



UVaDOC: Repositorio Documental de la Universidad de Valladolid

Artículos en acceso abierto (SEPTIEMBRE 2022)

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/54818> Cherubin, Alberto; Guerra, Javier; Barrado Esteban, Enrique; García-Serrada, Carlos; Pulido Pelaz, Francisco José. Título: Addition of amines to molasses and lees as corrosion inhibitors in sustainable de-icing materials. Publicación: Sustainable Chemistry and Pharmacy, 2022, vol. 29, 100789. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scp.2022.100789>

Resumen: Los residuos formados durante las actividades de elaboración de azúcar y vino han llamado nuestra atención dada su capacidad para inhibir la corrosión en presencia de salmuera en una formulación descongelante. Aquí se encuentra que la adición de aminas a la melaza de remolacha desazucarada y las lías de vino mejora sus propiedades anticorrosivas. Por lo tanto, los experimentos de pérdida de peso muestran claramente que la adición de una pequeña cantidad de aminas a la melaza o lías da como resultado una marcada inhibición de la corrosión en acero al carbono y galvanizado. Los experimentos electroquímicos posteriores y los estudios de microscopía respaldaron este hallazgo. Además, las imágenes microscópicas indicaron que la trietanolamina era la mejor candidata entre las aminas probadas para su uso en la formulación final de descongelación. Los experimentos de fusión del hielo demostraron que la presencia de melaza/lías junto con trietanolamina no altera las propiedades del agente descongelante. Cuando se midió la corrosión en sondas de acero al carbono y galvanizado en condiciones ambientales, se logró una disminución del 88% para el acero galvanizado y del 65% para el acero al carbono debido a la acción inhibitoria de la mezcla melaza/trietanolamina. Estos resultados sugieren que se recomienda la adición de melaza/lías y trietanolamina a los agentes descongelantes a base de salmuera.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55057> Ibáñez Fonseca, Arturo; Rico, Ana; Preciado, Silvia; González Pérez, Fernando; Muntión, Sandra; García Briñón, Jesús; García Macías, María Carmen; Rodríguez Cabello, José Carlos; Pericacho, Miguel; Alonso Rodrigo, Matilde; Sánchez Guijo, Fermín. Título: Mesenchymal stromal cells combined with elastin-like recombinamers increase angiogenesis in vivo after hindlimb ischemia. Publicación: Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2022, vol.10, artículo 918602. DOI: <https://doi.org/10.3389/fbioe.2022.918602>

Resumen: La isquemia de miembros posteriores es una necesidad médica no cubierta, especialmente para aquellos pacientes que no pueden someterse a una cirugía vascular. La terapia celular, principalmente a través de la administración de células estromales mesenquimales (MSC), puede ser un enfoque potencialmente atractivo en este contexto. En el trabajo actual, nuestro objetivo fue evaluar el potencial de la combinación de MSC con un hidrogel proangiogénico basado en elastina similar a un recombinamero (ELR) en un modelo murino de isquemia de las patas traseras. [...] En resumen, la combinación de un hidrogel basado en ELR con MSC puede mejorar los efectos angiogénicos de ambas estrategias en la revascularización de tejidos isquémicos.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55159> Tsai, Chinhao; Aboy Cebrián, María; Pelaz Montes, María Lourdes; Hsu, Yu-Hsiang; Woon, Wei-Yen; Timans, Paul J.; Lee, Chih-Kung. Título: Rapid thermal process driven intra-die device variations. Publicación: Materials Science in Semiconductor Processing, 2022, vol. 152, 107052 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.107052>

Resumen: La variación del dispositivo dentro del troquel debido a los efectos del diseño del patrón asociados con el desarrollo de procesos de recocido ultrarrápidos es uno de los principales desafíos de escalado para los dispositivos CMOS avanzados. En este artículo, mostramos que se puede establecer una correlación excelente y universal entre la variación del dispositivo en matriz y una nueva técnica de caracterización de reflectancia con suficiente resolución. Este enfoque tiene el potencial de ser universalmente aplicable a prácticamente cualquier patrón de estructura. Además,



realizamos simulaciones del efecto de recocido térmico en perfiles de dopaje 2D al considerar los efectos de la sensibilidad a la temperatura, la reflectividad y la fracción de dopante activo. Nuestros resultados muestran que la variación observada en la matriz se debió principalmente al uso de un proceso de recocido térmico rápido (RTA) en lugar de un recocido instantáneo (FLA). Además, llegamos a la conclusión de que la variación del dispositivo inducida por el patrón se debe principalmente a la redistribución de los dopantes, en lugar de a la activación de los dopantes. Para mitigar el efecto de carga del patrón del recocido térmico, empleamos una capa absorbente de luz para eliminar la variación de reflectividad dentro del troquel. Descubrimos que podíamos reducir con éxito la variación eléctrica en el troquel en un 50 %.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55380> Anderez Fernández, María; Ferrero, Sergio; Queiroz, Joao Paulo Silva; Pérez Velilla, Eduardo; Álvarez González, Celedonio Manuel; Martín Martínez, Ángel; Bermejo Roda, Maria Dolores. Título: Formic acid production by simultaneous hydrothermal CO₂ reduction and conversion of glucose and its derivatives. Publicación: Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 2022, vol. 139, 104504. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2022.104504>

