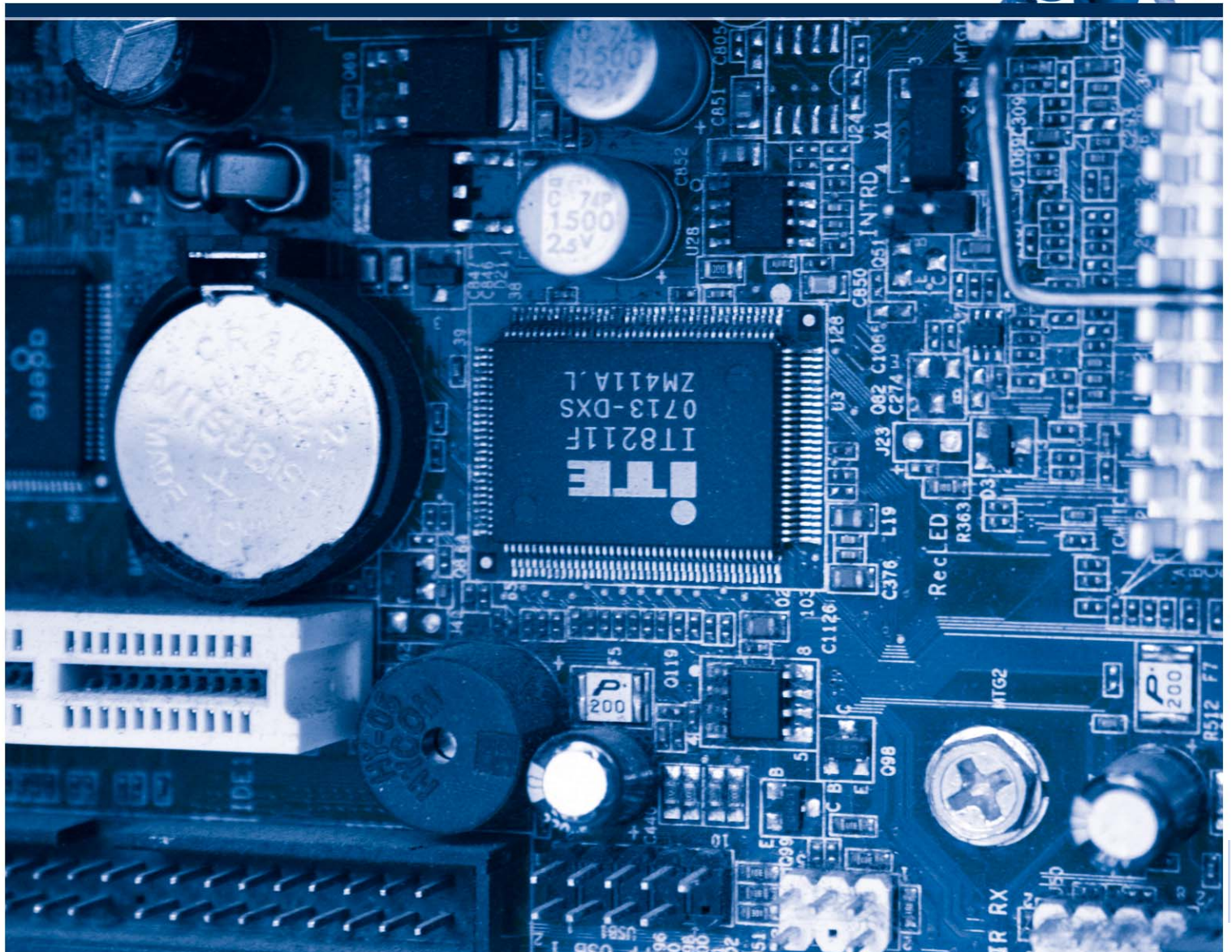
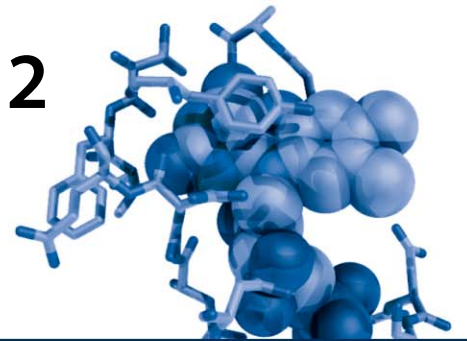




Instituto Universitario de Investigación  
**Biocomputación y Física  
de Sistemas Complejos**  
Universidad Zaragoza

# Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

## Memoria anual 2012



## Índice

|                                                                                                                                             |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos .....                                                                                | 5  |
| 1.1. Equipo directivo y divisiones o áreas de organización .....                                                                            | 5  |
| 1.2. Recursos humanos .....                                                                                                                 | 7  |
| 1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza .....                                                                                               | 8  |
| 1.2.2. Otros miembros que no pertenecen a la Universidad de Zaragoza.....                                                                   | 10 |
| 1.2.3. Captación de recursos: incorporación de investigador/personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2012 ..... | 12 |
| 1.2.4. Bajas y motivo .....                                                                                                                 | 12 |
| Apartado 2. Líneas de investigación.....                                                                                                    | 13 |
| 2.1. Estructura de investigación en BIFI .....                                                                                              | 14 |
| 2.2. Descripción de las áreas de investigación .....                                                                                        | 14 |
| 2.3. Área de Biología Molecular y Celular .....                                                                                             | 15 |
| 2.3.1. Células Madre y Apoptosis/Stem Cells and apoptosis. ....                                                                             | 15 |
| 2.3.2. Vehiculización de fármacos/Drug Delivery. ....                                                                                       | 18 |
| 2.3.3. Regulación Génica y Fisiología de Cianobacterias/Genetic regulation and physiology of cyanobacteria .....                            | 20 |
| 2.3.4. Microcistinas y su tecnología/Studies on microcystin and its technology.....                                                         | 24 |
| 2.3.5. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology.....                            | 26 |
| 2.3.6. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design .....                                               | 28 |
| 2.4. Área de Física.....                                                                                                                    | 30 |
| 2.4.1. Vidrios de spín/Spin glasses. ....                                                                                                   | 31 |
| 2.4.2. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomolecules.....                                                              | 33 |
| 2.4.3. Sistemas complejos y Redes/Complex Systems and networks .....                                                                        | 37 |
| 2.4.4. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic structure .....                                        | 41 |

|                                                                                                                                                 |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.4.5. Econofísica, modelos no-lineales y complejidad/Econophysics, nonlinear models and complexity .....                                       | 44 |
| 2.5. Área de Biofísica .....                                                                                                                    | 46 |
| 2.5.1. Plegamiento de proteínas y diseño molecular/Protein folding and molecular design .....                                                   | 46 |
| 2.5.2. Flavoenzimas: mecanismos de acción y biotecnología/Flavoenzymes: action mechanisms and biotechnology.....                                | 46 |
| 2.5.3. Glicosiltransferasas e hidrolasas implicadas en enfermedades humanas/Glycosyltransferases and hydrolases involved in human diseases..... | 47 |
| 2.5.4. Redes y sistemas complejos/Complex systems and networks .....                                                                            | 48 |
| 2.5.5. Modelos físicos de biomoléculas/Physical modelling of biomolecules.....                                                                  | 50 |
| 2.5.6. Dinámica molecular y estructura electrónica/Molecular dynamics and electronic struture .....                                             | 50 |
| 2.5.7. Interacciones biomoleculares/Biomolecular interactions .....                                                                             | 50 |
| 2.6.Área Computación.....                                                                                                                       | 52 |
| 2.6.1. High Performance Computing.....                                                                                                          | 52 |
| 2.6.2. Grid&Cloud Computing .....                                                                                                               | 54 |
| 2.6.3. Ciencia Ciudadana/Citizen science .....                                                                                                  | 55 |
| 2.6.4. Ordenadores dedicados/Special purpose computers.....                                                                                     | 57 |
| 2.6.5. Visualización avanzada y transferencia tecnológica .....                                                                                 | 59 |
| 2.6.6 Análisis de Información en Internet y Grandes Redes. Inteligencia Colectiva .....                                                         | 61 |
| 2.7. Infraestructuras del BIFI. ....                                                                                                            | 62 |
| 2.7.1. Infraestructuras de Física y Computación .....                                                                                           | 63 |
| 2.7.2. Infraestructuras Bioquímica y Biofísica .....                                                                                            | 77 |
| Apartado 3. Estructura de financiación: captación de recursos y destino de los mismos.....                                                      | 86 |
| 3.1. Financiación basal proporcionada por el Gobierno de Aragón de apoyo al BIFI .....                                                          | 87 |
| 3.2. Financiación basal proporcionada por la Universidad de Zaragoza .....                                                                      | 87 |
| 3.3. Financiación obtenida en convocatorias de carácter público y concurrencia competitiva: europeos, nacionales y europeos.....                | 88 |

|                                                                                                                  |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.3.1. Proyectos de carácter europeo .....                                                                       | 88  |
| 3.3.2. Proyectos de convocatorias nacionales .....                                                               | 88  |
| 3.3.3. Proyectos de convocatorias autonómicas.....                                                               | 90  |
| 3.3.4. Financiación obtenida de empresas.....                                                                    | 91  |
| 3.4. Estructura de gastos durante el año 2012 .....                                                              | 92  |
| Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica.....                                                  | 92  |
| 4.1. Proyectos de investigación.....                                                                             | 93  |
| 4.1.1. Proyectos de investigación de financiación pública y de concurrencia competitiva .....                    | 93  |
| Proyectos Financiados por entidades europeas en 2012.....                                                        | 93  |
| Financiados por entidades nacionales en 2012 .....                                                               | 95  |
| Financiados por entidades autonómicas en 2012.....                                                               | 101 |
| 4.1.2. Proyectos participados o liderados por investigadores pertenecientes al IUI financiados por empresas..... | 104 |
| 4.2. Publicaciones.....                                                                                          | 105 |
| 4.3. Comunicaciones a congresos .....                                                                            | 113 |
| Conferencias invitadas .....                                                                                     | 113 |
| Comunicaciones orales.....                                                                                       | 116 |
| Posters.....                                                                                                     | 118 |
| 4.4. Congresos, cursos y jornadas organizados por el BIFI.....                                                   | 121 |
| 4.4.1. Congresos, cursos y jornadas organizados por el IUI, talleres de trabajo.....                             | 121 |
| 4.5. Conferencias.....                                                                                           | 122 |
| 4.5.1. Organización de conferencias en las que participan Investigadores de otros centros de investigación.....  | 122 |
| 4.6. Patentes.....                                                                                               | 123 |
| 4.7. Empresas SPIN-OFF .....                                                                                     | 123 |
| Apartado 5. Formación.....                                                                                       | 124 |
| 5.1. Tesis dirigidas leídas en 2012 .....                                                                        | 124 |

|                                                                                             |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.2. Becas de iniciación a la investigación.....                                            | 125 |
| 5.3. Cursos impartidos.....                                                                 | 125 |
| Apartado. 6. Proyección Internacional.....                                                  | 127 |
| 6.1. Colaboraciones externas.....                                                           | 127 |
| 6.1.1. Colaboración con centros extranjeros: .....                                          | 127 |
| 6.1.2. Colaboraciones con centros españoles .....                                           | 131 |
| 6.2. Estancias en otros centros de investigación.....                                       | 132 |
| 6.2.1. Estancias de investigación en centros extranjeros de investigadores del BIFI .....   | 132 |
| 6.2.2. Estancias de investigaciónbrealizadas por investigadores extranjeros en el BIFI..... | 133 |
| Apartado 7. Interacción con la sociedad .....                                               | 135 |



## **Apartado 1. Estructura organizativa y recursos humanos**

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

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

Este instituto nace con una vocación generada por el interés del estudio de moléculas de interés biológico y de otros sistemas físicos complejos desde un punto de vista multidisciplinar y con el uso masivo de recursos de computación. A lo largo de la década de vida de esta entidad se han ido perfilando y añadiendo líneas afines, en función de resultados obtenidos, de nuevos proyectos, de incorporación de investigadores, etc.

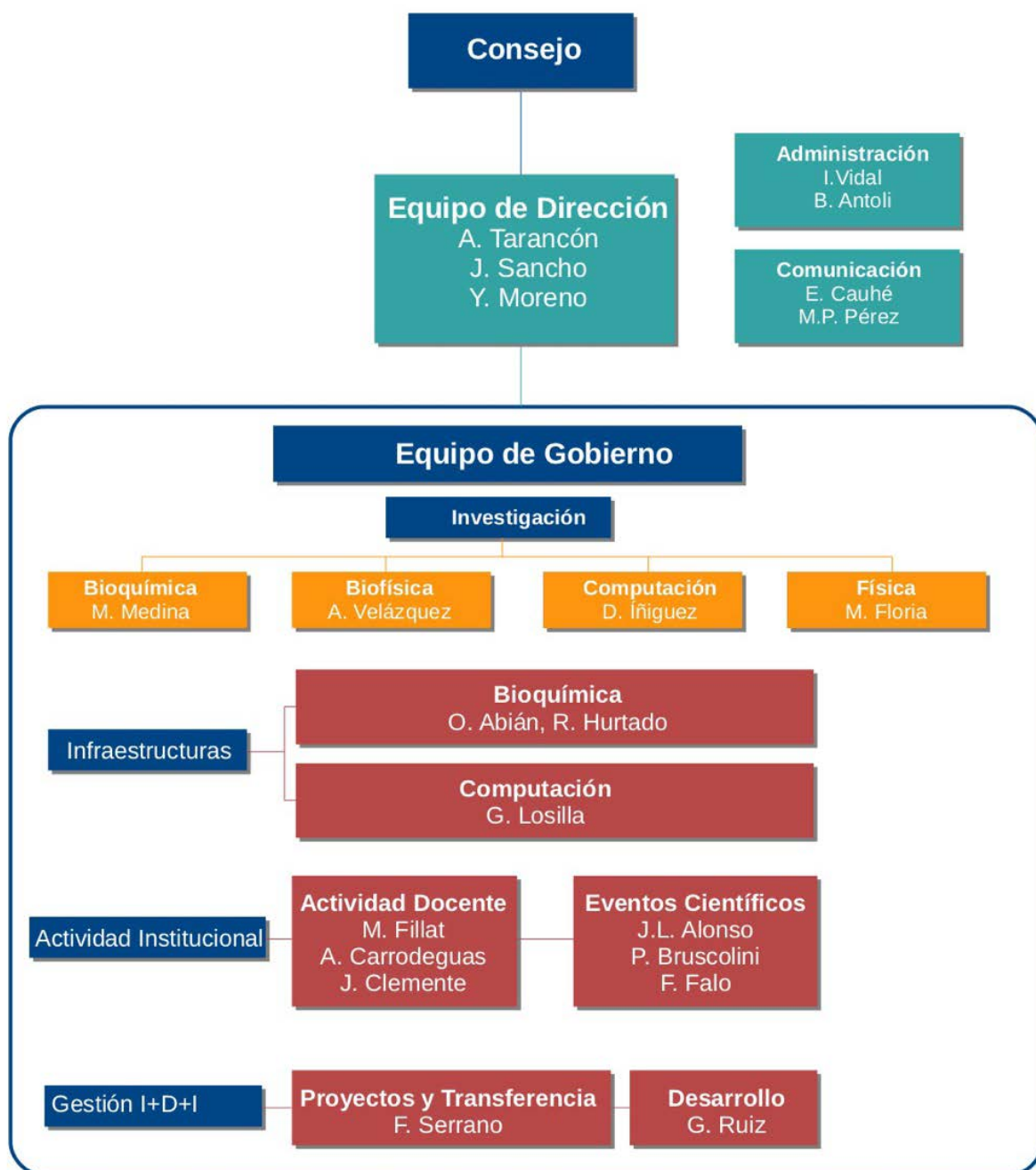
La cultura y los valores del BIFI incluyen distintos aspectos que cada año se intentan potenciar para obtener los mejores resultados:

- idoneidad interdisciplinar: reunir y establecer sinergias entre investigadores de distintos campos, especialmente computación, física y biología
- 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 del instituto es el que aparece en la siguiente imagen:





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

El Equipo de Gobierno se compone, además del Equipo de Dirección, por un representante responsable de cada una de las Áreas de Investigación y de los Servicios Transversales.

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.

En el esquema anterior se puede ver que en el organigrama del BIFI aparecen 3 divisiones o departamentos:



## 1.2. Recursos humanos

---

Los miembros del BIFI se clasifican en 3 tipologías:

Una gran mayoría que pertenece a la Universidad de Zaragoza. También tendrán esta consideración aquellos que pertenezcan a otras entidades y que desempeñen sus actividades en el Instituto. Como norma general y salvo excepciones justificables, en sus artículos figura su afiliación al BIFI en el 100% de los casos.

Otros miembros del BIFI pertenecen a otras entidades no universitarias 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. También algunos de los miembros asociados pertenecen a la Universidad de Zaragoza, aunque no cumplan los requisitos de afiliación necesarios para ser considerados miembros ordinarios y en los que figura su afiliación al BIFI en al menos un 50% de sus artículos.

Por otra parte hay miembros que comparten un proyecto, publicación o cualquier otra actividad con un miembro del BIFI en los últimos 5 años y no necesitan hacer constar necesariamente en sus trabajos de investigación su pertenencia al BIFI.



### 1.2.1. Personal Universidad de Zaragoza

Durante este año 2012 se pueden clasificar el personal del BIFI que pertenecen a la Universidad de Zaragoza según se ve en la tabla siguiente:

| <b>PDI</b>                        | <b>DOCTORES</b> | <b>NO DOCTORES</b> |
|-----------------------------------|-----------------|--------------------|
| Área de Bioquímica                | 13              | 0                  |
| Área de Biofísica                 | 5               | 0                  |
| Área de Física                    | 23              | 1                  |
| Área de computación               | 4               | 0                  |
| Sin área asignada                 | 0               | 0                  |
|                                   | <b>45</b>       | <b>1</b>           |
| <b>Investigadores</b>             |                 |                    |
| <b>Investigadores</b>             | <b>DOCTORES</b> | <b>NO DOCTORES</b> |
| Área de Bioquímica                | 0               | 20                 |
| Área de Biofísica                 | 0               | 4                  |
| Área de Física                    | 3               | 3                  |
| Área de computación               | 1               | 3                  |
| Sin área asignada                 | 0               | 0                  |
|                                   | <b>4</b>        | <b>30</b>          |
| <b>Personal técnico</b>           | <b>DOCTORES</b> | <b>NO DOCTORES</b> |
| Área de Bioquímica                | 1               | 3                  |
| Área de Biofísica                 | 0               | 0                  |
| Área de Física                    | 0               | 0                  |
| Área de computación               | 0               | 14                 |
| Sin área asignada                 | 2               | 2                  |
|                                   | <b>3</b>        | <b>19</b>          |
| <b>TOTAL MIEMBROS</b>             |                 |                    |
| <b>Área de Bioquímica</b>         | <b>14</b>       | <b>23</b>          |
| <b>Área de Biofísica</b>          | <b>5</b>        | <b>4</b>           |
| <b>Área de Física</b>             | <b>26</b>       | <b>4</b>           |
| <b>Área de computación</b>        | <b>5</b>        | <b>17</b>          |
| <b>Sin área asignada</b>          | <b>2</b>        | <b>2</b>           |
|                                   | <b>52</b>       | <b>50</b>          |
| <b>Personal de administración</b> |                 |                    |
| <b>Sin área asignada</b>          | <b>2</b>        |                    |
|                                   | <b>2</b>        |                    |
| <b>TOTAL BIFI UZ</b>              |                 |                    |
|                                   |                 | <b>102</b>         |

En cuanto a los miembros del BIFI pertenecientes a la Universidad de Zaragoza, destacamos que un 87% de los doctores del instituto es personal docente investigador (PDI), destacando que aproximadamente un 50% de ellos son del área de física. Sin embargo, la cantera de investigadores en cuanto a investigadores no doctores pertenecen en su mayoría al área de Bioquímica y Biofísica. Otro detalle a comentar es la especialización del personal técnico del BIFI, que incluyen expertos técnicos, diplomados, licenciados y doctores que aunque trabajan en distintas áreas, es en la de computación en la que se puede observar su mayor proporción. Estos técnicos, aunque se han incluido en personal técnico, en muchos de los casos y en cuanto a su actividad, pueden considerarse investigadores, ya que participan como responsables o coordinadores de líneas de investigación supervisados por un investigador en sentido estricto del BIFI.

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

|                               |                                   |                              |
|-------------------------------|-----------------------------------|------------------------------|
| Adrián Velázquez Campoy       | Javier Borge                      | Pascual López Buesa          |
| Ainoa Figuerola Conchas       | Javier López Lorente              | Patricia Ferreira Neila      |
| Alan Eduardo Viguera Ceballos | Javier Sancho Sanz                | Patricia Martínez Alonso     |
| Alberto Castro Barrigón       | Jessika Valero González           | Pedro García                 |
| Alejandro Rivero (PI)         | Jesús Clemente Gallardo           | Pedro J Martínez Ovejas      |
| Alejandro Tejeor Cubero       | Jesús Gómez Gardeñes              | Pierpaolo Bruscolini         |
| Alejandro Usón Ferrando       | Joaquín Sanz                      | Pilar Catalán                |
| Alessio Cardillo              | Jorge Monforte García             | Rafael Clavería              |
| Alfredo Ferrer Marco          | José Alberto Carrodegas           | Ramón Hurtado-Guerrero       |
| Alfonso Tarancón Lafita       | Villar/                           | Raquel Álvarez Baños         |
| Amalio Fernández-Pacheco      | José Luis Alonso                  | Raquel Villanueva Llop       |
| Pérez                         | José M <sup>a</sup> Gracia Bondia | Renata Almeida García Reis   |
| Ana Belén Lasiera             | José Manuel Carmona Martínez      | Renzo Torreblanca Gonzales   |
| Ana Sánchez Azqueta           | José Miguel Gil Narvió            | Ricardo López-Ruiz           |
| Ana Serrano Esteban           | José Vicente García Esteve        | Rubén Vallés                 |
| Andres Cruz Flor              | Juan Altarriba Farrán             | Sandro Meloni                |
| Andrés González Rodríguez     | Juan Carro Aramburu               | Sergio Pérez Gaviró          |
| Angela Rodríguez Cardenas     | Juan Jose Galano Frutos           | Silvia Baquedano Coarasa     |
| Angélica Ospina Correa        | Juan José Mazo Torres             | Sonia Arilla Luna            |
| Arturo Giner                  | Juan Martínez Olivan              | Sonia Vega                   |
| Beatriz Antolí                | Laura Botello Morte/              | Víctor A. Gopar              |
| Carlos Val                    | Laura Calvo Begueria.             | Víctor Polo Ortiz            |
| Carmen Pellicer-Lostao        | Laura Catalina Lopez Rodriguez    | Violeta Calvo Sein-Echaluze/ |
| Cristina Viñas Viñuales       | Laura Ceballos Laita.             | Vladimir Espinosa Angarica   |
| David Íñiguez                 | Luis Mario Floria                 | Yamir Moreno                 |
| Eduardo Lostal                | Luis Varona Aguado                | Yolanda Vergara              |
| Elisa Cauhé                   | Mari Carmen Ibañez                | Zuriñe Rozado Aguirre        |
| Emanuele Cozzo                | María Alejandra Nelo Bazán.       |                              |
| Emilio Lamazares Arcia        | María Arruebo                     |                              |
| Erandi Lira-Navarrete         | Maria Conde Gimenez               |                              |
| Erik Gracia                   | María Francisca Fillat Castejón/  |                              |
| Fermín Serrano                | María Luisa Peleato Sánchez       |                              |
| Fernando Falceto              | María Reyes perez gracia          |                              |
| Fernando Falo                 | María Sebastián Valverde          |                              |
| Francisco Sanz,               | María Teresa Bes Fustero          |                              |
| Gerardo Sanz Sainz            | Marta Asencio del Río             |                              |
| Gonzalo Ruiz Manzanares       | Marta Martínez Júlvez             |                              |
| Guillermo Losilla             | Milagros Medina Trullenque        |                              |
| Isabel Almudi                 | Miriam Alías Niño                 |                              |
| Isabel Clemente Arellano      | Noemí Bervis.                     |                              |
| Isabel Vidal                  | Olga Abián Franco                 |                              |
| Isaías Lans Vargas            | Pablo Echenique                   |                              |
| Isidro Cortés Ciriano         | Pablo García Risueño              |                              |
| Jaime Ibar                    | Pablo Piedrahita                  |                              |

### **1.2.2. Otros miembros que no pertenecen a la Universidad de Zaragoza**

Dentro de la multidisciplinariedad que prima en el IUI BIFI pueden destacarse también la multiterritorial en cuanto al centro de pertenencia de alguno de sus miembros. 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.

|                                 |                                                                                                                                       |
|---------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Jose-Luis López                 | Univ. Publica de Navarra                                                                                                              |
| Luis Antonio Fernández Pérez    | Universidad Complutense de Madrid                                                                                                     |
| Juan Jesús Ruiz Lorenzo         | Universidad de Extremadura                                                                                                            |
| David Yllanes                   | Universidad Complutense de Madrid                                                                                                     |
| Mario Guidetti                  | Univesrità di Ferrara (Italia)                                                                                                        |
| Beatriz Seoane                  | Universidad Complutense de Madrid                                                                                                     |
| Celerino Abad Zapatero          | Pharmaceutical Biotechnology Molecular Biology. University of Illinois. Chicago                                                       |
| Olga Abián Franco               | IACS. Zaragoza                                                                                                                        |
| Alejandro Arenas Moreno         | Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial. Universidad Rovira y Virgili. Tarragona                                         |
| Xabier Arias Moreno             | Bioquímica y Biología Molecular. Universidad de Zaragoza                                                                              |
| Liliana Arrachea                | Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Departamento de Física. Universidad de Buenos Aires. 1428 Buenos Aires. ARGENTINA           |
| Adrian Budini                   | Argentina                                                                                                                             |
| Marta Bueno Fernández           | Computational Biology University of Pittsburgh. Pittsburgh, PA (USA)                                                                  |
| Javier Burguete Tolosa          | Estacion Experimental Aula Dei. CSIC. Zaragoza                                                                                        |
| Xavier Horacio Calbet Alvarez   | Institution: EUMETSAT, Alemania. EUMETSAT (Organización Europea para la Explitación de Satélites Meteorológicos) Darmstadt (Alemania) |
| Ivan Calvo Rubio                | Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid                                                             |
| Isabel Campos Plasencia         | Instituto de Física de Cantabria CSIC. Santander                                                                                      |
| Luis Alberto Campos Prieto      | CSIC. Centro de Investigaciones Biológicas (CIB) - CSIC . Madrid                                                                      |
| Francisco Castejón Magaña       | Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid                                                             |
| Guillermo Chiappe               | Física Aplicada. Universidad de Alicante. Alicante                                                                                    |
| Bruno Contreras Moreira         | Estación Experimental Aula Dei. CSIC. Zaragoza                                                                                        |
| Nunilo Cremades Casasin         | Department of Chemistry. University of Cambridge. UK                                                                                  |
| Santiago Cuesta López           | École Normale Supérieure de Lyon. Lyon (Francia)                                                                                      |
| José Antonio Cuesta Ruiz        | Departamento de Matemáticas. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid                                                                 |
| Andrés de Bustos Molina         | CIEMAT. Madrid                                                                                                                        |
| Albert Díaz Guilera             | Física Fundamental. Universidad de Barcelona. Barcelona                                                                               |
| Pep Español Garrigós            | FRIAS. Universität Freiburg. Freiburg. Alemania                                                                                       |
| Luis Antonio Fernández          | Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid                                                                             |
| Juan Fernández - Recio          | Barcelona Supercomputing Center. Universidad de Barcelona. Barcelona                                                                  |
| Ramón Fernández Alvarez-Estrada | Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid                                                                             |
| Susana Frago Moreno             | Sir William Dunn School of Pathology. University of Oxford. U.K.                                                                      |
| Luis García Gonzalo             | Física. Universidad Carlos III. Madrid                                                                                                |
| Mauricio Garcia Mateu           | Centro de Biología Molecular Severo Ochoa. Universidad Autónoma de Madrid. Madrid                                                     |
| Guillermína Goñi Rasía          | Centro Nacional Investigaciones Oncológicas. CNIO. Zaragoza                                                                           |
| Antonio Gordillo Guerrero       | Universidad de Extremadura. Badajoz                                                                                                   |
| José Gracias Brudía             | Química. Universidad de Salerno. Salerno (Italia)                                                                                     |

|                              |                                                                                                    |
|------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Francisco Guinea             | Instituto de Ciencia de los Materiales de Madrid. CSIC. Madrid                                     |
| Beatriz Ibarra               | Química Física. Universidad de Granada. Granada                                                    |
| Alfonso Jaramillo            | Laboratoire de Biochimie. École Polytechnique. Paris, FRANCE                                       |
| Sergio Jiménez Sanjuan       | Scien Analytics                                                                                    |
| Violeta Lamarca Gay          | Département de Physiologie Cellulaire et Métabolisme.. Centre Médical Universitaire. Geneve. Suiza |
| Daniel Lopez Bruna           | Laboratorio Nacional de Fusión (Unidad de Teoría). EURATOM-CIEMAT. Madrid                          |
| José Luis Lopez García       | Matematica Aplicada. Universidad Pública Navarra. Navarra                                          |
| Jon Lopez Llano              | Lima (Peru)                                                                                        |
| Enrique Louis Cereceda       | Física Aplicada. Universidad de Alicante. Alicante                                                 |
| Andrea Maiorano              | Universidad de Ferrara. Italia                                                                     |
| Michel Mareschal             | ZCAM.                                                                                              |
| Joaquín Marro Borau          | Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional. Universidad de Granada. Granada              |
| Beatriz Martín Luna          | OPERON S.A. ZARAGOZA                                                                               |
| Víctor Martín Mayor          | Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid                                          |
| Luis Martín Moreno           | CSIC. Universidad de Zaragoza. Zaragoza                                                            |
| Joaquín Molla Lorente        | Unidad de Materiales. CIEMAT. Madrid                                                               |
| Antonio Muñoz Sudupe         | Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid                                          |
| Carlos Naón                  | Universidad de la Plata.Argentina                                                                  |
| Fernando Naranjo Mayorga     | Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia. Tunja-Bocaya (Colombia)                          |
| José Luis Neira              | Química Física. Universidad Miguel Hernández. Elche                                                |
| Isabel Nogués González       | Instituto di Biologia Agro-ambientale e Forestale IBAF. CNR. Roma (Italia)                         |
| Antonio Parody               | Química Física. Universidad de Granada. Granada                                                    |
| Silvia Pellicer Espuña       | Zurko Research. Centro Regional de Investigaciones Biométicas. CRIB. Albacete                      |
| José Ramón Peregrina Bonilla | Science. University of St Andrews. Zaragoza                                                        |
| Sergio Pérez Gaviro          | Dipartimento di Fisica. Università la Sapienza. Roma (Italia)                                      |
| Julia Poncela Casasnovas     | Technological Institute. Northwestern University (Evanston, Illinois). Illinois                    |
| Diego Prada Gracia           | Freiburg Institute for Advanced Studies. School of Soft Matter Research. Freiburg (Alemania)       |
| Antonio Rey Gayo             | Química Física. Universidad Complutense de Madrid. Madrid                                          |
| Angel Rubio Secades          | Dpto. Fisica Materiales. Universidad del Pais Vasco                                                |
| Juan Jesús Ruiz Lorenzo      | Física. Universiudad de Extremadura. Badajoz                                                       |
| Ángel Sánchez Sánchez        | Matematica Aplicada. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid                                      |
| José M. Sánchez-Ruiz         | Química Física. Universidad de Granada. Granada                                                    |
| José María Sancho Herrero    | Materia Condensada. Universidad de Barcelona. Barcelona                                            |
| Jaime Sañudo Romeu           | Facultad de Ciencias. Universidad de Extremadura. Badajoz                                          |
| Daniele Sciretti             | Barcelona Media. Barcelona                                                                         |
| Alvaro sebastian Yagüe       | Laboratorio de Biología. Estacion Experimental Aula Dei. Zaragoza                                  |
| Jesús Tejero Bravo           | Lerner Research Institute. Cleveland EEUU                                                          |
| Carlos Ungil                 | CERN. Ginebra                                                                                      |
| José Luis Velasco Garasa     | CIEMAT. MADRID                                                                                     |
| Paolo Verrocchio             | Física Teórica. Universidad Complutense de Madrid. Madrid                                          |
| Inmaculada Yruela Guerrero   | Aula Dei.CSIC Zaragoza                                                                             |
| David Zueco Lainez           | Institut für Physik. Universität Augsburg. Germany                                                 |
| Beatriz Herguedas Frances    | Neurobiology Division. MRC Laboratory of Molecular Biology, CB2 0QH Cambridge, UK                  |

### **1.2.3. Captación de recursos: incorporación de investigador / personal técnico de laboratorio que ha captado el IUI durante el año 2012**

---

El año 2012 respecto a la captación de recursos ha dado como balance en el instituto BIFI muy positivo, con la contratación de 37 personas para realizar actividades científicas, técnicas o de administración. Se han realizado 8 nuevas contrataciones de personal investigador, 27 personal técnico especializado y una de administración, distribuidas en las 4 áreas de investigación del BIFI.

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

Se puede citar que tres de las contrataciones de personal técnico especialista se realizaron a través de convocatorias de concurrencia competitiva, una ayuda concedida para la contratación por el Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) y 2 por el Gobierno de Aragón. Otro dato importante a tener en cuenta es que se han incorporado 6 nuevos investigadores predoctorales con ayudas concedidas tanto del Gobierno de Aragón como del Ministerio de Economía y Competitividad.

A las anteriores incorporaciones, durante el año 2012 han realizado su proyecto de Máster 9 alumnos del Máster en Biología Molecular y Celular en 4 líneas de investigación principalmente: 3 con la Profesora Milagros Medina, 3 con el Profesor Javier Sancho, 2 con la doctora Olga Abián y 1 con el Dr. Adrián Velázquez.

### **1.2.4. Bajas y motivo**

---

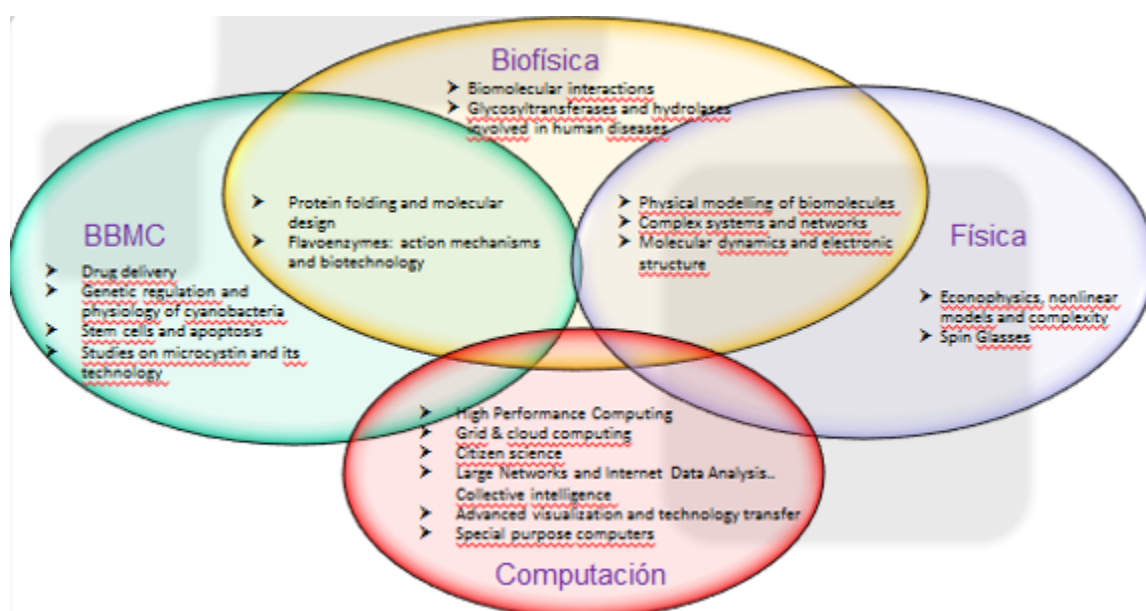
En el 2012 en cuanto a bajas no se ha visto modificado en gran medida el personal del Instituto BIFI. En cuanto a personal técnico se ha producido dos bajas a mediados de 2012, una en el departamento de Comunicación y otra en el departamento de Gestión de la I+D, por voluntad propia. En otros casos las bajas se han producido por finalización de la obra o servicio para las que se realizó la contratación.

En cuanto a bajas solicitadas como miembros del BIFI, se ha producido la del Catedrático Carlos Gómez-Moreno, por motivos de incompatibilidad con su pertenencia a otro instituto.

## Apartado 2. Líneas de investigación

Cumpliendo con uno de los objetivos generales del BIFI para el 2012 planteados como mejora estratégica respecto al año 2011 se ha conseguido interrelacionar la actividad científica entre las 4 áreas de investigación del instituto.

