Kickoff de Neuromed: 3 y 4 de julio

Relacionado con este proyecto el investigador principal por la Universidad de Zaragoza participó en E.S.PKU Conference 2014 en Croacia. Esta conferencia se celebra anualmente (<http://www.espku.org/en/>) y la del octubre pasado fue la número 28.. Tiene como característica que reúne a distintos actores del problema. Los científicos participan junto con pacientes y sus familias y por supuesto también está representada la industria.



Sozientice

Durante el 2014 Ibercivis es ya 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....

Ibercivis es una plataforma de ciencia ciudadana que permite a la sociedad a participar en la investigación científica de una manera directa y en tiempo real. Es un proyecto ibérico líder que tiene la intención de involucrar al mayor número de ciudadanos en la computación voluntaria y otros experimentos participativos.

Utiliza la capacidad de cálculo de la computadora en momentos de ocio para llevar a cabo las tareas derivadas de un proyecto de investigación.

Ibercivis atrae a los ciudadanos a las investigaciones iniciales y los convierte en participante en el proceso de la toma de la ciencia. Al mismo tiempo, proporciona la comunidad científica con una herramienta de cálculo de gran alcance. El ordenador se convierte en una ventana abierta a la ciencia, la creación de un canal para el diálogo directo entre los investigadores y la sociedad.

Entre los proyectos de ciencia ciudadana del BIFI, Socientize ha finalizado con éxito en el 2014. Este proyecto ha conseguido establecer las bases de la ciencia ciudadana en Europa, mediante la coordinación de todos los agentes implicados en el proceso de la ciencia ciudadana. El proyecto promueve el uso de las infraestructuras científicas compuestas, de recursos externos dedicados, incluidos los científicos profesionales y aficionados. Socientize ha establecido una red en la que los proveedores de infraestructuras y los investigadores reclutarán voluntarios de un público en general para llevar a cabo la ciencia en el país. Los ciudadanos individuales contribuyen a los estudios científicos con sus propios conocimientos y recursos que participan de una forma activa. Más información: <http://www.socientize.eu>



Memorandum of Understanding firmado entre Socientize y EU-BON en Berlin (el principal proyecto de bases de datos y redes de observación de biodiversidad de Europa)

Ibercivis es una plataforma de ciencia ciudadana que permite a la sociedad a participar en la investigación científica de una manera directa y en tiempo real. Es un proyecto ibérico líder que tiene la intención de involucrar al mayor número de ciudadanos en la computación voluntaria y otros experimentos participativos. Utiliza la capacidad de cálculo de la computadora en momentos de ocio para llevar a cabo las tareas derivadas de un proyecto de investigación.

Ibercivis atrae a los ciudadanos a las investigaciones iniciales y los convierte en participante en el proceso de la toma de la ciencia. Al mismo tiempo, proporciona la comunidad científica con una herramienta de cálculo de gran alcance. El ordenador se convierte en una ventana abierta a la ciencia, la creación de un canal para el diálogo directo entre los investigadores y la sociedad.

Otros eventos sociales de ciencia ciudadana

Ibercivis está presente en numerosos eventos y participación en prensa relacionados con la ciencia ciudadana. Citamos a continuación los más destacados:

International Space Apps Challenge, 12 y 13 de abril de 2014

Space Apps (<https://2014.spaceappschallenge.org/location/zaragoza/>) es un evento internacional centrado en la exploración espacial y que se celebrará simultáneamente en más de 80 ciudades todo el mundo, entre ellas, Zaragoza. El reto consiste en la realización de aplicaciones libres que resuelvan necesidades globales, tanto de la vida en Tierra como en el espacio: Resuelve en equipo uno de los 40 desafíos sobre Aplicaciones Espaciales, con temáticas variadas que van desde la tecnología en el espacio a los vuelos espaciales tripulados, la robótica o los asteroides.



La NASA lidera este evento global junto a una serie de colaboradores gubernamentales y más de 100 organizaciones locales. En este evento el proyecto Societize entrega un premio a la aplicación que fuera considerada ganadora.

Conferencia de Ciencia Ciudadana en Europa, 22/09/2014

En esta conferencia, SOCIETIZE presentó un documento clave para la política europea que será utilizado como un facilitador para el debate abierto: el nuevo Libro Blanco sobre la Ciencia Ciudadana para Europa, un conjunto de recomendaciones de política creado colectivamente por cientos de actores del Ciudadano comunidad científica, la búsqueda de nuevos caminos para mejorar la investigación y las innovaciones sociales que den respuesta a la necesidad del cambio de paradigma en el que estamos inmersos.