Resumen: La reducción hidrotermal de CO₂ utilizando moléculas orgánicas como los alcoholes puede producir combustibles renovables y productos químicos de plataforma, como el ácido fórmico (FA). Si el proceso se realiza utilizando glucosa como reductor, el rendimiento es especialmente alto, ya que los FA se producen selectivamente tanto por reducción de CO₂ como por degradación de glucosa en medios hidrotermales alcalinos.: Este artículo analiza el origen del ácido fórmico usando NaH₁₃CO₃ como fuente de CO₂, asistido por HPLC y ¹³C-NMR para estudiar el origen de los AF. Los resultados muestran que tienen lugar dos vías de reacción: la primera, en tiempos de reacción cortos, consiste en la descomposición de la glucosa en ácido fórmico y otros subproductos, logrando un bajo rendimiento a FA-¹³C, mientras que los tiempos de reacción más largos conducen a un mayor rendimiento a FA-¹³C. Del mismo modo, la temperatura juega un papel importante, siendo 300 °C el óptimo.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55386> Cantera, Sara; López de Sancho Marín, Martino; Muñoz Torre, Raúl; Lebrero Fernández, Raquel. Título: Comparative evaluation of bacterial and fungal removal of indoor and industrial polluted air using suspended and packed bed bioreactors. Publicación: Chemosphere, 2022, vol. 308, 136412 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136412>

Resumen: La reducción de los compuestos orgánicos volátiles (VOCs) en interiores representa un gran desafío debido a su riesgo ambiental, amplia naturaleza y variabilidad de concentración. Las biotecnologías representan una plataforma rentable, sólida y sostenible para el tratamiento de VOC peligrosos en concentraciones bajas y fluctuantes. Sin embargo, apenas se han implementado para la purificación del aire interior. Por lo tanto, se sabe poco sobre la influencia de la configuración del reactor o la naturaleza y variabilidad de la concentración de los VOCs sobre la remoción, la resiliencia y la población microbiana de las configuraciones de biorreactores susceptibles de implementarse, tanto en ambientes interiores como industriales. El presente estudio tiene como objetivo comparar el rendimiento de eliminación de cuatro VOCs con diferente hidrofobicidad y estructura molecular - acetona, n-hexano, α -pineno y tolueno- a dos concentraciones de entrada (5 y 400 mg m⁻³), que imitan las concentraciones de aire interior e industrial contaminado.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55547> Cattaneo, Carlos R.; Rodríguez Muñoz, Yadira; Rene, Eldon Raj; García Depaect, Octavio; Muñoz Torre, Raúl. Título: Biogas bioconversion into poly (3-hydroxybutyrate) by a mixed microbial culture in a novel Taylor flow bioreactor. Publicación: Waste Management, 2022, vol. 150, p. 364-372. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2022.07.017>

Resumen: La producción de biopolímeros a base de biogás representa una ruta alternativa de valorización del biogás con potencial para reducir la contaminación plástica y las emisiones de gases de efecto invernadero. Este estudio investigó por primera vez la bioconversión continua de metano,



contenido en biogás, en poli(3-hidroxi-butarato) (PHB) mediante un cultivo metanótrofo mixto utilizando un innovador biorreactor de flujo Taylor de alta transferencia de masa. Tras un mapeo del régimen de flujo hidrodinámico, se evaluó la influencia del tiempo de residencia del gas y la recirculación interna del gas en la reducción del CH₄ en condiciones no limitantes de nutrientes. En condiciones operativas óptimas (tiempo de residencia del gas de 60 min y relación interna de reciclaje de gas de 17), el biorreactor pudo soportar una eficiencia de eliminación de CH₄ del 63,3 %, una capacidad de eliminación de CH₄ robusta (17,2 g-CH₄ m⁻³h⁻¹) y una concentración de biomasa estable (1,0 g L⁻¹). La reducción simultánea de CH₄ y la síntesis de PHB se investigó bajo una operación continua de 24 h: 24 h de festín de nitrógeno/hambruna. La privación de nitrógeno cíclico y el flujo de Taylor impuesto en el biorreactor dieron como resultado una concentración de biomasa relativamente constante de 0,6 g L⁻¹ con contenidos de PHB que oscilaban entre 11 y 32 % p w⁻¹ (sobre una base de peso seco), lo que implica un PHB promedio productividad de 5,9 g-PHB m⁻³ d⁻¹ con un rendimiento de PHB asociado de 19,8 mg-PHB g-CH₄⁻¹. Finalmente, el análisis molecular de la estructura de la población microbiana indicó que los metanótrofos de tipo II superaron a los metanótrofos de tipo I que no acumulan PHB, con un consorcio heterótrofo-metanotrófico enriquecido en *Methylocystis*, *Hyphomicrobium*, *Rubinisphaeraceae* SH PL14 y *Pseudonocardia*.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/54944> Curto Lorenzo, David; Acebes Senovilla, Fernando; González Varona, José Manuel; Poza García, David Jesús. Título: Impact of aleatoric, stochastic and epistemic uncertainties on project cost contingency reserves. Publicación: International Journal of Production Economics, 2022, vol. 253, 108626. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijpe.2022.108626>