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



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

| Tipología reconocida | Área       | REF   | Nombre del Grupo                              |
|----------------------|------------|-------|-----------------------------------------------|
| <b>Consolidado.</b>  | Exp. y Mat | E24/3 | Biocomputación y Física de Sistemas Complejos |
| <b>Consolidado</b>   | Biomédicas | B89   | Protein Targets                               |
| <b>Consolidado</b>   | Biomédicas | B18   | Biología Estructural                          |
| <b>Consolidado.</b>  | Exp. y Mat | E19   | Física Estadística y No Lineal                |
| <b>Consolidado.</b>  | Exp. y Mat | E24/1 | Física Matemática y Teoría de Campos          |

El director del Instituto BIFI, Alfonso Tarancón es investigador principal del grupo consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos; el subdirector, Javier Sancho del grupo consolidado Protein Targets y el Secretario, Yamir Moreno del de Física Estadística y No lineal.



## 2.1. Estructura de investigación en BIFI

---

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

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

## 2.2. Descripción de las áreas de investigación

---

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



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 de intersección de conjuntos).

La investigación en colaboración en BIFI ha incrementado durante 2012 según los patrones acertados y 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.

Desde el año 2009, a través de proyectos intramurales que se emprenden cada año desde el BIFI. Durante el 2012 se han financiado 4 proyectos de este tipo que han implicado a distintas líneas de investigación del instituto conjuntamente. Los temas de estos proyectos han sido:

- ✓ *Interacciones proteína-proteína implicadas en cáncer pancreático*
- ✓ *Desarrollo de un modelo de mecánica estadística para la predicción de estabilidad y cinética de proteínas*
- ✓ *Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad*
- ✓ *Movilidad*

Las líneas de investigación del BIFI desarrolladas en 2012 y que pretenden continuar en 2013, 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 van a primar en un futuro cercano, la ciencia excelente, el liderazgo industrial y los retos sociales.

### **2.3. Área de Bioquímica y Biología Molecular y Celular**

---

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

**Responsable de Área:** Milagros Medina.

#### **Líneas de Investigación:**

|                                                           |                             |
|-----------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 2.3.1. Células Madre y Apoptosis                          | IP. José Alberto Carrodegas |
| 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 2012**

##### **2.3.1. Células Madre y Apoptosis / Stem Cells and apoptosis. IP. José Alberto Carrodegas**

---

#### **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.

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

Utilizamos principalmente el laboratorio de biología molecular, el laboratorio de cultivos celulares, el lector multimodo (fluorescencia, luminiscencia y absorbancia) y el microscopio invertido de fluorescencia. Actualmente estamos comenzando a utilizar *light scattering*, *dicroísmo circular* y *calorimetría*.

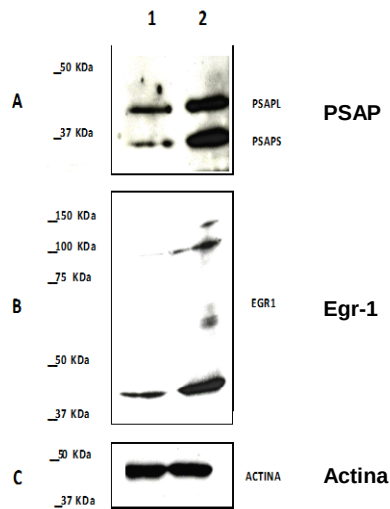
### Proyectos relacionados:

| Título proyecto                                                                                                                            | Entidad Financiadora             |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|
| Identificación de moléculas bioactivas en células troncales mediante cribado funcional de quimiotecas: herramientas para terapias seguras. | Ibercaja/Universidad de Zaragoza |
| Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad                   | BIFI                             |
| Análisis del efecto en la proliferación de células in-vivo e in-vitro de un nuevo producto.                                                | OTRI                             |

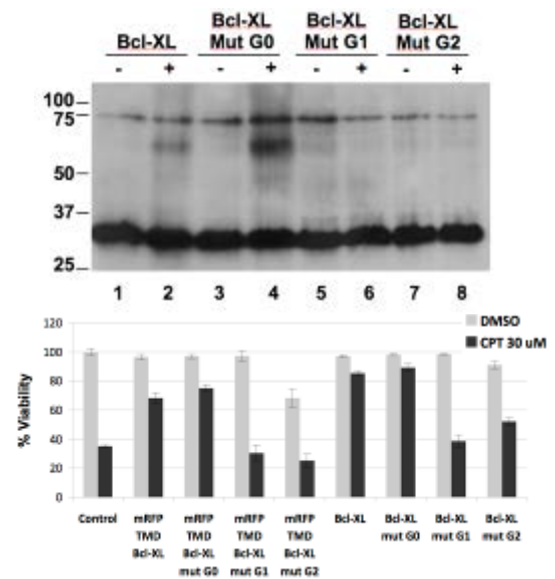
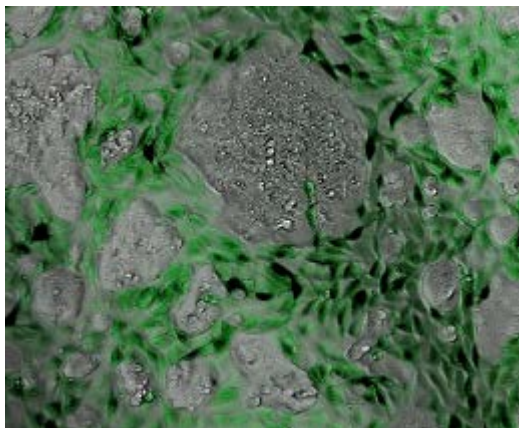
### Equipo de investigación:

| Investigador responsable /coordinador                                            | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
|----------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| José Alberto Carrodeguas Villar/Profesor Contratado Doctor Investigador          | B89-Grupo Protein Targets                     |
| Investigadores implicados                                                        | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
| Angélica Ospina Correa (Becaria predoctoral Banco Santander/Unizar               | B89-Grupo Protein Targets                     |
| María Alejandra Nelo Bazán. Becaria predoctoral Fundación Ayacucho de Venezuela. | B89-Grupo Protein Targets                     |
| Alan Eduardo Viguera Ceballos. Becario predoctoral CONACYT, México.              | B89-Grupo Protein Targets                     |

### Resultados y conclusiones destacados en 2012



- Identificación de Egr-1 como activador transcripcional de PSAP/Mtch1. La gráfica muestra el aumento de expresión de Mtch1 al sobreexpresar Egr-1.



- Identificación de aminoácidos en el dominio transmembrana de Bcl-XL importantes para su dimerización y función antiapoptótica.
- Cocultivo de células madre embrionarias de ratón (gris) y fibroblastos (verde), tratadas con un compuesto que mata selectivamente a las células madre.

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Publicaciones

Discovery of Novel Inhibitors of Amyloid  $\beta$ -Peptide 1-42 Aggregation. López LC, Dos-Reis S, Espargaró A, Carrodegua JA, Maddelein ML, Ventura S, Sancho J. *J Med Chem.* 2012

Early postmortem gene expression and its relationship to composition and quality traits in pig Longissimus dorsi muscle. Cánovas A, Varona L, Burgos C, Galve A, Carrodegua JA, Ibáñez-Escriche N, Martín-Burriel I, López-Buesa P. *J Anim Sci.* 2012, 90:3325-36.

### Patentes

Inventores (p.o. de firma): Javier Sancho, Laura C. López, José Alberto Carrodegua, Salvador Ventura

Título: Compuestos para su uso en el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer

Nº de solicitud: P201231452

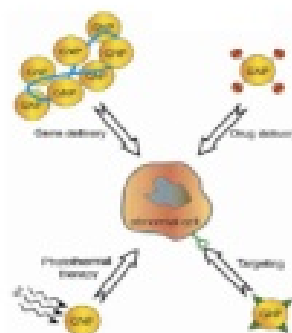
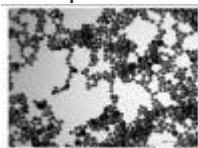
País de prioridad: España

Fecha de prioridad: 19/09/2012

### 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<br>Identificación Grupo |
|----------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| Olga Abián Franco/ Investigador SNS Programa Miguel Servet           | B1-Patología Digestiva                        |
| Investigadores implicados                                            | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
| Marta Asencio Del Rio/ Estudiante Máster                             | No                                            |
| Ana Belen Lasierra/ Investigador Sns Programa Rio Hortega Carlos III | B1-Patología Digestiva                        |
| Rafael Clavería/ Estudiante Máster                                   | No                                            |
| Maria Arruebo/ Becario Predoctoral Fis                               | B1-Patología Digestiva                        |

## Resultados y conclusiones destacadas 2012

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

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Patente

Solicitantes (p.o. de firma): Abián, O., Velázquez, A., Sancho, J. and Vega, S.  
Título: Allosteric inhibitors of ns3 protease from hepatitis C virus  
Nº de registro: 300062217  
Nº de solicitud: ep12382218.1  
Fecha de presentación: 30 mayo 2012  
Lugar de presentación: European Patent Office  
Entidad: Universidad de Zaragoza

### Publicaciones

López-Gallego F, Abián O, Guisán JM. Altering the interfacial activation mechanism of a lipase by solid-phase selective-chemical modification. *Biochemistry*. 51(35):7028-36. 2012.

Romero O, Filice M, Ribas BD, Carrasco-Lopez C, Klett J, Morreale A, Hermoso AA, Guisán JM, Abián O, Palomo JM. Semisynthetic peptide-lipase conjugates for improve biotransformations. *Chem Commun (Comb)*. 48 (72) 9053-5. 2012.

Martínez-Julvez M, Abián O, Vega S, Medina M, Velázquez-Campoy A. Studying the allosteric energy cycle by isothermal titration calorimetry. *Methods Mol Biol*. 796:53-70. 2012.

### 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 *Listeria monocytogenes*.

#### *Objetivos específicos:*

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

2.- *Análisis funcional de FurB y FurC en las cianobacterias Anabaena PCC 7120 y Microcystis aeruginosa PCC 7806.* Se están investigando las funciones que



desempeñan estos parálogos en las dos cianobacterias incluyendo su posible interactividad con FurA. Se está caracterizando el fenotipo tanto de mutantes de *Anabaena* PCC 7120 sobreexpresando cada una de estas proteínas, como de los mutantes de delección en los que se han inactivado cada uno de estos genes.

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

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

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

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

## Proyectos relacionados

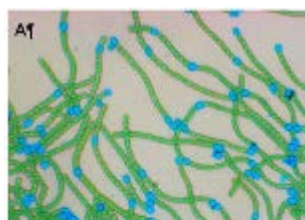
| Título proyecto                                                                                                                                           | Entidad Financiadora                                                                  |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------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

## Equipo investigador

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

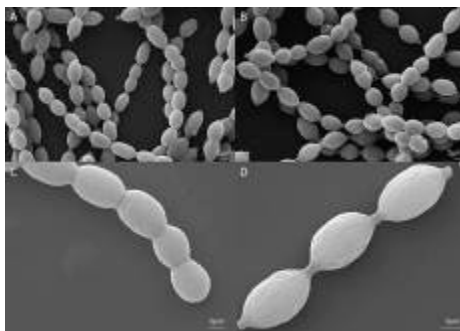
## Resultados y conclusiones destacadas 2012

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



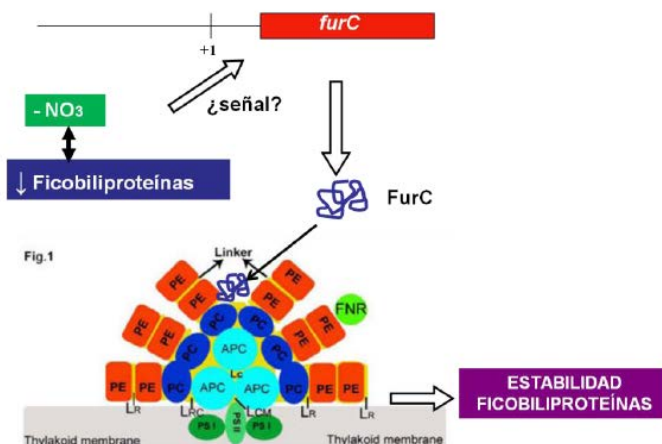
Inhibición de la diferenciación del heterocisto por la sobreexpresión de FurA. Las células se tiñeron con Alcian blue, específico de heterocistos. (A) Filamentos de la estirpe silvestre tras 24 horas de déficit nitrogenado. (B) Mutante de *Anabaena* que sobreexpresa FurA. Los filamentos muestran un patrón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

Se ha caracterizado el fenotipo de un mutante de delección de FurB en *Anabaena* que es mas sensible a daño oxidativo y posee menor contenido en clorofila y ficobiliproteínas que la estirpe silvestre. Este mutante presenta una unión mas débil entre células.



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

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



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

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Publicaciones de relevancia

Botello-Morte L, González A, Bes MT, Peleato ML and Fillat MF. Functional genomics of metalloregulators in cyanobacteria. LIBRO: *Genomics of Cyanobacteria. Advances in Botanical research (book series)*. F. Chauvat and C. Cassier-Chauvat eds. Elsevier Oxford. Capítulo de libro por invitación a MF Fillat, en prensa.

Pellicer S, González A, Peleato ML, Martínez JI, Fillat MF and Bes MT. Site-directed mutagenesis and spectral studies suggest a putative role of FurA from *Anabaena* sp. PCC 7120 as heme sensor protein. *The FEBS Journal*. 279(12):2231-46. 2012.

González, A., Bes, M.T., Valladares, A., Peleato, M.L. and Fillat M.F. FurA is the master regulator of iron homeostasis and modulates the expression of tetrapyrrole biosynthesis genes in *Anabaena* sp. PCC 7120. *Environ Microbiol*. 2012 Sep 20. doi: 10.1111/j.1462-2920.2012.02897.x.

### Patentes:

Inventores (p.o. de firma): María F. Fillat, María Luisa Peleato, Antonio Clavel, María Pilar Goñi, Laura Calvo, Irene Gregorio, Alicia García Berna, María Teresa Fernández

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

N. de solicitud: 201131130

Entidad titular: Universidad de Zaragoza

Empresa/s que la están explotando: en trámite

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

IP. 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.

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

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

También se ha estudiado el efecto de contaminantes en la síntesis de la microcistina. Además del lindano, se han estudiado contaminantes de los llamados “emergentes”, entre los que se encuentran gran número de fármacos. El lindano provoca un ligero aumento de la síntesis de la toxina, mientras que ninguno de los fármacos afectó significativamente a los niveles de microcistina en las células

##### Proyectos relacionados

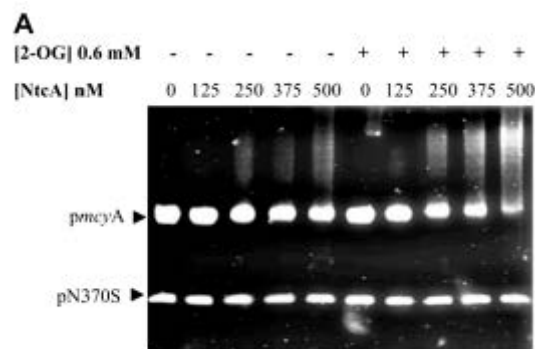
|                                                                                                                                                                                                                       | Entidad Financiadora                     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------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

## Equipo investigador

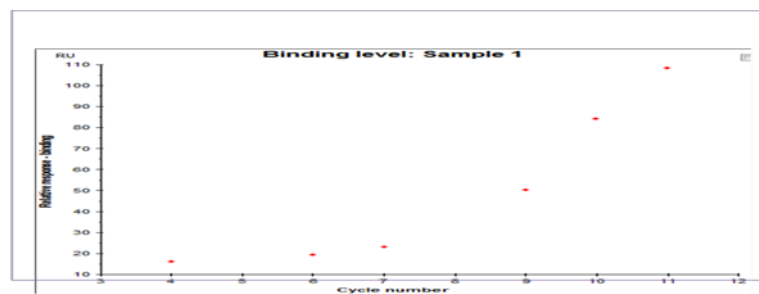
| Investigador responsable /coordinador                   | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
|---------------------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| María Luisa Peleato Sánchez/ Catedrático de Universidad | B18-Biología Estructural                      |
| Investigadores implicados                               | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
| Laura Ceballos Laita/Contratado                         | B18-Biología Estructural                      |
| Laura Calvo Begueria/Contratado                         | B18-Biología Estructural                      |
| Noemí Bervis/Becaria predoctoral Fundación Carolina     | B18-Biología Estructural                      |

## Resultados y conclusiones destacados 2012

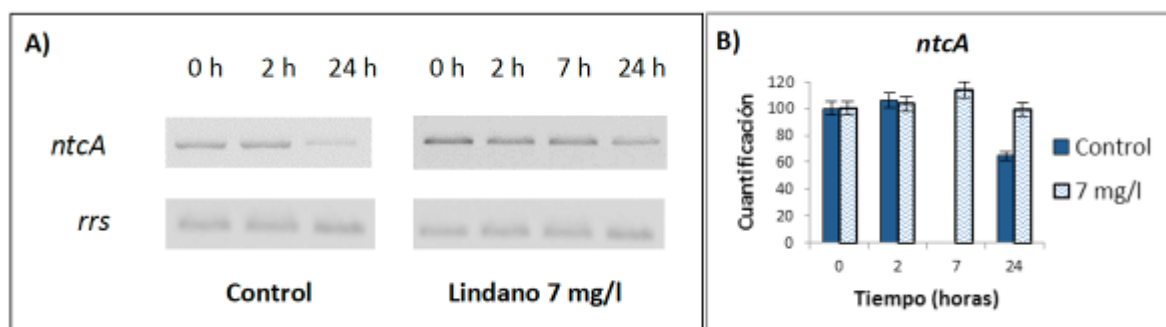
- El balance C/N regula la síntesis de microcistina



- La actividad de unión al DNA de NtcA, no solo esta regulada por 2-oxoglutarato, sino que aminoacidos como glutamico y aspartico pueden modular su actividad.



- La presencia de lindano induce la expresión de los genes implicados en la síntesis de microcistina, y la expresión de *ntcA*



## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Publicaciones

Emma Sevilla, Beatriz Martin-Luna, M. Teresa Bes, Maria F. Fillat and M. Luisa Peleato. An active photosynthetic electron transfer chain required for *mcyD* transcription and microcystin synthesis in *Microcystis aeruginosa* PCC7806. *Ecotoxicology*, 21, 811-819. 2012

Kuniyoshi T, Sevilla E, Bes MT, Fillat MF and Peleato ML. Phosphate deficiency in nitrogen replete conditions (N/P 40:1) induces *mcyD* transcription and microcystin synthesis in *Microcystis aeruginosa* PCC7806. Aceptado en *Journal Plant Physiology and Biochemistry*.

Laura Calvo, Ms; Irene Gregorio, Ms; Alicia García Berna, Ms; Maria Teresa Fernández, Dr; Maria Pilar Goñi, Dr; Antonio Clavel, Dr; María Luisa Peleato, Dr; María F. Fillat, Dr. A new pentaplex-nested PCR to detect five pathogenic bacteria in free living amoebae. *Water research in press* (doi:pii: S0043-1354(12)00682-3. 10.1016/j.watres.2012.09.039.)

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

---

#### Objetivo y descripción

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

Tópicos actuales:

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

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

*2-Flavoenzimas en mamíferos: el factor de inducción de apoptosis humano (hAIF) como potencial diana farmacológica.* La comprensión de los mecanismos moleculares que subyacen detrás de patologías relacionadas con disfunciones metabólicas ha llevado a investigar nuevos enfoques terapéuticos que incluyen flavoenzimas como el factor de inducción de apoptosis.

*3-Explorando otras flavoenzimas con interés biotecnológico.*

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



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

## Proyecto relacionado

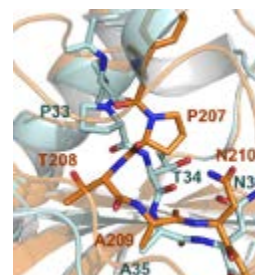
| Título proyecto                                                                                | Entidad Financiadora               |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|
| Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: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

## Equipo de investigación

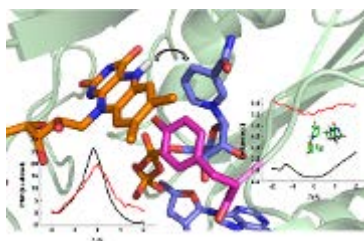
| Investigador responsable /coordinador               | Pertenece a Grupo DGA<br>Sí/No<br>Identificación Grupo |
|-----------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| Milagros Medina Trullenque/ Catedrático             | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| <b>Investigadores implicados</b>                    |                                                        |
| Marta Martínez Júlvez/Profesor Titular              | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| Patricia Ferreira Neila/Profesor Ayudante Doctor    | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| Ana Serrano Esteban/Técnico de Proyecto             | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| Isaías Lans Vargas/Contratado Pre-doctoral JAE      | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| Ana Sánchez Azqueta/Contratado Predoctoral FPU      | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| Sonia Arilla Luna / Estudiante de Doctorado         | Sí / B18-Biología Estructural                          |
| Raquel Villanueva Llop / Contratado Predoctoral FPI | Sí / B18-Biología Estructural                          |

## Resultados y conclusiones destacados 2012

- Identificación de tres puntos de acción para la inhibición selectiva de las FADS procariotas: i) diferencias estructurales en la actividad riboflavinquinasa, ii) formación del oligómero, y, principalmente, iii) diferente química para la actividad FMN:adenililtransferase.



- Combinando métodos experimentales y computacionales hemos propuesto un modelo a nivel atómico para el complejo catalíticamente competente en la transferencia de hidruro entre el FAD de la ferredoxina-NADP<sup>+</sup> reductasa plástica y el coenzima NADP<sup>+</sup>.



- Esta combinación de métodos también ha permitido concluir que AAO oxida alcoholes a aldehídos en un proceso concertado de transferencia de protón e hidruro de forma estereoselectiva, reflejando la arquitectura del centro activo.



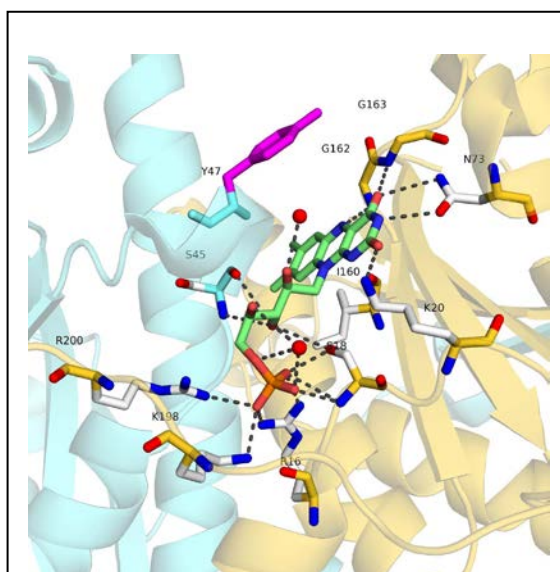
## Difusión de logros científicos destacados

Serrano A, Frago S, Herguedas B, Martínez-Júlvez M, Velázquez-Campoy A, and Medina M. Role of key residues at the riboflavin kinase catalytic site of the bifunctional riboflavin kinase/FMN adenylyltransferase from *Corynebacterium ammoniagenes*. *Cell Biochem. Biophys.* DOI: 10.1007/s12013-012-9403-9. 2012. Impacto ISI: 3.747.

Lans I, Medina M, Rosta E, Hummer G, García-Viloca M, Lluch JM, and González-Lafont A. Theoretical study of the mechanism of the hydride transfer between Ferredoxin NADP<sup>+</sup> reductase and NADP<sup>+</sup>. The role of Tyrosine 303. *J. Am. Chem. Soc.* 134, 20544–20553. 2012. Impacto ISI: 9.9

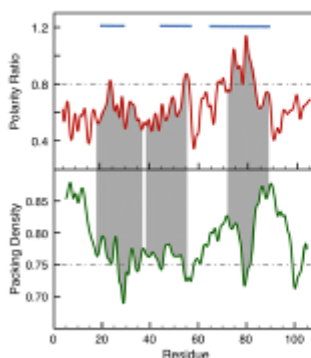
Floudas D, Binder M, Riley R, Barry K, Blanchette RA, Henrissat B, Martínez AT, Otilar R, Spatafora JW, Yadav JS, Aerts A, Benoit I, Boyd A, Carlson A, Copeland A, Coutinho PM, de Vries RP, Ferreira P, +52 autores más, Hibbett DS. The Paleozoic origin of enzymatic lignin decomposition reconstructed from 31 fungal genomes. *Science*. 336:1715-1719. 2012. Impacto ISI: 31.201.

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

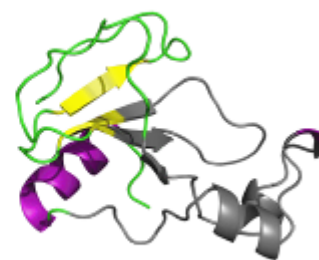


Sitio activo de la enzima RdxA que activa el profármaco metronidazol. Se destacan los residuos de unión del cofactor FMN y un residuo de tirosina posiblemente implicado en la unión del profármaco.

En computación, hemos desarrollado un algoritmo de análisis que identifica, en estructuras de proteínas, las regiones inestables susceptibles de desacoplarse del resto de la proteína y constituir las regiones



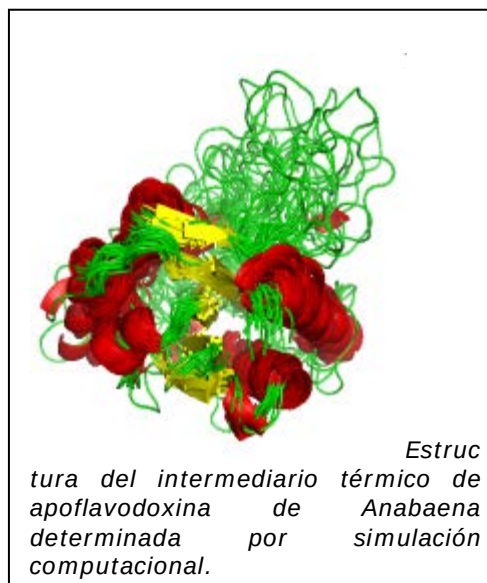
Identificación de las regiones no formadas en el estado de transición del plegamiento de la ribonucleasa barnasa. Regiones inestables reales (sombreado en gris). Regiones inestables predichas: LIPs, (barra azul).



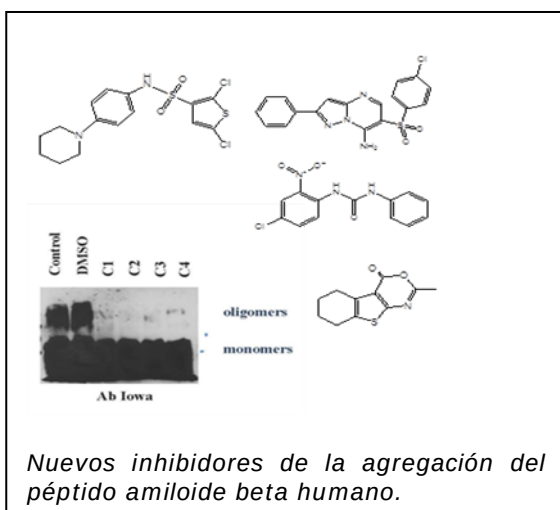
desestructuradas de los intermediarios de plegamiento de equilibrio y cinéticos. También hemos desarrollado, en colaboración con el grupo del Prof. Ventura (UAB) un algoritmo capaz de analizar proteomas completos e identificar proteínas priónicas mediante una función de puntuación de su potencial priónico.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

estabilizante o desestabilizante de mutaciones electrostáticas en proteínas. Finalmente, en cola-boración con el Prof. Orozco (BSC), hemos analizado computacionalmente la estructura de un intermediario de plegamiento de una proteína modelo.

En la parte biomédica, hemos descubierto compuestos que inducen selectivamente apoptosis en células madre y hemos resuelto la estructura tridimensional de una enzima implicada en la activación del profármaco metronidazol utilizado contra la bacteria *Helicobacter pylori*. Así mismo hemos resuelto la estructura tridimensional de una diana proteica clave de la fenilketonuria unida a su chaperona farmacológica y hemos descubierto nuevos inhibidores de la agregación del péptido beta amiloide humano con potencial uso en enfermedad de Alzheimer. Finalmente hemos realizado una nueva solicitud de patente para dichos compuestos.



En estabilidad y plegamiento de proteínas, hemos avanzado en la comprensión de la estructura de los intermediarios de equilibrio de las proteínas y en el análisis mutacional de otros intermediarios relevantes tales como el glóbulo fundido. En colaboración con el Prof. Ventura (UAB) hemos analizado el papel de



los puentes disulfuro en la formación de fibras amiloides. Así mismo hemos determinado la velocidad de procesos de interacción proteína/ion metálico que están involucrados en el funcionamiento del receptor de lipoproteínas de baja densidad.

## Proyectos relacionados

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

## Equipo de investigación

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

## Resultados y conclusiones destacados 2012

Se ha culminado el desarrollo del algoritmo de identificación de LIPs (light polar interfaces of proteins) que permite identificar las regiones localmente inestables de las proteínas y se han desarrollado nuevos compuestos con actividad antiagregatoria para el péptido beta amiloide humano.

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Publicaciones

Graña-Montes R, de Groot N S, Castillo V, Sancho J, Velázquez-Campoy A, and Ventura S. Contribution of disulfide bonds to stability, folding and amyloid fibril formation: The PI3-SH3 domain case. *Antioxidant and redox signaling*. 16:1–15. 2012. Impacto ISI: 8.6

### Patente

*Título: Compuestos para su uso en el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer*

*Autores: Sancho J, López L C, Carrodegua J A, Ventura S.*

*Nº solicitud: P201231452*

*País de prioridad: España*

*Entidad titular: Universidad de Zaragoza*

## 2.4. Área de Física

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

**Responsable del Área de Física:** Mario Floría

### Líneas de investigación:

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

## Descripción de las líneas y sus principales logros 2012

### 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” (Zaragoza) son capaces de satisfacer tales necesidades.

#### Proyectos relacionados

| Título proyecto                                                                               | Entidad Financiadora                    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte, FIS2009-12648-C03-02, 2010-2012 | MICINN                                  |
| Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte, FIS2012-35719-C02-02    | Ministerio de Economía y Competitividad |
| SCC Computing, 2012-2013                                                                      | VII Proyecto Marco UE                   |
| Extended curriculum for science infrastructure online, 2011-2014                              | VII Proyecto Marco UE                   |
| Scientific gateway based user, 2011-2014                                                      | VII Proyecto Marco UE                   |

#### Equipo de investigación

| Investigador responsable/coordinador                          | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
|---------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Alfonso Tarancón Lafita / Catedrático Universidad de Zaragoza | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos |
| Investigadores implicados                                     | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
| Andrés Cruz Flor/Prof Emérito                                 | NA                                                  |
| Luis Antonio Fernández Pérez/UCM                              | NA                                                  |
| Victor Martín Mayor/UCM                                       | NA                                                  |
| Juan Jesús Ruiz Lorenzo/UNEX                                  | NA                                                  |
| David Íñiguez / ARAID. UZ                                     | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos |
| David Yllanes/UI di Roma                                      | NA                                                  |
| Raquel Álvarez Baños/Predctoral                               | NA                                                  |
| José Miguel Gil NaBe rvión/Predctoral                         | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos |
| Antonio Gordillo Guerrero/UNEX                                | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos |
| Marco Guidetti/ U.di Ferrar                                   | NA                                                  |
| Andrea Maiorano/U. di Roma                                    | NA                                                  |
| Jorge Monforte García/UZ                                      | NA                                                  |
| Sergio Pérez Gavira/UZ                                        | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos |
| Beatriz Seoane/UCM                                            | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos |
|                                                               | NA                                                  |

## Resultados y conclusiones destacados 2012

Los principales resultados de la línea de investigación se obtuvieron en el estudio del modelo de Edwards-Anderson en cuatro dimensiones en presencia de un campo magnético externo. El objetivo de este estudio consistió en determinar si el modelo presenta una transición de fase para una determinada temperatura, como predice la solución RSB (“replica symmetry breaking”), o si por el contrario, el campo magnético externo destruye tal transición (modelo “droplet”). Para ello se realizaron simulaciones de sistemas con distinto tamaño, hasta llegar a un retículo  $L=16$  (simulado en el ordenador dedicado Janus), y a distintas temperaturas, haciendo uso del algoritmo de “Parallel Tempering”, que además permite una termalización más rápida del sistema. La longitud de correlación, definida en términos de la transformada de Fourier de la función de correlación a los dos momentos más bajos:

$$\xi_2 = \frac{1}{2\sin(\pi/L)} \left( \frac{\widehat{G}(0)}{\widehat{G}(k_1)} - 1 \right)^{1/2}$$

debe presentar cortes entre los diferentes tamaños de sistema a la temperatura crítica. Sin embargo, estudios anteriores concluían que tal punto de corte no existía, como se muestra en el panel superior de la Figura 1. Algunos autores, trabajando en modelos unidimensionales con interacciones a largo alcance, han ofrecido una posible explicación, que argumenta que el propagador o transformada de Fourier se comporta de modo anómalo para el modo  $k=0$ , resultando en fuertes correcciones de escala.

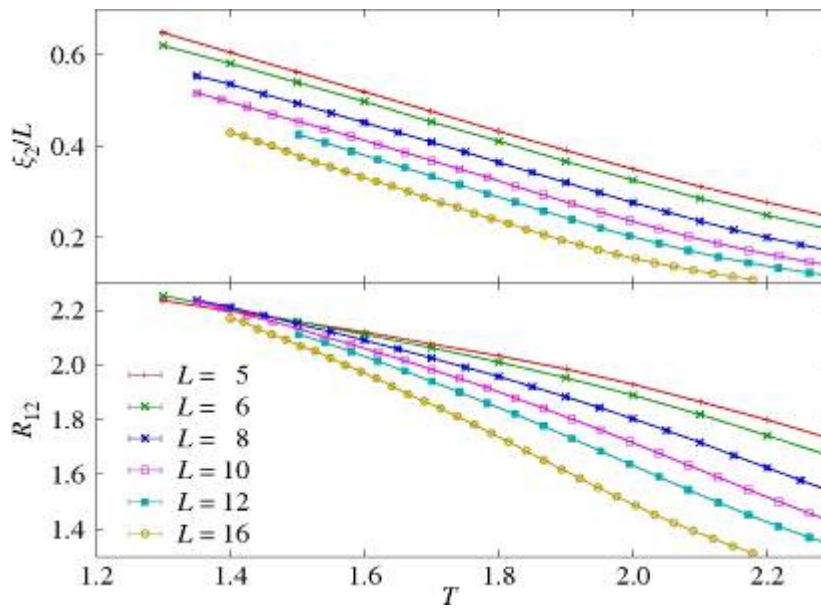


Figura 1.

Dado que la longitud de correlación no ofrece una buena descripción, se utilizó una aproximación al problema diferente, en la que se consideró una nueva magnitud definida en términos de los propagadores a primer y segundo momento:

$$R_{12} = \frac{\widehat{G}(k_1)}{\widehat{G}(k_2)}$$

y representada en el panel inferior de la Figura 1. Como se evita el modo  $k=0$ , se espera que las correcciones de escala sean menores. En efecto, esta magnitud presenta puntos de corte entre los diferentes retículos, lo que permitió estimar la temperatura de transición para diferentes valores del campo magnético externo, y posteriormente trazar un esquema del espacio de fases (T,h), haciendo uso del *scaling* de Fisher-Sompolinsky.

## **Difusión de logros científicos destacados en 2012**

### **Publicaciones**

R. A. Baños, A. Cruz, L. A. Fernandez, J. M. Gil-Narvion, A. Gordillo-Guerrero, M. Guidetti, D. Iñiguez, A. Maiorano, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, S. Perez-Gaviro, J. J. Ruiz-Lorenzo, S. F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, P. Tellez, R. Tripiccion, D. Yllanes

Thermodynamic glass transition in a spin glass without time-reversal symmetry. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 109, 17, 6452-6456 (2012).

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

---

**IP Fernando Falo**

#### **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, termodinámicas y cinéticas 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.



La técnica utilizada para estudiar la transición térmica entre los estados plegados y los estados desplegados es la simulación Montecarlo 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 termodinámicas, proteínas anudadas; proteínas bajo presión, o la competencia entre el plegamiento de proteínas y la agregación.

*Grupo de Pierpaolo Bruscolini:*

Se aplican modelos “coarse-graining” y métodos de la mecánica estadística para el problema de plegamiento de proteínas, el diseño de proteínas y la secuenciación, buscando el mejor equilibrio entre la precisión cuantitativa de las predicciones (que aumenta con la complejidad del modelo) y la viabilidad en términos de costos y tiempo de cálculo (creciente con la sencillez del enfoque).

a) plegamiento de proteínas: utilizamos modelos gaussianos de red y modelos binarios como el propuesto por Finkelstein y colaboradores (PNAS, 96,11299, 1999) y sobre todo el propuesto por Wako y Saito y por Muñoz y Eaton (WSME, Wako, Saito, J. Phys. Soc. Japan, 44,1931,1978; Muñoz, Eaton PNAS, 96,11311,1999), para el que se puede dar una solución exacta (PRL, 88, 258101, 2002).

b) Diseño de proteínas: nos ocupamos de diseño de proteínas como un proceso de optimización, en determinación de la columna, sobre la elección de los aminoácidos y sus rotámeros a ser dispuestos en la secuencia de la proteína. Nuestros resultados sugieren que es importante para dar cuenta de la entropía para diseñar secuencias óptimas, y que las secuencias optimizadas con respecto a la energía libre no se puede predecir fácilmente consultando la lista clasificada de las secuencias optimizadas de acuerdo con la energía. Estamos interesados en desarrollar el método más, utilizando los diferentes campos de fuerza de la energía de los rotámeros.

c) Proteínas Secuenciación: estamos interesados en la secuenciación “de novo” por espectrometría de masas, y se ha propuesto un nuevo algoritmo, T-NovoMS, que se basa en el mapeo de la secuencia de un péptido en la termodinámica de un sistema unidimensional.

