

Hospital Infantil de  
México Federico Gomez,  
Unidad de Investigación en Biología  
Computacional y Diseño de Fármacos.  
C/ Dr. Marquez 162, Delegación Cuauhtémoc.  
06720 Ciudad de México, México.  
☎ +52 1 55 7810 2479  
✉ prada.gracia@gmail.com  
🌐 dprada  
🐦 dpradagracia  
📧 diego\_prada

# Dr. Diego Prada Gracia

## Biofísico Computacional

Nacido en 1979, Zaragoza, España.

### Perfil Profesional

- Estudio mediante métodos computacionales de la termodinámica y cinética de sistemas moleculares de relevancia biológica.
- Simulación de dinámica molecular de procesos de interacción proteína-ligando, proteína-proteína y plegamiento.
- Diseño y optimización computacional de moléculas con potencial farmacológico.
- Desarrollo de nuevos marcos teóricos físicos estadísticos para el análisis de sistemas complejos dinámicos.
- Desarrollo de software ad-hoc para el análisis de modelos computacionales de la dinámica de sistemas biomoleculares.
- Análisis de Big Data.

### Posición Actual

Feb. 2017 - ... **Investigador Principal Responsable**, Unidad de Investigación en Biología Computacional y Diseño de Fármacos. Hospital Infantil de México Federico Gomez, Ciudad de México, México. (<http://uibcdf.org>).

### Posiciones Anteriores

- Nov. 2015 - Nov. 2016 **Investigador Asociado Postdoctoral**, Department of Pharmacological Sciences. Icahn School of Medicine at Mount Sinai, New York, US.  
Dr. Marta Filizola Laboratory: Computer-Aided Structural Biology and Drug Discovery (<http://filizolalab.org>).
- Nov. 2010 - Oct. 2014 **Investigador Postdoctoral**, School of Soft Matter. Freiburg Institute for Advanced Studies, Freiburg, Alemania.  
Dr. Francesco Rao's Lab: Dynamics of Complex Biomolecular Systems.
- Jun. 2008 - Sept. 2010 **Investigador en Formación Contratado Parcial**, Departamento de Física de la Materia Condensada. Facultad de Ciencias Físicas, Universidad de Zaragoza., Zaragoza, España.  
Dr. Fernando Falo: Laboratorio de Física Estadística y No Lineal
- May. 2004 - May. 2008 **Contratado Estudiante de Doctorado**, Departamento de Física de la Materia Condensada. Facultad de Ciencias Físicas, Universidad de Zaragoza., Zaragoza, España.  
Dr. Fernando Falo: Laboratorio de Física Estadística y No Lineal
- Abr. 2006 - Ago. 2006 **Investigador Predoctoral Estancia Becada**, Department of Computational Biology, School of Medicine, University of Pittsburgh, USA.  
Dr. Carlos Camacho's Lab: "The role of water molecules in the Barnase-Barstar interface".

---

## Educación

Ene. 2011 **PhD en Biofísica y Física Estadística**, Universidad de Zaragoza, España.  
Título: *"Paisajes de Energía Libre en modelos de biomoléculas"*. Calificación: Summa Cum Laude.  
Supervisor: Prof. Dr. Fernando Falo.

Sept. 2004 - Sept. 2006 **Diploma de Estudio Avanzados**, Universidad de Zaragoza, España.  
Programa ubicado en el campo de la biofísica y física estadística

Sept. 1997 - Jul. 2003 **Licenciatura en Ciencias Físicas**, Universidad de Zaragoza, España.

---

## Habilidades Profesionales

- **Experiencia y capacidad de desarrollo de nuevos métodos estadísticos computacionales de análisis.**
- **Conocimiento demostrado de análisis de grandes datos.**
- **Manejo, mantenimiento y coordinación de instalaciones de computo intensivo.**
- Experiencia en coordinación de proyectos y producción de resultados científicos.
- Estrategias de Gestión de proyectos científicos colaborativos.
- Capacidad de comunicación oral y escrita de resultados científicos (Inglés y Español).
- Experiencia de tutela de estudiantes de doctorado.