Resumen: En los proyectos de construcción, las reservas para contingencias se han estimado tradicionalmente en base a un porcentaje del costo total del proyecto, lo cual es arbitrario y, por lo tanto, poco confiable en casos prácticos. La simulación Monte Carlo proporciona una estimación más fiable. Sin embargo, los trabajos sobre este tema se han centrado exclusivamente en los efectos de la incertidumbre aleatoria, pero han ignorado los impactos de otros tipos de incertidumbre. En este artículo, presentamos un método para determinar cuantitativamente las reservas de contingencia de costos del proyecto basado en la simulación de Monte Carlo que considera el impacto no solo de la incertidumbre aleatoria, sino también de los efectos de otros tipos de incertidumbre (estocástica, epistémica) en el costo total del proyecto. El método propuesto ha sido validado con un caso real de proyecto de construcción en España. Los resultados obtenidos demuestran que el enfoque será útil para los Gerentes de Proyectos de construcción porque las reservas de contingencia de costos obtenidas son consistentes con el tipo de incertidumbre real que afecta los riesgos identificados en sus proyectos.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55044> Da Costa, André; Pereira, A.; Sampaio, Paula; Rodríguez Cabello, José Carlos; Gomes, Andreia C.; Casal, Margarida; Machado, Raúl. Título: Protein-Based Films Functionalized with a Truncated Antimicrobial Peptide Sequence Display Broad Antimicrobial Activity. Publicación: ACS Biomaterials Science & Engineering, 2021, 7, 2, 451–461. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsbiomaterials.0c01262>

Resumen: La creciente resistencia bacteriana a los antibióticos está impulsando una fuerte demanda de nuevos biomateriales antimicrobianos. Este trabajo describe la fabricación de películas independientes que exhiben propiedades antimicrobianas mediante la combinación, en la misma cadena polipeptídica, de un recombinante similar a la elastina que comprende 200 repeticiones del pentámero VPAVG (A200) y una variante truncada de 18 aminoácidos del péptido antimicrobiano, llamado BMAP-28. La proteína de fusión BMAP-18A200 se sobreexpresó y purificó convenientemente mediante un proceso no cromatográfico escalable y simplificado. Las películas independientes de BMAP-18A200 demostraron ser estables sin necesidad de agentes de reticulación y mostraron una alta actividad antimicrobiana contra los patógenos de la piel, incluidas



las bacterias gramnegativas y grampositivas, así como hongos unicelulares y filamentosos. La actividad antimicrobiana de las películas estuvo mediada por el contacto directo de las células con la superficie de la película, lo que resultó en una integridad estructural comprometida de las células microbianas. Además, las películas de BMAP-18A200 no mostraron citotoxicidad en líneas celulares humanas normales (fibroblastos de piel y queratinocitos). Todos estos resultados destacan el potencial de estos polímeros multifuncionales biotecnológicos como nuevos materiales libres de fármacos para prevenir y tratar infecciones microbianas.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55068> Sánchez Calderón, Ismael; Bernardo García, Victoria; Santiago Calvo, Mercedes; Naji, Haneen; Saiani, Alberto; Rodríguez Pérez, Miguel Ángel. Título: Effect of the molecular structure of TPU on the cellular structure of nanocellular polymers based on PMMA/TPU blends. Publicación: Polymers 2021, Vol.13, N.º.18, 18 pp. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym13183055>

Resumen: En este trabajo se presentan los efectos de la química y la concentración del poliuretano termoplástico (TPU) sobre la estructura celular de polímeros nanocelulares basados en poli(metilmetacrilato) (PMMA). Se han sintetizado tres grados de TPU con diferentes fracciones de segmentos duros (HS) (60%, 70% y 80%) mediante el método de prepolímero. Se han producido polímeros nanocelulares basados en PMMA mediante espumado por disolución de gas utilizando TPU como agente nucleante en diferentes contenidos (0,5 % en peso, 2 % en peso y 5 % en peso). La caracterización de TPU muestra que a medida que aumenta el contenido de HS, la densidad, la dureza y el peso molecular del TPU son mayores. Los materiales celulares de PMMA/TPU muestran una distribución de tamaño de celda de gradiente desde el borde de la muestra hacia el núcleo nanocelular. En la región central, la adición de TPU tiene un fuerte efecto de nucleación en PMMA. La estructura central depende del contenido de HS y del contenido de TPU. A medida que aumenta el contenido de HS o TPU, aumenta la densidad de nucleación celular y se reduce el tamaño celular. Luego, el uso de TPUs con diferentes características permite controlar la estructura celular. Se han obtenido polímeros nanocelulares con una densidad relativa del núcleo entre 0,15 y 0,20 y tamaños de celda entre 220 y 640 nm.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55063> Hasan, Abshar; Bagnol, Romain; Owen, Robert; Latif, Arsalan; Rostam, Hassan M.; Elsharkawy, Sherif; Rose, Felicity R. A. J.; Rodríguez Cabello, José Carlos; Ghaemmaghami, Amir M.; Eglin, David; Mata, Álvaro. Título: Mineralizing coating on 3D printed scaffolds for the promotion of osseointegration. Publicación: Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2022, vol. 10, artículo 836386, Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, 2022, vol. 10, artículo 836386. DOI: <https://doi.org/10.3389/fbioe.2022.836386>