*Grupo de Fernando Falo:*

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

a) Transporte por motores moleculares. Investigamos el transporte de cargos en el interior celular mediante motores procesivos direccionales (kinesina y dineína). Nuestro trabajo se ha centrado en el estudio de la influencia de las interacciones de motor a motor en el transporte



multimotor. También hemos analizado estos efectos en la competencia entre los motores de polaridad diferente ("tug of war").

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.

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

## Proyectos relacionados

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

## Equipo de investigación

|                                                                                                                                                                                                                                 |                                                      |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| <b>Investigador responsable/coordinador</b>                                                                                                                                                                                     | <b>Pertenece a Grupo DGA</b><br>Identificación Grupo |
| Fernando Falo Forníes, Profesor Titular                                                                                                                                                                                         | E17-Grupo de Física Estadística y no lineal          |
| <b>Investigadores implicados</b>                                                                                                                                                                                                | <b>Pertenece a Grupo DGA</b><br>Identificación Grupo |
| Pierpaolo Bruscolini Profesor Contratado Doctor.<br>Antonio Rey Gayo, Profesor Titular, Universidad Complutense de Madrid (UCM)<br>Ramiro Perezzan, Estudiante de Doctorado (UCM)<br>Vicente Charro, Estudiante de Máster (UCM) | E24/3-Biocomputación y Física de Sistemas complejos  |
| Rafael Tapia Rojo, Estudiante de Doctorado, Becario DGA                                                                                                                                                                         | E17-Grupo de Física Estadística y no lineal          |

## Resultados y conclusiones destacados 2012

1.- Hemos sido capaces de utilizar estos modelos para obtener diagramas esquemáticos de fase que muestra el comportamiento de los péptidos con secuencias diferentes en función tanto de la temperatura y la concentración. Hemos calculado también el diagrama de fases de una proteína globular como una función de una presión efectiva y la temperatura, que muestra el aspecto a altas presiones de un estado hinchado.

Perezzan, R., Rey, A.. "Simulating protein unfolding under pressure with a coarse-grained model". *J. Chem. Phys.* **137**, 185102-1 – 185102-10.

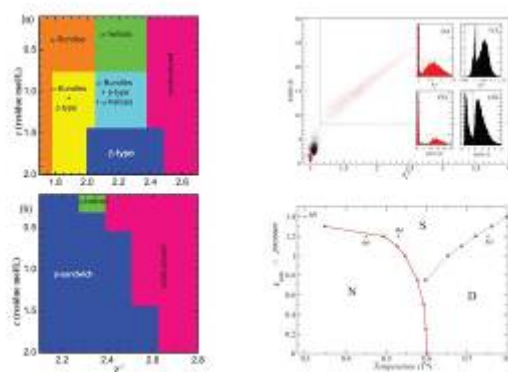
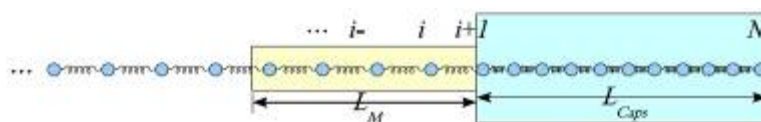


Diagrama de fases del modelo propuesto en el artículo.

2.- Hemos modelado la translocación forzada de un polímero a través de un poro mediante simulación de dinámica molecular de Langevin. Con este modelo somos capaces de entender algunas de las propiedades del motor de empaquetamiento del DNA en el bacteriófago  $\phi 29$ .

Fiasconaro A, Mazo JJ, Falo F. Michaelis-Menten dynamics of a polymer chain out of a dichotomous ATP-based motor. *New Journal of Physics*, **14** 023004 [12 pp]. 2012 . Impacto ISI: 4.177



Esquema del modelo de motor molecular y cápside propuesto en el artículo.

3.- Demostramos la existencia una selección evolutiva para el plegamiento rápido de proteínas, aunque es un efecto pequeño, comparado con la necesidad de estabilidad frente a la desnaturalización y el plegamiento en estructuras equivocadas.

Bastolla U., Bruscolini P., Velasco J. L., Sequence determinants of protein folding rates: Positive correlation between contact energy and contact range indicates selection for fast folding. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics*. 80 (9), 2287-2304 (2012)

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Publicaciones

Fiasconaro A, Mazo JJ, Falo F. Michaelis-Menten dynamics of a polymer chain out of a dichotomous ATP-based motor. *New Journal of Physics*, **14** 023004 [12 pp]. 2012 . Impacto ISI: 4.177

Perezan, R., Rey, A.. "Simulating protein unfolding under pressure with a coarse-grained model". *J. Chem. Phys.* **137**, 185102-1 – 185102-10. IF = 3.333

Bastolla U., Bruscolini P., Velasco J. L., Sequence determinants of protein folding rates: Positive correlation between contact energy and contact range indicates selection for fast folding. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics*. 80 (9), 2287-2304 (2012)

### 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.                        |

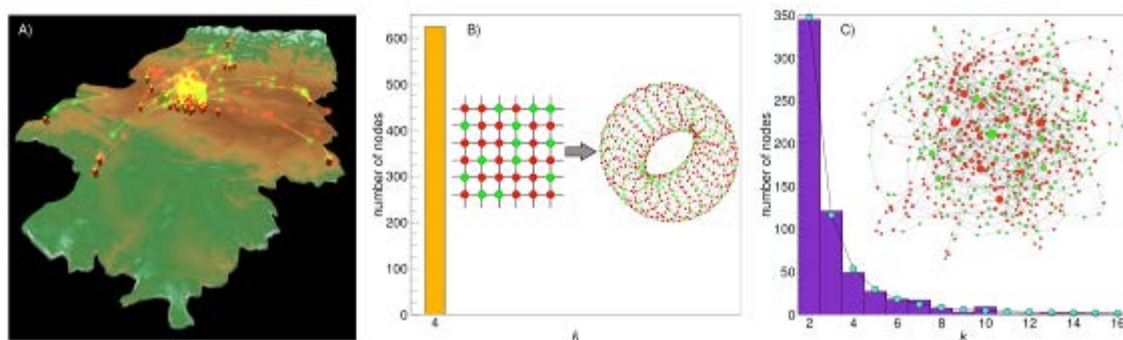
#### Equipo de investigación

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

## Resultados y conclusiones destacadas 2012

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.

**Sociofísica:** En el marco del modelo de Axelrod de transmisión cultural, se ha introducido una variable, la tolerancia, cuyos efectos sobre la tensión globalización-multiculturalidad se han estudiado en dos escenarios diferentes de plasticidad de la red de contactos culturales: En el primero de ellos, se ha encontrado que los rasgos culturales tolerantes poseen ventaja selectiva, de modo que predominan en la cultura global resultante. En el segundo, mientras valores intermedios de la tolerancia favorecen el multiculturalismo, tanto las sociedades muy tolerantes como las muy intolerantes favorecen la globalización cultural.

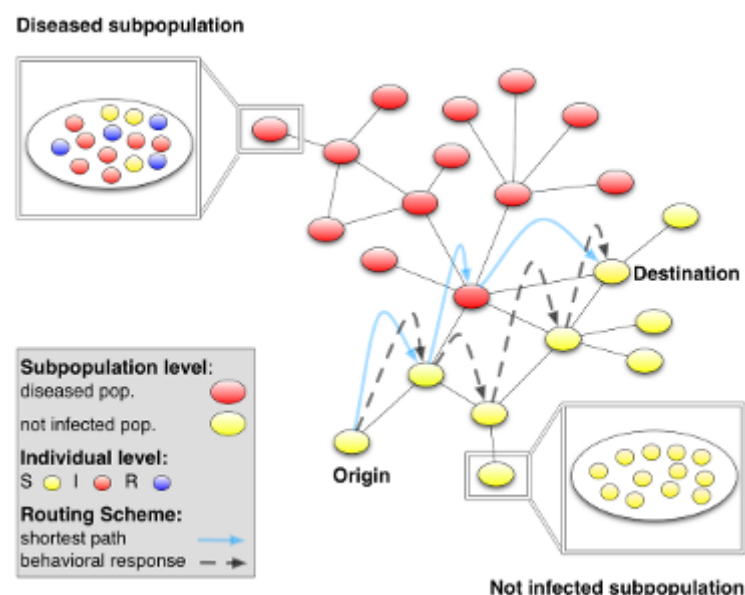


**Teoría Evolutiva de Juegos:** Se han proseguido los estudios sobre evolución de la cooperación en redes de grado heterogéneo, incluyendo limitación al número de juegos permitidos para los agentes por unidad de tiempo. Asimismo, estos estudios se han generalizado a juegos grupales como el juego de los bienes públicos. En este ámbito se ha estudiado la influencia que la correlación entre la estructura de los grupos donde los individuos juegan y los patrones de contactos de la red subyacente tiene en el desarrollo y la emergencia de la cooperación. Es de destacar que hemos realizado con éxito el mayor experimento sobre dilemas sociales hecho hasta la fecha (ver Figura adjunta). Para ello diseñamos una plataforma computacional que ha permitido que 1300 estudiantes de Bachiller realizaran el experimento simultáneamente. Los resultados ya han sido publicados en una de las revistas científicas más importantes del mundo (PNAS USA), y es de espera que tengan gran impacto por la novedad de los mismos (por ejemplo, el experimento en redes heterogéneas es único en el mundo). Finalmente, recientemente se ha iniciado el estudio de la dinámica evolutiva de la cooperación en redes multicapas, encontrando un importante incremento de la cooperación, debido al desarrollo de correlaciones no triviales entre la estrategias que un individuo desarrolla simultáneamente en diferentes capas de la red.

**Sincronización:** En este apartado hemos avanzado considerablemente en la comprensión de la relación entre la estructura de interacciones de una red compleja y la emergencia de estados sincronizados en ella. Para ello hemos tomado como marco teórico el modelo de osciladores de fase acoplados de Kuramoto. En primer lugar hemos llevado a cabo un estudio exhaustivo de los patrones microscópicos que permiten la formación de clústeres sincronizados

justo antes del punto crítico de sincronización. Esto nos ha permitido corroborar resultados previos con una precisión y estadística mucho mayor que los estudios llevados a cabo hasta la fecha. Seguidamente, estudiamos como modificar las propiedades críticas de la transición al estado de sincronización. Para ello, acoplamos las propiedades estructurales y dinámicas de cada oscilador, creando una correlación positiva entre el número de interacciones y la frecuencia interna de cada oscilador. En este estudio demostramos numérica y analíticamente que la transición de fase se convierte en explosiva (primer orden) mostrando regímenes de bi-estabilidad y fenómenos de histéresis. Este estudio ha supuesto la generalización del fenómeno de percolación explosiva en el ámbito de sincronización abriendo la puerta a su exploración experimental. En este ámbito hemos podido llevar a cabo un estudio sobre sincronización explosiva de osciladores caóticos (Rössler) donde se demuestra numérica y experimentalmente la existencia de ese fenómeno.

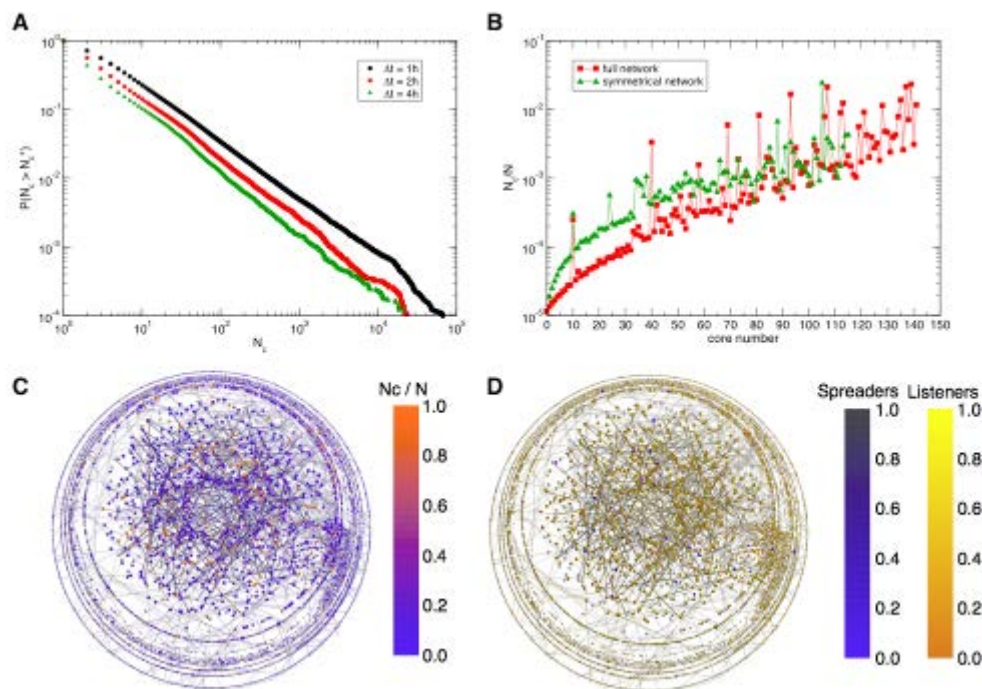
**Redes Adaptativas:** En este ámbito hemos estudiado la emergencia de patrones estructurales en sistemas complejos adaptativos. En primer lugar, hemos caracterizado al formación en redes de osciladores de Kuramoto donde el grado de sincronización entre osciladores regula la intensidad de su acoplo. Para ello hemos incorporados dos mecanismos ampliamente estudiados en redes neuronales: refuerzo Hebbiano (los nodos sincronizados tienden a aumentar su acoplo) y el principio homeo-estático (la intensidad del acoplo total de un oscilador con su entorno permanece constante). La competición de estos dos mecanismos adaptativos da lugar a la emergencia de patrones libres de escala y modularidad, que de manera recurrente se encuentran en redes de interacciones cortico-corticales. En segundo lugar hemos explorado la incorporación de redes adaptativas en sistemas de tráfico. De esta manera hemos conseguido aumentar, de manera auto-organizada, el punto crítico de congestión del sistema sin necesidad de establecer un tipo concreto de protocolo de transporte de información entre los nodos de una red.



**Modelos epidemiológicos:** Durante este año se ha continuado prestando especial atención al estudio de procesos de propagación de epidemias en sistemas de transporte. Como recientemente se ha demostrado con la epidemia de gripe A (H1N1), la globalización de los sistemas de transporte modernos hace



posible que hoy en día una enfermedad se propague en pocos días, algo que sólo unas decenas de años atrás hubiera tardado mucho más tiempo. El resultado es que la sociedad moderna está expuesta como nunca a este tipo de amenazas, por lo que su estudio es de vital importancia. En particular, nuestro grupo ha desarrollado un modelo matemático novedoso (ver figura) que tiene en cuenta más detalles sobre los mecanismos de propagación de la enfermedad y cómo influyen los cambios de comportamiento de la población en la evolución de la misma. Actualmente se continúa trabajando en esta línea para refinar aún más nuestros modelos implementando, además, nuevos mecanismos que tengan en cuenta la posibilidad de que diferentes enfermedades interactúen entre sí. En este apartado, cabe destacar el reciente lanzamiento de la plataforma computacional Gripenet.es, que tiene como objetivo monitorizar en tiempo real la incidencia de la gripe estacional en España a través de la participación desinteresada y anónima de ciudadanos voluntarios. Esta plataforma es parte de un consorcio europeo (Influenzanet.eu) que incluye países como Portugal, Reino Unido, Francia, Italia y Holanda, entre otros.



**Estructura y Dinámica de Redes Sociales on-line:** En un contexto internacional de desasosiego económico, social y político, nuestro grupo ha iniciado una línea de investigación que pretende comprender cómo las herramientas de la Web 2.0, y en especial las redes sociales, facilitan el intercambio y la formación de opiniones entre individuos. Los eventos ocurridos desde mayo de 2011 en España, vertebrados alrededor de la red de Twitter, han permitido al grupo no sólo estudiar un sistema social complejo real --lo cual ya es en sí mismo un avance-- sino un sistema sometido a tensiones y cambios bruscos, como consecuencia de los sucesos acaecidos en esas semanas. Fruto de esta oportunidad se han establecido nuevas colaboraciones interdisciplinarias con universidades de primer nivel internacional (Oxford, M.I.T.). Así, hemos podido determinar cómo operan los mecanismos de "reclutamiento" --mediante usuarios políticamente concienciados repartidos en toda la topología-- y los mecanismos de centralización y difusión de la información --mediante usuarios "clave"

ubicados en el núcleo mejor conectado de la red, capaces de distribuir información que alcance a todo el sistema de forma eficiente y rápida (ver Figura). El acceso a datos reales multiplica los temas de investigación relevantes, que el grupo pretende continuar abordando en el futuro.

### **Difusión de logros científicos destacados en 2012**

Como resultado del trabajo realizado, se han publicado 23 artículos científicos este año, lo cual constituye por una parte un logro importante y por otra una medida objetiva de la importancia y actualidad de la investigación en esta línea no sólo en el BIFI, sino a nivel Nacional e Internacional, siendo nuestro grupo una referencia indudable. De hecho, este año uno de los artículos publicados por el grupo continúa siendo *el artículo científico más citado de la Universidad de Zaragoza* en toda su historia (más de 2000 citaciones).

Otro logro destacable es la obtención de dos proyectos europeos, un STREP y un IP, ambos en la misma Call (se otorgaron sólo 9) del programa FP7, ICT Fet Proactive.

A continuación se enumeran algunas de las publicaciones en esta línea:

- E. Cozzo, A. Arenas, and Y. Moreno. Stability of Boolean Multilevel Networks. *Physical Review E*, 86, 036115. 2012.
- C. Gracia-Lázaro, A. Ferrer, G. Ruíz, A. Tarancón, J. A. Cuesta, A. Sánchez, and Y. Moreno. Heterogeneous networks do not promote cooperation when humans play a Prisoner's Dilemma. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* 109, 12922-12926. 2012.
- J. Borge-Holthoefer, A. Rivero, and Y. Moreno. Locating privileged information spreaders during political protests on an Online Social Network. *Physical Review E* 85, 066123. 2012.

#### **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. Estudio de anomalías en mecánica cuántica no relativista en los teoremas del virial, de Hellmann-Feynman, y otras identidades entre valores esperados. Cálculos de química cuántica de alta precisión en péptidos y su difusión mediante principios de datos abiertos, en formatos comunes y semánticamente enriquecidos. Estudio de la imposición de ligaduras en sistemas moleculares y su influencia en las propiedades de equilibrio de los mismos. Análisis de transporte electrónico en circuitos mesoscópicos y nanoscópicos utilizando métodos de mecánica cuántica y teoría de matrices aleatorias.

### Proyectos relacionados

| Título proyecto                                                                                     | Entidad Financiadora |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
| Bases de datos de resultados computacionales en química y biología molecular                        | Fundación ARAID      |
| Time dynamics and ContROl in naNOStructures for magnetic recording and energy applications (CRONOS) | European Unión - FP7 |
| Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte                                        | MICINN               |

### Equipo investigador

| Investigador responsable /coordinador                       | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo          |
|-------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| Pablo Echenique/Científico Titular del CSIC                 | E24/3- Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos   |
| Investigadores implicados                                   | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo          |
| Alberto Castro/Científico contratado por la Fundación ARAID | E24/3- Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos   |
| Jesús Clemente Gallardo/Profesor Contratado Doctor (UZ)     | E24/1-Fisica matemática y Teoría de campos             |
| Víctor A. Gopar/ Profesor Titular                           | E24/3- Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos   |
| Víctor Polo Ortiz / Profesor Titular de Universidad (UZ)    | E07-Catalisis homogenea por Compuestos Organometalicos |
| Fernando Falceto/Profesor Titular de Universidad (UZ)       |                                                        |

### Resultados y conclusiones destacadas 2012

- *Resultado 1.* Se llevó a cabo un trabajo en el que se definió un potencial efectivo para los núcleos que contiene la información correspondiente a los estados excitados electrónicos, cada uno con su correcto peso de Boltzmann.

El modelo resultante, consistente en los núcleos evolucionando en la superficie clásica definida por dicho potencial efectivo, produce la correcta mecánica estadística esperable de un sistema mixto clásico-cuántico y presenta modificaciones tanto en las barreras entre estados como en los correspondientes tiempos de transición con respecto a la habitual aproximación de Born-Oppenheimer del estado fundamental.

Se demostró que las correcciones introducidas por dicho potencial a temperatura distinta de cero modifican magnitudes medibles en moléculas pequeñas, como su expansión térmica o las tasas de reacción.

En otro trabajo, se ha probado que la dinámica de sistemas mixtos clásico-cuánticos permite considerar, cuando se considera desde un punto de vista estadístico, efectos sobre los subsistemas cuánticos que tienen los mismos efectos que la decoherencia.

- *Resultado 2.* La teoría de control óptimo cuántico (QOCT) proporciona las herramientas necesarias para, desde un punto de vista teórico, diseñar campos externos capaces de controlar sistemas cuánticos, y dirigirlos hacia objetivos prefijados, o dirigirlos por una determinada ruta en el espacio de Hilbert. Esta teoría debe complementarse con un modelo adecuado al sistema físico concreto. En el caso concreto de sistemas multi-electrónicos irradiados con pulsos láser, la solución completa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo no puede obtenerse en general. Si queremos trabajar desde primeros principios, una opción adecuada para el modelado es la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT). Hemos establecido las ecuaciones que combinan la QOCT con la TDDFT, y hemos implementado estas ecuaciones en una plataforma computacional (octopus), demostrando su practicidad numérica.
- *Resultado 3.* En cuanto a la línea de investigación sobre transporte electrónico, se han estudiado el efecto del desorden tipo Lévy en la conductancia a través de hilos cuánticos, así como efectos de delocalización electrónica en el transporte.
- *Resultado 4.* Estudios teóricos sobre estructura electrónica y reactividad química en catálisis homogénea: activación y funcionalización de amoníaco. La activación del amoníaco es un proceso de gran interés en la química moderna debido a su fácil obtención mediante procesos industriales de tipo Haber-Bosch y su posible uso para funcionalizar moléculas orgánicas y sintetizar derivados nitrogenados de alto valor añadido mediante reactivos de bajo coste. Utilizando métodos teóricos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) y en colaboración con grupos experimentales se ha diseñado un catalizador organometálico capaz de activar la molécula de amoníaco en condiciones suaves.

## **Difusión de logros científicos destacados en 2012**

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

J. L. Alonso, A. Castro, J. Clemente-Gallardo, P. Echenique, J. J. Mazo, V. Polo, A. Rubio, y D. Zueco, Non-adiabatic effects within a single thermally-averaged potential energy surface: Thermal expansion and reaction rates of small molecules, *J. Chem. Phys.* 137 (2012) 22A533.

A. Castro, J. Werschnik, and E. K. U. Gross, Controlling the Dynamics of Many-Electron Systems from First Principles: A Marriage of Optimal Control and Time-

Dependent Density-Functional Theory, Physical Review Letters 109, 153603 (2012).

Fernando Falceto and Victor A. Gopar, Conductance through quantum wires with Levy-type disorder: universal statistics in anomalous quantum transport, EPL 92, 57014 (2010).

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

---

##### **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 contruidos con mappings caóticos, algunos de los cuales han sido propuestos en un contexto de dinámica de poblaciones, otros en un contexto de neuro-computación y otros en un contexto de criptografía caótica.
- Estudio de la complejidad en diferentes sistemas físicos, desde sistemas fuera del equilibrio hasta sistemas cuánticos. Preveemos además en este apartado poder abordar el problema de aplicar estos indicadores de complejidad a otros sistemas multicomponente tal como pueden ser las proteínas.

Por su parte, dentro de esta línea, Ricardo López-Ruiz lleva adelante su investigación sobre Complejidad Estadística y Econofísica en colaboración con diversos investigadores: Jaime Sañudo de la Univ. de Extremadura, José Luis López de la Univ. Pública de Navarra, Carmen Pellicer-Lostao de la Univ. de Zaragoza, Elvira Romera de la Univ. de Granada, Danièle Fournier-Prunaret del INSA de Toulouse (Francia), Mario Cosenza de la Univ. de los Andes (Mérida, Venezuela) y Javier González-Estévez de la UNET (Táchira, Venezuela).

##### **Proyectos relacionados**

| <b>Título proyecto</b>                                                                        | <b>Entidad Financiadora</b> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 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<br>Identificación Grupo        |
|------------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| Ricardo López-Ruiz                             | E24/3- Biocomputación y Física de Sistemas Complejos |
| Investigadores implicados                      | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo        |
| Jaime Sañudo/Catedrático Univ. Extremadura     | NO                                                   |
| José-Luis López/Catedrático Univ. Pub. Navarra | NO                                                   |
| Carmen Pellicer-Lostao/ Dr. Univ. Zaragoza     | NO                                                   |

## Resultados y conclusiones destacados 2012

- Nuevo modelo en econofísica.
- Nuevo modelo en gases ideales.
- Cálculo complejidad en un modelo de sólidos

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

Además, hay que mencionar que una de nuestras publicaciones en Open Access (R. López-Ruiz and J.R. Sánchez, *Complexity and Stochastic Synchronization in Coupled Map Lattices and Cellular Automata*, STOCHASTIC CONTROL, C. Myers (Ed.), Ch. 4, pp. 59-79, Sciyo Books, 2010) ha recibido hasta la fecha más de 6000 descargas, que otra publicación (R. López-Ruiz, J. Sañudo, E. Romera and X. Calbet, *Statistical Complexity and Fisher-Shannon Information: Applications*, STATISTICAL COMPLEXITY, K.D. Sen (Ed.), Ch. 4, pp. 65-127, Springer Books, 2011) forma parte de un monográfico de la editorial Springer sobre el tema Complejidad Estadística, lo cual es una prueba objetiva de que la visibilidad de nuestros resultados está ya consolidada y directamente ya son parte del cuerpo del conocimiento y una referencia en nuestro campo de trabajo, y que otra nueva publicación en Open Access (C. Pellicer-Lostao and R. López-Ruiz, *Notions of Chaotic Cryptography: Sketch of a Chaos based Cryptosystem*, APPLIED CRYPTOGRAPHY AND NETWORK SECURITY, J. Sen (Ed.), Ch. 12, pp. 267-294, Sciyo Books, 2012) ha recibido hasta la fecha cerca de 2000 descargas, en una temática novedosa que ha dado lugar a la lectura de una tesis doctoral.

## Publicaciones

J.L. López, R. López-Ruiz and X. Calbet. Exponential Wealth Distribution in a Random Market. A Rigorous Explanation. *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 386, 195-204. 2012.

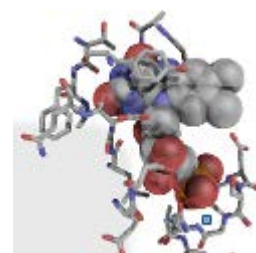
Shivanian and R. López-Ruiz. A New Model for Ideal Gases. Decay to the Maxwellian Distribution. *Physica A* 391, 2600-2607. 2012.

J. Sañudo and R. López-Ruiz. Calculation of Statistical Entropic Measures in a Model of Solids. *Physica Letters A*. 376, 2288-2291 2012.

## 2.5. Área de Biofísica

---

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



**Responsable del Área de Biofísica:** Adrián Velázquez Campoy

### **Líneas de investigación:**

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

### **Descripción de las líneas de investigación y sus logros en 2012**

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

---

Ver en área de Bioquímica

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

---

Ver en área de Bioquímica

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

IP Ramón Hurtado

#### Objetivo y descripción

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

Nuestro grupo está interesado en el estudio de glicosiltransferasas, hidrolasas y proteínas de unión a carbohidratos que están involucradas en enfermedades humanas. Usamos la cristalografía de rayos-X como herramienta principal y la complementamos con estudios de enzimología, de inhibición, etc, para dilucidar los mecanismos catalíticos de las enzimas que están involucradas en la síntesis y degradación de glicoconjugados, oligo y polisacáridos (Hurtado-Guerrero R *et al*, Biochemical Journal, 2010; Hurtado-Guerrero R *et al*, Journal of Biological Chemistry, 2009; Hurtado-Guerrero R *et al*, Current Opinion in Chemical Biology, 2012; Hurtado-Guerrero R *et al*, EMBO J, 2008).

Actualmente trabajamos en glicosiltransferasas tan dispares como PoFUT1, PoFUT2, B3GALTL o ppGalNAc transferasa. También somos activos en otras áreas no relacionadas con la Glicobiología y recientemente hemos descrito la primera estructura de la fenilalanina hidroxilasa en complejo con una chaperona farmacológica. Las implicaciones de nuestros estudios son y serán muy importantes para el desarrollo de nuevos tratamientos para enfermedades humanas.

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

#### Proyectos relacionados

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

#### Equipo investigador

| Investigador responsable /coordinador     | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
|-------------------------------------------|-----------------------------------------------|
| Ramón Hurtado-Guerrero/Investigador ARAID | B89-Protein Targets                           |
| Investigadores implicados                 | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo |
| Erandi Lira-Navarrete/Becario             | B89-Protein Targets                           |
| Jessika Valero-Gonzalez/Becario           | B89-Protein Targets                           |
| Ainoa Figureola-Conchas/Becario           | B89-Protein Targets                           |



## Resultados y conclusiones destacadas 2012

Lo más destacado de este año por parte de nuestro grupo son las siguientes resultados:

- Hemos descrito la primera estructura de la fenilalanina hidroxilasa humana en complejo con una chaperona farmacológica. Además demostramos que la chaperona no solamente estabiliza a mutantes inestables de fenilalanina hidroxilasa (descrito anteriormente, ver Pey AL, Journal of Clinical Investigation, 2008) sino que además la ayuda a replegar más rápidamente una vez desplegada. Estos estudios contribuirán al diseño racional de compuestos más potentes para tratar la Fenilcetonuria.
- En colaboración con Prof. van Aalten hemos contribuido a la caracterización de GBPA de *V. cholerae*. Esta proteína es un factor de virulencia esencial para colonizar este patógeno. En este trabajo hemos demostrado la función de los 4 dominios que constituyen GBPA y que la hacen ser un factor de virulencia muy importante para desembocar en la enfermedad.
- Por último, he escrito un "Review" junto con Prof. Davies, científico mundialmente reconocido por sus trabajos en el campo de la Glicobiología, sobre la glicosilación de proteínas, una modificación postraduccional muy importante en un gran número de procesos biológicos.

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

### Publicaciones

Edmond Wong, Gustav Vaaje-Kolstad, Avishek Ghosh, Ramon Hurtado-Guerrero, Peter V. Konarev, Adel F. M. Ibrahim, Dmitri I. Svergun, Vincent G. H. Eijssink, Nabendu S. Chatterjee and Daan M. F. van Aalten. The *Vibrio cholerae* colonization 1 factor GbpA possesses a 2 modular structure that governs binding to different host 3 surfaces. *PLoS Pathogens*, in press . 2012. IF: 9.079

Torreblanca R, Lira-Navarrete E, Sancho J, Hurtado-Guerrero R. Structural and mechanistic basis of the interaction between a pharmacological chaperone and human phenylalanine hydroxylase. *Chembiochem* . 2012. IF: 3.944

Hurtado-Guerrero R, Davies GJ. Recent structural and mechanistic insights into post-translational enzymatic glycosylation. *Curr Opin Chem Biol*. 2012. IF: 9.723

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

---

#### Objetivo y descripción

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

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

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

### Proyectos relacionados

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

### Equipo investigador

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

### Resultados y conclusiones destacados 2012

Respecto a los objetivos, las tareas desarrolladas tienen que ver con la caracterización topológica y dinámica de la red de transcripción de *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb*). El objetivo fundamental fue compilar la información necesaria para construir una versión de la red de regulación de transcripción del *Mtb* lo más grande posible. La compilación de semejante red de transcripción -de tamaño comparable, por primera vez, a redes de regulación de organismos modelo como la bacteria *E. coli*- cuenta con una extraordinaria utilidad como base de datos bioquímica que la dota de un potencial de impacto. El volumen de información experimental integrada en nuestra red multiplica casi por diez las bases de datos compiladas previamente como MtbRegList, y dobla el tamaño de la última versión de la red publicada en 2008.

Además, hemos indexado a un mayor nivel de detalle la metodología experimental en la que se basa cada enlace de la red. Posteriormente se desarrollaron modelos dinámicos capaces de reproducir los comportamientos coordinados de estas redes de interacciones moleculares que definen, en última instancia, la fisiología celular. En este punto, nuestro análisis comenzó por el estudio de la dinámica asociada a los subgrafos más simples (módulos o motivos) para posteriormente explorar las dinámicas de subgrafos de mayor entidad.

Asimismo, hemos comenzado a desarrollar modelos de redes que permitan, a partir de la información topológica, inferir clasificaciones funcionales de proteínas y genes. También se está trabajando en el desarrollo de un modelo “in silico” de

circuito genético que sea capaz de reproducir los resultados experimentales existentes para diferentes condiciones “in vitro” con el objetivo final de encontrar nuevos mecanismos de regulación y/o soluciones para el knock-out selectivo de genes. Como resultado del trabajo realizado, se han publicado 2 artículos científicos este año, un capítulo de libro y actualmente hay otro artículo en revisión.

### **Difusión de logros científicos en 2012**

E. Cozzo, A. Arenas, and Y. Moreno. Stability of Boolean Multilevel Networks. *Physical Review E*. 86, 036115. 2012.

J. Sanz, E. Cozzo, J. Borge-Holthoefer, and Y. Moreno, Topological effects of data incompleteness of gene regulatory networks. *BMC Systems Biology*. 6:110 2012.

E. Cozzo, J. Sanz, and Y. Moreno. Dynamics of Biomolecular Networks. Chapter 11, pp 349-379, in *Systems Biology: Current Topics from the Encyclopedia of Molecular Cell Biology and Molecular Medicine* (Edited by Robert A. Meyers), ISBN: 978-3-527-32607-5 (Wiley-VCH, Weinheim, 2012).

#### **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 se pueden descomponer en subprocesos de interacción y cambios conformacionales en biomoléculas. Empleamos técnicas experimentales biofísicas (principalmente, calorimetría y espectroscopía) y computacionales para:

- Caracterizar estructural y energéticamente el paisaje conformacional, las interacciones con otras biomoléculas y los cambios conformacionales en proteínas con relevancia biomédica y/o biotecnológica
- Desarrollar metodologías experimentales para el estudio de interacciones biomoleculares y fenómenos cooperativos alostéricos en sistemas biológicos

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

### Proyectos relacionados.

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

### Equipo de investigación

| Investigador responsable/coordinador                                     | Pertenece a Grupo DGA                    |
|--------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|
| Adrián Velázquez Campoy/Investigador ARAID                               | Identificación Grupo B89-Protein Targets |
| Investigadores implicados                                                | Pertenece a Grupo DGA                    |
| José Luis Neira Faleiro/Catedrático Universidad Miguel Hernández (Elche) | Identificación Grupo NO                  |
| Isidro Cortés Ciriano/Estudiante Máster                                  | NO                                       |

### Resultados y conclusiones destacadas 2012

Velázquez-Campoy A, Abián O, Vega S, Sancho J. Allosteric inhibitors of NS3 protease from hepatitis C virus. Patente N° solicitud: EP12382218.1. Fecha de prioridad: 2012/05/30. Entidades titulares: Universidad de Zaragoza, ARAID, IACS

Martínez-Julvez M, Abián O, Vega S, Medina M, and Velázquez-Campoy A. Studying the allosteric energy cycle by isothermal titration calorimetry. In *Allostery: Methods and protocols. Methods in Molecular Biology*. 796:53-70. 2012

Domenech R, Martínez-Rodríguez S, Velázquez-Campoy A, and Neira JL. Peptides as inhibitors of the first phosphorylation step of the *Streptomyces coelicolor* phosphoenolpyruvate: sugar phosphotransferase system. *Biochemistry*. 51:7393-7402. 2012

### Difusión de logros científicos destacados en 2012

Graña-Montes R, de Groot NS, Castillo V, Sancho J, Velázquez-Campoy A, and S. Ventura. Contribution of disulfide bonds to stability, folding and amyloid fibril formation: The PI3-SH3 domain case. *Antioxidants & Redox Signaling*. 16:1-15. 2012

En colaboración con investigadores de la Universidad Autónoma de Barcelona se presenta un estudio de la influencia de los enlaces disulfuro sobre la estabilidad y la propensión a la agregación fibrilar en proteínas.