Aquí puede descargarse el libro blanco:

<http://www.societize.eu/?q=es/content/download-societize-white-paper>

Experimento Ser o No Ser D+Di

Dentro de las Jornadas De Divulgación Innovadora que tuvieron lugar en Zaragoza el 17 y 18 octubre, BIFI compartió la plataforma on line de inteligencia colectiva, Think Hub (<http://ic.bifi.es/>), para confeccionar los diez imprescindibles de la divulgación innovadora antes del 18 de octubre, último día de las jornadas.



D+I
el

Experimento Inteligencia Colectiva. 24 Octubre 2014

Fruto de la alianza entre la Obra Social La Caixa y la Fundación Ibercivis para fomentar la relación entre ciencia, arte y sociedad, en las instalaciones de CaixaForum de Zaragoza, estaba programado para 24 de octubre en llevar a cabo el experimento descrito a continuación, si bien no pudo realizarse un ataque hacker. Investigadores del BIFI de la Universidad de Zaragoza y de la Fundación Ibercivis, colaboración con la Obra Social La Caixa, llevarán a cabo "Colectiva-mente experimento" con un millar de estudiantes de 2º de Bachillerato de Aragón



el
por
en
de

La realización del experimento con estudiantes de Bachillerato sitúa a la comunidad de Aragón como referente en Europa en el estudio de la inteligencia colectiva. Se quería ver, en directo y en tiempo real, a través de la herramienta diseñada por el BIFI, "ThinkHub" (ic.bifi.es), el estudio de las interacciones que se producen en la red cuando alrededor de 1.000 alumnos trabajan de manera colaborativa, donde el pensamiento, la comunicación y la creatividad son los ejes principales. Se puede obtener más información en la web thinkhub.ibercivis.es

Reportaje de Ciencia Ciudadana en Antena 3 Noticias – A Fondo

No hace falta un gran ordenador ni ser un gran investigador para colaborar con la ciencia, nos cuenta Matias Prats en Antena 3 Noticias, dentro del reportaje de ciencia ciudadana. – A fondo .



Creciente Papel De La Ciencia Ciudadana, Entrevista A Fermin Serrano



Ciencia Ciudadana por Fermín Serrano - El investigador de ciencia ciudadana Fermín Serrano Sanz, el pasado mes de abril comentaba cómo el público influye cada vez más el diseño y desarrollo de nuevos productos y servicios.

Fermín Serrano Sanz es investigador en el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos de la Universidad de Zaragoza en España.

Habló sobre el creciente papel de la ciencia ciudadana que puede jugar ésta en proyectos de Horizon 2020 tras el proyecto SOCIENTIZE del 7FP (<http://www.paneuropeannetworks.com/H2/#60>)

Experimento de Música Colectiva Sonar + D 12.13.14 Junio 2014

BIFI, en el marco del proyecto europeo Socientize, presentó un "[experimento de música colectiva](#)" en el 21º Festival Internacional de Música Avanzada y New Media Art de Barcelona.

Para los investigadores de BIFI, uno de los retos de la sociedad de la información es entender la inteligencia colectiva y los mecanismos que se dan cuando un gran número de personas colabora y resuelve problemas conjuntamente. Es por ello que en MarkeLab se presentó Crowd-tivity, un experimento promovido la Universidad de Zaragoza junto con los músicos R de Rumba y Miguel Angel Mercadal, donde se investiga y promueve la participación colectiva para obtener datos sobre la red y la creatividad a través de la composición de canciones de los participantes.

Durante los tres días de Sónar+D, el público pudo crear patrones musicales a partir de un conjunto de audios que se encuentran en un secuenciador. Allí se pudo ver lo que otros están creando, mirar sus variaciones e incorporar las mejores partes a su pieza, simplemente cogiéndolas y arrastrándolas. No eran necesarios conocimientos musicales. Los investigadores contaban con que pasado un tiempo, las mejores pistas se propagaran por la red haciendo evolucionar el sistema. R de Rumba y Miguel Angel Mercadal interpretaron los resultados mezclando en directo los patrones que predominaron y *sonificaron* la evolución del sistema.