Resumen: El diseño y la fabricación de implantes que puedan funcionar mejor que los injertos óseos autólogos siguen siendo un desafío insatisfecho para la regeneración de tejido duro en aplicaciones craneomaxilofaciales. Aquí, informamos un enfoque integrado que combina la fabricación aditiva con la química supramolecular para desarrollar "scaffolds" impresos en 3D mineralizantes acelulares para la regeneración de tejidos duros. Nuestro enfoque se basa en un recubrimiento de elastina recombinante (ELR) diseñado para desencadenar y guiar el crecimiento de apatita ordenada en la superficie de los "scaffolds" de nailon impresos en 3D. Tres muestras de prueba que incluyen a) "scaffolds" de nailon sin recubrimiento (denominados "sin recubrimiento"), b) "scaffolds" recubiertos de ELR (denominados "solo ELR"), y c) "scaffolds" recubiertos de ELR y mineralizados in vitro (denominados "premineralizados").) fueron preparados y probados para el rendimiento in vitro e in vivo. Todas las muestras de prueba apoyaron la adhesión, el crecimiento y la diferenciación de células madre mesenquimales inmortalizadas humanas normales con una proliferación celular mejorada observada en las muestras "Premineralizadas". Utilizando un modelo in vivo de calvarial de conejo, los "scaffolds" 'premineralizados' también exhibieron un mayor crecimiento óseo en los poros y cavidades del andamio con una mayor integración del implante de tejido. Sin embargo, los "scaffolds" recubiertos ("solo ELR" y "premineralizados") no exhibieron una formación significativamente mayor de hueso nuevo en comparación con los "scaffolds" "sin recubrimiento".



En general, el recubrimiento mineralizante ofrece la oportunidad de mejorar la integración de los implantes óseos impresos en 3D. Sin embargo, existe la necesidad de descifrar y ajustar aún más su respuesta inmunológica para desarrollar superficies verdaderamente osteoinductivas/conductoras.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55090> González Obeso, Constancio; Rodríguez Cabello, José Carlos; Kaplan, David L. Título: Fast and reversible crosslinking of a silk elastin-like polymer. Publicación: Acta Biomaterialia, 2022, vol. 141, p. 14-23. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2021.12.031>

Resumen: Los polímeros similares a la elastina (ELP) y su subfamilia quimérica, los polímeros similares a la elastina de seda (SELP), exhiben un comportamiento de temperatura crítica de solvatación (LCST) más baja en el agua que ha sido ampliamente estudiado desde perspectivas teóricas, computacionales y experimentales. La inclusión de dominios de seda en la columna vertebral de los ELP afecta la dinámica molecular de los dominios similares a la elastina en respuesta al aumento de la temperatura por encima de su temperatura de transición y confiere capacidad de gelificación. Esta respuesta ha sido estudiada en términos de cambios estructurales iniciales y a largo plazo, sin embargo, los estados de transición intermedios han sido menos investigados. Además, se sabe poco sobre los efectos de la hidratación reversible en los dominios de elastina frente a los de seda en los entrecruzamientos físicos. Utilizamos técnicas espectroscópicas para analizar los estados iniciales, intermedios y a largo plazo de los enlaces cruzados en SELP. Una combinación de medidas termoanalíticas y reológicas demostró que la rápida rehidratación reversible de los motivos de elastina adyacentes a los dominios de seda relativamente pequeños era capaz de romper los enlaces cruzados físicos de la seda. Esta característica se puede aprovechar para adaptar la dinámica de estos tipos de enlaces cruzados en SELP.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55532> Izquierdo Millán, Segismundo Samuel; Izquierdo, Luis R. Título: Stability of strict equilibria in best experienced payoff dynamics: Simple formulas and applications. Publicación: Journal of Economic Theory, 2022, In Press, 105553. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jet.2022.105553>

Resumen: Consideramos una familia de dinámicas de juegos de población conocida como Best Experienced Payoff Dynamics. Bajo esta dinámica, cuando a los agentes se les da la oportunidad de revisar su estrategia, prueban algunas de sus posibles estrategias un número fijo de veces. Fundamentalmente, cada estrategia se prueba contra un nuevo conjunto de oponentes elegido al azar. El agente revisor luego elige la estrategia cuyo pago total fue más alto en la prueba, desempata de acuerdo con una regla de desempate determinada. Los equilibrios estrictos de Nash son puntos de reposo de estas dinámicas, pero no necesitan ser estables. Proporcionamos algunas fórmulas y algoritmos simples para determinar la estabilidad o inestabilidad de los equilibrios estrictos de Nash.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55533> Molinos Senante, Maria; Maziotis, Alexandros; Sala Garrido, Ramón; Mocholi Arce, Manuel. Título: Assessing the influence of environmental variables on the performance of water companies: An efficiency analysis tree approach. Publicación: Expert Systems with Applications, Volume 212, 2023, 118844. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.118844>