Martins PT, Velázquez-Campoy A, Vaz WL, Cardoso RM, Valerio J, and Moreno MJ. Kinetics and thermodynamics of chlorpromazine interaction with lipid

bilayers: Effect of charge and cholesterol. *Journal of the American Chemical Society*. 134:4184-4195. 2012

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

## 2.6. Área Computación

---

**Objetivo:** Esta 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 David Iñiguez     |
| 2.6.5. Visualización avanzada y transferencia tecnológica                          | IP Gonzalo Ruiz      |
| 2.6.6. Análisis de Información en Internet y Grandes Redes. Inteligencia Colectiva | IP Alejandro Rivero  |

### **Descripción de las líneas y sus logros 2012**

#### **2.6.1. High Performance Computing IP. Guillermo Losilla**

---

##### **Objetivo y descripción**

El grupo HPC ("High Performance Computing") del BIFI cuenta principalmente con las siguientes líneas de trabajo:

- Investigación en Computación de Altas Prestaciones. El grupo participa en proyectos de investigación nacionales y europeos que estudian las nuevas tendencias y tecnologías alrededor del mundo de la supercomputación.
- Mantenimiento y soporte de las infraestructuras de supercomputación del BIFI. El personal del grupo cuenta con una larga experiencia en la gestión

(operación, monitorización, contabilidad...) y soporte a usuarios de grandes sistemas de cálculo, así como en el diseño y mantenimiento de CPDs. Actualmente gestionamos 2 CPDs (200m2 en total) y 3 grandes sistemas de cálculo: MEMENTO, TERMINUS y CAESARAUGUSTA.

- Ofrecer un servicio de cálculo y almacenamiento para investigadores del Instituto y externos. Los sistemas de cálculo que gestionamos ofrecen anualmente varios millones de horas de cálculo y cientos de terabytes de almacenamiento, tanto a los investigadores del BIFI y sus colaboradores, como a usuarios externos a través de la Red Española de Supercomputación y del programa Hosted Clusters.
- Otros servicios: porting, optimización y paralelización de aplicaciones. Como servicio adicional al soporte básico ofrecido en el uso de nuestros supercomputadores, colaboramos con nuestros usuarios para ayudarles a migrar y hacer más eficientes sus códigos en el entorno HPC.
- Formación y divulgación. El grupo participa activamente en este tipo de actividades, impartiendo cursos y tutoriales, dirigiendo PFCs, tutorando prácticas en empresa, gestionando visitas guiadas a nuestras instalaciones...

### Proyectos relacionados

| Título proyecto                                               | Entidad Financiadora   |
|---------------------------------------------------------------|------------------------|
| SCC-Computing                                                 | Comisión Europea (FP7) |
| Supercomputador de memoria compartida BIFI-ZCAM               | FEDER                  |
| Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAr) | FEDER                  |
| Convenio CAESARAUGUSTA                                        | Gobierno de Aragón     |

### Equipo investigador

| Investigador responsable / coordinador | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
|----------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Guillermo Losilla Anadón / contratado  | E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos |
| Investigadores implicados              | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
| Arturo Giner Gracia / PTA MINECO       | E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos |

### Resultados y conclusiones destacados 2012



Durante 2012, además de seguir prestando un servicio de cálculo y almacenamiento estable para los investigadores del Instituto y sus colaboradores, se ha culminado con éxito la recepción, instalación y puesta en marcha de Memento. Este nuevo sistema, compartido entre el BIFI y el ZCAM, supone incorporar una máquina de memoria compartida de 12TB de memoria RAM y 3072 cores de cálculo al abanico de recursos computacionales a disposición de los investigadores del Instituto.

*Memento está ubicado en el Laboratorio de Supercomputación del BIFI*

La exitosa organización a finales de noviembre en nuestras instalaciones del “International Workshop EU-China on Scientific Computing” (<http://www.scc-computing.eu/zaragoza>), con más de 90 investigadores registrados, nos ha abierto nuevas posibilidades de colaboración con China en materia de computación.

## **Difusión de logros científicos destacados en 2012**

Los días 27 y 28 de Marzo, acogimos el seminario técnico de la Red Española de Supercomputación “Migración de cluster Slurm+Moab a Slurm 2.3”, que reunió en el BIFI a todos los administradores de sistemas de los distintos nodos de la RES. En el seminario se realizó un taller para actualizar y homogeneizar los batch schedulers de todos los nodos a la última versión de Slurm utilizando CAESARAUGUSTA como ejemplo.

### **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.

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

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

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

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 |
|-----------------|----------------------|
| PireGrid        | INTERREG IV A        |
| SCI-BUS         | FPVII                |
| EGI-InSPIRE     | FPVII                |
| AraGrid         | FEDER                |

### Equipo investigador

| Investigador responsable / coordinador | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
|----------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Rubén Vallés Pérez/ contratado"        | E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos |
| Investigadores implicados              | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
| Jaime Ibar Yubero/contratado"          | E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos |

### Resultados y conclusiones destacados 2012

- Acercamiento de tecnologías grid y cloud a las PYMES a través del proyecto PireGrid el cual hemos liderado ([www.piregrid.eu](http://www.piregrid.eu))
- Gestión y administración computacional de la infraestructura grid regional AraGrid distribuida en Zaragoza, Huesca y Teruel.
- Desarrollo de interfaces web de usuario para facilitar el uso de las infraestructuras distribuidas, mediante nuestra participación en SCI-BUS ([www.sci-bus.eu](http://www.sci-bus.eu))

### Difusión de logros científicos destacados en 2012

Ibar J, Ruiz G, Tarancón A, Vallés R. Optiweb: An optimization application for steel cut industries ported to the grid in the framework of PireGrid project. *Computing and Informatics* 31(1):161-171. 2012.

### 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.

### Proyectos relacionados

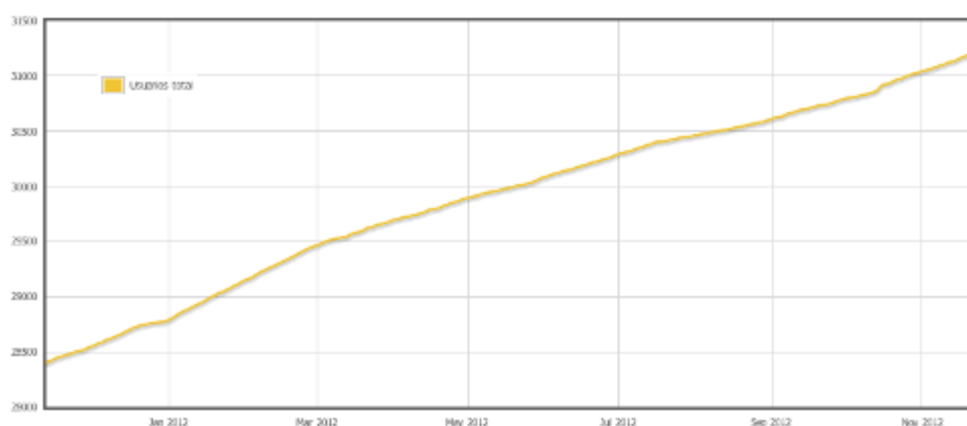
| Título proyecto           | Entidad Financiadora |
|---------------------------|----------------------|
| Global Excursion          | FP7                  |
| SOCIETIC                  | FP7                  |
| EDGI                      | FP7                  |
| DEGISCO                   | FP7                  |
| Acciones Complementarias  | MICINN               |
| e-Ciencia España-Portugal | MICINN               |

### Equipo investigador

| Investigador responsable / coordinador            | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo                         |
|---------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| Fermín Serrano/Contratado                         | E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos                   |
| Investigadores implicados                         | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo                         |
| Francisco Sanz/Contratado                         | E24/3-Biocomputacion y Fisica de Sistemas Complejos<br>NO<br>NO<br>NO |
| Carlos Val/Contratado                             |                                                                       |
| Eduardo Lostal/Contratado                         |                                                                       |
| Erik Gracia/Colaborador Becario                   |                                                                       |
| Mari Carmen Ibañez/Contratada Fundación Ibercivis |                                                                       |

### Resultados y conclusiones destacados 2012

- Ibercivis sigue creciendo en número de usuarios conectados con BOINC hasta contar actualmente con más de 31.000 personas.



- Se ha incorporado a Ibercivis una nueva aplicación BOINC en producción, Biosoft, cuyos resultados iniciales se presentan en una tesis doctoral de Gaizka Erkizia el 12 de diciembre de 2012.
- Se ha desarrollado y liberado el código de una herramienta software para gestionar proyectos de ciencia ciudadana, Furnivall.

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

- La Comisión Europea ha apostado por el BIFI, que coordina el proyecto SOCIETIC, como referente de la ciencia ciudadana para fijar las directivas y políticas del Horizonte2020 e integrar a los ciudadanos en los procesos científicos.
- Con fecha de 1/10/2012 se constituyó la Fundación Ibercivis lo que supuso el punto de partida a pleno rendimiento de esta fundación privada sin ánimo de lucro de promoción y soporte de ciencia ciudadana. Tras los primeros tres meses, ya se han desarrollado actuaciones como la Jornada de Comunicar la Neurociencia en Zaragoza, la plataforma Gripenet.es a nivel nacional y se cuenta con 6 experimentos en fase de desarrollo para ser lanzados a nivel europeo en el primer semestre de 2013. El patronato de la Fundación está compuesto por la Universidad de Zaragoza, el CSIC, el CIEMAT, Red.es, la Fundación Zaragoza Ciudad del Conocimiento, el Gobierno de Aragón y la Fundación Ikerbasque.

### 2.6.4. Ordenadores dedicados / Special purpose computers IP. David Iñiguez

---

#### Objetivo y descripción

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

#### Proyectos relacionados

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

## Equipo investigador

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

## Resultados y conclusiones destacados 2012

Durante el año 2012 se han cumplido 3 años de explotación científica del supercomputador dedicado Janus, explotado por el grupo de investigación en Spin Glasses del BIFI y herramienta clave para la elaboración de diversas publicaciones científicas en ese ámbito.

También, se ha concluido el diseño de una nueva generación del supercomputador dedicado, al que se le ha llamado Janus 2, financiado con una convocatoria de fondos FEDER para infraestructuras.

Durante este año se han identificado grupos de investigación con aplicaciones susceptibles de ejecución eficiente en Janus II y se ha fijado el rango de problemas potencialmente portables a la nueva infraestructura.

Contando con la colaboración de varios investigadores del panorama internacional, se han realizado estudios de eficiencia sobre algunas aplicaciones candidatas a ser portadas a la nueva generación, con el objeto de facilitar la toma de decisiones respecto a la arquitectura.

Posteriormente, se ha diseñado la arquitectura de la máquina en función de las aplicaciones previamente fijadas, decidiendo tanto el tipo de procesador específico a utilizar (en este caso una FPGA de la familia Virtex 7) como la topología de las conexiones o el tipo y la cantidad de memoria.

Durante este año se ha adjudicado el fabricante de todas las distintas partes que componen Janus 2, Link Engineering, y se ha participado tanto en la elaboración de requerimientos técnicos para el diseño de la placa base y los módulos de diseño básico, como en el diseño de la alimentación, la ventilación, o el sistema de Input / Output general para la máquina.

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

M.Baity-Jesi et al. (2012). An FPGA-based supercomputer for Statistical Physics: the weird case of Janus. In W. Wanderbauwhede & K. Benkrid (Eds.), High-Performance Computing Using FPGAs (in press). Springer

### 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 principalmente también por jóvenes ingenieros en informática. En él se desarrollan tres tareas bien diferenciadas.

- Dar soporte a la investigación realizada en el instituto participando en proyectos que requieren desarrollo de software. También se da soporte en cuanto a la mejora y optimización de programas ya realizados, así como consultoría para la recomendación de tecnologías, técnicas, etc. para el desarrollo de los mismos.
- Desarrollo de proyectos de colaboración con empresas en temáticas o líneas en las que el BIFI trabaja con el fin de aportar a sus productos y procesos un valor añadido y diferencial a través de la transferencia de los resultados de investigaciones obtenidos en el instituto.
- Investigación en sus propias líneas de trabajo, como son el laboratorio de visualización 3D, el laboratorio de Realidad aumentada, 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 |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
| PireGrid                                                                                                                 | Interreg IV A        |
| Sistema experto de previsión y severidad de incidentes en redes eléctricas                                               | MINECO - INNPACTO    |
| Realidad Aumentada                                                                                                       | FECYT                |
| SCI-BUS                                                                                                                  | FPVII                |
| SOCIETIC                                                                                                                 | FPVII                |
| Global Excursion                                                                                                         | FPVII                |
| Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad | BIFI                 |

## Equipo investigador

| Investigador responsable /coordinador   | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
|-----------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| Gonzalo Ruiz Manzanares / Contratado    | E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos |
| Investigadores implicados               | Pertenece a Grupo DGA<br>Identificación Grupo       |
| Alfredo Ferrer Marco / Contratado Grupo | E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos |
| Cristina Viñas Viñuales / Contratado    | E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos |
| David Iñiguez Dieste/ARAID              | E24/3-Biocomputacion y Física de Sistemas Complejos |

## Resultados y conclusiones destacados 2012

- Implantación de un sistema de realidad aumentada para el estudio de problemas de física en educación secundaria y bachillerato:  
<http://rrllab.bifi.es/>



- Difusión de la ciencia a través de la participación en distintos eventos, realización de visitas, demostraciones y presentaciones públicas
- Participación en el desarrollo de diferentes proyectos europeos en colaboración con otras áreas del BIFI

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

- Carlos Gracia-Lázaro, Alfredo Ferrer, Gonzalo Ruiz, Alfonso Tarancón, José A. Cuesta, Angel Sánchez, Yamil Moreno. Heterogeneous networks do not promote cooperation when humans play a Prisoner's Dilemma. PNAS August 7, 2012 vol. 109 no. 32 12922-12926.
- Ibar J, Ruiz G, Tarancón A, Vallés R. Optiweb: An optimization application for steel cut industries ported to the grid in the framework of PireGrid project. COMPUTING AND INFORMATICS 31(1):161-171. 2012.

### **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. Por ejemplo durante el 2012 se ejecutó un estudio sobre las redes de llamadas entre tres millones de usuarios de una compañía de telecomunicación.

Se colabora 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 colaboraciones del que ya se han hecho diversos prototipos este año y que aparecerá finalmente como un sistema accesible vía web para examinar la evolución dinámica de esta red.

#### *Inteligencia Colectiva*

En esta línea, se estudia si una colectividad presenta rasgos de inteligencia, sea por combinación de habilidades o por otras sinergias, vayan mas 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**

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



## Equipo investigador

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

## Resultados y conclusiones destacados 2012

Durante el año 2012 se han aislado problemas y tareas que se pueden plantear a pequeños grupos de estudiantes y escalar a colaboración masiva en internet. Se ha diseñado un método, y el correspondiente software, en el cual cada persona tiene la oportunidad de colaborar con varios vecinos de forma controlada, los cuales a su vez pueden colaborar con otros. Sobre este sistema será posible estudiar situaciones de propagación, mutación y supervivencia de ideas y soluciones.

Se ha suministrado a otros grupos el know-how necesario para organizar capturas geoposicionadas en twitter y apoyado el desarrollo del software necesario para ello.

Se han realizado colaboraciones con empresas que requieren el análisis de grandes volúmenes de información, como es el caso de las compañías de telecomunicaciones, desarrollando modelos útiles para la toma de decisiones en la gestión y captación de clientes.

## Difusión de logros científicos destacados en 2012

Borge-Holthoefer, S. González-Bailón, A. Rivero, and Y. Moreno, "The Spanish Indignados Movement: Time dynamics, geographical distribution, and recruitment mechanisms", Chapter contribution to Online Collective Action, in press, 2012.

## 2.7. Infraestructuras del BIFI.

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

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

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

### **2.7.1. Infraestructuras de Física y Computación**

---

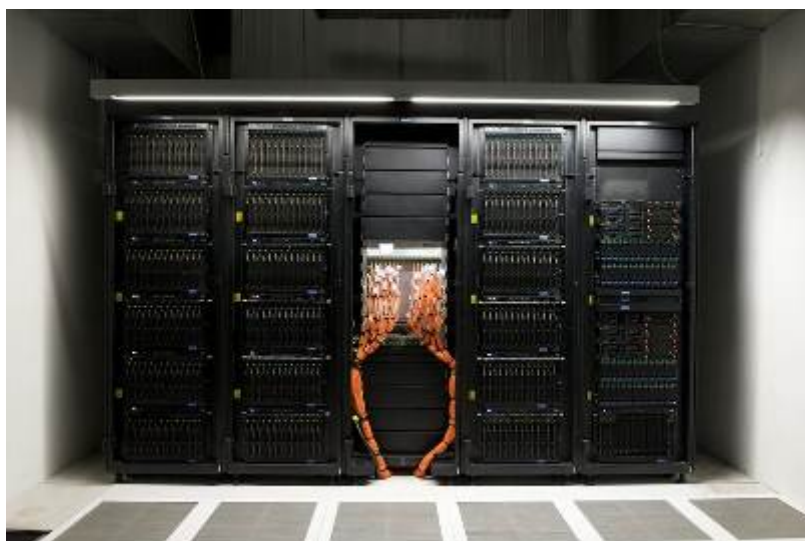
En lo que respecta a Computación, en los últimos años, gracias al programa FEDER y otros proyectos de infraestructura, el Instituto se ha dotado de unos recursos de primer nivel. Esto permite afirmar que por infraestructura computacional, el BIFI está entre el “top 5” de centros de computación y e-Ciencia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

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

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

#### **CAESARAUGUSTA**

Descripción. Caesaraugusta es el nodo de la Red Española de Supercomputación en Aragón. Se trata de un supercomputador de memoria distribuida formado por 512 procesadores PPC64, 1 TeraByte de memoria RAM, 24 TeraBytes de almacenamiento y red de interconexión Myrinet. Su potencia de cálculo pico ( $R_{peak}$ ) es de 4,5 TeraFLOPS.



**Investigador / Técnico responsable / coordinador.** Guillermo Losilla Anadón

**Investigadores / Técnicos implicados.** Arturo Giner Gracia

**Metodología y técnicas disponibles.** El tiempo de CPU de Caesaraugusta se distribuye en periodos cuatrimestrales (Marzo-Junio, Julio-Octubre, Noviembre-Febrero) entre los proyectos científicos que solicitan su acceso. El 80% de dicho tiempo se asigna a través del Comité de Acceso global de la Red Española de Supercomputación. El 20% restante se asigna a través del Comité de Acceso local de Caesaraugusta. El listado de software disponible se puede consultar en: <http://www.bsc.es/marenostrum-support-services/available-software>.

**Comentarios de interés.** Durante 2012, el BIFI ha seguido gestionando CAESARAUGUSTA, nodo en Aragón de la Red Española de Supercomputación (RES). Esta red, con núcleo en Marenostrum (Barcelona Supercomputing Center), fue creada en 2007 por el MICINN para dar respuesta a las crecientes necesidades de computación de la investigación en España. A fecha de hoy, CAESARAUGUSTA mantiene su configuración original formada por 512 procesadores PPC64, 24 TeraBytes de almacenamiento y red de interconexión Myrinet.

Durante 2012, en CAESARAUGUSTA se han computado 3.006.000 horas de CPU; 2.640.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité de Acceso de la Red Española de Supercomputación (al que corresponde asignar el 80% de uso del sistema) y 366.000 horas correspondientes a usuarios asignados por el Comité local (20% de tiempo restante).

El número de proyectos que hicieron uso de esta infraestructura a lo largo de este año fue de 26; 13 fueron asignados por el Comité de Acceso de la Red Española de Supercomputación y otros 13 fueron asignados por el Comité local. En concreto, en el área de “biomedicina y ciencias de la salud” se solicitaron 7, en “química, ciencia de materiales y tecnología” 6, en “matemáticas, física e ingeniería” 10 y en “astronomía, espacio y ciencias de la tierra” 3.

Además se han realizado varias reuniones (presenciales y por videoconferencia) de coordinación con el resto de integrantes de la RES. Del mismo modo, este año hemos colaborado en la organización de dos eventos celebrados en Zaragoza: “Migración de cluster Slurm + Moab a Slurm 2.3”, 27 y 28 Marzo 2012, BIFI (Edificio I+D); “Presentación BSC, RES y PRACE”, 15 Marzo 2012, BIFI (Edificio I+D).

## **TERMINUS**

**Descripción.** Terminus es un supercomputador de memoria distribuida, compuesto por 950 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

**Metodología y técnicas disponibles.** Actualmente, todos los miembros del BIFI y sus colaboradores, tienen derecho de acceso a Terminus. El listado actual de software disponible se puede consultar en: <http://bifi.es/en/infraestructures/scientific-equipment/terminus/available-software>.

**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 superior a los 8 TeraFLOPs.

Más de 100 investigadores del BIFI o colaboradores suyos poseen cuenta en Terminus. Además, este año hemos continuado impulsando el programa "Hosted Clusters", un servicio del BIFI que permite a los grupos de investigación con financiación para infraestructura pero sin personal dedicado ni unas instalaciones apropiadas, gozar de una solución completa de hosting para sus recursos de supercomputación.

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

| Nombre     | Investigador Principal | Departamento-Centro                              | # Cores | # RAM (Gbs) |
|------------|------------------------|--------------------------------------------------|---------|-------------|
| RTN4       | Alfonso Tarancón       | Física teórica-UNIZAR                            | 124     | 124         |
| BIFI       |                        | BIFI-UNIZAR                                      | 190     | 294         |
| MMT        | Milagros Medina        | Bioquímica y Biología Molecular y Celular-UNIZAR | 68      | 68          |
| CONMAT     | Luis Martin Moreno     | Física de la Materia Condensada-UNIZAR           | 418     | 2229        |
| BIOCOMPLEX | Pierpaolo Bruscolini   | Física teórica-UNIZAR                            | 40      | 40          |
| PLATON     | Carlos Lafuente        | Química-Física-UNIZAR                            | 24      | 48          |
| EEAD       | Javier Burguete        | Estación Experimental Aula Dei-CSIC              | 16      | 16          |
| JSS        | Javier Sancho          | Bioquímica y Biología Molecular y Celular-UNIZAR | 72      | 144         |
| HECTOR     | Jesús Santamaría       | INA                                              | 24      | 96          |

## MEMENTO

**Descripción.** Memento es un supercomputador de memoria compartida híbrida de 3072 cores de cálculo, 12 TeraBytes de memoria RAM y red de interconexión Infiniband QDR. La máquina se comparte entre el BIFI y el ZCAM.

**Investigador / Técnico responsable / coordinador.** Guillermo Losilla Anadón

**Investigadores / Técnicos implicados.** Arturo Giner Gracia



**Metodología y técnicas disponibles.** Memento es una máquina de memoria compartida híbrida con una potencia pico ( $R_{peak}$ ) de 25,8 TeraFLOPS. El sistema cuenta con un total de 3072 cores de cálculo (AMD Opteron Interlagos 6272 2,1GHz), 12 TeraBytes de memoria RAM y red de interconexión Infiniband QDR



(40 Gbps). Todo este hardware se encuentra agrupado en 48 servidores, cada uno conteniendo 64 cores de cálculo y 256 GB de memoria RAM.

**Comentarios de interés.** El sistema entró en operación en Abril de 2012. Además de dar servicio a usuarios del BIFI y del ZCAM, a corto plazo se prevé dar también acceso a investigadores del CECAM. En el uso de este sistema tienen preferencia aplicaciones con necesidades especiales de memoria y/o de red.

## **ARAGRID**

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



**Investigador / Técnico responsable / coordinador.** Rubén Vallés Pérez

**Investigadores / Técnicos implicados.** Jaime Ibar Yubero

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

Cada uno de sus 4 nodos cuenta con aproximadamente 480 cores de cálculo para un total de unos 2000 en toda la infraestructura. Del mismo modo, se cuenta con 40 Terabytes de almacenamiento por site.

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

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

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

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

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

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

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

## RECURSOS CLOUD

**Descripción.** El BIFI cuenta con una plataforma cloud de 256 cores de cálculo.



**Investigador / Técnico responsable / coordinador.** Rubén Vallés Pérez

**Investigadores / Técnicos implicados.** Jaime Ibar Yubero

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

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

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



**Comentarios de interés.** Estos recursos se utilizan en proyectos europeos participados por el Instituto (SCI-BUS) 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.

Actualmente se trabaja en añadir la parte de almacenamiento de objetos mediante el componente SWIFT, que es compatible con el almacenamiento S3 de Amazon.

## **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

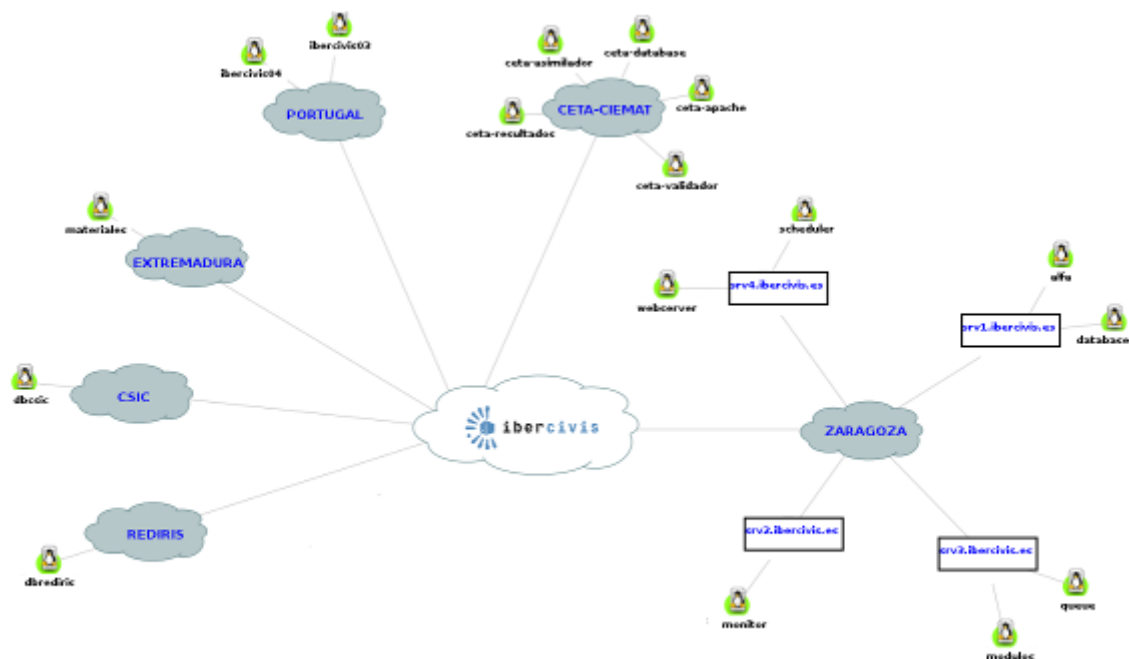
**Metodología y técnicas disponibles.** Ibercivis es una plataforma de computación voluntaria dirigida a investigadores de diferentes áreas cuyas necesidades de cálculo son elevadas.

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.** David Iñiguez Dieste

**Investigadores/Técnicos implicados.** Jorge Monforte, Raquel Alvarez, 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 Spin. El ordenador presenta cierta flexibilidad lo que permite simular diferentes modelos, como el modelo de Edwards-Anderson, los modelos de Potts con diferentes estados, cambiar la dimensión espacial del sistema e incluyendo o no la presencia de campos magnéticos, constantes o variables. Al adaptar su arquitectura al problema concreto permite simular a velocidades entre 1000 y 100.000 procesadores convencionales en el momento de su construcción. Esto ha supuesto un salto cualitativo en los resultados obtenidos.

Se ha conseguido desarrollar implementaciones de algoritmos de Parallel Tempering dentro de la lógica reconfigurable de Janus, utilizando microprocesadores embebidos en hardware que solamente se utilizaba para comunicación y no para cálculo. Se ha desarrollado una versión que permite la paralelización de hasta 16 FPGA para poder realizar simulaciones de retículos de tamaños hasta ahora inalcanzables para Janus. Esto nos ha permitido durante este último año pasar a simular retículos de tamaños tan grandes como 256.. Más info: <http://www.janus-computer.com>

**Comentarios de interés.** Dentro de la convocatoria de Fondos FEDER para infraestructuras, se dispone financiación para la segunda generación de Janus, que llamaremos Janus II. Esta nueva máquina tiene como objetivo fundamental ampliar el rango de aplicaciones que puede ejecutar, para incluir problemas tales como Dinámica Molecular, reconocimiento de secuencias en polipéptidos, acelerador numérico para problemas con fuerzas a largo alcance (potenciales tipo Coulomb, por ejemplo), Redes Neuronales, y problemas similares. Además el objetivo es aumentar la potencia de cálculo de Janus en un factor 100.

Esta nueva máquina estará construida por SP (basados de nuevo en FPGA) conectados en una malla 3D, con conexión directa entre primeros vecinos, formando una interconexión toroidal en 3D. Cada placa de Janus II tendrá 16 SP conectados de la forma 8x8x1 en la malla 3D. Cada placa tendrá 16 conectores de entrada y otros 16 conectores de salida que conectarán sus SP con los de otras placas para conformar la malla 3D. Además el IOP será capaz de reconfigurar los SP. Entrará en producción en la primavera de 2013.

## **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. También hay 6 altavoces situados alrededor del sistema que permiten un sonido envolvente.

**Investigador / Técnico responsable / coordinador.** Gonzalo Ruiz

**Investigadores / Técnicos implicados.** Cristina Viñas



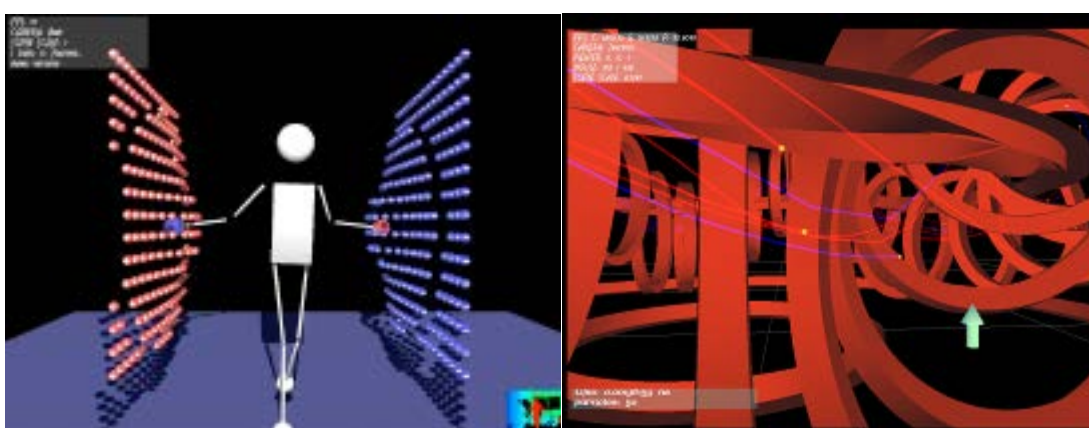
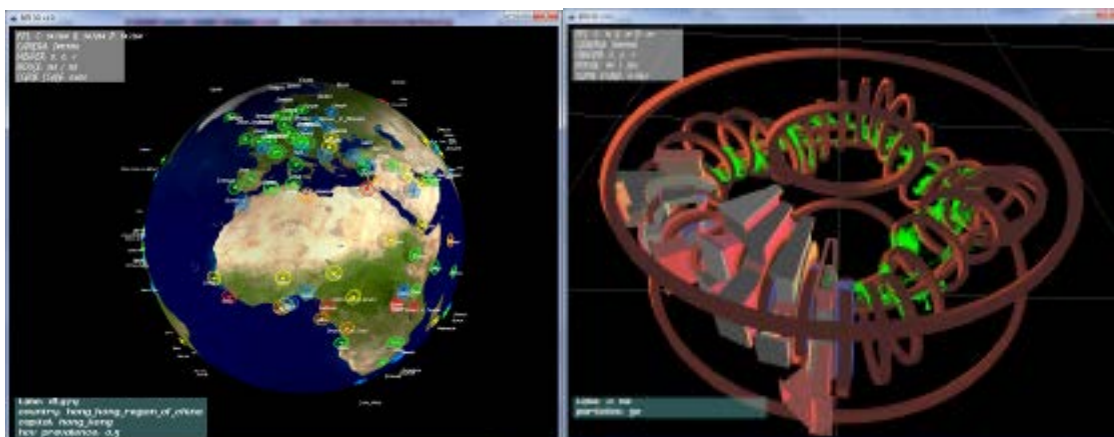
**Metodología y técnicas disponibles.** El BIFI ha desarrollado su propio entorno de desarrollo software que permite la creación de aplicaciones gráficas de manera sencilla. Durante finales del 2010 se crearon dos que integraban conceptos físicos básicos (una de gravitación universal, y otra de campo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

**Comentarios de interés.** Como novedad se ha introducido un sistema de visualización estéreo activo (una tele 3D y gafas activas) y el sistema de posicionamiento Kinect, de menores dimensiones que las 12 cámaras infrarrojas. Este nuevo sistema permite su transporte de manera fácil y cómoda sin tener que desmontar la sala si se realiza a algún acto fuera del instituto.





## LABORATORIO DE REALIDAD AUMENTADA

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

Como una ampliación del laboratorio de visualización, se ha creado otro laboratorio de realidad aumentada que permite la simulación de diferentes escenarios físicos sencillos (actualmente un péndulo, un muelle con una carga y una caída libre). Dichos experimentos son realizados de forma totalmente automática gracias a una serie de motores, controladores y sensores eléctricos, y gracias a una cámara web, se captan imágenes de ellos que permiten el análisis de los movimientos de los agentes que intervienen así como la superposición de resultados calculados teóricamente para comprobar su corrección. Este laboratorio está pensado con fines educativos principalmente, ya que este tipo de sistemas pueden ayudar mucho a la comprensión de estos problemas a estudiantes desde secundaria hasta licenciaturas.

**Investigador / Técnico responsable / coordinador.** Gonzalo Ruiz

**Investigadores / Técnicos implicados.** Alfredo Ferrer

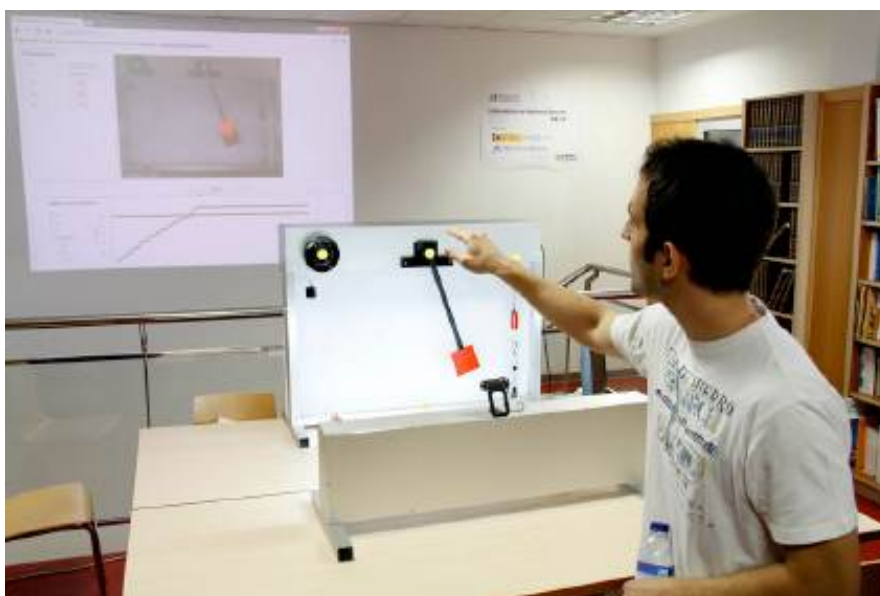




**Metodología y técnicas disponibles.** El laboratorio está compuesto por dos elementos, el dispositivo físico, y el servidor con nuestra aplicación, que permite el acceso remoto al mismo.

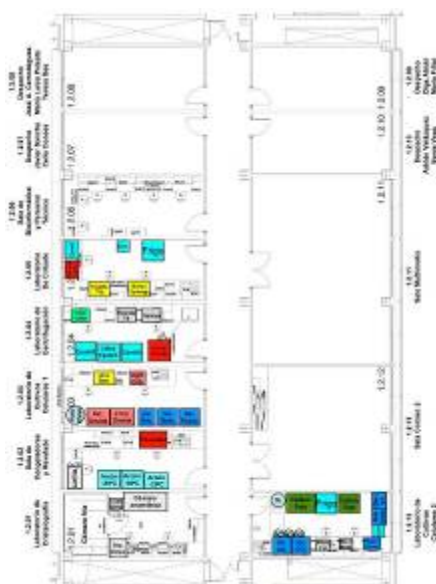
- En el dispositivo físico, que consiste en una estructura de aluminio, se reproducen los tres experimentos físicos de caída libre, péndulo, y muelle con carga. Los elementos están robotizados mediante una serie de motores y placas de manera que pueden ser controlados electrónicamente a través del servidor,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

**Comentarios de interés.** Como se trata de un sistema real, sólo puede haber 3 alumnos utilizándolo simultáneamente, uno por cada experimento, con intervalos de 10 minutos para que hagan las pruebas que necesiten, y cuando su turno termine, pasará a manejarlo el siguiente que haya accedido a la plataforma en orden cronológico. Por ello, hemos desarrollado también un sistema de reservas que permite utilizar la plataforma más tiempo indicándolo con antelación, pero siempre con un máximo 4 horas a la semana y de 1 hora consecutiva. En mayo, el sistema fue presentado públicamente en IES La Azucarera, y desde entonces ha estado disponible al público un prototipo que ha recibido 3000 visitas. Desde entonces se ha mejorado el diseño del dispositivo físico y se han realizado 3 réplicas, una de ellas estará instalada en el BIFI, y las otras dos en dos colegios 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>.