### Selección de Metodologías

- Simulación de Dinámica Molecular
- Métodos computacionales de mejora de la exploración del paisaje conformacional de biomoléculas
- Métodos computacionales de cálculo de energías libres
- Teoría de Procesos Estocásticos
- Simulación Numérica
- Métodos MonteCarlo
- Teoría de la Información
- Análisis MultiDimensional
- Métodos de Clustering
- Teoría de Redes Complejas y Algoritmos de Detección de Comunidades
- Modelos de Estados de Markov y Redes de Cinéticas de Transición
- Análisis basados en fluctuaciones de parámetros de orden

### Conocimientos Computacionales

- Administración de clusters informáticos bajo Linux OS.
  - Estrategias de Desarrollo de Software.
- Programación
- Avanzado: Fortran, Python, Bash Scripting.
  - Básico: C, Java, R, Tcl/Tk.

---

## Aptitudes y Capacidades Personales

- **La resolución de problemas y la aplicación de la ciencia para la mejora del bienestar de la sociedad como motivación personal principal.**
  - **Constante deseo de aprendizaje y adquisición de conocimiento.**
  - Extraordinaria motivación para trabajar en ambientes multidisciplinarios.
  - Actitud óptima para trabajar en grupo o individualmente.
- Idiomas
- Español: nativo.
  - Inglés: fluidez hablado y escrito.

---

## Otros Méritos o Logros Profesionales

- Investigador en Ciencias Médicas “D”. Instituto Nacional de Salud. Secretaría de Salud. México.
- Investigador perteneciente al Sistema Nacional de Investigadores Mexicano: SNI I.
- Experto asesor para el Comité de Moléculas Nuevas, Comisión de Autorización Sanitaria, Comisión Federal para la Protección contra Riesgos Sanitarios, México. Marzo 2017 - ...
- Miembro del Comité de Investigación del Hospital Infantil de México Federico Gómez.
- Publicaciones científicas (<http://goo.gl/xlDDuq> y [https://www.researchgate.net/profile/Diego\\_Prada-Gracia](https://www.researchgate.net/profile/Diego_Prada-Gracia)).
- Desarrollador principal del software: AquaLab (<http://dprada.github.io/Aqua>). Conjunto de librerías de análisis estadístico de sistemas biomoleculares y simulaciones de dinámica molecular. Código abierto en Python y Fortran.
- Administrador de Sistemas Informáticos de los recursos computacionales del Laboratorio de Física Estadística y No Lineal de la Universidad de Zaragoza (España) en el periodo 2006-2010: cluster computacional de 222 cpus para 12 usuarios. Co-administrador de los recursos computacionales del Laboratorio de el Dr. Francesco Rao en el Freiburg Institute for Advanced Studies (Alemania), durante el periodo 2010-2014: 80 cpus y 24 gpus para 6 usuarios.
- Principal promotor y miembro del comité organizador de la conferencia internacional “Complex Energy Landscapes: Computational and Statistical Methods for Soft Matter” (<http://bifi.es/events/ce12010>, June 2010, ESF-ZCAM, Zaragoza, Spain).

---

## Actividad Docente

- Tutor responsable y docente del curso de postgrado “De la estructura molecular del blanco al diseño racional de fármacos” perteneciente al programa de Doctorado de Ciencias Biomédicas UNAM. Semestre 2018-1.
- Asistente de profesor en la asignatura “Física Biológica”: Sept. 2006 - Jun. 2008, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza, España.

---

## Actividad Divulgación Científica

- Conferencia “Proteínas dentro de la computadora” del ciclo “Lunes en la Ciencia”: 22 Mayo 2017, Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Iztapalapa, México.

---

## Publicaciones Científicas

- 2016 K. A. Marino, **D. Prada-Gracia**, D. Provasi & M. Filizola. “Impact of Lipid Composition and Receptor Conformation on the Spatio-Temporal Organization of  $\mu$ -Opioid Receptors in a Multi-component Plasma Membrane Model.” *PLoS Computational Biology*, vol. 12(12), p. e1005240. [<http://10.1371/journal.pcbi.1005240>]
- 2016 L. M. Moreno-Vargas & **D. Prada-Gracia**. “New perspectives on the computational characterization of the kinetics of binding-unbinding in drug design: implications for novel therapies” *Boletín Médico del Hospital Infantil de México*, In Press.
- 2016 **D. Prada-Gracia**, S. Huerta-Yepez & L. M. Moreno-Vargas. “Application of computational methods for anticancer drug discovery, design, and optimization.” *Boletín Médico del Hospital Infantil de México*, In Press.