Resumen: La evaluación de la eficiencia es una herramienta valiosa para las industrias que están reguladas, como la provisión de agua potable. Por lo tanto, la investigación anterior sobre este tema es amplia. Sin embargo, los enfoques actuales y ampliamente utilizados, como los métodos paramétricos, no paramétricos y de frontera parcial, presentan varias limitaciones y escollos. Por lo tanto, aquí, el método del Árbol de Análisis de Eficiencia (EAT, the Efficiency Analysis Tree) se probó en una muestra de empresas de agua. Este método supera los problemas de sobreajuste porque emplea una combinación de clasificación, métodos de árbol de regresión y análisis no paramétricos. A efectos comparativos, también se estimó la eficiencia utilizando los métodos no paramétricos Data



Envelopment Analysis (DEA) y Free Disposal Hull (FDH). El enfoque se aplicó empíricamente utilizando una muestra de empresas de agua inglesas y galesas durante 1991–2020. La eficiencia promedio se estimó en 0,489, lo que demuestra que las empresas de agua podrían ahorrar un 51,1 % de sus costos si fueran eficientes. Excepto en el período 2011-2015, la eficiencia aumentó con el tiempo, lo que indica que las revisiones de precios realizadas por los reguladores de agua de Inglaterra y Gales contribuyeron a mejorar el desempeño de las empresas de agua. La aplicación de técnicas de análisis de regresión bootstrap mostró que la principal fuente de agua cruda, el porcentaje de propiedades medidas, la densidad de población y el porcentaje de fugas de agua representaban variables ambientales que influyeron significativamente en los puntajes de eficiencia de las empresas de agua. El enfoque presentado aquí podría ser útil para los reguladores del agua, ya que supera las limitaciones existentes de los enfoques tradicionales empleados para evaluar el desempeño de las empresas de agua, lo que facilita la toma de decisiones acertadas.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55548> Abia Llera, Luis María;Angulo Torga, Óscar;López Marcos, Juan Carlos;López Marcos, Miguel Ángel. Título: Numerical integration of an age-structured population model with infinite life span. Publicación: Applied Mathematics and Computation, 2022, vol. 434, 127401. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2022.127401>

Resumen: La elección de la edad como parámetro fisiológico para estructurar una población y describir su dinámica implica la elección del tiempo de vida. El análisis de un modelo poblacional estructurado por edades de vida ilimitada está motivado porque, no sólo continúan apareciendo nuevos modelos en este marco, sino que también es requerido por el estudio del comportamiento asintótico de su dinámica. La integración numérica del modelo correspondiente se suele realizar en dominios acotados mediante el truncamiento de la duración de la edad. Aquí, proponemos un nuevo método numérico que evita el truncamiento del dominio de edad ilimitado. Se analiza completamente y se establece segundo orden de convergencia. Reportamos algunos experimentos para exhibir numéricamente los resultados teóricos y el comportamiento del problema en la simulación de la evolución del modelo de moscas azules de Nicholson.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55566> Castillo Sánchez, Gema Anabel;Jojoa Acosta, Mario;García Zapirain, Begonya;Torre Díez, Isabel de la; Franco Martín, Manuel Ángel. Título: Application of machine learning techniques to help in the feature selection related to hospital readmissions of suicidal behavior. Publicación: International Journal of Mental Health and Addiction, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11469-022-00868-0>

Resumen: El suicidio fue la principal fuente de muerte por causas externas en España en 2020, con 3.941 casos. La importancia de identificar aquellos trastornos mentales que influyeron en los reingresos hospitalarios nos permitirá gestionar la atención sanitaria de la conducta suicida. La selección de características de cada hospital de esta región se realizó aplicando Machine learning (ML) y métodos estadísticos tradicionales. Se presentan los resultados de las características que mejor explican los reingresos de cada hospital tras la valoración por el especialista en psiquiatría. Para esta región se seleccionaron el trastorno de adaptación, el abuso de alcohol, el síndrome depresivo, el trastorno de personalidad y el trastorno distímico. Los métodos o características más influyentes asociados con el suicidio fueron la intoxicación por benzodiazepinas, la ideación suicida, la intoxicación por medicamentos, la intoxicación por antipsicóticos y el suicidio y/o las autolesiones saltando. La conducta suicida es una preocupación en nuestra sociedad, por lo que los resultados son relevantes para la gestión hospitalaria y la toma de decisiones para su prevención.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55569> Andújar Muñoz, Francisco José;Sánchez de la Rosa, Miguel;Escudero Sahuquillo, Jesús;Sánchez, José L. Título: Extending the VEF traces framework to model data center network workloads. Publicación: The Journal of Supercomputing, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11227-022-04692-0>