### 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 ESPECTROSCOPÍA

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

- **Espectropolarímetro y espectrofotómetro de fluorescencia Chirascan (Applied Photophysics)** con control preciso de la temperatura mediante un módulo Peltier y que permite caracterizar la estructura de proteínas y estudiar la estabilidad estructural y sus interacciones con otras biomoléculas, tanto en ensayos de equilibrio como cinéticos (mediante un módulo de stopped-flow) mediante dicróismo circular y fluorescencia.



- **Espectrofotómetro UV/visible Cary 100 BIO (Varian)** con módulo para 6 muestras, permitiendo un control preciso de la temperatura en el formato de cuatro muestras mediante un módulo Peltier.
- **Espectrofotómetro NanoVue (GE Healthcare)**, que permite la medida de muestras en volúmenes pequeños.
- **Espectrofotómetro de fluorescencia Cary Eclipse (Varian)**, con dos monocromadores (excitación y emisión), polarizador y módulos intercambiables para una muestra, cuatro o placas multipocillo de hasta 384 muestras, permitiendo un control preciso de la temperatura en el formato de cuatro muestras mediante un módulo Peltier. Permite caracterizar la estructura de proteínas y estudiar la estabilidad estructural y sus interacciones con otras biomoléculas, tanto en ensayos de equilibrio como cinéticos. Este aparato permite también análisis de alta capacidad utilizando marcadores fluorescentes en células vivas, permitiendo, por ejemplo, el cribado de



colecciones de compuestos químicos para la identificación de aquellos que inducen muerte celular, diferenciación, etc.

- **Equipo de light scattering Dynapro Nanostar (Wyatt)** que permite determinar el radio hidrodinámico y la masa molecular de proteínas en disolución y su aplicación en ensayos de 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 procariotas con ácidos nucleicos.
- **Un sistema de purificación de agua Elix 3 (Millipore) y un sistema de ultra-purificación de agua MilliQ Reference (Millipore).**
- **Máquina de hielo**
- **Cabina para manipulación de levaduras**
- **Cabina de seguridad química.**

## LABORATORIO GENERAL 2

En el Laboratorio General 2 (2.0.06) se localizan:

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



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

## Laboratorio de Cromatografía y Microscopía

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

- **Equipos de cromatografía líquida de alta resolución, un HPLC y dos FPLC**, que permiten el análisis y la separación de diversas moléculas basándose en parámetros



físico-químicos como el tamaño, la forma, la carga o la interacción con distintos tipos de moléculas.

- **Microscopio invertido de fluorescencia automatizado Leica DMI6000B**, con sistema de célula viva. Este equipo permite análisis multidimensional 6D (tres dimensiones espaciales, tiempo, distintas posiciones en la muestra y distintos tipos de iluminación, con luz visible o fluorescencia). Incluye un sistema de células viva para time lapse microscopy y un sistema de luz estructurada que permite semiconfocalidad (planos focales más limpios, permitiendo la reconstrucción 3D a partir de distintos planos focales). También incluye un sistema de cambio de filtros de alta velocidad y el sistema dual view para realizar estudios de interacciones moleculares in situ mediante FRET. Incluye el software Metamorph, que permite una gran variedad de análisis, incluyendo identificación y seguimiento de partículas, conteo, 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 termostatzada** para cristalizaciones a distintas temperaturas (generalmente a 18° C).
- **Cámara anaeróbica**, instalada en 2010, que permite trabajar con proteínas en ambientes



la



reductores e incluso cristalizarlas en distintos estados de reducción.

- **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 sala se localizan:

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



### **LABORATORIO DE CENTRIFUGACIÓN**

El Laboratorio de Centrifugación (1.2.04) incluye:

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



- **Ultracentrífuga Optima L-100 XP (Beckman)**, que alcanza más de 800000 g, e incluye un rotor de ángulo fijo y uno basculante.
- **Balanza de brazos** para equilibrado de muestras para centrifugación.
- **Balanza electrónica.**
- **Sonicador**, para disrupción de células mediante ultrasonidos.

## LABORATORIO DE CRIBADO

El Laboratorio de Cribado (1.2.04) incluye:

- **PCR REAL TIME**, con la que se pueden llevar a cabo experimentos de amplificación de DNA/RNA en tiempo real mediante fluorescencia, cribado de alto rendimiento, etc.
- **Lector multimodo para placas multipocillo Synergy HT (Biotek)**, que funciona como espectrofotómetro, fluorímetro y luminómetro y admite placas de distinto número de pocillos.
- **Fluorímetro FluoDia T70 (PTI)**, con sistema de control de temperatura, para placas multipocillo. Ambos equipos se usan intensivamente en cribados de quimiotecas para identificar compuestos bioactivos.
- **Centrífuga para placas multipocillo**

## SALA DE BIOINFORMÁTICA Y PERSONAL TÉCNICO

En la Sala de Bioinformática y Personal Técnico (1.2.01) se localizan estaciones de trabajo para resolución y análisis de estructuras de proteínas, entre otras técnicas, y se localiza también personal técnico de los laboratorios de biofísica, bioquímica y biología molecular y celular.

## LABORATORIO DE CULTIVOS CELULARES 2

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

- **Dos cabinas de flujo laminar.**
- **Dos incubadores con control de la temperatura y concentración de CO<sub>2</sub>.**
- **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.

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

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

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

El Gobierno de Aragón también aporta otras fuentes de financiación al BIFI que son de varios tipos: convenios, grupos de investigación reconocidos por el Gobierno de Aragón, proyectos financiados por la Universidad de Zaragoza y por el Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (IACS) y proyectos que han obtenido financiación a través de una convocatoria de concurrencia competitiva.

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 2012 en el BIFI se han desarrollado con éxito como se ha podido comprobar en el apartado 2 un buen número de proyectos con implicación autonómica, nacional e internacional.

También en 2012 se han incrementado las acciones de transferencia de conocimiento hacia el sector empresarial, a través del desarrollo de proyectos en colaboración entre grupos de investigación con empresas, tendencia que va a dirigir el esquema de investigación global a nivel autonómico, nacional y europeo en los próximos 8 años.

Uno de los proyectos destacados en 2012 en los que ha investigado el BIFI, de esta colaboración público-privada *Sistema experto de probabilidad y severidad de incidentes en red*, liderado por la empresa UNION FENOSA DISTRIBUCION SA ha sido el proyecto que ha conseguido financiación a través del Programa INNPACTO 2012. Este proyecto ayuda a potenciar la actividad innovadora, moviliza la inversión privada, genera empleo y se espera aporte mejora en la balanza tecnológica del país, así como fomentar la participación de las entidades beneficiarias privadas, en especial las PYMEs en proyectos y programas europeos e internacionales.

En el esquema siguiente se recoge la estructura de financiación del BIFI en el año 2012, donde puede observarse los volúmenes económicos aportados por las distintas vías de financiación:

| <b>TIPO DE FINANCIACIÓN</b>         | <b>Importe ayuda 2012 (€)</b> |
|-------------------------------------|-------------------------------|
| <b>APOYO A IUI</b>                  | <b>116.000</b>                |
| <b>NÓMINAS PERSONAL UZ</b>          | <b>1.767.495</b>              |
| <b>PROYECTOS AUTONÓMICOS*</b>       | <b>158.230</b>                |
| <i>BIFI Intramurales</i>            | <b>15.500</b>                 |
| <i>GOBIERNO DE ARAGÓN</i>           | <b>142.730</b>                |
| CONVENIOS                           | 20.000                        |
| GRUPOS RECONOCIDOS                  | 71.110                        |
| CONCURRENCIA COMPETITIVA            | 23.000                        |
| UZ                                  | 23.620                        |
| IACS                                | 5.000                         |
| <b>PROYECTOS NACIONALES*</b>        | <b>2.779.872</b>              |
| <b>PROYECTOS EUROPEOS*</b>          | <b>1.365.037</b>              |
| <b>PROYECTOS EMPRESAS**</b>         | <b>137.871</b>                |
| <b>TOTAL financiación BIFI 2012</b> | <b>6.074.505</b>              |

\*Los tipos de proyectos se designan según su financiación

\*\*Se incluye la financiación del proyecto SEPS a través del programa INNPACTO 2012

A continuación se presenta la financiación desglosada por tipos de financiación, identificando los proyectos por su título (puede consultarse información más detallada el apartado 4 de la memoria).

### **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 1.9% de la financiación total.

| <b>APOYO GOBIERNO DE ARAGÓN AL BIFI</b> | <b>Importe ayuda 2012 (€)</b> |
|-----------------------------------------|-------------------------------|
| Instituto BIFI                          | <b>116.000</b>                |

### **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 29.1% de la global del instituto.

| <b>AYUDA UNIZAR</b>             | <b>Importe ayuda 2012 (€)</b> |
|---------------------------------|-------------------------------|
| NÓMINAS PERSONAL BIFI DE LA UZ* | <b>1.767.495</b>              |

\*Estimación con salarios medios

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

---

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, tanto públicas como privadas y en la mayoría de los casos de concurrencia competitiva. Se detallan a continuación la financiación según la tipología de los proyectos. Se ha estimado una financiación semejante para todos los años de duración de proyecto.

#### **3.3.1. Proyectos de carácter europeo**

---

Los proyectos financiados a través de convocatorias europeas durante el 2012 y el importe de la ayuda para este año ha sido el que aparece en la tabla siguiente:

| <b>PROYECTOS EUROPEOS</b> | <b><i>Importe ayuda 2012 (€)</i></b> |
|---------------------------|--------------------------------------|
| SCI-BUS                   | 71.410                               |
| SOCIETIC                  | 355.000                              |
| PIREGRID                  | 122.733                              |
| GLOBAL EXCURSION          | 46.280                               |
| CRONOS                    | 79.027                               |
| PLEXMATH                  | 88.044                               |
| MULTIPLEX                 | 77.327                               |
| SCC COMPUTING             | 47.824                               |
| EGI-InSPIRE               | 67.092                               |
| EDGI                      | 125.800                              |
| DEGISCO                   | 34.500                               |
| <b>TOTAL</b>              | <b>1.115.037</b>                     |

El importe de la ayuda de estos proyectos asciende a 1.115.037 euros, que ronda el 20% de la financiación total del instituto.

#### **3.3.2. Proyectos de convocatorias nacionales**

---

Los proyectos financiados a través de convocatorias nacionales durante el 2012 suponen la mayor de los porcentajes de financiación (45.8%) total del BIFI.

Los proyectos y el importe de la ayuda para este año ha sido el que aparece en la tabla siguiente:



| <b>PROYECTOS NACIONALES</b>                                                                                                                                               | <b>Importe ayuda 2012 (€)</b> |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| <b>MICINN / MINECO</b>                                                                                                                                                    | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica</i>                                                                     | 110.000                       |
| <i>Red Temática de Biotecnología de materiales lignocelulósicos: retos enzimáticos, químicos y moleculares para su aplicación industrial, energética y medioambiental</i> | 20.000                        |
| <i>Acercamiento computacional a la complejidad en redes, proteínas, y sistemas de muchos agentes</i>                                                                      | 43.000                        |
| <i>Procesos dinámicos evolutivos: virus, ecosistemas y comportamientos sociales. PRODIEVO</i>                                                                             | 39.930                        |
| <i>O-fucosilación de proteínas: buscando inhibidores para la leucemia linfática celular aguda y para la esclerosis múltiple. BFU2010-19504 (subprograma BMC)</i>          | 60.000                        |
| <i>Estabilidad conformacional de proteínas: principios generales, análisis estabilidad función del r-LDL y búsqueda de nuevas chaperonas farmacológicas.</i>              | 157.300                       |
| <i>BIFI2012 - Protein Targets: Discovery of Bioactive Compound</i>                                                                                                        | 7.000                         |
| <i>Bioavailability of amphiphilic ligands - Drugs and metabolites</i>                                                                                                     | 6.000                         |
| <i>Proteasa NS3 del virus de la hepatitis C: Identificación y caracterización de inhibidores competitivos y alostéricos</i>                                               | 45.000                        |
| <i>Simulación y modelización de materiales complejos</i>                                                                                                                  | 30.667                        |
| <i>Redes, Biofísica y Ciencia No Lineal</i>                                                                                                                               | 156.695                       |
| <i>Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte</i>                                                                                                       | 87.500                        |
| <i>Estructuraciones matemáticas en sistemas cuánticos y sus aplicaciones.</i>                                                                                             | 3.000                         |
| <i>Realidad aumentada</i>                                                                                                                                                 | 15.000                        |
| <i>Identificación de moléculas bioactivas en células troncales mediante cribado funcional de quimiotecas: herramientas para terapias seguras.</i>                         | 19.000                        |
| <i>Computación avanzada en sistemas complejos y fenomenos de transporte FIS2012-35719-C02-02 Proyecto coordinado por con las Universidades Complutense y Zaragoza</i>     | 46.500                        |
| <i>Ibercivis, computación voluntaria y ciencia ciudadana</i>                                                                                                              | 60.000                        |
| <i>Ibercivis, Cooperación Hispano Portuguesa en computación voluntaria y ciencia ciudadana</i>                                                                            | 2.500                         |
| <i>Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAr)</i>                                                                                                      | 666.667                       |
| <i>Ibercivis: Plataforma de investigación basada en la computación voluntaria</i>                                                                                         | 50.000                        |
| <i>Acuerdo Ciemat y UZ para el mantenimiento de la organización virtual de fusión. Computación en Grid para Fusión</i>                                                    | 20.425                        |
| <i>Ordenador dedicado de nueva generación (II)</i>                                                                                                                        | 389.940                       |
| <i>Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte</i>                                                                                                       | 55.667                        |
| <i>Aragri+D: Creación de una Grid en Aragón (FONDOS FEDER)</i>                                                                                                            | 327.083                       |
| <i>Realidad aumentada</i>                                                                                                                                                 | 42.000                        |
| <b>Subtotal</b>                                                                                                                                                           | <b>2.460.872</b>              |

| <b>CIEMAT</b>                                                                                                                                            | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| <i>Cálculos de inducción de corriente y de momento por inyección de partículas neutras energéticas en plasmas de fusión por confinamiento magnético.</i> | 20.500                        |
| <b>Subtotal</b>                                                                                                                                          | <b>20.500</b>                 |
| <b>GENOMA ESPAÑA</b>                                                                                                                                     | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Convenio colaboración Genoma España</i>                                                                                                               | 295.000                       |
| <i>International Conference BIFI 2012 – Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds</i>                                                            | 3.500                         |
| <b>Subtotal</b>                                                                                                                                          | <b>298.500</b>                |
| <b>TOTAL</b>                                                                                                                                             | <b>2.779.872</b>              |

### **3.3.3. Proyectos de convocatorias autonómicas**

Los proyectos financiados a través de convocatorias autonómicas suponen un 2.6% de la financiación del BIFI durante el 2012.

Los proyectos y el importe de la ayuda para este año ha sido el que aparece en la tabla siguiente:

| <b>AUTONÓMICOS</b>        |                |
|---------------------------|----------------|
| <i>BIFI Intramurales</i>  | <b>15.500</b>  |
| <i>GOBIERNO DE ARAGÓN</i> | <b>142.730</b> |
| CONVENIOS                 | 20.000         |
| GRUPOS RECONOCIDOS        | 71.110         |
| CONCURRENCIA COMPETITIVA  | 23.000         |
| PROYECTOS UZ              | 23.620         |
| IACS                      | 5.000          |
| <b>TOTAL</b>              | <b>158.230</b> |

Según el tipo de proyecto se agrupan en la siguiente tabla:

| <b>PROYECTOS AUTONÓMICOS</b>                                                                                                    |                               |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| <b>BIFI Intramurales</b>                                                                                                        | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Interacciones proteína-proteína implicadas en cáncer pancreático</i>                                                         | 2.730                         |
| <i>Desarrollo de un modelo de mecánica estadística para la predicción de estabilidad y cinética de proteínas</i>                | 2.260                         |
| <i>Análisis informático multiparamétrico de imágenes de microscopía: aplicaciones en diferenciación celular y citotoxicidad</i> | 5.450                         |
| <i>Movilidad</i>                                                                                                                | 5.060                         |
| <b>TOTAL</b>                                                                                                                    | <b>15.500</b>                 |

| <b>Convenio</b>                                                                                                                                                                                            | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
| CeSar                                                                                                                                                                                                      | 20.000                        |
| <b>GRUPOS RECONOCIDOS</b>                                                                                                                                                                                  | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Grupo Consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos</i>                                                                                                                                  | 26.172                        |
| <i>Grupo Consolidado Protein Targets</i>                                                                                                                                                                   | 9.867                         |
| <i>Grupo Consolidado Biología Estructural (B18)</i>                                                                                                                                                        | 18.430                        |
| <i>Grupo de Investigación: Física Estadística y No Lineal</i>                                                                                                                                              | 12.288                        |
| <i>Física Matemática y Teoría de Campos</i>                                                                                                                                                                | 4.353                         |
|                                                                                                                                                                                                            | <b>71.110</b>                 |
| <b>UNIZAR</b>                                                                                                                                                                                              | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Producción de métodos audiovisuales para la comprensión del proceso de aislamiento y caracterización de proteínas</i>                                                                                   | 1.200                         |
| <i>Coordinación de la metodología y actividad de aprendizaje del programa de seminarios, diseñado para homogeneizar la prueba de evaluación de asignaturas del Master de Biología Molecular y Celular.</i> | 600                           |
| <i>Estructuras matemáticas en sistemas cuánticos y sus aplicaciones</i>                                                                                                                                    | 1.500                         |
| <i>Identificación de moléculas bioactivas en células troncales mediante cribado funcional de quimiotecas: herramientas para terapias seguras</i>                                                           | 19.000                        |
| <i>International Conference BIFI 2012 – Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds</i>                                                                                                              | 1.320                         |
|                                                                                                                                                                                                            | <b>23.620</b>                 |
| <b>Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud IACS</b>                                                                                                                                                     | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Ayuda para utilización de unidades de apoyo de la investigación del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud</i>                                                                                      | 5.000                         |
|                                                                                                                                                                                                            | <b>5.000</b>                  |
| <b>Concurrencia competitiva</b>                                                                                                                                                                            | <b>Importe ayuda (€) 2012</b> |
| <i>Bases de datos de resultados computacionales en química y biología molecular, Línea "Jóvenes Investigadores 2010"</i>                                                                                   | 15.000                        |
| <i>Implantación de un modelo de identificación de generadores de opinión y predicción de tendencias</i>                                                                                                    | 8.000                         |
|                                                                                                                                                                                                            | <b>23.000</b>                 |
| <b>TOTAL PROYECTOS AUTONÓMICOS</b>                                                                                                                                                                         | <b>473.067</b>                |

### **3.3.4. Financiación obtenida de empresas**

Los proyectos en colaboración con empresas durante el 2012 y el importe de la ayuda para el 2012 ha sido el que aparece en la tabla siguiente:

| <b>PROYECTOS CON EMPRESAS</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                           | <b>Importe ayuda<br/>(€) 2012</b> |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
| <i>Expresión y purificación de la proteína de la cápside VP1 de Norovirus genotipo GI.1 y GII.4 variante 2002, que se ensamblan formando partículas pseudovíricas (virus-like particles, VLPs) a partir de la cepa de baculovirus recombinante (producido mediante el sistema de vectores Bac-to-bac de Invitrogen)</i> | 2.726                             |
| <i>Análisis del efecto en la proliferación de células in-vivo e in-vitro de un nuevo producto</i>                                                                                                                                                                                                                       | 2.726                             |
| <i>Expresión y purificación de la proteína de la cápside VP1 de Norovirus genotipo GII.4. Variante 2006.B.</i>                                                                                                                                                                                                          | 1.796                             |
| <i>Modelos de centralidad y comunidades en redes de clientes de operadoras de telecomunicaciones</i>                                                                                                                                                                                                                    | 8.000                             |
| <i>Proyecto SEPS(INNPACTO 2012)</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 117.624                           |
| <i>Sistema de visualización con interacción gestual humana (Proyecto de transferencia tecnológica para "Colegio Juan de Lanuza")</i>                                                                                                                                                                                    | 5.000                             |
| <b>TOTAL</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | <b>137.871</b>                    |

### 3.4. Estructura de gastos durante el año 2012

Durante el año 2012 el instituto BIFI ha llevado una gran actividad investigadora y de difusión que ha podido ser llevada a cabo gracias a la financiación descrita en los anteriores puntos de este apartado.

El gasto principal del instituto es el personal que supone aproximadamente un 50% del gasto total. En cuanto a la partida de material fungible de laboratorio supone un 25 % y entre otros costes directos y viajes y dietas se completa el gasto del instituto, siendo la partida de viajes y dietas la menor de todas, que supone un 5%.

### Apartado 4. Actividad Científica, Innovadora y Tecnológica

Desde BIFI, en 2012 se han potenciado las líneas de colaboración entre los sectores público y privado y la mayor participación en convocatorias nacionales y sobre todo europeas.

Un desafío para el BIFI es ser motor de arranque para la colaboración con otros agentes, como empresas o centros tecnológicos, que aunque el comienzo de esta colaboraciones es complicado, pero deben tender a instaurarse de una forma estable.

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 2012, incluidos los concedidos anteriormente, pero que durante este año han estado en vigor.

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

---

##### **Proyectos Financiados por entidades europeas en 2012**

Durante el año 2012, 11 proyectos de investigación financiados por entidades europeas han sido concedidos o han estado en vigor. Los proyectos se incluyen en varios programas de ayudas europeos para el desarrollo de proyectos de investigación, tales como FP7 e Interreg IV Muchos de ellos 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 2012 casi un 20% de la total del Intituto.

*Título:* SCI-BUS. SCientific gateway Based User Support

*Entidad financiadora:* Comisión Europea. VII FP

*Duración:* 2011-2014

*Importe total* 214.230 €

*Investigador principal:* Alfonso Taracón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* SOCIETIC

*Entidad financiadora:* Comisión Europea. VII FP

*Duración:*

*Importe total:* 710.000€

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* PIREGRID

*Entidad financiadora:* INTERREG IV

*Duración:* 2009-2012

*Importe total:* 368.200 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Global Excursion

*Entidad financiadora:* Comisión Europea. VII FP

*Duración:* 2010-2012

*Importe total:* 92.560 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* SCC COMPUTING: Strategic collaboration with China on supercomputing bases Tianhe - 1A

*Entidad financiadora:* VII Programa Marco

*Duración:* 2012-2013

*Importe total:* 47.824 € €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* EGI-InSPIRE

*Entidad financiadora:* Unión Europea

*Duración:* 2010-2014

*Importe total:* 134.184 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* European Desktop Grid Initiative EDGI

*Entidad financiadora:* UE FP7 – Infraestructures – 2012 – 2

*Duración:* 2010 - 2012

*Importe total:* 251.600 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Desktop Grids For International Scientific Colaboration. DEGISCO

*Entidad financiadora:* UE FP7 – Infraestructures 2010 – 2

*Duración:* 2010 – 2012

*Importe total:* 69.000 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Time dynamics and control in nanostructures for magnetic recording and energy applications. CRONOS

*Entidad financiadora:* Seventh Framework Programme

*Duración:* 3 años

*Importe total:* 310.080 €. *Subvención:* 237.080 €.

*Investigador principal:* Alberto Castro

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Mathematical framework for multiplex networks (PLEXMATH)

*Entidad financiadora:* European Union. Project 317614.

*Duración:* 2012-2015

*Importe total:* 352.176 €

*Investigador principal:* Yamir Moreno

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Foundational Research on multilevel complex networks and systems (MULTIPLEX)

*Entidad financiadora:* European Union. Project 317532

*Duración:* 2012-2016

*Importe total:* 309.306 €

*Investigador principal:* Yamir Moreno

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder



## **Financiados por entidades nacionales en 2012**

En cuanto a los proyectos de investigación del BIFI que han sido financiados por entidades nacionales puede decirse que la gran mayoría, excepto 3 de ellos corresponde a la resolución de aprobación de las convocatorias del antiguo Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) y el actual Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO), en diferentes programas de financiación.

*Título:* Mecanismos catalíticos en flavoenzimas: clave para su utilización biotecnológica o terapéutica.

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación (actual MINECO).

BIO2010-14983

*Duración:* Enero 2011-Diciembre 2013

*Importe total:* 266.000 €. *Subvención:* 220.000 €

*Investigador principal:* Milagros Medina

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Realidad aumentada.

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación y Fundación Caixa.

FCT-11-1909

*Duración:* Enero 2011-Mayo 2012

*Subvención:* 42.000 €

*Investigador principal:* Milagros Medina

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Red Temática de Biotecnología de materiales lignocelulósicos: retos enzimáticos, químicos y moleculares para su aplicación industrial, energética y medioambiental.

*Entidad financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO).

BIO2011-15394-E

*Duración:* 2012

*Subvención:* 20.000 €

*Investigador principal:* Susana Camero

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

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

*Entidad financiadora:* FIS2009-13364-C02-01 (MICINN)

*Duración:* 01/01/2010-31/12/2012

*Subvención:* 86000€

*Investigador principal:* Pierpaolo Bruscolini

*Tipo de participación en el proyecto:* líder

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

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Duración:* 2010-2012

*Importe total:* 340.911

*Investigador principal:* Pierpaolo Bruscolini

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Inhibición de la agregación de proteínas por polielectrolitos de alta densidad de carga. IPD

*Entidad financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad. CTQ2011-24393.

*Duración:* 2012-2014

*Importe total:* 92.000 €

*Investigador principal:* Javier Gómez

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Spanish Ion Channel initiative. SICI

*Entidad financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad. CSD2008-00005.

*Duración:* 2009-2013

*Importe total:* 180.000 €

*Investigador principal:* José Luis Neira

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Procesos dinámicos evolutivos: virus, ecosistemas y comportamientos sociales. PRODIEVO.

*Entidad financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad

*Duración:* 2012-2014

*Importe total:* 39.930 €. *Subvención:* 39.930 €

*Investigador principal:* José Antonio Cuesta Ruiz

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

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

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Duración:* enero 2011-diciembre 2013

*Subvención:* 120000 €

*Investigador principal:* Ramón Hurtado-Guerrero

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

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

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto FIS2009-13364-C02-02

*Duración:* 2010 – 2012

*Importe total:* 35.000 €. *Subvención:* 35.000 €

*Investigador principal:* Antonio Rey Gayo

*Tipo de participación en el proyecto:* IP

*Título:* Convenio de colaboración

*Entidad financiadora:* Genoma España

*Duración:* 2008-2012

*Importe total:* 295.000 €. *Subvención:* 295.000 €

*Investigador principal:* Javier Sancho

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

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

*Entidad financiadora:* MICINN

*Duración:* 2011-2013

*Importe total:* 260.000 €. *Subvención:* 260.000 €

*Investigador principal:* Javier Sancho

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Técnicas avanzadas de resonancia paramagnética electrónica (EPR) para el diseño de materiales funcionales bioinspirados con aplicaciones energéticas.

*Entidad financiadora:* Plan Nacional I+D+i. Ref: MAT2011-23861.

*Duración:* 2012-2014

*Importe total:* 61.983 €

*Investigador principal:* Jesús Ignacio Martínez Martínez

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* BIFI2012 - Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds

*Entidad financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad (SAF2011-15732-E)

*Duración:* 2012

*Importe total:* 7.000 €. *Subvención:* 7.000 €

*Investigador principal:* Adrián Velázquez Campoy

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* International Conference BIFI 2012 – Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds

*Entidad financiadora:* Fundación Genoma España

*Duración:* 2012

*Importe total:* 3.500 €. *Subvención:* 3.500 €

*Investigador principal:* José Alberto Carrodegua

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Bioavailability of amphiphilic ligands - Drugs and metabolites

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

*Duración:* 2012-2013

*Importe total:* 6.000 €. *Subvención:* 6.000 €

*Investigador principal:* Adrián Velázquez Campoy

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder (Grupo español)

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

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

*Duración:* 2010-2013

*Importe total:* 90.000 €. *Subvención:* 90.000 €

*Investigador principal:* Adrián Velázquez Campoy

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Simulación y modelización de materiales complejos ( FIS2009-12648-C03-01)

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Duración:* del 1/1/2009 al 31/12/2012

*Importe total:* 101.850,00 €. *Subvención:* 92000,00€

*Investigador principal:* Víctor Martín Mayor

*Tipo de participación en el proyecto:* Se trata de un proyecto coordinado UCM/UZ. Los miembros de la UZ pertenecen al BIFI. Los de la UCM son

miembros correspondientes del BIFI. El coordinador del proyecto pertenece a la UCM.

*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:* Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte

*Entidad financiadora:* MICINN

*Duración:* 2010-2012

*Importe total:* 174999.99 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Investigador

*Título:* Estructuraciones matemáticas en sistemas cuánticos y sus aplicaciones.

*Entidad financiadora:* MICINN

*Duración:* 2012

*Importe total:* 3000 €

*Investigador principal:* Jesús Clemente Gallardo

*Tipo de participación en el proyecto:* Investigador Principal

*Título:* Realidad aumentada

*Entidad financiadora:* FECYT

*Duración:* 2011-2012

*Importe total:* 62.022,10 €. *Subvención:* 30.000€

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón Lafita

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Modificación de cápsidas víricas por ingeniería de proteínas, como una etapa en el desarrollo de nanocontenedores para la administración dirigida de fármacos. BIO2009-10092

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación

*Duración:* 3 años

*Importe total:* 314.600 €. *Subvención:* 314.600 €

*Investigador principal:* Mauricio García Mateu

*Tipo de participación en el proyecto:*

*Título:* Plasmónica en grafeno y superficies metálicas.

*Entidad financiadora:* Proyecto del Plan Nacional de I+D+I. (MAT2011-28581-C02-02)

*Duración:* 2012 hasta: 2014

*Importe total:* 90000

*Investigador principal:* Luis Martín Moreno

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Consolider NanoLight.es

*Entidad financiadora:* Ministerio de Ciencia e Innovación (CSD2007-046)

*Duración:* 2008 hasta: 2012

*Importe total:* 367884€.

*Investigador principal:* Niek Van Hulst

*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título:* Sistema experto de probabilidad y severidad de incidentes en redes eléctricas

*Entidad financiadora:* MINECO

*Duración:* 2012-2014

*Investigador Principal:* David Iñiguez Dieste

*Importe total del Proyecto (para la BIFI):* 149995,06

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Computación avanzada en sistemas complejos y fenómenos de transporte FIS2012-35719-C02-02 *Entidad financiadora:* MINECO

*Duración:* 2012-2014

*Investigador Principal:* David Iñiguez Dieste

*Importe total del subproyecto:* 93.000 €

*Tipo de participación en el proyecto:* Proyecto coordinado UCM/UZ

*Título:* Ibercivis, computación voluntaria y ciencia ciudadana

*Entidad Financiadora:* MICINN

*Duración:* 2012

*Investigador Principal:* Alfonso Tarancón

*Importe Total del Proyecto:* 60.000 €

*Título:* Ibercivis, Cooperación Hispano Portuguesa en computación voluntaria y ciencia ciudadana

*Entidad financiadora:* MINECO

*Duración:* 2012

*Investigador Principal:* A. Tarancón

*Importe Total del Proyecto:* .2.500 €

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Cálculos de inducción de corriente y de momento por inyección de partículas neutras energéticas en plasmas de fusión por confinamiento magnético.

*Entidad financiadora:* CIEMAT:

*Duración:* 2011-2012

*Investigador Principal:* A. Tarancón

*Importe Total del Proyecto:* 41.000 €

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Equipamiento del Centro de Supercomputación de Aragón (CeSAr)

*Administración Financiadora:* MICINN

*Duración:* 2011-2014

*Investigador Principal:* A. Tarancón

*Importe Total del Proyecto:* 2. 000.000 €

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Ibercivis: Plataforma de investigación basada en la computación voluntaria

*Entidad financiadora:* MICINN

*Duración:* 2011-2012

*Investigador Principal:* A. Tarancón

*Importe total del Proyecto: 100.000 €*  
*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título: Acuerdo Ciemat y UZ para el mantenimiento de la organización virtual de fusión. Computación en Grid para Fusión*  
*Entidad Financiadora: CIEMAT*  
*Duración: 2010-2012*  
*Investigador Principal: A. Tarancón*  
*Importe Total del Proyecto: 40.850 €*  
*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título: Ordenador dedicado de nueva generación (II)*  
*Entidad financiadora: FEDER-MEC*  
*Duración: 2010-2012*  
*Investigador Principal: José Félix Sáenz Lorenzo*  
*Responsable Científico: A. Tarancón*  
*Importe total del proyecto: 779.879 €*  
*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título: Computación avanzada en materiales y fenómenos de transporte*  
*Entidad financiadora: MEC FIS 2009-12648-C03-02. Proyecto coordinado Universidad de Zaragoza y Universidad Complutense de Madrid*  
*Duración: 2009-2012*  
*Investigador Principal en Aragón: A. Tarancón*  
*Importe concedida Universidad de Zaragoza: 167.000 € + 1 Beca predoctoral*  
*Importe total del proyecto: 167.000 €*  
*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título: Aragrl+D: Creación de una Grid en Aragón (FONDOS FEDER)*  
*Entidad financiadora: FEDER-MEC*  
*Duración: 2010-2012*  
*Responsable Científico: A. Tarancón*  
*Importe total del proyecto: 654.165 €*  
*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título: Física Estadística, Teoría y Simulación de Sistemas Complejos, y sus Aplicaciones Multi-disciplinarias*  
*Entidad financiadora: MICINN-FEDER, FIS2009-08451*  
*Duración: 2009-2013*  
*Responsable Científico: Joaquín Marro*  
*Importe total del proyecto: 654.165 €*  
*Tipo de participación en el proyecto: Líder*

*Título: Evolucion multigenomica de las gramineas templadas (Pooideae, Poaceae). Biogeografía y filogeografía de especies modelo de pooideas (Festuca, Anthoxanthum s.l, Brachypodium, Bromus) en el viejo mundo*  
*Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia y Tecnología - CICYT. Proyecto CGL2009-12955-C02-01*  
*Duración: 2012-2012*  
*Importe total: €. Subvención: €*  
*Investigador principal: Pilar Catalán*

*Entidades participantes:* Universidad de Zaragoza, Universidade da Coruña, Universidad de León, Indiana University, Natural History Museum (Oslo)

*Título:* Genética y ecología del paisaje de pastos subalpinos pirenaico-cantábricos (*Festuca*, Gramineae): Conservación de la biodiversidad y restauración vegetal.

*Entidad financiadora:* Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino. Organismo Autónomo de Parques Nacionales. Proyecto 059/2009

*Duración:* 2012-2012

*Importe total:* 83.547 €. *Subvención:* 83.547 €

*Investigador principal:* Pilar Catalán

*Entidades participantes:* Universidad de Zaragoza, Instituto Pirenaico de Ecología, Universidade da Coruña, Universidad de León

### **Financiados por entidades autonómicas en 2012**

La financiación por entidades autonómicas en 2012 para el desarrollo de proyectos de investigación ha sido de varios tipos. Ha habido colaboraciones enmarcadas en convenios de colaboración, como el que se firma con el Gobierno de Aragón para soporte de CeSAr.