- 2016 M. C. Morón, **D. Prada-Gracia** & F. Falo. "Macro and nano scale modelling of water-water interactions at ambient and low temperature: relaxation and residence times". *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 18, p. 9377. -Portada de la revista- [<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP06791J>]
- 2015 P.-A. Cazade, W. Zheng, **D. Prada-Gracia**, G. Berezovska, F. Rao, C. Clementi & M. Meuwly. "A comparative analysis of clustering algorithms: O<sub>2</sub> migration in truncated hemoglobin I from transition networks". *The Journal of Chemical Physics*, vol. 142, p. 025103. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4904431>]
- 2014 C. Lu, **D. Prada-Gracia** & F. Rao. "Structure and dynamics of water in crowded environments slows down peptide conformational changes". *The Journal of Chemical Physics*, vol. 141, no. 4, p. 045101. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4891465>]
- 2013 S. Mostarda, F. Levi, **D. Prada-Gracia**, F. Mintert & F. Rao. "Optimal, robust geometries for coherent excitation transport". *arXiv preprint*, arXiv:1312.1833. [<http://arxiv.org/abs/1312.1833>]
- 2013 **D. Prada-Gracia**, R. Shevchuk & F. Rao. "The quest for self-consistency in hydrogen bond definitions". *The Journal of Chemical Physics*, vol. 139, no. 8, p. 084501. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4818885>]
- 2013 S. Mostarda, F. Levi, **D. Prada-Gracia**, F. Mintert & F. Rao. "Structure-dynamics relationship in coherent transport through disordered systems". *Nature Communications*, vol. 4, no. 2296. [<http://dx.doi.org/10.1038/ncomms3296>]
- 2013 **D. Prada-Gracia** & F. Rao. "Rethinking hydrogen-bond kinetics". *arXiv preprint*, arXiv:1308.1030. [<http://arxiv.org/abs/1308.1030>]
- 2013 G. Berezovska, **D. Prada-Gracia** & F. Rao. "Consensus for the Fip35 folding mechanism?". *The Journal of Chemical Physics*, vol. 139, no. 3, p. 035102. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4812837>]
- 2012 G. Berezovska, **D. Prada-Gracia**, S. Mostarda & F. Rao. "Accounting for the kinetics in order parameter analysis: Lessons from theoretical models and a disordered peptide". *The Journal of Chemical Physics*, vol. 137, no. 19, p. 194101. -Portada de la revista- [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4764868>]
- 2012 **D. Prada-Gracia**, R. Shevchuk, P. Hamm & F. Rao. "Towards a microscopic description of the free-energy landscape of water". *The Journal of Chemical Physics*, vol. 137, no. 14, p. 144504. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4755746>]
- 2012 R. Tapia-Rojo, **D. Prada-Gracia**, J.J. Mazo & F. Falo. "Mesoscopic model for free-energy-landscape analysis of DNA sequences". *Physical Review E*, vol. 86, no. 2, p. 021908. [<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.86.021908>]
- 2012 **D. Prada-Gracia** & F. Rao. "Is ion channel selectivity mediated by confined water?". *arXiv preprint*, arXiv:1207.6953. [<http://arxiv.org/abs/1207.6953>]
- 2012 R. Shevchuk, **D. Prada-Gracia** & F. Rao. "Water structure-forming capabilities are temperature shifted for different models". *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 116, no. 25, p. 7538. [<http://dx.doi.org/10.1021/jp303583f>]
- 2009 **D. Prada-Gracia**, J. Gómez-Gardeñes, P. Echenique & F. Falo. "Exploring the free energy landscape: from dynamics to networks and back". *PLoS Computational Biology*, vol. 5, no. 6, p. e1000415. [<http://dx.doi.org/10.1371/journal.pcbi.1000415>]