Resumen: Los centros de datos son una infraestructura fundamental en la era Big-Data, donde las aplicaciones y servicios demandan una gran cantidad de datos y tiempos de respuesta mínimos. La red de interconexión es un subsistema esencial en el centro de datos, ya que debe garantizar un alto ancho de banda de comunicación y baja latencia a las operaciones de comunicación de las aplicaciones, de lo contrario se convierte en el cuello de botella del sistema. La simulación se usa ampliamente para modelar la funcionalidad de la red y evaluar su desempeño bajo cargas de trabajo específicas. Además del modelado de la red, es fundamental caracterizar el patrón de comunicación de los nodos finales, lo que ayudará a identificar cuellos de botella y fallas en la arquitectura de la red. En trabajos anteriores, propusimos el marco de seguimiento de VEF: un conjunto de herramientas para capturar el tráfico de comunicación de las aplicaciones basadas en MPI y generar seguimientos de tráfico que se utilizan para alimentar las herramientas del simulador de red. En este documento, ampliamos el marco de seguimiento de VEF con nuevas cargas de trabajo de comunicación, como aplicaciones de capacitación de aprendizaje profundo y cargas de trabajo de uso intensivo de datos en línea.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55620> Jiménez García, Jorge;García, María;Gutiérrez Tobal, Gonzalo César;Kheirandish Gozal, Leila;Vaquerizo Villar, Fernando;Álvarez, Daniel;Campo Matias, Félix del;Gozal, David;Hornero Sánchez, Roberto. Título: A 2D convolutional neural network to detect sleep apnea in children using airflow and oximetry. Publicación: Computers in Biology and Medicine, 2022, vol. 147, 105784. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combiomed.2022.105784>

Resumen: El enfoque estándar de oro para diagnosticar la apnea obstructiva del sueño (obstructive sleep apnea (OSA) en niños es la polisomnografía en el laboratorio (PSG) durante la noche, que requiere mucha mano de obra para los médicos y es onerosa para los sistemas de atención médica y las familias. La simplificación de la PSG debería mejorar la disponibilidad y la comodidad, y reducir la complejidad y las listas de espera. Las señales de flujo de aire (AF) y oximetría (SpO2) resumen la mayor parte de la información necesaria para detectar apneas e hipopneas, pero el análisis automático de estas señales mediante algoritmos de aprendizaje profundo no se ha investigado exhaustivamente en el contexto pediátrico. El objetivo de este estudio fue evaluar una arquitectura de red neuronal convolucional (CNN) basada en estas dos señales para estimar la gravedad de la OSA pediátrica. [...] el análisis de las señales de FA y SpO2 mediante el aprendizaje profundo puede ser útil para implementar herramientas de diagnóstico asistidas por computadora confiables para la apnea obstructiva del sueño infantil.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55594> Menchón Lara, Rosa María;Simmross Wattenberg, Federico Jesús;Rodríguez Cayetano, Manuel;Casaseca de la Higuera, Juan Pablo;Martín Fernández, Miguel Angel;Alberola López, Carlos. Título: Efficient convolution-based pairwise elastic image registration on three multimodal similarity metrics. Publicación: Signal Processing, 2023, vol. 202, 108771. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sigpro.2022.108771>

Resumen: Este artículo propone una formulación convolucional completa para problemas de registro de imágenes por pares multimodales 2D basados en deformaciones de forma libre. Hemos reformulado en términos de convoluciones 1D discretas la evaluación de las transformaciones espaciales, el término de regularización y sus gradientes para tres métricas de registro multimodal diferentes, a saber, correlación cruzada normalizada, información mutua e información mutua normalizada. Se proporciona una condición suficiente sobre el gradiente métrico para una mayor extensión a otras métricas. El enfoque propuesto ha sido probado, como prueba de concepto, en imágenes de resonancia magnética cardíaca de perfusión de primer paso mejoradas con contraste. Los tiempos de ejecución se han comparado con los correspondientes tiempos de ejecución de la formulación del producto tensor clásico, tanto en CPU como en GPU. La aceleración que se logra al utilizar convoluciones en lugar de productos tensoriales depende del tamaño de la imagen y del número de puntos de control considerados, cuanto mayores sean estas magnitudes, mayor será la



reducción del tiempo de ejecución. Además, la aceleración será más significativa cuando las operaciones de gradiente constituyan el principal cuello de botella en el proceso de optimización.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55603> López Martín, Pedro; Aboy Cebrián, María; Santos Tejido, Iván; Marqués Cuesta, Luis Alberto; Ullán, Miguel; Pelaz Montes, María Lourdes. Título: Microscopic origin of the acceptor removal in neutron-irradiated Si detectors - An atomistic simulation study. Publicación: Acta Materialia, Volume 241, 2022, 118375 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118375>

Resumen: La mejora de la dureza a la radiación de los detectores de Si de tipo-p se ve obstaculizada por el proceso de eliminación del aceptor inducido por la radiación, que aún no se comprende del todo. Mediante la modelización atomística del daño por desplazamiento y de las interacciones con el dopante, analizamos la eliminación del aceptor bajo irradiación de neutrones, proporcionando una visión física de su origen microscópico. Nuestros resultados muestran que el rápido decaimiento de la concentración efectiva de dopante (Neff) a bajas fluencias de irradiación se debe a la desactivación del B causada por los autointersticiales de Si. El intrigante aumento del parámetro de eliminación del aceptor con la concentración inicial de dopante (Neff,0) se explica por el limitado número de autointersticiales de Si móviles que sobreviven a los procesos de aniquilación y agrupación. La dependencia sublineal del parámetro de eliminación con respecto a Neff,0 se asocia a la falta de homogeneidad del daño para Neff,0 bajo y a la formación de clusters de B-intersticiales con varios átomos de B para Neff,0 alto. La presencia de O y C modifica los mecanismos de desactivación del B debido al papel clave de los defectos de BiO y al atrapamiento de vacantes y autointersticiales de Si, pero para las concentraciones de impurezas analizadas en este trabajo ($[O] \gg [C]$) tiene poco efecto sobre la cantidad global de aceptores eliminados. A altas fluencias de irradiación, el aumento reportado de Neff se atribuye a la formación de aceptores profundos relacionados con los defectos. A partir del análisis de las concentraciones de defectos resultantes de la irradiación de neutrones y de la ocupación de pequeños clusters con niveles de aceptores reportados en la literatura, señalamos al cluster de tetra-vacancia como uno de los principales contribuyentes a Neff con carga espacial negativa.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55597> Molinos Senante, Maria; Maziotis, Alexandros; Sala Garrido, Ramón; Mocholi Arce, Manuel. Título: Understanding water energy nexus in drinking water provision: an eco-efficiency assessment of water companies. Publicación: Water Research, Volume 225, 2022, 119133 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.119133>