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

### **CONVENIOS**

*Título:* Convenio con el Gobierno de Aragón para soporte del nodo de la RES, CAESARAUGUSTA

*Entidad financiadora:* Gobierno de Aragón

*Duración:* 2012

*Importe total:* 20.000

*Investigador principal:* A. Tarancón

*Tipo de participación en el proyecto:* líder

### **GRUPOS RECONOCIDOS POR EL GOBIERNO DE ARAGÓN**

*Título* Grupo Consolidado de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

*Entidad financiadora:* Diputación General de Aragón

*Duración:* 2012

*Importe total:* 26.172 €. *Subvención:* 26.172 €

*Investigador principal:* Alfonso Tarancón

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título* Grupo Consolidado Protein Targets

*Entidad financiadora:* Diputación General de Aragón

*Duración:* 2012

*Importe total:* 9.867 €. *Subvención:* 9.867 €

*Investigador principal:* Javier Sancho Sanz

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder



*Título:* Grupo Consolidado Biología Estructural (B18)  
*Entidad financiadora:* Diputación General de Aragón  
*Duración:* 2012  
*Subvención:* 18.430 €  
*Investigador principal:* Carlos Gómez-Moreno  
*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Grupo de Investigación: Física Estadística y No Lineal.  
*Entidad financiadora:* Diputación General de Aragón.  
*Duración:* 2012  
*Importe total:* 12.288 €. *Subvención:* 12.288 €  
*Investigador principal:* Dr. Luis Mario Floría Peralta.  
*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Física Matemática y Teoría de Campos  
*Entidad financiadora:* DGA  
*Duración:* 2011-2012  
*Importe total:* 4.353 €. *Subvención:* 4.353€  
*Investigador principal:* Manuel Fernández Rañada  
*Tipo de participación en el proyecto:* Investigador

## **UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA**

*Título:* Producción de métodos audiovisuales para la comprensión del proceso de aislamiento y caracterización de proteínas.  
*Entidad financiadora:* Universidad de Zaragoza. PIECyT\_11\_1\_184  
*Duración:* Año Académico, 2011-2012  
*Importe total:* 1.200 €  
*Investigador principal:* Alberto Anel  
*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Coordinación de la metodología y actividad de aprendizaje del programa de seminarios, diseñado para homogeneizar la prueba de evaluación de asignaturas del Master de Biología Molecular y Celular.  
*Entidad financiadora:* Universidad de Zaragoza. PIECyT\_11\_1\_315  
*Duración:* Año Académico, 2011-2012  
*Importe total:* 600 €  
*Investigador principal:* María Iturralde Navarro  
*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

*Título:* Estructuras matemáticas en sistemas cuánticos y sus aplicaciones  
*Entidad financiadora:* Universidad de Zaragoza  
*Duración:* 2012  
*Importe total:* 1.500 €  
*Investigador principal:* Jesús Clemente Gallardo  
*Tipo de participación en el proyecto:* Investigador Principal

## **Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud IACS**

*Título del proyecto:* Ayuda para utilización de unidades de apoyo de la investigación del Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud.  
*Entidad financiadora:* Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud.

*Entidades participantes:* Universidad de Zaragoza. Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud.

*Duración,* desde: 2012 hasta: 2012

*Cuantía de la subvención:* 5.000 €

*Investigador responsable:* José A. Carrodegua.

*Tipo de participación en el proyecto:* Investigador principal

## **CONCURRENCIA COMPETITIVA**

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

*Entidad financiadora:* Aragón I+D (ARAID) e IberCaja

*Duración:* 27/12/2010-01/11/2012

*Investigador principal:* Pablo Echenique

*Importe total:* 30.000€

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Implantación de un modelo de identificación de generadores de opinión y predicción de tendencias

*Entidad financiadora:* Gobierno de Aragón

*Duración:* 2012

*Investigador principal:*

*Importe total:* 8.000€

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

## **PROYECTOS INTRAMURALES BIFI**

*Título:* Interacciones proteína-proteína implicadas en cáncer pancreático

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

*Duración:* 2011-2012

*Importe total:* 2.730 €. *Subvención:* 2.730 €

*Investigador principal:* Adrián Velázquez Campoy

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

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

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

*Duración:* 2011-2012

*Importe total:* 2.260 €. *Subvención:* 2.260 €

*Investigador principal:* Pierpaolo Bruscolini

*Tipo de participación en el proyecto:* Socio

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

*Entidad financiadora:* BIFI

*Duración:* 2012

*Importe total:* 5.450 €

*Investigador principal:* José Alberto Carrodegua y David Íñiguez

*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Movilidad  
*Entidad financiadora:* BIFI  
*Duración:* 2012  
*Importe total:* 5.060 €  
*Investigador principal:* Yamir Moreno y David Íñiguez  
*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

## **COMUNIDAD AUTÓNOMA DE MADRID**

*Título:* Modelización y simulación de sistemas complejos. MODELICO-CM.  
*Entidad financiadora:* Comunidad de Madrid  
*Duración:* 2010-2013  
*Importe total:* 816.500 €. *Subvención:* 816.500 €  
*Investigador principal:* Enrique Lomba García (coordinador), José A. Cuesta (I.P. del nodo GISC-UC3M)  
*Tipo de participación en el proyecto:* Líder

*Título:* Química a alta presión, QUIMAPRES  
*Entidad financiadora:* Comunidad de Madrid. Proyecto S2009/PPQ-1551  
*Duración:* 2010 – 2013  
*Importe total:* 893.300 €. *Subvención:* 75.000 €  
*Investigador principal:* Valentín García Baonza  
*Tipo de participación en el proyecto:* IP del subproyecto UCM-SIMPOL

### **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 2012 se han llevado a cabo estos proyectos:

*Título del proyecto:* Expresión y purificación de la proteína de la cápside VP1 de Norovirus genotipo GI.1 y GII.4 variante 2002, que se ensamblan formando partículas pseudovíricas (virus-like particles, VLPs) a partir de la cepa de baculovirus recombinante (producido mediante el sistema de vectores Bac-to-bac de Invitrogen).  
*Entidad financiadora:* Certest Biotec. S.L.  
*Entidades participantes:* Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos/ Certest Biotec S.L.  
*Duración, desde:* 2012 hasta: 2013  
*Cuantía de la subvención:* 2725,8 €  
*Investigador responsable:* José A. Carrodegas.

*Título del proyecto:* Análisis del efecto en la proliferación de células in-vivo e in-vitro de un nuevo producto.  
*Entidad financiadora:* María Teresa Bascuas Poc  
*Entidades participantes:* Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos.  
*Duración, desde:* 2012 hasta: 2012

*Cuántía de la subvención:* 1795,96 €  
*Investigador responsable:* José A. Carrodegua.

*Título del proyecto:* Expresión y purificación de la proteína de la cápside VP1 de Norovirus genotipo GII.4. Variante 2006.B.  
*Entidad financiadora:* Certest Biotec. S.L.  
*Entidades participantes:* Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos/ Certest Biotec S.L.  
*Duración,* desde: 2012 hasta: 2012  
*Cuántía de la subvención:* 2725,8 €  
*Investigador responsable:* José A. Carrodegua.

*Título del proyecto:* Modelos de centralidad y comunidades en redes de clientes de operadoras de telecomunicaciones  
*Empresa:* Trustserver. Gobierno de Aragón. Cheque Tecnológico  
*Duración;* Marzo-agosto 2012  
*Importe del proyecto:* 8000  
*Investigador principal:* Yamir Moreno

*Título:* Modelo de identificación de clientes únicos en una compañía de telefonía móvil  
*Entidad financiadora:* Applied Advanced Analytics  
*Duración:* 2011-2012  
*Importe total:* 12800€  
*Investigador principal:* David Iñiguez

*Título:* Sistema de visualización con interacción gestual humana  
*Entidad financiadora:* Proyecto de transferencia tecnológica para "Colegio Juan de Lanuza".  
*Duración:* 2012  
*Importe total:* 5000€  
*Investigador principal:* David Iñiguez

## 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 2012 publicados en revistas de difusión internacional y su índice de impacto reconocido según el Institute for Scientific Information-ISI.

|                                                                                                                                                                                                                                                                                         | ISI   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Aguado-Llera D, Bacarizo J, Gregorio-Teruel L, Taberner-Sanchís F, Cámara-Artigas A, and Neira JL. Biophysical characterization of the isolated c-terminal region of the transient receptor potential vanilloid 1. FEBS Letters 586:1154-1159                                           | 3.538 |
| Aguado-Llera D, Doménech R, Marenchino M, Vidal M, and Neira JL. Non-canonical residues of the marginally stable monomeric ubiquitin conjugase from goldfish are involved in binding to the c-terminus of Ring1B. Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics 1824:991-1001 | 3.635 |
| Alonso JL, Clemente-Gallardo J, Cuchí JC, Echenique P, and Falceto F. Ehrenfest dynamics is purity non-preserving: A necessary ingredient for decoherence. Journal of Chemical Physics 137:054106                                                                                       | 3.333 |
| Alonso JL, Castro A, Clemente-Gallardo J, Echenique P, Mazo JJ, Polo V, Rubio A, and                                                                                                                                                                                                    | 3.333 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |        |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| Zueco D. Non-adiabatic effects within a single thermally-averaged potential energy surface: Thermal expansion and reaction rates of small molecules. <i>Journal of Chemical Physics</i> 137:22A533                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |        |
| Alonso JL, Castro A, Echenique P, and Rubio A. On the combination of TDDFT with molecular dynamics: New developments. In "Time Dependent Density Functional Theory" (Miguel Marques et al, Eds.), pp.301–315, Lecture Notes in Physics 837 (Springer Berlin/Heidelberg)                                                                                                                                                                                                                                                      | NA     |
| Alvarez G, Aso N, Belanger DP, Durand AM, Martin-Mayor V, Motoya K, and Muro Y. Neutron scattering experiments and simulations near the magnetic percolation threshold of Fe <sub>x</sub> Zn <sub>1-x</sub> F <sub>2</sub> . <i>Physical Review B</i> 86:24416                                                                                                                                                                                                                                                               | 3.691  |
| Alvarez-Estrada RF, Calvo GF, and Serrano H. A transfer integral technique for solving a class of linear integral equations: Convergence and applications to DNA. <i>Journal of Computational and Applied Mathematics</i> 236:3561-3571                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 1.112  |
| Alvarez-Estrada RF, Pastor I, Guasp J, and Castejón F. Nonlinear relativistic single-electron Thomson scattering power spectrum for incoming laser of arbitrary intensity. <i>Physics of Plasmas</i> 19:062302                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 2.147  |
| Alvarez-Estrada RF. Classical and quantum models in non-equilibrium statistical mechanics: Moment methods and long-time approximations. <i>Entropy</i> 14:291-322                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 1.183  |
| Andrade X, Alberdi-Rodríguez J, Strubbe DA, Oliveira MJT, Nogueira F, Castro A, Muguerza J, Arruabarrena A, Louie SG, Aspuru-Guzik A, Rubio A, and Marques MAL. Time-dependent density-functional theory in massively parallel computer architectures: The Octopus project. <i>Journal of Physics - Condensed Matter</i> 24:233202                                                                                                                                                                                           | 2.546  |
| Angarica VE, and Sancho J. Protein dynamics governed by interfaces of high polarity and low packing density. <i>PLoS ONE</i> 7:e48212                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 4.092  |
| Baity-Jesí M, Baños RA, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero A, Guidetti M, Iñiguez D, Maiorano A, Mantovani F, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz Sudupe A, Navarro D, Parisi G, Pivanti M, Perez-Gaviro S, Ricci-Tersenghi F, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancon A, Tellez P, Tripiccion R, and Yllanes D. Reconfigurable computing for Monte Carlo simulations: Results and prospects of the Janus project. <i>European Physical Journal -Special Topics</i> 210:33-51 | 1.562  |
| Baños RA, Cruz A, Fernandez LA, Gil-Narvion JM, Gordillo-Guerrero A, Guidetti M, Iñiguez D, Maiorano A, Marinari E, Martin-Mayor V, Monforte-Garcia J, Muñoz Sudupe A, Navarro D, Parisi G, Perez-Gaviro S, Ruiz-Lorenzo JJ, Schifano SF, Seoane B, Tarancon A, Tellez P, Tripiccion R, and Yllanes D. Thermodynamic glass transition in a spin glass without time-reversal symmetry. <i>Proceedings of the National Academy of Sciences USA</i> 109:6452-6456                                                               | 9.681  |
| Baños RA, Fernandez LA, Martin-Mayor V, and Young AP. Correspondence between long-range and short-range spin glasses. <i>Physical Review B</i> 86:134416                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 3.691  |
| Barrera FN, and Neira JL Turbulent times in southern European science. <i>The Lancet</i> 380:1229-1230                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 38.278 |
| Bastolla U, Bruscolini P, and Velasco JL. Sequence determinants of protein folding rates: Positive correlation between contact energy and contact range indicates selection for fast folding. <i>Proteins - Structure, Function and Bioinformatics</i> 80:2287–2304                                                                                                                                                                                                                                                          | 3.392  |
| Billoire A, Maiorano A, and Marinari E. Correlated domains in spin glasses. <i>Journal of Statistical Mechanics – Theory and Experiment</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 1.727  |
| Bocanegra R, Rodríguez-Huete A, Fuertes MA, and Mateu MG. Molecular recognition in the human immunodeficiency capsid and antiviral design. <i>Virus Research</i> 169:388-410                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 2.941  |
| Borge-Holthoefer J, and Moreno Y. Absence of influential spreaders in rumor dynamics. <i>Physical Review E</i> 85:026116                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 2.255  |
| Borge-Holthoefer J, González-Bailón S, Rivero A, and Moreno Y. The Spanish Indignados Movement: Time dynamics, geographical distribution, and recruitment mechanisms. Chapter contribution to <i>Online Collective Action</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                | NA     |
| Borge-Holthoefer J, Meloni S, Gonçalves B, and Moreno Y. Emergence of influential spreaders in modified rumor models. <i>Journal of Statistical Physics</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 1.397  |
| Borge-Holthoefer J, Moreno Y, and Arenas A. Topological versus dynamical robustness in a lexical network. <i>International Journal of Bifurcation and Chaos</i> 22:1250157                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 0.755  |
| Borge-Holthoefer J, Rivero A, and Moreno Y. Locating privileged information spreaders during political protests on an Online Social Network. <i>Physical Review E</i> 85:066123                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 2.255  |
| Cánovas A, Varona L, Burgos C, Galve A, Carrodegua JA, Ibáñez-Escriche N, Martín-Burriel I, and López-Buesa P. Early postmortem gene expression and its relationship to composition and quality traits in pig longissimus dorsi muscle. <i>Journal of Animal Science</i>                                                                                                                                                                                                                                                     | 2.096  |
| Capitán JA, Borge-Holthoefer J, Gómez S, Martínez-Romo J, Araujo L, Cuesta JA, and Arenas A. Local-based semantic navigation on a networked representation of information.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 4.092  |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| PLoS ONE 7:e43694                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |
| Cardillo A, Meloni S, Gomez-Gardeñes J, and Moreno Y. Velocity-enhanced cooperation of moving agents playing public goods games. <i>Physical Review E</i> 85:067101                                                                                                                                                                                                                                                 | 2.255 |
| Carretero-Palacios S, García-Vidal FJ, Martín-Moreno L, and y S. G. Rodrigo. Effect of film thickness and dielectric environment on optical transmission through subwave-length holes. <i>Physical Review B</i> 85:035417                                                                                                                                                                                           | 3.691 |
| Castellanos M, Pérez R, Carrasco C, Hernando-Pérez M, Gómez-Herrero J, de Pablo PJ, and Mateu MG. A balance between stiffness and elasticity provides a mechanical foundation for the infectivity of a virus. <i>Proceedings of the National Acadademy of Sciences USA</i> 109:12028-12033                                                                                                                          | 9.681 |
| Castellanos M, Pérez R, Carrillo PJP, de Pablo PJ, and Mateu MG. Mechanical disassembly of single virus particles reveals kinetic intermediates predicted by theory. <i>Biophysical Journal</i> 102:2615-2624                                                                                                                                                                                                       | 3.653 |
| Castro A, and Gross EKV. Quantum optimal control. In "Time Dependent Density Functional Theory" (Miguel Marques et al, Eds.), pp.265–276, <i>Lecture Notes in Physics</i> 837 (Springer Berlin/Heidelberg)                                                                                                                                                                                                          | NA    |
| Castro A, Isla M, Martínez JI, and Alonso JA. Scattering of a proton with the Li4 cluster: Non-adiabatic molecular dynamics description based on time-dependent density-functional theory. <i>Chemical Physics</i> 399:230                                                                                                                                                                                          | 1.896 |
| Castro A, Werschnik J, and Gross EKV. Controlling the dynamics of many-electron systems from first principles: A marriage of optimal control and time-dependent density-functional theory. <i>Physical Review Letters</i> 109:153603                                                                                                                                                                                | 7.370 |
| Cavagna A, Grigera TS, and Verrocchio P. Dynamic relaxation of a liquid cavity under amorphous boundary conditions. <i>Journal of Chemical Physics</i> 136:204502                                                                                                                                                                                                                                                   | 3.333 |
| Clemente-Gallardo J, and Marmo S. Tensorial description of quantum mechanics, <i>Physica Scripta</i> T150                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 1.204 |
| Conesa C, Doss MX, Antzelevitch C, Sachinidis A, Sancho J, and Carrodeguas JA. Identification of specific pluripotent stem cell death-inducing small molecules by chemical screening. <i>Stem Cell Reviews and Reports</i> 8:116-127                                                                                                                                                                                | 3.739 |
| Conte R, Gilbert N, Cioffi-Revilla C, Deffuant G, Kertesz J, Loreto V, Moat S, Nadal JP, Sánchez A, Nowak A, Flache A, San Miguel M, and Helbing D. Manifesto of computational social science. <i>European Physical Journal - Special Topics</i> 214:325-346                                                                                                                                                        | 1.562 |
| Cozzo E, Arenas A, and Moreno Y. Stability of boolean multilevel networks. <i>Physical Review E</i> 86:036115                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 2.255 |
| Cronin KA, and Sánchez A. Social dynamics and cooperation: The case of nonhuman primates and its implications for human behavior. <i>Advances in Complex Systems</i> 15 (Suppl.1):1250066                                                                                                                                                                                                                           | 0.653 |
| Doménech R, Martínez-Gómez AI, Aguado-Llera D, Martínez-Rodríguez S, Clemente-Jiménez JM, Velázquez-Campoy A, and Neira JL. Stability and binding of the phosphorylated species of the N-terminal domain of enzyme I and the histidine phosphocarrier protein from the <i>Streptomyces coelicolor</i> phosphoenolpyruvate:sugar phosphotransferase system. <i>Archives of Biochemistry and Biophysics</i> 526:44-53 | 2.935 |
| Doménech R, Martínez-Rodríguez S, Velázquez-Campoy A, and Neira JL. Peptides as inhibitors of the first phosphorylation step of the <i>Streptomyces coelicolor</i> phosphoenolpyruvate:sugar phosphotransferase system. <i>Biochemistry</i> 51:7393-7402                                                                                                                                                            | 3.422 |
| Enciso M, and Rey A. Simple model for the simulation of peptide folding and aggregation with different sequences. <i>Journal of Chemical Physics</i> 136:215103                                                                                                                                                                                                                                                     | 3.333 |
| Espinosa J, López-Redondo ML, Miguel-Romero I, Neira JL, Marina A, and Contreras A. Insights into the mechanism of activation of the phosphorylation-independent response regulator NBLR. Role of residues Cys69 and Cys96. <i>Biochimica et Biophysica Acta - Gene Regulatory Mechanisms</i> 1812:382-390                                                                                                          | 4.405 |
| Faisca PFN, Travasso RDM, Parisi A, Rey A. Why do protein folding rates correlate with metrics of native topology? <i>PLoS ONE</i> 7:e35599                                                                                                                                                                                                                                                                         | 4.092 |
| Farmer JD, Gallegati M, Hommes C, Kirman A, Ormerod P, Cincotti S, Sánchez A, and Helbing D. A complex systems approach to constructing better models for managing financial markets and the economy. <i>European Physical Journal - Special Topics</i> 214:295-324                                                                                                                                                 | 1.562 |
| Fernandez LA, Gordillo-Guerrero A, Martin-Mayor V, and Ruiz-Lorenzo JJ. Numerical test of the Cardy-Jacobsen conjecture in the site-diluted Potts model in three dimensions. <i>Physical Review B</i>                                                                                                                                                                                                               | 3.691 |
| Fernández LA, Martin-Mayor V, Seoane B, and Verrocchio P. Equilibrium fluid-solid coexistence of hard spheres. <i>Physical Review Letters</i> 108:165701                                                                                                                                                                                                                                                            | 7.370 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |        |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| Fernández-Fueyo E, Ruiz-Dueñas FJ, Ferreira P, +62 autores, and Cullen D. Comparative genomics of Ceriporiopsis-subvermisporea and Phanerochaete-chrysosporium provide insight into selective ligninolysis. <i>Proceedings of the National Academy of Sciences USA</i> 109:5458-5463                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 9.681  |
| Fiasconaro A, and Falo F. A dynamical model for the full stretching curve of DNA. <i>Physical Review E</i> 86:032902                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 2.255  |
| Fiasconaro A, Mazo JJ, and Falo F. Michaelis-Menten dynamics of a polymer chain out of a dichotomous ATP-based motor. <i>New Journal of Physics</i> 14:023004                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 4.177  |
| Floudas D, Binder M, Riley R, Barry K, Blanchette RA, Henrissat B, Martínez AT, Otillar R, Spatafora JW, Yadav JS, Aerts A, Benoit I, Boyd A, Carlson A, Copeland A, Coutinho PM, de Vries RP, Ferreira P, Findley K, Foster B, Gaskell J, Glotzer D, Górecki P, Heitman J, Hesse C, Hori C, Igarashi K, Jurgens JA, Kallen N, Kersten P, Kohler A, Kües U, Kumar TK, Kuo A, LaButti K, Larrondo LF, Lindquist E, Ling A, Lombard V, Lucas S, Lundell T, Martin R, McLaughlin DJ, Morgenstern I, Morin E, Murat C, Nagy LG, Nolan M, Ohm RA, Patyshakuliyeva A, Rokas A, Ruiz-Dueñas FJ, Sabat G, Salamov A, Samejima M, Schmutz J, Slot JC, St John F, Stenlid J, Sun H, Sun S, Syed K, Tsang A, Wiebenga A, Young D, Pisabarro A, Eastwood DC, Martin F, Cullen D, Grigoriev IV, and Hobbitt DS. The Paleozoic origin of enzymatic lignin decomposition reconstructed from 31 fungal genomes. <i>Science</i> 336:1715-1719 | 31.201 |
| García-Fandiño R, Bernadó P, Ayuso-Tejedor S, Sancho J and Orozco M. Defining the nature of thermal intermediate in 3 state folding proteins. Apoflavodoxin, a study case. <i>PLoS Computational Biology</i> 8:e1002647                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 5.215  |
| García-Risueño P, and Echenique P. Linearly scaling direct method for accurately inverting sparse banded matrices. <i>Journal of Physics A - Mathematical and Theoretical</i> 45:065204                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 1.564  |
| Gómez-Gardeñes J, Gracia-Lázaro C, Floría LM, and Moreno Y. Evolutionary dynamics on interdependent networks. <i>Physical Review E</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 2.255  |
| González B, Garrido F, Ortega R, Martínez-Júlvez M, Revilla-Guarinos A, Pérez-Pertejo Y, Velázquez-Campoy A, Sanz-Aparicio J, and Pajares MA. NADP+ binding to the regulatory subunit of methionine adenosyltransferase II increases intersubunit binding affinity in the hetero-trimer. <i>PLoS ONE</i> 7:e50239                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 4.092  |
| González-Bailón S, Borge-Holthoefer J, and Moreno Y. Broadcasters and hidden influentials in online protest diffusion. <i>American Behavioral Scientist</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | NA     |
| González-Bailón S, Borge-Holthoefer J, and Moreno Y. Online networks and the diffusion of protest. Chapter contribution to <i>Analytical Sociology - Norms, Actions and Networks</i>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | NA     |
| Gracia-Lázaro C, Cuesta JA, Sánchez A, and Moreno Y. Human behavior in Prisoner's Dilemma experiments suppresses network reciprocity. <i>Scientific Reports</i> 2:325                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | NA     |
| Gracia-Lázaro C, Ferrer A, Ruiz G, Tarancón A, Cuesta JA, Sánchez A, and Moreno Y. Heterogeneous networks do not promote cooperation when humans play a Prisoner's Dilemma. <i>Proceedings of the National Academy of the USA</i> 109:12922-12926                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 9.681  |
| Graña-Montes R, de Groot NS, Castillo V, Sancho J, Velázquez-Campoy A, and Ventura S. Contribution of disulfide bonds to stability, folding and amyloid fibril formation: The PI3-SH3 domain case. <i>Antioxidant and Redox Signaling</i> 16:1-15                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 8.456  |
| Grujić J, Cuesta JA, and Sánchez A. On the coexistence of cooperators, defectors and conditional cooperators in the multiplayer iterated Prisoner's Dilemma. <i>Journal of Theoretical Biology</i> 300:299-308                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 2.208  |
| Grujić J, Eke B, Cabrales A, Cuesta JA, and Sánchez A. Three is a crowd in iterated prisoner's dilemmas: Experimental evidence on reciprocal behavior. <i>Scientific Reports</i> 2:638                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | NA     |
| Hernández-Ortega A, Ferreira P, and Martínez AT. Fungal aryl-alcohol oxidase: A peroxide-producing flavoenzyme involved in lignin degradation? <i>Applied Microbiology and Biotechnology</i> 93:1395-1410                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 3.425  |
| Hernández-Ortega A, Ferreira P, Merino P, Medina M, Guallar V, and Martínez AT. Stereoselective hydride transfer by aryl-alcohol oxidase, a member of the GMC superfamily. <i>ChemBioChem</i> 13:427-435                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 3.944  |
| Hernández-Ortega A, Lucas F, Ferreira P, Medina M, Guallar V, and Martínez AT. Role of active site histidines in the two half-reactions of the aryl-alcohol oxidase catalytic cycle. <i>Biochemistry</i> 51:6995-6608                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 3.422  |
| Huidobro PA, Nikitin AY, González-Ballesteros C, Martín-Moreno L, and García-Vidal FJ. Superradiance mediated by graphene surface plasmons. <i>Physical Review B</i> 85:155438                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 3.691  |
| Hurtado-Guerrero R, and Davies GJ. Recent structural and mechanistic insights into post-translational enzymatic glycosylation. <i>Current Opinion in Chemical Biology</i> 16:479-487                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 9.723  |
| Ibar J, Ruiz G, Tarancón A, and Vallés R. Optiweb: An optimization application for steel cut                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 0.239  |



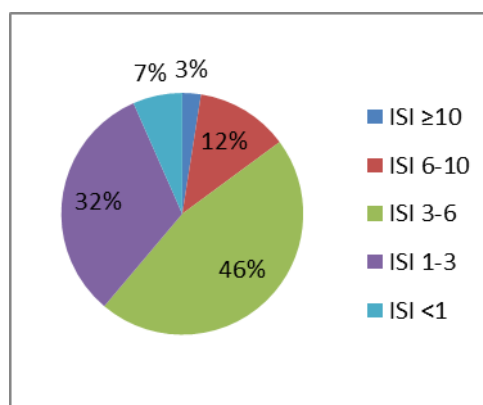
|                                                                                                                                                                                                                                                                                       |       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| industries ported to the grid in the framework of PireGrid project. Computing and Informatics 31:161-171                                                                                                                                                                              |       |
| Iranzo J, Floría LM, Moreno Y, and Sánchez A. Empathy emerges spontaneously in the ultimatum game: Small groups and networks. PLoS ONE 7:e43781                                                                                                                                       | 4.092 |
| Lans I, Frago S, and Medina M. Understanding the FMN cofactor chemistry within the Anabaena flavodoxin environment. Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics 1817:2118-2127                                                                                                      | 4.843 |
| Lans I, Medina M, Rosta E, Hummer G, García-Viloca M, Lluch JM, and González-Lafont A. Theoretical study of the mechanism of the hydride transfer between ferredoxin NADP+ reductase and NADP+. The role of Tyrosine 303. Journal of the American Chemical Society. 134, 20544–20553. | 9.907 |
| Leyva I, Sevilla-Escoboza R, Buldu JM, Sendiña-Nadal I, Gómez-Gardeñes J, ArenasA, Moreno Y, Gómez S, Jaimes-Reátegui R, and S. Boccaletti. Non-equilibrium first-order transition to synchrony in networks of chaotic oscillators. Physical Review Letters 108:168702                | 7.370 |
| López JL, López-Ruiz R, and Calbet X. Exponential Wealth Distribution in a Random Market. A Rigorous Explanation. Journal of Mathematical Analysis and Applications 386:195-204                                                                                                       | 1.001 |
| López LC, Dos-Reis S, Espargaró A, Carrodegua JA, Maddelein ML, Ventura S, and Sancho J. Discovery of novel inhibitors of amyloid b-peptide 1-42 aggregation. Journal of Medicinal Chemistry 55:9521-9530                                                                             | 5.248 |
| López-Ruiz R, and Sañudo J. Heisenberg uncertainty relation and statistical measures in the square well. Communications in Numerical Analysis cna-00117-7                                                                                                                             | NA    |
| López-Ruiz R, and Sañudo J. Shape of traveling densities with extremum statistical complexity. International Journal of Applied Mathematics and Statistics (Special Issue on "Statistical Chaos and Complexity") 26:81-91                                                             | NA    |
| López-Ruiz R, and Shivanian E. A Nonlinear map for the decay to equilibrium of ideal gases. NOMA'11 Conference, pp.1-3, Abstracts, Évora, Portugal (2011), Springer Proceedings in Mathematics (PROM)                                                                                 | NA    |
| López-Ruiz R, López JL, and Calbet X. Exponential Wealth Distribution: A new approach from functional iteration theory. ECIT'10-ITERATION THEORY, Nant (France), ESAIM Proceedings, vol.36, pp.189-196                                                                                | NA    |
| López-Ruiz R. Complex systems with trivial dynamics. ECCS'12 Conference, Brussels (Belgium), Setember (2012). Proceedings in CSS Archive, Springer Complexity                                                                                                                         | NA    |
| Luján MA, Martínez JI, Alonso PJ, Guerrero F, Roncel M, Ortega JM, Yruela I, and Picorel R. Reconstitution, spectroscopy and redox properties of the photosynthetic recombinant cytochrome b559 from higher plants. Photosynthesis Research 112:193-204                               | 3.243 |
| Marani R, D'Orazio A, Petruzzelli V, Rodrigo SG, Martín-Moreno L, García-Vidal FJ, and Bravo-Abad J. Gain-assisted extraordinary optical transmission through periodic arrays of subwavelength aper-tures. New Journal of Physics 14:013020                                           | 4.177 |
| Marcuello C, Arilla-Luna S, Medina M, and Lostao A. Atomic force microscopy reveals a dimer of trimers organization in Corynebacterium ammoniagenes FAD synthetase. FEBS Journal 279:513-514                                                                                          | 3.790 |
| Marcuello C, de Miguel R, Gómez-Moreno C, Martínez-Júlvez M, and Lostao A. An efficient method for enzyme immobilization evidenced by atomic force microscopy. Protein Engineering, Design and Selection 25:715-723                                                                   | 3.023 |
| Marcuello C, de Miguel R, Medina M, Martínez-Júlvez M, Gómez-Moreno C, and Lostao A. Nanomechanics of ferredoxin-NADP+ reductase complexes analyzed by AFM single-molecule force spectroscopy. FEBS Journal 279:513-513                                                               | 3.790 |
| Martínez JI, Alonso PJ, and Medina M. The electronic structure of the neutral isoalloxazine semiquinone within Anabaena flavodoxin: New insights from HYSCORE experiments. Journal of Magnetic Resonance 218:153–162                                                                  | 2.138 |
| Martínez Vaquero L, Cuesta JA, and Sánchez A. Generosity pays in the presence of direct reciprocity: A comprehensive study of 2 × 2 repeated games. PLoS ONE 7:e35135                                                                                                                 | 4.092 |
| Martínez-Julvez M, Abián A, Vega S, Medina M, and Velázquez-Campoy A. Studying the allosteric energy cycle by isothermal titration calorimetry. Methods in Molecular Biology 796:53-70                                                                                                | NA    |
| Martínez-Júlvez M, Rojas AL, Olekhovich I, Angarica VE, Hoffman PS, and Sancho J. Structure of RdxA: An oxygen insensitive nitroreductase essential for metronidazole activation in Helicobacter pylori. FEBS Journal 279:4306-4317                                                   | 3.790 |
| Martínez-Martín D, Carrasco C, Pérez R, Mateu MG, Carrascosa JL, Kiracofe D, Raman A, de Pablo PJ, and Gómez-Herrero J. Resolving structure and mechanical properties at the                                                                                                          | 4.092 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |        |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| nanoscale of viruses with frequency modulation atomic force microscopy. PLoS ONE 7:e30204                                                                                                                                                                                                       |        |
| Martins PT, Velázquez-Campoy A, Vaz WL, Cardoso RM, Valerio J, and Moreno MJ. Kinetics and thermodynamics of chlorpromazine interaction with lipid bilayers: Effect of charge and cholesterol. Journal of the American Chemical Society. 134:4184-4195                                          | 9.907  |
| Mateu, MG. Assembly and stability of virus capsids. Archives of Biochemistry and Biophysics                                                                                                                                                                                                     | 2.935  |
| Mateu, MG. Mechanical properties of viruses analyzed by atomic force microscopy: A virological perspective. Virus Research 168:1-22                                                                                                                                                             | 2.941  |
| Meloni S, Gomez-Gardenes J, Latora V, and Moreno Y. Effects of degree heterogeneity in flow fluctuations on complex networks. International Journal of Bifurcation and Chaos 22:1250170                                                                                                         | 0.755  |
| Mena I, Casado MA, Polo V, Garcia-Orduna P, Lahoz FJ, and Oro LA. The dehydrogenation of alcohols through a concerted bimetallic mechanism involving an amido-bridged diiridium complex. Angewandte Chemie – International Edition 51:8259-8263                                                 | 13.455 |
| Merino P, Tejero T, Delso I, Hurtado-Guerrero R, Gómez-Sanjuan A, and Sádaba D. Recent progress on fucosyltransferase inhibitors. Mini Reviews in Medicinal Chemistry                                                                                                                           | 2.528  |
| Naumov DY, Llusar R, Gómez-García CJ, Polo V, Konchenko SN, and Petrov P. Synthesis and structure of a paramagnetic Mo3S4 incomplete cuboidal cluster with seven cluster skeletal electrons. Dalton Transactions 41:14031                                                                       | 3.838  |
| Navarro A, Encinar JA, López-Méndez B, Aguado-Llera D, Prieto J, Gómez J., Martínez-Cruz LA, Millet O, González-Ros JM, Fernández-Ballester G, Neira JL, and Ferrer-Montiel A. Mutation of Ser-50 and Cys-66 in snapin modulates protein structure and stability. Biochemistry 51:3470-3484     | 3.422  |
| Neira JL, Sevilla P, and García-Blanco F. The C-terminal sterile alpha motif (SAM) domain of human p73 is a highly dynamic protein, which acquires high thermal stability through a decrease in backbone flexibility. Phys Chem Chem Phys 4:10308-10323                                         | 3.573  |
| Nikitin AY, Guinea F, and Martín-Moreno L. Resonant plasmonic effects in periodic graphene antidot arrays. Applied Physics Letters 101:151119                                                                                                                                                   | 3.844  |
| Nikitin AY, Guinea F, García-Vidal FJ, and Martín-Moreno L. Surface plasmon enhanced absorption and suppressed transmission in periodic arrays of graphene ribbons. Physical Review B 85:081405                                                                                                 | 3.691  |
| Peregrina JR, Lans I, and Medina M. The transient catalytically-competent coenzyme allocation into the active site of Anabaena ferredoxin NADP+-reductase. European Biophysical Journal 41:117–128                                                                                              | 2.139  |
| Perezzan R, and Rey A. Simulating protein unfolding under pressure with a coarse-grained model. Journal of Chemical Physics 137:185102                                                                                                                                                          | 3.333  |
| Petretti S, Saenz A, Castro A, and Decleva P. Water Molecules in Ultrashort Intense Laser Fields. Chemical Physics                                                                                                                                                                              | 1.896  |
| Petrov PA, Virovets AV, Bogomyakov AS, Llusar R, Gomez-Garcia CJ, Polo V, and Konchenko SN. Synthesis, molecular and electronic structure of an incomplete cuboidal Re3S4 cluster with an unusual quadruplet ground state. Chemical Communications 48:2713-2715                                 | 6.169  |
| Ponceta J, Gomez-Gardenes J, Floria LM, and Moreno Y. Growing networks driven by the evolutionary Prisoner's Dilemma game. Chapter contribution to the Handbook of Optimization in Complex Networks, Springer Optimization and Its Applications, Vol.57 (Thai, My T.; Pardalos, Panos M., Eds.) | NA     |
| Pors A, Moreno E, Martín-Moreno L, Pendry JB, and Garcia-Vidal FJ. Localized spoof plasmons arise while texturing closed surfaces. Physical Review Letters 108:223905                                                                                                                           | 7.370  |
| Requejo RJ, Camacho J, Cuesta JA, and Arenas A. Stability and robustness analysis of cooperation cycles driven by destructive agents in finite populations. Physical Review E 86:026105                                                                                                         | 2.255  |
| Roca CP, Sánchez A, and Cuesta JA. Individual strategy update and emergence of cooperation in social networks. Journal of Mathematical Sociology 36:1-21                                                                                                                                        | 0.680  |
| Ruting F, Fernandez-Dominguez AI, Martín-Moreno L, and Garcia-Vidal FJ. Diffraction regimes of single holes. Physical Review B 86:075437                                                                                                                                                        | 3.691  |
| Sánchez-Azqueta A, Musumeci MA, Martínez-Júlvez M, Ceccarelli EA, and Medina M. Structural backgrounds for the formation of a catalytically competent complex with NADP(H) during hydride transfer in ferredoxin-NADP+ reductases. Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics 1817:1063–1071 | 4.843  |
| Sancho J. The stability of 2-state, 3-state and more-state proteins from simple spectroscopic techniques... plus the structure of the equilibrium intermediates at the same                                                                                                                     | 2.935  |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |       |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| time. Archives of Biochemistry and Biophysics                                                                                                                                                                                                                                                                                 |       |
| Santos-Oliván D, Fiasconaro A, and Falo F. Directional motion of forced polymer chains with hydrodynamic interaction. Physical Review E 86:031804                                                                                                                                                                             | 2.255 |
| Sanz J, Cozzo E, Borge-Holthoefer J, and Moreno Y. Topological effects of data incompleteness of gene regulatory networks. BMC Systems Biology 6:110                                                                                                                                                                          | 3.148 |
| Sanz J, Floria LM, and Moreno Y. Dynamics of persistent infections in homogeneous populations. International Journal of Bifurcation and Chaos 22:1250164                                                                                                                                                                      | 0.755 |
| Sañudo J, and López-Ruiz R. Calculation of statistical entropic measures in a model of solids. Physics Letters A 376:2288-2291                                                                                                                                                                                                | 1.632 |
| Seoane B, and Nishimori H. Many-body transverse interactions in the quantum annealing of the p-spin ferromagnet. Journal of Physics A - Mathematical and Theoretical 45:435301                                                                                                                                                | 1.564 |
| Serrano A, Frago S, Velázquez-Campoy A, and Medina M. Role of key residues at the flavin mononucleotide FMN:adenylyltransferase catalytic site of the bifunctional riboflavin kinase/flavin adenine dinucleotide FAD synthetase from Corynebacterium ammoniagenes. International Journal of Molecular Sciences 13:14492-14517 | 2.598 |
| Shivanian E, and López-Ruiz R. A new model for ideal gases. Decay to the Maxwellian distribution. Physica A 391:2600-2607                                                                                                                                                                                                     | 1.373 |
| Sorribes I, Lloret F, Waerenborgh JC, Polo V, Llusar R, and Vicent C. Cubane-type Mo <sub>3</sub> FeS <sub>4</sub> 4+, 5+ complexes containing outer diphosphane ligands: Ligand substitution reactions, spectroscopic studies, and electronic structure. Inorganic Chemistry 51:10512-10521                                  | 4.601 |
| Tapia-Rojo R, Prada-Gracia D, Mazo JJ, and Falo F. Mesoscopic model for free-energy-landscape analysis of DNA sequences. Physical Review E 86:021908                                                                                                                                                                          | 2.255 |
| Tondo L, Hurtado-Guerrero R, Sánchez-Azqueta A, Ceccarelli EA, Medina M, Orellano E, and Martínez-Júlvez M. Crystal structure of FAD-containing ferredoxin-NADP+ reductase from Xanthomonas axonopodis pv. citri. FEBS Journal 279:444-445                                                                                    | 3.790 |
| Torreblanca R, Lira-Navarrete E, Sancho J, Hurtado-Guerrero R. Structural and mechanistic basis of the interaction between a pharmacological chaperone and human phenylalanine hydroxylase. Chembiochem 13:1266-1269                                                                                                          | 3.944 |
| Velasco JL, Bustos A, Castejón F, Fernández LA, Martín-Mayor V, and Tarancón A. ISDEP: Integrator of stochastic differential equations for plasmas. Computer Physics Communications 183:1877-1883                                                                                                                             | 3.268 |
| Velasco JL, Alonso JA, Calvo I, and Arévalo J. Vanishing neoclassical viscosity and physics of the shear layer in stellarators. Physical Review Letters. 109:135003-135007                                                                                                                                                    | 7.370 |
| Vilone D, Ramasco JJ, Sánchez A, and San Miguel M. Social and strategic imitation: The way to consensus. Scientific Reports 2: 686                                                                                                                                                                                            | NA    |
| Wanko M, García-Risueño P, and Rubio Á. Excited states of the green fluorescent protein chromophore: Performance of ab initio and semi-empirical methods. Physica Status Solidi B 249:392-400                                                                                                                                 | 1.316 |
| Wong E, Vaaje-Kolstad G, Ghosh A, Hurtado-Guerrero R, Konarev PV, Ibrahim AFM, Svergun DI, Eijssink VGH, Chatterjee NS, and van Aalten DMF. The Vibrio cholerae colonization 1 factor GbpA possesses a 2 modular structure that governs binding to different host 3 surfaces. PLoS Pathogens                                  | 9.079 |
| Xia C, Meloni S, and Moreno Y. Effects of environment knowledge on agglomeration and cooperation in spatial public goods games. Advances in Complex Systems 15:1250056                                                                                                                                                        | 0.653 |
| Yi MA, Cuhe A, de Leon-Perez F, Degiron A, Laux E, Devaux E, Genet C, Alegret J, Martín-Moreno L, and Ebbesen TW. Diffraction regimes of single holes. Physical Review Letters 109:023901                                                                                                                                     | 7.370 |
| Yruela I, and Contreras-Moreira B. Protein disorder in plants. A view from the chloroplast. BMC Plant Biology 12:165                                                                                                                                                                                                          | 3.447 |
| Díaz-Pérez A, Sequeira M, Santos-Guerra A, and Catalán P. Divergence and biogeography of the recently evolved Macaronesian red Festuca (Gramineae) species inferred from coalescence-based analyses. Molecular Ecology 21:1702-1726                                                                                           | 5.522 |
| Viruel J, Catalan P, and Segarra-Moragues JG. Disrupted phylogeographical microsatellite and cpDNA patterns indicate a vicariance rather than long-distance dispersal origin for the disjunct distribution of the Chilean endemic Dioscorea biloba (Dioscoreaceae) around the Atacama Desert. Journal of Biogeography         | 4.544 |
| López-Alvarez D, López-Herranz ML, Betekhtin A, and Catalán P. A DNA barcoding method to discriminate between the model plant Brachypodium distachyon and its close relatives B. stacei and B. hybridum (Poaceae). PLoS ONE 7:e51058.                                                                                         | 4.092 |
| Catalán P, Müller J, Hasterok R, Jenkins G, Mur LAJ, Langdon T, Betekhtin A, Siwinska D,                                                                                                                                                                                                                                      | 4.030 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |       |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| Pimentel M, and López-Alvarez D. Evolution and taxonomic split of the model grass <i>Brachypodium distachyon</i> (L.) P. Beauv. <i>Annals of Botany</i> 109:385–405                                                                                                                                |       |
| Garnatje T, Pérez-Collazos E, Pellicer J, and Catalán P. Balearic insular isolation and large continental spread framed the phylogeography of the western Mediterranean <i>Cheirolophus intybaceus</i> (Asteraceae). <i>Plant Biology</i> 15:166-175                                               | 2.395 |
| Girón V, Garnatje T, Vallés J, Pérez-Collazos E, Catalán P, and Valdés B. Geographical distribution of diploid and tetraploid cytotypes of <i>Thymus</i> sect. <i>Mastichina</i> (Lamiaceae) in the Iberian Peninsula: Genome size and evolutionary processes. <i>Folia Geobotanica</i> 47:441-460 | 1.500 |
| Triano E, Benavente Navarro A, Catalán P, Hernández P, Pujadas and Salvà AJ. <i>Orobanchelainzii</i> (J. Gómez Navarro et al.) Triano & A. Pujadas comb. nov. (Orobanchaceae) en Andalucía oriental (España). <i>Acta Botanica Malacitana</i> 37:224-225                                           | NA    |
| Catalán P, and González-Candelas F. Técnicas y marcadores filogenéticos. In: Zardoya R, Vargas P (eds.): <i>El árbol de la vida: Sistemática y evolución de los seres vivos</i> . Madrid. CSIC. pp. 533-542.                                                                                       | NA    |
| Catalán P, and Müller J. <i>Festuca</i> L., in Zuloaga F. et al. (eds.). <i>Flora de Argentina</i> . CONICET. Buenos Aires. vol.3, tomo II:219-250.                                                                                                                                                | NA    |
| Prignano L, Moreno Y, Diaz-Guilera A. Exploring complex networks by means of adaptive walkers., <i>Physical Review E</i> 86, 066116 (2012).                                                                                                                                                        | 2.225 |