- 2008 J.L. Alonso, X. Andrade, P. Echenique, F. Falceto, **D. Prada-Gracia** & A. Rubio. "Efficient formalism for large-scale ab initio molecular dynamics based on time-dependent density functional theory". *Physical Review Letters*, vol. 101, no. 9, p. 096403. [<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.096403>]
- 2007 M. Martinez-Júlvez, N. Cremades, M. Bueno, I. Pérez-Dorado, C. Maya, S. Cuesta-López, **D. Prada-Gracia**, F. Falo, J. Hermoso & J. Sancho. "Common conformational changes in flavodoxins induced by FMN and anion binding: The structure of *Helicobacter pylori* apoflavodoxin". *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, vol. 69, no. 3, p. 581. [<http://dx.doi.org/10.1002/prot.21410>]
- 2006 M. Cotallo-Abán, **D. Prada-Gracia**, J.J. Mazo, P. Bruscolini, F. Falo & J. Sancho. "Analysis of Apoflavodoxin Folding Behavior with Elastic Network Models". *AIP Conference Proceedings*, Vol. 851, p. 135. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.2345631>]

## Selección de Contribuciones en Conferencias.

- 2013 **D. Prada-Gracia**. "Towards the Free-Energy Landscape characterisation of water: from bulk to solvation". International Black Forest Focus 9. Protein Dynamics: From Water Hydration to Crowding Effects. Freiburg, Germany. **-Contribución Oral-**
- 2013 **D. Prada-Gracia**. "Towards a microscopic description of the Free Energy Landscape of water". 7th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems. Barcelona, Spain. **-Contribución Oral-**
- 2013 **D. Prada-Gracia**. "Accurate kinetic analysis from reaction coordinates: a universal problem". Challenges in Soft Matter Research: From Modelling to Structures and Applications. FRIAS, Freiburg, Germany. **-Contribución Oral-**
- 2012 **D. Prada-Gracia**. "The Free Energy Landscape of water by computer simulations and complex network analysis". XIII International Workshop on Complex Systems, Andalo, Trento, Italy. **-Contribución Oral-**
- 2011 **D. Prada-Gracia** & F. Rao. "Water pathways to ion solvation". 2nd Workshop on Molecular Kinetics '11. Berlin, Germany. **-Poster-**
- 2009 **D. Prada-Gracia**, J. Gómez-Gardeñes & F. Falo. "Exploring the free energy landscape: From dynamics to networks and back". XVI National Statistical Physics Conference, FisES'09, Huelva, Spain. **-Contribución Oral-**
- 2009 **D. Prada-Gracia**, J. Gómez-Gardeñes, P. Echenique & F. Falo. "Unveiling the free energy landscape of complex systems: The conformational Markov network as coarse-grained picture.". IV National Conference Biocomputation and Complex Systems, BIFI, Zaragoza, Spain. **-Contribución Oral-**
- 2008 **D. Prada-Gracia**, J. Gómez-Gardeñes, P. Echenique & F. Falo. "Exploring the Free-Energy Landscape: from dynamics to networks". XXI International Sitges Conference on "Statistical Mechanics of Molecular Biophysics", Sitges, Spain. **-Poster-**
- 2008 **D. Prada-Gracia**, J. Gómez-Gardeñes & F. Falo. "Exploring the Energy Landscape: From the double well to the analysis of the conformational space of proteins". XV National Statistical Physics Conference, FisES'08, Salamanca, Spain. **-Poster-**
- 2006 **D. Prada-Gracia**, M. Cotallo, P. Bruscolini, F. Falo & J. Mazo. "Mechanical and Statistical model of proteins: Apoflavodoxin". XIII National Statistical Physics Conference, FisES'06, Madrid, Spain. **-Poster-**

- 2006 **D. Prada-Gracia**, M. Cotallo, P. Bruscolini, F. Falo & J. Sancho. "Analysis of Apoflavodoxin Folding with Elastic Network Models". II International Conference BIFI: "From Physics to Biology: The interface between Experiment and Computation". BIFI, Zaragoza, Spain. *-Poster-*
- 2005 **D. Prada-Gracia**, J. Mazo & F. Falo. "Unfolding and stretching dynamics of simple polymer models". ICTP Workshop on Biopolymers. ICTP, Trieste, Italy. *-Poster-*