Resumen: Entender el nexo agua-energía en la prestación de servicios de agua potable es un reto que tiene una relevancia destacada en la actual situación de emergencia climática. La evaluación de la eficiencia ambiental y la ecoeficiencia de las empresas de agua son dos herramientas útiles para abordar este reto. En este estudio, estimamos las funciones de distancia hiperbólica e hiperbólica mejorada para calcular la reducción potencial de las emisiones de gases de efecto invernadero (GHG) y los costes energéticos en el suministro de agua potable. La aplicación empírica se centró en las compañías de agua inglesas y galesas durante el período 2011-2019. Las puntuaciones medias de eficiencia ambiental y ecoeficiencia fueron de 0,920 y 0,962, respectivamente, lo que indica que las empresas de agua obtuvieron buenos resultados, pero hay margen de mejora. Además, debido a las economías de escala, el coste de la reducción de las emisiones de GEI fue mayor para las empresas de agua y alcantarillado que para las empresas de agua solamente. Los resultados y conclusiones de este estudio permiten comprender mejor la relación entre el suministro de agua potable, los costes energéticos y las emisiones de GHG

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55602> Katsinas, Nicolaos; Gehlsen, Uta; García Posadas, Laura; Rodríguez Rojo, Soraya; Steven, Philipp; González García, María Jesús; Enríquez de Salamanca y Aladro, Amalia. Título: Olive pomace phenolic compounds: from an agro-industrial by-product to a promising ocular surface protection for dry eye disease. Publicación: Journal of Clinical Medicine, 2022, Vol. 11, N°. 16, 17 pp. DOI: <https://doi.org/10.3390/jcm11164703>



Resumen: La sequedad ocular (DED) es una enfermedad prevalente cuya principal etiología fisiopatológica es la inflamación inmunomediada. El orujo de oliva, principal subproducto de la industria del aceite de oliva, es rico en polifenoles de alto valor. Se determinaron sus actividades antiinflamatorias e inmunomoduladoras en células T CD4⁺ humanas (hTCD4⁺) y en un modelo animal de DED. Se evaluó la viabilidad de las células hTCD4⁺ aisladas de la sangre periférica y activadas con fitohemaglutinina-M tras el tratamiento durante 48 h con un extracto de orujo de oliva (OPT3, 0,10-0,40 mg/mL) y su principal compuesto, el hidroxitirosol (25-100 µM). En cuanto al modelo animal de DED, se administraron tópicamente 100 µM de hidroxitirosol, 0,20 mg/mL de OPT3 o un vehículo (tampón de borato) a ratones C57BL/6 expuestos al estrés desecante durante 14 días (administración de flujo de aire constante/escopolamina). Se evaluó el volumen de lágrimas, la tinción con fluoresceína de la córnea (CFS), el recuento de células T CD4⁺ y CD8⁺ en los ganglios linfáticos (citometría de flujo) y la expresión de los genes IP-10 y TNF-α (qRT-PCR) en la córnea, la conjuntiva y las glándulas lagrimales. La OPT3 (0,2-0,4 mg/mL) y el hidroxitirosol (100 µM) redujeron significativamente la proliferación de hTCD4⁺. En los ratones, ambos tratamientos redujeron la expresión del gen IP-10 de las glándulas lagrimales. El OPT3 también redujo el SFC y la expresión génica del IP-10 conjuntival y del TNF-α corneal. En los ganglios linfáticos, el hidroxitirosol redujo el recuento de CD3⁺, OPT3 y CD8⁺. Por lo tanto, se propuso una aplicación de alto valor como protección prometedora de la DED para el orujo de oliva.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55611> Katsinas, Nicolaos;Enrriquez de Salamanca y Aladro, Amalia;Bento da Silva, Andreia;Bronze, Maria Rosario;Rodríguez Rojo, Soraya. Título: Olive pomace phenolic compounds stability and safety evaluation: from raw material to future ophthalmic applications. Publicación: *Molecules*, 2021, Vol. 26, N°. 19, 23 pp. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules26196002>