Analizando los datos que se muestran en la tabla sobre el factor de impacto de las publicaciones realizadas por el instituto durante el 2012 puede observarse que solo 121 de ellas tienen identificado ya su ISI, aunque en 20 o todavía está pendiente o no aplica por el tipo de publicación de que se trata. Subrayar que hay tres publicaciones que destacan por tener un índice muy superior a 10 y otras 15 con un índice entre 6 y 10, lo que da idea de la calidad científica de los trabajos realizados en el BIFI durante el 2012, quedando casi la mitad de las publicaciones en un índice entre 3 y 6 y que tan solo 7 tienen un ISI inferior a 1.



## Publicaciones en libros

Se citan a continuación algunas publicaciones en formato libro que también han realizado los investigadores del BIFI durante el 2012.

Cozzo E, Sanz J, and Moreno Y, "Dynamics of Biomolecular Networks", Chapter 11, pp 349-379, in "Systems Biology: Current Topics from the Encyclopedia of Molecular Cell Biology and Molecular Medicine (Edited by Robert A. Meyers), ISBN: 978-3-527-32607-5 (Wiley-VCH, Weinheim, 2012).

Meloni S, Arenas A, Gómez S, Borge-Holthoefer J, and Moreno Y, "Modeling Epidemic Spreading in Complex Networks: Concurrency and Traffic". Chapter contribution to the Handbook of Optimization in Complex Networks, Springer Optimization and Its Applications, Vol. 57, Thai, My T.; Pardalos, Panos M. (Eds.) 2012.

Martínez-Júlvez M, Abián O, Vega S, Medina M, and Velázquez-Campoy A. Studying the allosteric energy cycle by isothermal titration calorimetry. *Methods in Molecular Biology, Allostery: Methods and Protocols*. Aron W. Fenton. Springer Science+Business Media, LLC. ISBN: 978-1-61779-333-2. vol. 796, 53-70. 2012.

Serrano A, and Medina M. Revisiting the mechanism of interaction and electron transfer between Flavodoxin and Ferredoxin NADP<sup>+</sup>-reductase by fast kinetic methods with photodiode array detection. *Advances in Photosynthesis. Fundamental aspects*,

- Najafpour, M.M. Intech. Rijeka, Croatia ISBN: 978-953-307-928-8, p.p. 129-148. 2012.
- Medina M. Enzymes of FMN and FAD metabolism. *Handbook of Flavoproteins*. R. Hille, S. Miller, B. Palfey. Walter de Gruyter publishers. ISBN: 978-3-11-026842-3. vol. 1, 71-100. 2012
- M.Baity-Jesi et al. (2012). An FPGA-based supercomputer for Statistical Physics: the weird case of Janus. Chapter contribution in W. Wanderbauwhede & K. Benkrid (Eds.), High-Performance Computing Using FPGAs (in press). Springer-Verlag.
- 

### **4.3. Comunicaciones a congresos**

---

#### **4.3.1. Presentaciones durante el año 2012 en congresos, talleres, seminarios**

---

##### **Conferencias invitadas**

El personal del BIFI ha participado en 37 conferencias como invitados. De estas 4 han sido en eventos nacionales y 33 en eventos internacionales, lo que da idea de la internacionalización y actividades de colaboración internacionales del instituto BIFI.

##### **Eventos Nacionales**

- Sancho, J. Congreso. Programa de cooperación Farma-Biotech. Zaragoza (España). 2012
- Valles R. PireGrid. Sexta Reunión Plenaria de la Red Española de e-Ciencia. Madrid (España). Mayo 2012
- Moreno Y. Conferenciante Plenario en el Congreso Nolineal 2012. Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España, Junio 2012.
- Catalán P., Marques I, Draper B, Komac B, Segarra-Moragues J.G. Genética del paisaje y ecología de pastos subalpinos pirenaico-cantábrico (*Festuca*, Gramineae) en la Red de Parques Nacionales. Jornadas de investigación de la red de Parques Nacionales 2012. Matalascañas. : 26-28/09/2012

##### **Eventos Internacionales**

- Medina M. The FMN and FAD biosynthesis in Prokaryotes: a potential drug target. *International Congress of the Biophysical Society-SBE Barcelona 2012*. Barcelona (España). Julio 2012.
- Medina M. High throughput screening of inhibitors against enzymatic activities: The bacterial FAD synthetase a case study. *COST CM1103 Action WG Meeting*. Madrid (España). Noviembre 2012.
- Cuesta JA, Gracia-Lázaro C, Moreno Y, Sánchez A, and Tarancón A. Realistic human behavior and prisoner's dilemma on networks. *International Meeting on Behavioral and Experimental Economics*. Castelló (España). Marzo 2012.
- Echenique P. Beyond ground-state Born-Oppenheimer in open quantum-classical systems, Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid, España, mayo 2012.

Cuesta J A, Gracia-Lázaro C, Moreno Y, Sánchez A, and Tarancón A. Realistic human behavior and prisoner's dilemma on networks. *International Meeting on Behavioral and Experimental Economics*. Castellón (España). Marzo 2012.

Merino Pedro. Rationale design of glycomimetic inhibitors of Glycosyltransferases. *9th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry*. SISOC-IX. Tenerife (Spain). February 10-14, 2012

Yruela I, Contreras-Moreira B. Protein disorder in plants: a view from the chloroplast. *22<sup>nd</sup> IUBMB Congress*. Sevilla (España). Septiembre 2012.

Castro A. Octopus: a first principles electronic structure code case for supercomputers and GPUs. *International Workshop EU-China on scientific computing*. Zaragoza (Spain). Noviembre 2012.

"V BIFI International Conference: Protein Targets, Discovery of Bioactive Compounds", Zaragoza, España. Febrero 2012. Varios ponentes, ver apartado de comunicaciones orales

Hernández-Ortega A, Ferreira P, Lucas F, Carro Aramburu J, Medina M, Guallar V, and Martínez AT. On the aryl-alcohol oxidase catalytic mechanism. *Oxizymes 2012*. Marsella (Francia). Septiembre 2012

Sánchez A. How reciprocity renders networks irrelevant for cooperation in social dilemmas. *Workshop on Games, Networks and Markets*. Cambridge (Reino Unido). Junio 2012.

Sánchez A. Network reciprocity, large-scale experiments and the Prisoner's Dilemma: the last word. *International Workshop on "Agent-based models and complex techno-social systems"*. Zürich (Suiza). Julio 2012.

Sánchez A. There is no such thing as network reciprocity when humans play a Prisoner's Dilemma. *"Physics of Competition and Conflict Closing Meeting"*. Galway (Irlanda). Julio de 2012.

Gracia-Lázaro C, Tarancón A, Cuesta J A, Moreno Y, and Sánchez A. How reciprocity renders networks irrelevant for cooperation in social dilemmas. *Workshop on Games, Networks and Markets*. Cambridge (Reino Unido). Junio 2012.

Gracia-Lázaro C, Tarancón A, Cuesta J A, Moreno Y, and Sánchez A. Network reciprocity, large-scale experiments and the Prisoner's Dilemma: the last word. *International Workshop on Agent-based models and complex techno-social systems*. Zürich (Suiza). Julio 2012.

Gracia-Lázaro C, Tarancón A, Cuesta J A, Moreno Y, and Sánchez A. There is not such thing as network reciprocity when humans play a Prisoner's Dilemma. *Physics of Competition and Conflict Closing Meeting*. Galway (Irlanda). Julio 2012.

Cuesta J A. Evolutionary dynamics. *II GEFENOL Summer School on Statistical Physics of Complex and Small Systems*. Benasque, Huesca (España). Septiembre 2012.

Rey, A. "Computers and proteins: Where the cyberspace meets structural biology". Programa "Science Public Lectures" de la Universidad de Lisboa (Portugal). Serie de conferencias bajo el título "Proteins: Life's origamis". Lisboa, septiembre 2012. [http://www.ul.pt/portal/page?\\_pageid=173,1548306&\\_dad=portal&\\_sc\\_hema=PORTAL](http://www.ul.pt/portal/page?_pageid=173,1548306&_dad=portal&_sc_hema=PORTAL)

Yruela I, Contreras-Moreira B. Protein disorder in plants: a view from the chloroplast. *The Emerging Dynamic View of Proteins: Protein Plasticity in Allostery, Evolution and Self-Assembly*. Dresden (Alemania). Julio 2012.

Martín Mayor V. *The Janus computer, a new window into the physics of spin glasses in three (and four) spatial dimensions*, Theoretical Physics Institute, Chinese Academy of Science. Beijing, Abril 2012.

Marco Baity-Jesi, *GPU Simulations on 3d Anisotropic Heisenberg Spin Glasses*, SCC-Computing Kick-off Meeting, National Super Computing Center, Tianjin, Abril 2012.

Andrea Maiorano. *Janus2: an FPGA-based supercomputer for spin glass simulations*. Future HPC Systems: the Challenge of Power-Constrained Performance. San Servolo, Venecia, Italia, junio 2012. La conferencia apareció publicada en forma de Proceedings: Janus2: an FPGA-based supercomputer for spin glass simulations

M. Baity-Jesi, R.A. Baños, A. Cruz, L.A. Fernandez, J.M. Gil-Narvion, A. Gordillo-Guerrero, M. Guidetti, D. Iniguez, A. Maiorano, F. Mantovani, E. Marinari, V. Martin-Mayor, J. Monforte-Garcia, A. Muñoz-Sudupe, D. Navarro, G. Parisi, M. Pivanti, S. Perez-Gavero, F. Ricci-Tersenghi, J.J. Ruiz-Lorenzo, S.F. Schifano, B. Seoane, A. Tarancon, P. Tellez, R. Tripiccion, D. Yllanes; Proceedings of the Future HPC Systems: the Challenges of Power-Constrained Performance. San Servolo, Venezia, Italy, 25-29 June 2012, p. 2:1-2:11, New York, NY, USA:ACM DOI: 10.1145/2322156.2322158

Castro A. Non-adiabatic effects within a single thermally-averaged potential energy surface: Thermal expansion and reaction rates of small molecules. *17th ETSF Workshop on Electronic Excitations: Advanced Green Function Methods*. Coimbra (Portugal). Octubre 2012.

Moreno Y. Conferenciante invitado en la School "Complex Networks in Action", Universidad de Catania, Catania, Italia. Septiembre 2012.

Moreno Y. Conferenciante invitado. Workshop "Complex Systems Analysis: Advancing Health Systems Policy Design and Planning". Bellagio, Italia, Septiembre 2012.

Martín-Moreno L. Nanoemitters in conducting surfaces: from metals to graphene. *Winter Workshop de la Korean Nano Optical Society. Tipo de comunicación: Conferencia Plenaria*. Muju-Kun, Corea del Sur: Febrero 2012.

Martín-Moreno L. Electromagnetic fields radiated by nano emitters in graphene. *META 12. Tipo de comunicación: Conferencia Invitada*. Paris (Francia). Abril 2012.

Martín-Moreno L. Non-linear electromagnetic effects in nano-structured metals. *NoLineal2012. Tipo de comunicación: Conferencia Invitada*. Zaragoza (España). Junio 2012.

Catalan P., López-Álvarez D., Gordon S., Vogel J. More than one model plant within the complex? Hybridization history and ecological distribution of the *Brachypodium distachyon* – *B. stacei* – *B. hybridum* taxa. Congreso: 21st International Symposium Biodiversity and Evolutionary Biology of the German Botanical Society (DBG). Mainz. 16-19/09/2012

Draper B, Komac B, Marques I, Segarra-Moragues J.G., Villar L, Sahuquillo E, Pérez-Collazos E, Viruel J, Catalan P. Genética del paisaje y ecología de pastos subalpinos de *Festuca eskia* y *F. gautieri* en el Parque Nacional de Aigüestortes y estany de Sant Maurici (PNAESM). Congreso: IX Jornadas de investigación en el Parque Nacional de Aigüestortes y estany de Sant Maurici. Boí. 17-19/10/2012



Moreno Y. Keynote Speaker en el “XXXIII Annual Meeting of the Neurology Society of the Basque Country”, Villabuena de Álava, España. Marzo 2012.

Polo Ortiz V, Mena Pardo I, Casado Lacabra M A, Oro Giral L A. Theoretical Studies on Ammonia Activation and Dehydrogenation of Alcohols mediated by Iridium Clusters IIIrd workshop on transition metal clusters. Benicassim (España). Septiembre 2012

### Comunicaciones orales

Se han presentado 28 comunicaciones orales en congresos nacionales e internacionales, aunque en su mayor parte, más del 90% de las mismas se mostraron en eventos internacionales. Se listan a continuación dichas comunicaciones, con los autores y las fechas y lugares de celebración.

Villanueva R, Ferreira P, Marcuello C, Lostao A, Usón A, Velázquez-Campoy A, Sancho J, Susín S, and Medina M. Apoptosis Inducing Factor: a promising drug target. V International Conference BIFI 2012. *Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012

Lans I, Peregrina JR, Medina M, Rosta E, Hummer G, García-Viloca M, Lluch JM, and González-Lafont A. Theoretical study of the mechanism of the hydride transfer between ferredoxin-NADP<sup>+</sup> reductase and NADP<sup>+</sup>. The role of Tyr303. X *Girona Seminar on theoretical and computational chemistry for the modeling of Biochemical systems: from Theory to Applications*. Girona (España). Julio 2012

Velasco J L, Alonso J A, Calvo I, and Arévalo J. Vanishing neoclassical viscosity and physics of the shear layer in stellarators. *Gyrokinetic Theory Working Group Meeting*. Madrid (España). Junio 2012.

Capitán J A, Martínez-Romo J, Araujo L, Borge-Holthoefer J, Arenas A, and Cuesta J A. Desambiguación semántica mediante un grafo de co-ocurrencias. *Nolineal 2012*. Zaragoza (España). Julio 2012.

Martínez-Vaquero L A, Cuesta J A, and Sánchez A. Prevalencia de la generosidad en reciprocidad directa. *FisEs 2012*. Palma de Mallorca (España). Octubre 2012.

Hurtado-Guerrero R. Molecular Mechanism of Protein O-Fucosylation. *First Biennial Meeting of the Chemical Biology Group*. Santiago de Compostela. 2012

Hurtado-Guerrero R. Molecular mechanism of glycosyltransferases. *Congreso Internacional del BIFI*. Zaragoza. 2012

Hurtado-Guerrero R. Molecular mechanism of Protein o-fucosylation. *Increasing the Impact of Glycoscience through New Tools and Technologies*. San Sebastián (CIC BIOMAGUNE). 2012

Enciso Carrasco, M, Rey Gayo, A. “Sequence-dependent effects in peptide folding by minimalist simulations”. *International Congress of the Spanish Biophysical Society*. Barcelona. Julio 2012.

González-Arzola K, Moreno-Beltrán B, Díaz-Quintana A, Velázquez-Campoy A, Díaz-Moreno I, and De la Rosa MA. Cytochrome c1-cytochrome c: An atypical transient complex. XXXV Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular – 22nd IUBMB Congress – 37th FEBS Congress. Sevilla (España). Septiembre 2012.

Abián O, Asencio M, Lasiera A, Grazu V, Martínez de la Fuente J, and A. Velázquez-Campoy A. Thermodynamic characterization of cyclodextrins binding to novel anti-HCV compounds using isothermal titration calorimetry. *9<sup>th</sup> International Symposium on Polymer Therapeutics: From Laboratory to Clinical Practice*. Valencia (España). Mayo 2012.

Baity-Jesi M, *Spin Glasses with a multi-GPU approach*, International Workshop EU-China on Scientific Computing, BIFI, Zaragoza, Noviembre 2012.

Bruscolini P. T-novoMS: Protein sequencing by Tandem mass spectrometry as a Statistical-Mechanics Problem. *V International Conference BIFI 2012*. Zaragoza (España), Febrero 2012.

Ospina A and Carrodegua JA. Novel transmembrane domain interactions in Bcl-2 family proteins. Congreso: *V International Conference BIFI 2012*. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds. Zaragoza, 1-4 febrero 2012.

Iñiguez Dieste D, *Computing research area at BIFI*, International Workshop EU-China on Scientific Computing, BIFI, Zaragoza, Noviembre 2012.

Velasco J L, Alonso J A, Calvo I, and Arévalo J. Experimental measurement and NC calculations of the viscosity at TJ-II. *10th Coordinated Working Group Meeting*. Greifswald (Alemania). Junio 2012.

Velasco J L, and TJ-II team. Neoclassical analyses for the joint IAEA paper *10th Coordinated Working Group Meeting*. Greifswald (Alemania). Junio 2012.

Tessone CJ, Sánchez A, and Schweitzer F. Response to social norms enhancement by heterogeneous populations. *Congreso  $\phi$ -SOE (División de Física de Sistemas Socioeconómicos de la Sociedad Alemana de Física)*. Berlin (Alemania). Marzo de 2012.

Sánchez A, Urbano A, and Vila JE. High-dimensional connectivity and cooperation. 4th World Congress of the Game Theory Society. Estambul (Turquía). Julio de 2012.

Grujić J, Eke B, Cabrales A, Cuesta JA, and Sánchez A. Universal reciprocal behavior in iterated prisoner's dilemmas: Three is a crowd. *International Workshop on "Agent-based models and complex techno-social systems"*, Zürich (Suiza). Julio 2012.

Christoforou E, Fernández Anta A, Georgiu C, Mosteiro MA, and Sánchez A. Achieving Reliability in Master-worker Computing via Evolutionary Dynamics. *31st Annual ACM SIGACT-SIGOPS Symposium on Principles of Distributed Computing*. Madeira (Portugal). Julio 2012.

Christoforou E, Fernández Anta A, Georgiu C, Mosteiro MA, and Sánchez A. Achieving Reliability in Master-worker Computing via Evolutionary Dynamics. *EURO-PAR 2012 (International European Conference on Parallel and Distributed Computing)*. Rodas (Grecia). Agosto 2012.

Vilone D, Ramasco JJ, Sánchez A, and San Miguel M. On the irrationality of consensus in heterogeneous networks. *Cultural and opinion dynamics: Modeling, Experiments and Challenges for the future (ECCS 2012 Satellite)*. Bruselas (Bélgica). Septiembre 2012.

Galbete A, Moler J, and Plo F. An adaptive design for clinical trials based on the Klein urn. *International Workshop on Applied Probability (IWAP 2012)*. Jerusalén (Israel). Junio 2012

Cauhé E, Giner A, Ibar J, Ruiz G, Valles R. Hadoop Cloud SaaS access via WS-PGRADE adaptation. *6th IBERIAN GRID INFRASTRUCTURE CONFERENCE*. Lisboa (Portugal). Noviembre 2012

Martín Mayor V, *The de Almeida-Thouless line of the four-dimensional Ising spin glasses*. March-meeting of the American Physical Society, Boston, U.S.A., Febrero 2012.

Yllanes Mosquera D. *Finite-size scaling analysis of the distributions of pseudo-critical temperatures in spin glasses*, CompPhys12, Universität Leipzig, Alemania, noviembre 2012.

## Posters

Durante el 2012, se han presntado varios posters a eventos nacionales e internacionales. En total 38 posters que indican una importante actividad científica de difusión del BIFI durante este año 2012, a nivel internacional mayoritariamente.

Marcuello C, Arilla-Luna S, Medina M, and Lostao A. Atomic Force Microscopy unravels the formation of *Corynebacterium ammoniagenes* FAD synthetase dimer of trimmers. *V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012

Serrano A, Arilla S, Herguedas B, Baquedano S, Yruela I, Ferreira P, Martínez-Júlvez M, and Medina M. Understanding the behaviour of a potential drug target: the prokaryotic FADS synthetase. *V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012

Marcuello C, de Miguel R, Medina M, Martínez-Júlvez M, Gómez-Moreno C, and Lostao A. Single molecule force spectroscopy as a tool to analyze protein-ligand interactions: the case of Ferredoxin-NADP<sup>+</sup> reductase complexes. *V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012

Marcuello C, de Miguel R, Medina M, Martínez-Júlvez M, Gómez-Moreno C, and Lostao A. Nanomechanics of ferredoxin-NADP<sup>+</sup> reductase complexes analyzed by AFM single-molecule force spectroscopy. *Young Scientific Forum IUBMB and FEBS*. Cádiz (España). Septiembre 2012

Tondo L, Hurtado-Guerrero R, Sánchez-Azqueta A, Ceccarelli EA, Medina M, Orellano E, and Martínez-Júlvez M. Crystal structure of FAD-containing ferredoxin-NADP<sup>+</sup> reductase from *Xanthomonas axonopodis* pv. citri. *22<sup>nd</sup> IUBMN and 37<sup>th</sup> FEBS Sevilla 2012*. Sevilla (España). Septiembre 2012

Marcuello C, Arilla-Luna S, Medina M, and Lostao A. Atomic force microscopy reveals a dimer of trimers organization in *Corynebacterium ammoniagenes* FAD synthetase. *22<sup>nd</sup> IUBMN and 37<sup>th</sup> FEBS Sevilla 2012*. Sevilla (España). Septiembre 2012

Marcuello C, de Miguel R, Medina M, Martínez-Júlvez M, Gómez-Moreno C, and Lostao A. Nanomechanics of ferredoxin-NADP<sup>+</sup> reductase complexes analyzed by AFM single-molecule force spectroscopy. *22<sup>nd</sup> IUBMN and 37<sup>th</sup> FEBS Sevilla 2012*. Sevilla (España). Septiembre 2012

Aguado-Llera D; Doménech R, Marenchino M, Vidal M and Neira JL Non-canonical residues of the marginally stable monomeric ubiquitin conugase from goldfish are

involved in binding to the c-terminus of Ring1B. *FEBS Conference*. Sevilla (España). Septiembre 2012

Grujić J, Eke B, Cabrales A, Cuesta J A, and Sánchez A. Univesal reciprocal behavior in iterated prisoner's dilemmas: three is a crowd. *FisEs 2012*. Palma de Mallorca (España). Octubre 2012.

Capitán J A, Cuenda S, Cuesta J A, and Alonso D. Estocasticidad y exclusión competitiva en comunidades ecológicas. *FisEs 2012*. Palma de Mallorca (España). Octubre 2012.

Alvarez-Nodarse R, Cuesta J A, and Quintero N R. El efecto ratchet en la partícula relativista. *FisEs 2012*. Palma de Mallorca (España). Octubre 2012.

Yruela I, Contreras-Moreira B. Proteínas desordenadas en plantas: una visión desde el cloroplasto. *XI Reunión Biología Molecular de Plantas*. Segovia (España). Junio, 2012.

Cruz-Gallardo I, Diaz-Moreno I, Donaire A, Velázquez-Campoy A, Diaz-Quintana A, Ramos A, Holder AA, and De la Rosa MA. Structural screening of cupredoxins against malaria. *XXXV Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular – 22nd IUBMB Congress – 37th FEBS Congress*. Sevilla (España). Septiembre 2012.

Fraga HD, Papaleo H, Velázquez-Campoy A, and Ventura S. Zinc induced folding is essential for Tim15 activity as an mtHsp70 chaperone. *XXXV Congreso de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular – 22nd IUBMB Congress – 37th FEBS Congress*. Sevilla (España). Septiembre 2012.

Conde M, Vega S, Velázquez-Campoy A, Dhulesia A, Kumita JR, Dobson CM, Cremades N, and Sancho J. Characterization of the binding affinity of small stabilizing compounds for human lysozyme mutants. *XII International Congress of the Spanish Biophysical Society – SBE Barcelona 2012*. Barcelona (España) Septiembre 2012.

Rozado Z, Martínez J, Arias-Moreno X, Velázquez-Campoy A, and Sancho J. Ligand binding domain of the LDL-R: Binding kinetics assays of calcium to LR4 and LR5. *XII International Congress of the Spanish Biophysical Society – SBE Barcelona 2012*. Barcelona (España) Septiembre 2012.

Martínez JE, Arias-Moreno X, Rozado-Aguirre Z, Velázquez-Campoy A, and Sancho J.  $\text{Ca}^{2+}$  and  $\text{Mg}^{2+}$  binding kinetics to the fifth binding module of the LDL receptor. *International Conference BIFI2012 – Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012.

Conde M, Vega S, Velázquez-Campoy A, Dhulesia A, Kumita JR, Dobson CM, Cremades N, and Sancho J. Screening of a chemical library to find stabilizing compounds for human lysozyme mutants. *International Conference BIFI2012 – Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012.

Abián O, Alfonso P, Velázquez-Campoy A, Giraldo P, Pocoví M, and Sancho J. Therapeutic strategies for Gaucher disease: Miglustat (NB-DNJ) as a pharmacological chaperone for glucocerebrosidase and the different thermostability of velaglycerase alfa and imiglycerase. *International Conference BIFI2012 – Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*. Zaragoza (España). Febrero 2012.

Bergues-Pupo AE, Bergues J, Falo F. Modeling the interaction of DNA with Terahertz fields. *XVIII Congreso de Física Estadística FISES'12*. Palma de Mallorca (España), Septiembre de 2012.

Ospina A, and Carrodegua JA. Novel transmembrane domain interactions in Bcl-2 family proteins. Congreso: V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds. Zaragoza, 1-4 febrero 2012

López Rodríguez LC, Carrodegua JA, Ventura S, Dos Reis S, Maddelein ML, and Sancho J. Evaluation of chemical compounds on the aggregation of amyloid beta peptide (1-42). V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds. Zaragoza, 1-4 febrero 2012

Viñas C, Martínez P, Iñíguez D, and Carrodegua JA. Automated multiparametric analysis of multidimensional microscopy images. Presentación de póster y presentación oral en workshop. I Congreso de la Red Española de Microscopía Óptica Avanzada (REMOA). Barcelona, 20-22 noviembre 2012

Velasco J L, Alonso J A, Calvo I, and Arévalo J. Configuration dependence of the neoclassical viscosity in TJ-II. 18<sup>th</sup> International Stellarator/Heliotron Workshop. Canberra (Australia). Enero 2012.

Velasco J L, Alonso J A, Calvo I, and Arévalo J. Extended calculations of neoclassical viscosity for TJ-II. 39<sup>th</sup> European Physical Society Conference on Plasma Physics. Estocolmo (Suecia). Julio 2012.

Vilone D, Ramasco JJ, Sánchez A, and San Miguel M Rational and irrational dynamics are both needed to reach consensus in random topologies. *International Workshop on "Agent-based models and complex techno-social systems"*, Zürich (Suiza). Julio 2012.

Cuesta J A, and Manrubia S C. Evolving on phenotype landscapes. *SMBE 2012: Society for Molecular Biology and Evolution*. Dublin (Irlanda). Junio 2012.

Quintero N R, Cuesta J A, and Alvarez-Nodarse R. La corriente promedio en los "rocking ratchets". *FisEs 2012*. Palma de Mallorca (España). Octubre 2012

Medina M, Sánchez-Azqueta A, Lans I, Hurtado-Guerrero R, Martínez-Júlvez M. Ser80 in *Anabaena* Ferredoxin-NADP<sup>+</sup> reductase contributes to stabilize the catalytically competent complex NADP<sup>+</sup>. *Proceedings of Flavins and Flavoproteins 2011*. Fecha: 2012

Travasso, R.D.M., Faisca, P.F.N., Parisi, A., and Rey, A. "Why do protein folding rates correlate with metrics of native topology?". *Gordon Research Seminar on "Protein Folding Dynamics"*. Ventura (California). Enero 2012.

Cortes-Ciriano I, Koutsoukas A, Abián O, Bender A, and Velázquez-Campoy A. Experimental validation of in silico target predictions on synergistic protein targets. 8<sup>th</sup> German Conference on Chemoinformatics. Goslar (Alemania). Noviembre 2012.

Abián O, Vega S, Sancho J, and Velázquez-Campoy. Novel allosteric inhibitors of the NS3 protease from the hepatitis C virus. 19<sup>th</sup> International Symposium on Hepatitis C Virus and Related Viruses. Venecia (Italia). Octubre 2012.

Seoane Bartolomé B. *Many-body transverse interactions in the quantum annealing of the p-spin ferromagnet*. Quantum Information meets Statistical Mechanics, Innsbruck, Austria, Septiembre 2012.

Bruscolini P. Modeling the folding of gpW and alpha-spectrin SH3 domain: accurate information from a simple model. *International Workshop on "The Emerging Dynamic View of Proteins: Protein Plasticity in Allostery, Evolution and Self-Assembly"*. Dresden (Alemania). Julio 2012

Bruscolini P. MS/MS spectra interpretation as a statistical-mechanics problem. *Wellcome Trust Scientific Conference on "Genome Informatics"*. Cambridge (Reino Unido). Septiembre 2012

López-Ruíz, R. JPS-2012: Journées de Physique Statistique', Paris (France); Enero - 2012. Congreso Nolineal 2012', Zaragoza ; Junio - 2012.

López-Ruíz, R 'ECCS'12: European Conference on Complex Systems', Brussels (Belgium); Septiembre - 2012.

Minaya M, Pimentel M, Mason-Gamer R, Catalán P. Distribution and evolutionary dynamics of *Stowaway* Miniature Inverted repeat Transposable Elements (MITes) in grasses. Botany 2012 conference. Columbus. 7-11/07/2012

Moreno Y. Stability of Multilevel Boolean Networks. *Congreso FISES 2012*. Universidad de las Islas Baleares, Palma de Mallorca, España, Octubre 2012

#### **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 7 importantes eventos científicos por el instituto BIFI durante el año 2012. A continuación se recogen la información básica de los mismos, su duración y la fecha y lugar de celebración.