Entrevista en directo para Siglo21 de Radio3 en el puesto de CME en el sónar+D

Entrevista para la Web de la Comisión Europea en España - Proyecto Socientize-

Hace dos años el Instituto de Investigación de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza, inició Socientize, un proyecto para coordinar a todos los agentes implicados en el proceso de la ciencia ciudadana, un concepto innovador que involucra a los ciudadanos en los procesos científicos. Fermín Serrano es director ejecutivo de la Fundación

Ibercivis, entidad privada sin ánimo de lucro, creada para dinamizar la labor de colaboración con la investigación ciudadana y realizar actividades de divulgación y formación.

Un Español entre los Innovadores del Futuro según Ars Electronica

<http://Www.ElMundo.Es/Economia/2014/09/05/5408a2b3e2704e04188b458e.Htm>

Ciencia Remix (<http://cienciaremix.es/>)

El 9 de abril de 2014 el Vicealcalde de la I.C de Zaragoza, Fernando García Marín y el Vicerrector de Política Científica de la Universidad de Zaragoza, Luis Miguel García Vinuesa, inauguraron la exposición permanente basada en ciencia ciudadana y matemáticas



Inauguración Ciencia Remix, 9 abril 2014

Este nuevo concepto de espacio expositivo, colaborativo, didáctico y de ocio. Ubicado de forma permanente en Etopia Centro de Arte y Tecnología de Zaragoza, está dedicado a diferentes experimentos y zonas de juego sobre Ciencia Ciudadana, Matemáticas y Creatividad.

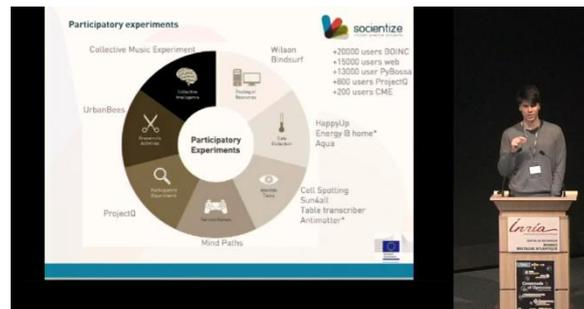
Premios Global Excursion

GLOBAL Excursion en un proyecto europeo para ayudar con la educación en temas científicos.

Sus objetivos básicamente son dos: por un lado, prever para enriquecer la enseñanza de la ciencia en las escuelas europeas, y por otro lado ofrecer a los investigadores y sus instituciones un canal de promoción a un público escolar. A través de un portal web central, llamado "Vish" que proporciona a los científicos, los profesores y sus alumnos, así como los responsables políticos un paquete de actividades, materiales y herramientas para permitir la integración de las infraestructuras electrónicas en los programas escolares.

ViSH es considerada una red social colaborativa en HTML5 para crear y compartir recursos con contenido educacional. ViSH conecta los recursos directamente con tus clases, ya sean físicas o virtuales.

En enero 2014 fueron publicados los ganadores de la competición que premiaba a las mejores excursiones en cada una de las diez categorías científicas establecidas. A través de este enlace <http://vishub.org/contest> se puede conocer a los ganadores y a las excursiones.



Charla en Inria-Rennes



Entrega de premios de los premios Prismas de A Coruña por parte del representante de Ibercivis

Anexo I. Tabla resumen Actividades BIFI 2014 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

BIFI-UNIZAR		DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI y PI		54	0	54
Investigadores: PFOR		0	22	22
PAS	Personal Técnico Lab y Apoyo a la investigación	2	9	11
	Administración	0	3	3
TOTAL UNIZAR		56	34	90

1.1.2. Miembros pertenecientes al IACS y al CSIC contabilizados EJC

Personal IACS	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
Investigadores	1	0	1
TOTAL IACS	1	0	1

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

1.1.3. Miembros pertenecientes al ARAID contabilizados EJC

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

1.1.4. Número total de miembros pertenecientes al Instituto contabilizados EJC

BIFI-UNIZAR		DOCTORES	NO DOCTORES	Total
PDI y PI		54	0	54
Investigadores: OA		7	0	7
Investigadores: PFOR		0	22	22
PAS	Personal Técnico Lab y Apoyo a la investigación	2	9	11
	Administración	0	3	3
TOTAL UNIZAR		63	34	97