*Título:* V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds

*Duración:* 4 días

*Fecha y Lugar de celebración:* 1-4 de Febrero de 2012. BIFI, Zaragoza

*Título:* PIREGRID: La 'nube' a disposición de las empresas; ¿Cómo acceder al cloud computing?

*Duración:* 2h 30min

*Fecha y Lugar de celebración:* 28 Febrero. Zaragoza (España).

*Título:* Stand del proyecto SCI-BUS

*Duración:* 4 días

*Fecha y Lugar de celebración:* 27-30 Marzo 2012. Munich (Alemania) .

*Título:* Grid y Cloud al Servicio de la Empresa

*Duración:* 4h

*Fecha y Lugar de celebración:* 25 Mayo 2012. Zaragoza (España).

*Título:* Stand del proyecto SCI-BUS

*Duración:* 4 días

*Fecha y Lugar de celebración:* 18-21 Septiembre 2012. Pagra (República Checa).

*Título:* II Gefenol Summer School on Statistical Physics of Complex and Small Systems.

*Duración:* 2 semanas

*Fecha y Lugar de celebración:* 3 al 14 de Septiembre. Centro de Ciencias "Pedro Pascual". Benasque.

ORGANIZADORES: Fernando Falo, Jesús Gómez-Gardeñes.

*Título:* Taller de SCI-BUS y WS-PGRADE para usuarios, administradores y desarrolladores

*Duración:* 6h

*Fecha y Lugar de celebración:* 17 de mayo de 2012. BIFI, Zaragoza.

*Título: "Migración de cluster Slurm + Moab a Slurm 2.3"*

*Duración: 2 días*

*Fecha y Lugar de celebración: 27 y 28 Marzo 2012, BIFI (Edificio I+D). Zaragoza*

## 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 2012 se pueden citar las siguientes:

*Título: V International Conference BIFI 2012. Protein Targets: Discovery of Bioactive Compounds*

*Ponente: Ver tabla con todos los ponentes del congreso.*

*Fecha y Lugar de celebración: 1-4 de Febrero de 2012. BIFI, Zaragoza*

#### V Internacional Conference BIFI 2012

| NOMBRE y APELLIDOS       | CENTRO AL QUE PERTENECE O REPRESENTA<br>POBLACIÓN (PAÍS)                  |
|--------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| Ernesto Freire           | The Johns Hopkins University (Baltimore, USA)                             |
| Agustí Emperador         | IRB (Barcelona)                                                           |
| Oliver Carrillo          | Universita degli Studi di Modena (Italy)                                  |
| Álvaro Sebastián         | Estación Experimental Aula Dei (Zaragoza)                                 |
| Juan Fernández-Recio     | Barcelona Supercomputing Center/ BIFI                                     |
| M. Cristina Nonato       | Universidade de Sao Paulo (Brazil)                                        |
| Patricia Ferreira        | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| Nadya Velikova           | Instituto de Biomedicina (Valencia)                                       |
| Ramón Hurtado-Guerrero   | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| Harren Jhoti             | Astex Pharmaceuticals (UK)                                                |
| Rui M.M. Brito           | Universidade de Coimbra (Portugal)                                        |
| Ramón Campos Olivas      | CNIO (Madrid)                                                             |
| Horacio Pérez-Sánchez    | Universidad de Murcia                                                     |
| Ana M. Roa-Arranz        | GlaxoSmithKline Spain (Madrid)                                            |
| Javier Sancho            | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| Yamir Moreno             | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| Silvia Pileri            | GE Healthcare Europe GmbH (Milano, Italy)                                 |
| Ricardo A.P. Padua       | Universidade de Sao Paulo (Brazil) / Queen Mary University of London (UK) |
| Javier Sánchez           | Merck Millipore Spain                                                     |
| Soledad Penades          | CIC-biomaGUNE / CIBERbbn (San Sebastián)                                  |
| Luis Martínez-Lostao     | Universidad de Zaragoza                                                   |
| Pilar Martín-Duque       | IACS (Zaragoza)                                                           |
| Eva M. Gálvez            | Instituto de Carboquímica – CSIC (Zaragoza)                               |
| Pierpaolo Bruscolini     | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| Jesús M. de la Fuente    | INA (Zaragoza)                                                            |
| Nunilo Cremades          | University of Cambridge (UK)/ BIFI                                        |
| Liliana Rodrigues        | Universidad de Zaragoza                                                   |
| Laura Ruiz-Ávila         | CIB-CSIC (Madrid)                                                         |
| Eva Latorre              | Universidad de Zaragoza                                                   |
| Julián Pardo             | Universidad de Zaragoza                                                   |
| Mariano Barbacid         | CNIO                                                                      |
| Gregory Petsko           | Brandeis University (Waltham, USA)                                        |
| José Alberto Carrodeguas | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| M. Luisa Peleato         | BIFI (Zaragoza)                                                           |
| Guillermina Goñi         | CNIO (Madrid)                                                             |
| Alberto Anel             | Universidad de Zaragoza                                                   |
| Manel Esteller           | IDIBELL (Barcelona)                                                       |



*Título:* Mathematical Structures in Quantum Systems and Applications

*Ponente:* 50

*Fecha y Lugar de celebración:* 8-14 de julio 2012, Benasque

*Título:* Visitas de estudiantes de diversos centros (ver estancias de investigadores).

*Duración:* Varias durante el año.

*Fecha y Lugar de celebración:* BIFI, 2012.

*Título:* Comité Científico y Presidente de desión (Javier Sancho)

CONGRESO: Congreso de la Sociedad de Biofísica de España

*Duración:* Varias durante el año.

*Fecha y Lugar de celebración:* Barcelona, 2012

*Título:* "Presentación BSC, RES y PRACE"

*Ponente:* <http://www.bsc.es/marenostrum-support-services/hpc-events-trainings/bsc-res-and-prace-2012>

*Fecha y Lugar de celebración:* 15 Marzo 2012, BIFI (Edificio I+D)

*Título:* "International Workshop EU-China on Scientific Computing"

*Ponente:* <http://www.scc-computing.eu/en/events/zaragoza-workshop/program>

*Fecha y Lugar de celebración:* 26, 27 y 28 Noviembre 2012, BIFI (Edificio I+D)

#### **4.6. Patentes**

---

La solicitud de estas 3 patentes desde el área de Bioquímica pone de manifiesto parte de los resultados de investigación que han sido patentados.

*Título:* Compuestos para su uso en el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer

*Autores:* Sancho J, López L C, Carrodegua J A, Ventura S.

*Nº solicitud:* P201231452

*Fecha concesión:* 2012

*País de prioridad:* España

*Entidad titular:* Universidad de Zaragoza

*Título:* Allosteric inhibitors of NS3 protease from hepatitis C virus

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

*Nº solicitud:* EP12382218.1

*Fecha de prioridad:* 01/06/2012

*País de prioridad:* España

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

*Título:* Compuestos para su uso en el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer

*Inventores:* Javier Sancho, Laura C. López, José Alberto Carrodegua, Salvador Ventura

*Nº de solicitud:* P201231452

*Fecha de prioridad:* 19/09/2012

*País de prioridad:* España

*Entidad titular:* Universidad de Zaragoza

#### **4.7. Empresas SPIN-OFF**

---

Durante el año 2012 no se han generado ninguna empresa Spin Off.

## **Apartado 5. Formación**

### **5.1. Tesis dirigidas leídas en 2012**

---

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 2012 han sido 10 tesis defendidas. A continuación se especifican cada una de ellas con su título, doctorando, director/es de tesis, fecha de lectura y la calificación.

*Título:* Estudio teórico del mecanismo de transferencia de electrones en flavoproteínas implicadas en la cadena fotosintética de *Anabaena*.

*Doctorando:* Isaías Lans Vargas

*Director/es:* Milagros Medina / Mireia García-Viloca

*Universidad:* Universidad de Zaragoza

*Fecha de defensa:* 19/07/2012.

*Calificación:* Sobresaliente *cum laude*.

*Título:* Mecanismo catalítico de la Aril alcohol oxidasa de *Pleurotus eryngii*

*Doctorando:* Aitor Hernández Ortega

*Director/es:* Ángel Martínez / Patricia Ferreira

*Universidad:* Universidad Autónoma de Madrid

*Fecha de defensa:* 25/05/2012.

*Calificación:* Sobresaliente *cum laude*

*Título:* Models of social behavior based on game theory.

*Doctorando:* Jelena Grujić.

*Director/es:* José A. Cuesta y Ángel Sánchez.

*Universidad:* Carlos III de Madrid.

*Fecha de defensa:* 21 de septiembre de 2012.

*Calificación:* Apto *cum laude* por unanimidad (Mención internacional)

*Título:* Estudio de interacciones macromoleculares en el diseño de nuevos anti-virales y antibióticos

*Doctorando:* Rosa Doménech

*Director/es:* José Luis Neira

*Universidad:* Universidad Miguel Hernández

*Fecha de defensa:* 16/11/2012

*Calificación:* Apto

*Título:* Modelos De Interacción De Enlace De Hidrógeno Para La Simulación Del Plegamiento Y La Agregación De Proteínas

*Doctorando:* Marta Enciso Carrasco

*Director/es:* Antonio Rey Gayo

*Universidad:* Universidad Complutense de Madrid

*Fecha de defensa:* 06/02/2012

*Calificación:* Sobresaliente “*cum laude*”

*Doctorando:* Sara Ayuso

*Director/es:* Javier Sancho

*Universidad:* Zaragoza

*Fecha de defensa:* 2012  
*Calificación:* APTO cum laude

*Título:* Simulaciones Cinéticas de Transporte Iónico en Dispositivos de Fusión  
*Doctorando:* Andrés de Bustos Molina.  
*Director/es:* Francisco Castejón Magaña y Víctor Martín Mayor  
*Universidad:* Complutense de Madrid  
*Fecha de defensa:* 10 de Febrero de 2012  
*Calificación:* Sobresaliente cum Laude

*Título:* Polinomios cúbicos riemannianos: uma abordagem hamiltoniana e aplicações  
*Doctorando:* Lígia Raquel dos Santos Abrunheiro  
*Director/es:* Margarida Caminha y Jesús Clemente Gallardo  
*Universidad:* Coimbra (Portugal)  
*Fecha de defensa:* 14 septiembre 2012  
*Calificación:* Aprovado com distinção e louvor (Maxima posible)

*Título:* Dynamics and Collective Phenomena of Social Systems.  
*Doctorando:* Carlos Gracia Lázaro  
*Director/es:* Yamir Moreno y Luis Mario Floría  
*Universidad:* Universidad de Zaragoza  
*Fecha de defensa:* 27 de Noviembre

*Título:* Relaciones estructura-función en la cápsida del virus de la fiebre aftosa: algunas implicaciones para el desarrollo de vacunas y antivirales  
*Doctorando:* Verónica Rincón Forero  
*Director/es:* Mauricio García Mateu  
*Universidad:* Universidad Autónoma de Madrid  
*Fecha de defensa:* 2012  
*Calificación:* Sobresaliente cum laude

## **5.2. Becas de iniciación a la investigación**

---

*Título proyecto:* Aplicaciones del formalismo geométrico de la Mecánica Cuántica  
*Beneficiario:* Jorge Alberto Jover Galtier  
*Entidad financiadora:* MICINN  
*Fecha de comienzo:* Curso 2011-2012

*Título proyecto:* Evolucion multigenomica de las gramineas templadas (Pooideae, Poaceae). Biogeografía y filogeografía de especies modelo de pooideas (Festuca, Anthoxanthum s.l, Brachypodium, Bromus) en el viejo mund  
*Beneficiario:* Diana López Alvarez  
*Entidad financiadora:* Ministerio de Economía y Competitividad. Beca FPI  
*Fecha de comienzo:* 2011-2014

## **5.3. Cursos impartidos**

---

Sin tener en cuenta la actividad docente de los investigadores PDI en los distintos grados, postgrados, másteres, etc se han impoartido por personal del BIFI los siguientes cursos durante 2012

*Título:* Técnicas biofísicas en la caracterización de flavoenzimas  
*Duración:* 2 horas

*Fecha y Lugar de celebración:* 05/06/2012. Universitat degli Studi di Bari. Bari. Italia

*Título* Fijación de Nitrógeno. Nutrición Vegetal: Homeostasis de metales en plantas. "Iniciación a la investigación en ciencias agrarias y del medio natural".

*Duración:* 12 horas.

*Fecha y Lugar de celebración:* Mayo 2012. Escuela Universitaria Politécnica Superior de Huesca, Universidad de Zaragoza.

*Título* .Proteínas: del la estructura a la función. Master "Biología Molecular y Celular"

*Duración:* 8 horas.

*Fecha y Lugar de celebración:* Noviembre 2012. Facultad de Ciencias. Universidad de Zaragoza.

*Título:* Jornada de portales web de acceso a infraestructuras distribuidas en el BIFI

*Duración:* 2h 30 min

*Fecha y Lugar de celebración:* 17 Mayo 2012. BIFI (Zaragoza)

*Título:* Protein Interactions by Calorimetry: General Concepts & Applications, in *Biomolecular Interactions Analysis 2012 (Instruct Integrating Biology)*

*Duración:* Noviembre 12-16

*Fecha y Lugar de celebración:* Noviembre 2012, Institute for Molecular and Cell Biology – University of Porto (Portugal)

*Título:* Quantum chemistry calculations of electronic spectra: (Time-dependent) density-functional theory.

*Duración:* 8 horas.

*Fecha y Lugar de celebración:* 04-09/06/2012. ZCAM (Zaragoza, Spain)

*Título:* Estructura de Macromoléculas (2º curso Grado en Bioquímica)

*Duración:* 1 semestre

*Fecha y Lugar de celebración:* Universidad Autónoma de Madrid

*Título:* Ingeniería de Proteínas (Máster en Biotecnología)

*Duración:* 4 semanas

*Fecha y Lugar de celebración:* Sep-Oct 2012, Universidad Autónoma de Madrid

*Título:* Ingeniería de Proteínas (Máster en Biología Molecular y Celular)

*Duración:* 4 semanas

*Fecha y Lugar de celebración:* Nov-Dic 2012 Universidad Autónoma de Madrid

*Título:* Graphene Nanophotonics

*Fecha y Lugar de celebración:* 27/06/2012. Imperial College, Londres (Reino Unido),

*Título:* Graphene Plasmonics: Nanoemitters, Waveguides And Solitons

*Fecha y Lugar de celebración:* 04/07/2012. University of Cambridge, (Reino Unido)

*Título:* Electromagnetic modes connected to graphene structures: waveguides, nano-emitters and solitons

*Fecha y Lugar de celebración:* 10/07/2012. Universidad de Exeter (Reino Unido)

*Título:* Electromagnetic modes connected to graphene structures: waveguides, nano-emitters and solitons

*Fecha y Lugar de celebración:* 14/09/2012. L'Institut D'Optique, Centre National de la Recherche Scientifique, Paris (Francia)

*Título:* Extraordinary Optical Transmission

*Fecha y Lugar de celebración:* 05/10/2012. Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja (Colombia)

*Título:* Electromagnetic modes connected to graphene structures: waveguides, nano-emitters and solitons

*Fecha y Lugar de celebración:* 09/10/2012. Universidad de los Andes, Bogotá (Colombia)

*Título:* Historia pretérita y actual de unos sobrevivientes glaciares, los ñames pirenaicos (Borderea Miège.) XVII curso sobre Flora y Vegetación pirenaicas. Jaca 18/07/2012

## **Apartado. 6. Proyección Internacional**

### **6.1. Colaboraciones externas**

Una de las características del IUI BIFI es también la investigación multidisciplinaria 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 2012 49 colaboraciones, de las que 10 son con centros españoles, 11 americanos, 5 asiáticos y 22 europeos, que se enumeran a continuación brevemente.

#### **6.1.1. Colaboración con centros extranjeros:**

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

*Investigador colaborador:* Dr. Néstor Carrillo, Dr. Néstor Cortez, Dr. Eduardo Ceccarelli y Dra. Elena Orellano.

*Tipo de colaboración:* Largo plazo. Proyecto conjunto. Estudio cinético y estructural de flavoenzimas bacterianas.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Laboratory of Chemical Physics, National Institute of Health in Bethesda, USA.

*Investigador colaborador:* Drs. Gerhard Hummer y Edina Rosta

*Tipo de colaboración:* Estudio mecanocuántico de procesos de transferencia de hidruro.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Centre de Recherche des Cordeliers, Paris, Francia. Experimentación celular y animal.

*Investigador colaborador:* Dr. Santos Susín.

*Tipo de colaboración:* Estudio a nivel molecular y celular de las funciones de hAIF.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Universitat degli Studi di Bari, Bari, Italia.

*Investigador colaborador:* Dr. Barile.

*Tipo de colaboración:* Análisis de inhibidores de la FADS bacteriana en el enzima humano.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Unidad de Expresión de Proteínas Recombinantes del Instituto Pasteur, París.

*Investigador colaborador:* Dr. Bellalou.

*Tipo de colaboración:* Utilización de plataformas de microfermentadores de alta capacidad.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Faculdade de Ciencias Farmaceuticas de Ribeirao Preto. Universidade de Sao Paulo. Brasil.

*Investigador colaborador:* Cristina Nonato.

*Tipo de colaboración:* Caracterización en BIFI del mecanismo catalítico de la flavoenzima dihidroorotato dehidrogenasa.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* USDA Institute of Microbial and Biochemical Technology, Madison, Wisconsin, USA y Universidad de Clark, Worcester, USA.

*Investigador colaborador:* Drs. Daniel Cullen y David Hibbett

*Tipo de colaboración:* secuenciación masiva de genomas de basidiomicetos (incluidos los genomas de 30 basidiomicetos, publicados en sendos trabajos en PNAS y Science) con especial énfasis en la búsqueda de genes de nuevas flavooxidasas y otras oxidorreductasas de interés biotecnológico

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Institute for Plasma Physics, Greifswald (Alemania) / Unidad de Teoría.

*Investigador colaborador:* Jose Manuel García-Regaña.

*Tipo de colaboración:* visita de trabajo

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* National Institute for Fusion Science, Toki (Japan) / Unidad de Teoría.

*Investigador colaborador:* Shinsuke Satake.

*Tipo de colaboración:* visita de trabajo.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* University of Liverpool

*Investigador colaborador:* Prof. Turnbull

*Tipo de colaboración:* Proteínas de unión a carbohidratos

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* University of Bath

*Investigador colaborador:* Dr Watts

*Tipo de colaboración:* Estudios mecanísticos de glicosiltransferasas

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Pasteur Institute

*Investigador colaborador:* Prof. Latge

*Tipo de colaboración:* Estudios de inhibición en transglicosilasas

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Picardie University

*Investigador colaborador:* Dr Siriwardena

*Tipo de colaboración:* Estudios de inhibición en glicosiltransferasas

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Virginia University

*Investigador colaborador:* PS Hoffman

*Tipo de colaboración:* Investigación conjunta

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Washington Univ Saint Louis

*Investigador colaborador:* D Berg

*Tipo de colaboración:* Investigación conjunta

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Universidad de Toulouse

*Investigador colaborador:* ML Maddelein

*Tipo de colaboración:* Investigación conjunta

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Department of Chemistry, Universidade de Coimbra

*Investigador colaborador:* Maria Joao Moreno

*Tipo de colaboración:* Estudio cinético y termodinámico de interacciones en membranas biológicas

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Center for Neuroscience and Cell Biology, Universidade de Coimbra

*Investigador colaborador:* Rui M.M. Brito

*Tipo de colaboración:* Estudio termodinámico de la interacción de chaperonas farmacológicas con moléculas diana

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

*Investigador colaborador:* John Reader

*Tipo de colaboración:* Estudio termodinámico de interacciones proteína-RNA

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

*Investigador colaborador:* Jayaraman Sivaraman

*Tipo de colaboración:* Estudio termodinámico de interacciones proteína-proteína

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

*Investigador colaborador:* Enrique García Hernández

*Tipo de colaboración:* Estudio termodinámico de interacciones proteína-ligando

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Department of Biology, The Johns Hopkins University

*Investigador colaborador:* Ernesto Freire

*Tipo de colaboración:* Identificación de compuestos bioactivos frente a dianas farmacológicas

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Universidad de California, Santa Cruz.

*Investigador colaborador:* Peter Young

*Tipo de colaboración:* científica (spin glasses)

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Chinese Academy of Science

*Investigador colaborador:* Haijun Zhou

*Tipo de colaboración:* científica (algoritmos de belief-propagation).

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Università di Roma, La Sapienza.

*Investigador colaborador:* Giorgio Parisi y su grupo.

*Tipo de colaboración:* científica (Janus Collaboration).

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Università di Ferrara.

*Investigador colaborador:* Raffaele Tripiccone y su grupo.

*Tipo de colaboración:* científica (Janus Collaboration).

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Tokyo Institute of Technology.

*Investigador colaborador:* Hidetoshi Nishimori.

*Tipo de colaboración:* científica (algoritmos de quantum annealing).

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Politecnico di Torino (Torino, Italia)

*Investigador colaborador:* Alessandro Pelizzola

*Tipo de colaboración:* Colaboración científica - publicación conjunta



*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Fundación ISI (Torino, Italia)

*Investigador colaborador:* Mauro Faccin

*Tipo de colaboración:* Colaboración científica - publicación conjunta

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Dep. Química, Universidad de Cambridge

*Investigador colaborador:* Laura Itzhaki

*Tipo de colaboración:* Colaboración científica - Intercambio de datos

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Dep. Química, Universidad de Cambridge

*Investigador colaborador:* Robert Best

*Tipo de colaboración:* Colaboración científica - Intercambio de datos

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Northeastern University, Boston, USA

*Investigador colaborador:* Prof. Alessandro Vespignani

*Tipo de colaboración:* Investigación

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* ISI Foundation, Turin, Italia.

*Investigador colaborador:* Prof. Alessandro Vespignani, Dr. Ciro Catutto

*Tipo de colaboración:* Investigación.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Oxford Internet Institute, University of Oxford. UK.

*Investigador colaborador:* Dr. Sandra González Bailón.

*Tipo de colaboración:* Investigación.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* University of Merseille, Francia.

*Investigador colaborador:* Dr. Bruno Goncalvez

*Tipo de colaboración:* Investigación.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* University of Cergy-Pontoise, Paris, Francia.

*Investigador colaborador:* Dr. Laura Hernandez

*Tipo de colaboración:* Investigación.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Central Veterinary Institut. Lelystad, Holanda

*Investigador colaborador:* Prof. Michiel Harmsen

*Tipo de colaboración:* Investigación en virología

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Center of Physiology and Pathophysiology. Institute of Neurophysiology. University of Cologne.

*Investigador colaborador:* Prof. Dr. Agapios Sachinidis, Ph.D.

*Tipo de colaboración:* Investigación en células madre.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Centre for Cell Science NCCS Complex, Pune University. India

*Investigador colaborador:* Dr. Nibedita Lenka

*Tipo de colaboración:* Investigación en células madre.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* University of Silesia, Faculty of Biology and Environmental Protection, Department of Anatomy and Cytology. Polonia

*Investigador colaborador:* NA

*Tipo de colaboración:* ayuda de movilidad de estancia docente e investigadora para profesores Erasmus en Europa

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* University of Aberystwyth, Institute of Biological, Environmental and Rural Sciences, UK

*Investigador colaborador:* NA

*Tipo de colaboración:* ayuda de movilidad de estancia docente e investigadora para profesores Erasmus en Europa

### **6.1.2. Colaboraciones con centros españoles**

---

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Centro de Investigaciones Biológicas, CSIC, Madrid.

*Investigador colaborador:* Dr. Angel T. Martínez.

*Tipo de colaboración:* Largo plazo. Proyecto. Caracterización de oxidorreductasas de tipo GMCs. Mecanismo catalítico de la Aril alcohol oxidasa.

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

*Investigador colaborador:* Dr. Manuel Hervás y Dr. José A. Navarro

*Tipo de colaboración:* Acceso a espectroscopia cinética inducida por pulso de láser para los miembros de nuestro grupo. Dirección conjunta de Tesis Doctoral.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Instituto Química Física-Rocasolano, CSIC, Madrid.

*Investigador colaborador:* Dr. Juan A. Hermoso.

*Tipo de colaboración:* Resolución de estructuras tridimensionales de algunas proteínas.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* IBB y Universidad Autónoma de Barcelona, Barcelona

*Investigador colaborador:* Dra. Mireia García-Viloca, Dr. José M. Lluch y Dra. Angels González.

*Tipo de colaboración:* Estudio mediante métodos mecanocuánticos del procesos enzimáticos. Dirección conjunta de Tesis Doctoral.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Barcelona Supercomputing Centre, Barcelona.

*Investigador colaborador:* Dr. Victor Guallar.

*Tipo de colaboración:* Cálculos computacionales.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Universidad Pablo de Olavide, Sevilla.

*Investigador colaborador:* Dra. Francisca Reyes.

*Tipo de colaboración:* Caracterización de los procesos de interacción y transferencia de electrones/hidruro en una cadena proteica de transferencia de electrones que implica diversas flavoenzimas y está involucrada en la biodegradación de la tetralina.

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

*Investigador colaborador:* Dra. Armengod.

*Tipo de colaboración:* Caracterización mediante mezcla rápida con flujo detenido el mecanismo de acción de la enzima MnmE.

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* CNRF

*Investigador colaborador:* P Bernadó

*Tipo de colaboración:* Investigación conjunta

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Instituto de Biotecnología y Biomedicina, Universidad Autónoma de Barcelona

*Investigador colaborador:* Salvador Ventura, David Reverter

*Tipo de colaboración:* Estabilidad y plegamiento de proteínas e interacciones proteína-ligando

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis, Universidad de Sevilla-CSIC  
*Investigador colaborador:* Irene Díaz Moreno, Antonio Díaz Quintana  
*Tipo de colaboración:* Estudio termodinámico de interacciones proteína-proteína

*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Instituto de Biología Molecular y Celular, Universidad Miguel Hernández  
*Investigador colaborador:* Jose Luis Neira  
*Tipo de colaboración:* Estudio termodinámico de interacciones proteína-proteína e identificación de fármacos

## **6.2. Estancias en otros centros de investigación**

---

### **6.2.1. Estancias de investigación en centros extranjeros de investigadores del BIFI**

---

Las estancias de investigación que se han realizado en centros extranjeros en el año 2012 se enumeran clasificadas por la duración de la estancia.

#### **Estancias de >1 MES**

*Nombre del investigador:* Raquel Villanueva Llop  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Centre de Recherche des Cordeliers, Paris, France. Experimentación celular y animal.  
*País:* Francia  
*Duración:* 3 meses  
*Fechas:* 08/02/2012-15/05/2012.

*Nombre del investigador:* Angel Sánchez  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Faculty of Economics, University of Cambridge.  
*País:* Reino Unido  
*Duración:* 3 meses.  
*Fechas:* 1 de junio a 30 de agosto de 2012.

*Nombre del investigador:* Jose Miguel Gil Narvi6n  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Università degli Studi di Ferrara / Dipartimento di Fisica  
*País:* Italia  
*Duración:* 6 semanas.  
*Fechas:* 22 Octubre - 30 Noviembre.

#### **Estancias de 15 a 30 días**

*Nombre del investigador:* Yamir Moreno  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* ISI Foundation  
*País:* Italia  
*Duración:* 1 mes  
*Fechas:* 01/07/2012 al 31/07/2012

Estancia en Roma  
*Nombre del investigador:* Jorge Monforte García  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Università di Roma, La Sapienza. Dipartimento di Fisica.

País: Italia  
Duración: 3 semanas  
Fechas: 8/10/2012 – 27/10/2012

Estancia en Ferrara  
Nombre del investigador: Jorge Monforte García  
Centro de investigación/Departamento/Unidad: Università di Ferrara. Dipartimento di Fisica.  
País: Italia  
Duración: 3 semanas  
Fechas: 27/10/2012 – 13/11/2012

### **Estancias de 0 a 15 días**

*Nombre del investigador:* Jesús Clemente Gallardo  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Departamento de Matemática, Universidad de Coimbra  
*País:* Portugal  
*Duración:* 4 días  
*Fechas:* 11-15 de septiembre de 2012

*Nombre del investigador:* Jesús Clemente Gallardo  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de la estancia:* Dipartimento de Scienze Fisiche, Università Federico II di Napoli  
*País:* Italia  
*Duración:* 6 días  
*Fechas:* 1-6 de mayo de 2012

### **6.2.2. Estancias de investigación realizadas por investigadores extranjeros en el BIFI**

---

Las estancias de investigación que realizadas por investigadores extranjeros en el BIFI en el año 2012 se enumeran clasificadas por la duración de la estancia.

#### **Estancias > 1 MES**

*Nombre del investigador:* Renata Almeida Garcia Reis  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Universidad de Sao Paolo, Sao Paolo, Brasil  
*Duración:* 30 días  
*Fechas:* 07/9/2012-06/10/2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Patricia Ferreira / Milagros Medina

*Nombre del investigador:* Beatriz Seoane Bartolomé  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad:* Department of Physics, Tokyo Institute of Technology  
*País:* Japón  
*Duración:* >1 mes  
*Fechas:* 15 marzo a 15 de junio de 2012

*Nombre del investigador:* Dr. Chengyi Xia  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Tiajin University, China.  
*Duración:* 1 año  
*Fechas:* Desde Septiembre 2011 a Septiembre 2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Yamir Moreno

*Nombre del investigador:* M. Sc. Christian Sanabria  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* UNAM, Ciudad de Mexico, Mexico.  
*Duración:* 6 meses  
*Fechas:* Desde Enero 2012 a Junio 2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Yamir Moreno

*Nombre del investigador:* Zhen Wang.  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Hong Kong Baptist University. Hong Kong, China.  
*Duración:* 3 meses  
*Fechas:* Junio 2012 a Septiembre 2012.  
*Investigador responsable del BIFI:* Yamir Moreno

*Nombre del investigador:* Arezky Hernandez.  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Universidad de la Ciudad de Mexico, Mexico.  
*Duración:* 3 meses  
*Fechas:* Mayo 2012 a Septiembre 2012.  
*Investigador responsable del BIFI:* Yamir Moreno y Luis Mario Floría

*Nombre del investigador:* Alexander Betekhtin  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* University of Silesia, Faculty of Biology and Environmental Protection, Department of Anatomy and Cytology  
*Duración:* 5 meses y medio  
*Fechas:* =17/01/2012-30/06/2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Pilar Catalán

### **Estancias de 15 a 30 días**

*Nombre del investigador:* Maria Joao Moreno, Filipe Coreta Gomes  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Department of Chemistry, Universidade de Coimbra  
*Duración:* 3 semanas  
*Fechas:* Marzo 2012, Noviembre 2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Adrián Velázquez Campoy

*Nombre del investigador:* Jose Gallego  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Unidad Central de Investigación Biomédica, Universidad Católica de Valencia  
*Duración:* 4 semanas  
*Fechas:* Marzo 2012, Julio 2012, Septiembre 2012, Noviembre 2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Adrián Velázquez Campoy

*Nombre del investigador:* Stefano Stella, Gulnazar Mortuza  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Structural Biology and Biocomputing Programme, CNIO  
*Duración:* 2 semanas  
*Fechas:* Agosto 2012, Octubre 2012  
*Investigador responsable del BIFI:* Adrián Velázquez Campoy

*Nombre del investigador:* Katiuska Fernández, Rafael Scheiba  
*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia:* Instituto de Bioquímica Vegetal y Fotosíntesis, Universidad de Sevilla-CSIC  
*Duración:* 2 semanas  
*Fechas:* Marzo 2012, Junio 2012, Noviembre 2012

*Investigador responsable del BIFI: Adrián Velázquez Campoy*

### **Estancias de 0 a 15 días**

*Nombre del investigador: Víctor Polo*

*Centro de investigación/Departamento/Unidad: King Fahd University of Petroleum and Minerals*

*País: Arabia Saudi*

*Duración: 9 días*

*Fechas: 8-15 Abril 2012*

*Nombre del investigador: Alessandro Pelizzola*

*Centro de investigación/Departamento/Unidad de procedencia: Politécnico de Turín (Italia)*

*Duración: 11 días*

*Fechas: 16-27/1/2012*

*Investigador responsable del BIFI: P.Bruscolini*

### **Apartado 7. Interacción con la sociedad**

El Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejas tiene una fuerte tradición de interacción con la sociedad a través de diferentes canales y actividades. 2012 ha sido un año en el que se han realizado numerosas actividades no solo en el contexto regional o nacional, sino que la participación en proyectos europeos con colaboradores de diferentes países ha permitido ampliar la visibilidad del centro y la actividad investigadora que se realiza.

Uno de los medios más utilizados para la difusión y divulgación es su página web, donde se pueden encontrar noticias, eventos, ofertas de trabajo así como una descripción de las áreas de investigación y trabajo del instituto. En enero de 2012 se presentó la nueva página web, con diseño más actual y donde cada área sube los contenidos de interés e información del grupo de investigación.

En Febrero el BIFI participó por tercer año consecutivo en los circuitos científicos de la Universidad de Zaragoza acogiendo visitas de diferentes institutos de secundaria rurales de la comunidad de Aragón y también participó dando una charla en el Instituto de Calamocha. El objetivo de esta actividad era fomentar las vocaciones científicas entre los más jóvenes. En el caso concreto del girl's day en el que el BIFI también participó enseñando sus instalaciones y presentando los programas de investigación, el fin era acercar la ciencia a las jóvenes estudiantes. También en febrero se realizó el congreso internacional del BIFI que, si bien tiene carácter investigador, la participación de Mariano Barbacid hizo que se plantease una sesión de acceso libre con el fin de dar visibilidad a la actividad investigadora. Se hizo especial difusión a través de centros de salud y hospitales.

El proyecto europeo SCI-BUS, del que el BIFI es líder de difusión y que tiene como fin crear portales de computación para científicos, participó en marzo en el EGI Community Forum en Munich con el fin de dar a conocer el proyecto a investigadores. También se asistió al EGI Technical Forum en Praga en septiembre, esta vez destinado a desarrolladores. Scc-computing, otro proyecto internacional en este caso de colaboración estratégica con China, fue presentado

en Tianjin en abril con varios representantes del BIFI y con un fuerte impacto en prensa y tv que cubrieron el evento.



En mayo finalizó el proyecto Piregrid y para ello se realizó un acto en el que se contó con la participación de Pau García Milá fundador de EyeOS en un evento enfocado a fomentar el uso del cloud por empresas de la región.

También en mayo se colaboró con la Asociación de software libre de la Universidad de Zaragoza, cediendo varios equipos de los ya en desuso en el BIFI.



RRLab, el laboratorio de Realidad Remota del BIFI, fue presentado públicamente en el Instituto de la Azucarera, contando con la presencia del Departamento de Educación del Gobierno de Aragón así como la presencia de la Fecyt, entidad financiadora del proyecto.

El BIFI también ha tenido repercusión en los medios tradicionales, como es el caso de la TV. En junio fue emitido un espacio en Informe semanal sobre redes sociales, dando gran visibilidad al BIFI.





Durante este año 2012 se participó en los cursos de verano de la Universidad del País Vasco dando a conocer las actividades de promoción científica del BIFI hacia la comunidad educativa y la Fundación Ibercivis con una charla sobre ciencia ciudadana en Paseo Project.

El comienzo del curso escolar viene marcado en los últimos años por la realización de la Noche de los Investigadores en el que el BIFI una vez más participó acercando la actividad investigadora a pie de calle, para niños, jóvenes y adultos interesados. También en septiembre, y dada la tradición de colaboración del BIFI con el Gobierno de Aragón en divulgación, se firmó un convenio de colaboración con el departamento de Educación para promover actividades de participación de centros de enseñanza en actividades científicas. En concreto, y bajo la cobertura de la Fundación Ibercivis, se lanzará un programa de ciencia ciudadana de reconocimiento de células en el que los alumnos participarán en el proceso de reconocimiento de muerte celular. Ibercivis continúa trabajando en el ámbito de la computación voluntaria y participó activamente en el encuentro de BOINC junto con la International Desktop Grid Federation (IDGF) en Londres el pasado septiembre.

Además, la Fundación Ibercivis, que se registró oficialmente como fundación en septiembre de 2012, lidera un proyecto europeo de participación ciudadana SOCIETIC, en el que se han llevado a cabo varias actuaciones. En octubre tuvo lugar la presentación dicho proyecto y la participación como patrocinador en las jornadas de “Comunicar la neurociencia” de la Universidad de Zaragoza.



Uno de los eventos que mayor repercusión ha tenido en el último año dentro de la llamada ciencia ciudadana o ciencia que se sirve de la participación de la sociedad para obtener datos o resultados científicos, ha sido el proyecto de Gripenet. Gripenet es un proyecto nacional que se une a una iniciativa internacional (Influezanet) que se presentó en noviembre para que la sociedad colabore en predecir la evolución de la gripe y que tuvo repercusión en prensa y televisión a nivel regional.

En el mes de diciembre se realizó la Fundación Ibercivis organizó el Cafe de la Innovación AINNA, con una jornada de presentación del BIFI en la facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza para animar a jóvenes estudiantes a realizar su carrera investigadora en este instituto.