1.2. Otros miembros no pertenecientes a ninguno de los Organismos anteriores

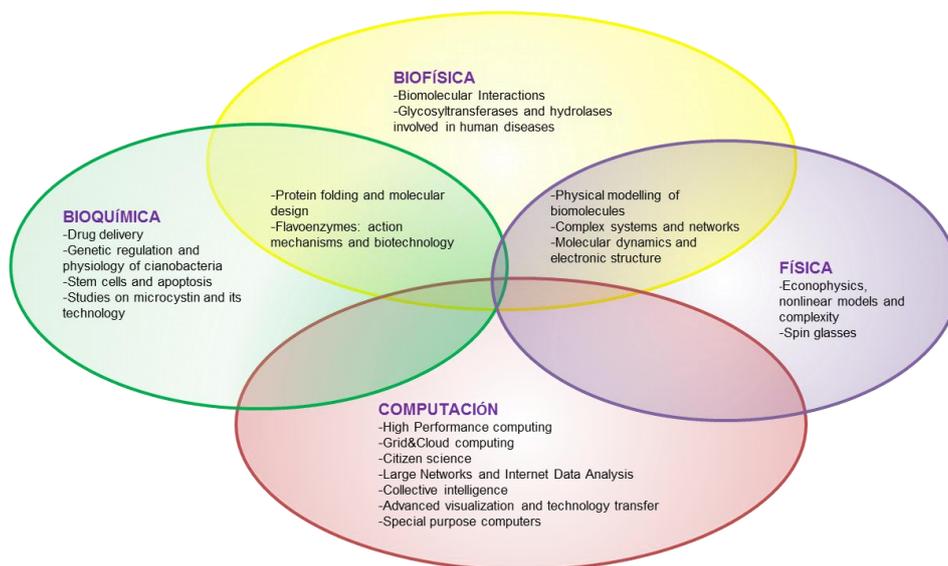
MIEMBROS COLABORADORES EXTERNOS	DOCTORES	NO DOCTORES	Total
	40	0	40
TOTAL MIEMBROS BIFI NO-UNIZAR	40	0	40

EJC=Equivalente en Jornada Completa

2. Líneas de investigación

Siguiendo con los objetivos generales que se plantearon en 2011 el BIFI en cuanto a mejora estratégica ha incrementado la inerrelación de la actividad científica entre las 4 áreas de investigación del instituto.

El esquema siguiente recoge dicha actividad conexa, 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 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 UNIZAR

FB_GA	FB_UZ	F_AU_CC	F_ES_CC	F_EU_CC	F_Empresas	Total
93.000	2.576.641*	1.177.603	4.187.830	2.420.669	683.083	11.138.826

*Incluye nóminas de personal de la UZA y ayuda a proyectos UZA

Leyenda

FB_GA=Financiación Basal (FB) Proporcionada en 2014 por el Gobierno de Aragón de Apoyo a los IUIs
FB_UZ= Financiación Basal (FB) Proporcionada en 2014 por la Universidad de Zaragoza (nóminas profesores)
FB_AU_CC= Financiación obtenida en 2014 en convocatorias autonómicas
FB_ES_CC =Financiación obtenida en 2014 en Convocatorias estatales
FB_EU_CC =Financiación obtenida en 2014 en Convocatorias europeas
FB_Empresas= Financiación obtenida en 2014 de empresas

3.2. Estructura de costes

G_Personal	G_Fungible	G_Rep	Viaj&Dieta	G_Generales	Total
845.624,17	243.688,80	110.438,64	190.958,28	911.541,32	2.302.251,21

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

Gastos generales	Informática	Libros
834.509,32	53.784,37	1.868.63

4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

4.1. Resumen de Publicaciones en Revistas Científicas

RangoISI	Nº public	%
≥10	6	7,69%
de 6 a 10	9	11,54%
de 5 a 6	3	3,85%
de 4 a 5	13	16,67%
de 3 a 4	12	15,38%
de 2 a 3	16	20,51%
de 1 a 2	8	10,26%
<1	6	7,69%
no ISI	3	3,85%
open access	1	1,28%
Nueva revista	1	1,28%
Nºpublicaciones 2014	78	

Índice de impacto reconocido según el Institute for Scientific Information

En Zaragoza, a 28 de enero de 2015


Fdo. Alfonso Tarancón Lafita
Director IUI BIFI

Zaragoza, a 28 de enero de 2015