Resumen: En la actualidad, el creciente interés por la valorización del orujo de oliva (OP) tiene como objetivo mejorar la sostenibilidad de la industria olivarera. Curiosamente, varios estudios proponen una aplicación de alto valor para los extractos de OP que contienen sus principales compuestos fenólicos, hidroxitirosol y oleuropeína, como terapia para las enfermedades de la superficie ocular. En este trabajo, se evaluó la estabilidad y accesibilidad del contenido total de fenoles y flavonoides de la OP, los principales compuestos representativos y la actividad antioxidante bajo diferentes condiciones de pretratamiento. Entre ellas, se encontró que la liofilización y la extracción con CO₂ supercrítico aumentaron significativamente la mayoría de las respuestas medidas en los extractos producidos. Dos extractos seleccionados (CONV y OPT3) se obtuvieron por diferentes técnicas (extracción convencional y líquida presurizada); sus soluciones acuosas se caracterizaron por HPLC-DAD-MS/MS. Además, se evaluó su seguridad y estabilidad de acuerdo con los requisitos de la EMA para su aprobación como productos oftálmicos: su efecto genotóxico en las células de la superficie ocular y su estabilidad de almacenamiento durante 6 meses en 4 condiciones diferentes de temperatura/humedad (CPMP/ICH/2736/99), junto con las soluciones puras de hidroxitirosol y oleuropeína. Se rastreó la concentración de hidroxitirosol y oleuropeína en las soluciones puras o de extracto, y se identificaron putativamente los posibles productos de degradación mediante HPLC-DAD-MS/MS. El hidroxitirosol y la oleuropeína tuvieron una estabilidad diferente como soluciones estándar o de extracto, y la oleuropeína también mostró un perfil de degradación diferente. Todos los compuestos/extractos eran seguros para el uso oftálmico en las concentraciones probadas.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55613> Katsinas, Nicolaos;Rodríguez Rojo, Soraya;Enrriquez de Salamanca y Aladro, Amalia. Título: Olive pomace phenolic compounds and extracts can inhibit inflammatory- and oxidative-related diseases of human ocular surface epithelium. Publicación: *Antioxidants*, 2021, Vol. 10, N°. 7, 25 pp. DOI: <https://doi.org/10.3390/antiox10071150>

Resumen: prevalencia y son un problema emergente en oftalmología. El orujo de oliva (OP) es el principal subproducto de la industria del aceite de oliva, y es potencialmente peligroso para el medio ambiente. Sin embargo, contiene compuestos fenólicos con importantes bioactividades, como la



oleuropeína (OL) y el hidroxitirosol (HT). Se examinaron los efectos antioxidantes y antiinflamatorios de cuatro extractos de OP (CONV, OPT(1-3)), OL y HT puros, y sus mezclas, en células epiteliales de córnea humana (HCE) y de conjuntiva (IM-ConjEpi). Los CONV se extrajeron de forma convencional, mientras que los OPT(1-3) se produjeron mediante extracción de líquidos a presión. Gracias a su mayor actividad, se seleccionaron CONV y OPT3 (enriquecidos con HT) para realizar estudios dependientes de la dosis. Se estimularon las células con factor de necrosis tumoral- α o radiación ultravioleta-B, midiendo la interleucina (IL)-1 β , IL-6, IL-8 e IL-17A, así como la secreción de proteína [IP]-10 inducida por el interferón γ o la producción intracelular de ROS, respectivamente. En HCE, tanto los extractos como la HT inhibieron la secreción de la mayoría de las ILs medidas, demostrando un fuerte efecto antiinflamatorio; mientras que en IM-ConjEpi, todas las muestras disminuyeron la secreción de IP-10. Además, el TH, el OL y ambos extractos mostraron una fuerte actividad antioxidante dependiente de la dosis en ambas líneas celulares. En comparación con el CONV, el OPT3 fue activo a concentraciones más bajas, lo que demuestra que las técnicas de extracción intensificada son selectivas hacia los biomarcadores objetivo. Por lo tanto, se propuso una aplicación de alto valor como potencial terapia de la superficie ocular para la valorización del OP.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55629> Katsinas, Nicolaos; Bento da Silva, Andreia; Enríquez de Salamanca y Aladro, Amalia; Fernández, Naiara; Bronze, Maria Rosario; Rodríguez Rojo, Soraya. Título: Pressurized liquid extraction optimization from supercritical defatted olive pomace: a green and selective phenolic extraction process. Publicación: ACS Sustainable Chemistry and Engineering, 2021, Vol. 9, N°. 16, págs. 5590–5602. DOI: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.0c09426>.

Resumen: El orujo de oliva (OP) es el principal subproducto de la industria del aceite de oliva producido en grandes cantidades. Su valorización como fuente de compuestos bioactivos fenólicos es primordial para el crecimiento sostenible de las industrias relacionadas. Este trabajo propone un proceso intensificado para maximizar la recuperación de compuestos fenólicos en extractos secos utilizando mezclas hidroalcohólicas. Se realizó un pretratamiento de desengrasado con dióxido de carbono supercrítico. A continuación, se optimizó la extracción líquida a presión mediante un diseño compuesto central circunscrito. Los factores fueron la temperatura (65,0-185,0 °C), el porcentaje de etanol (8,0-92,0%) y la relación sólido/líquido (0,2-0,8 gOP/mL SOLVENT). Además del contenido fenólico total (TPC) y el contenido total de flavonoides (TFC), se evaluaron los principales compuestos fenólicos del OP [hidroxitirosol (HT), tirosol (TY) y oleuropeína (OL)]. Además, el dialdehído decarboximetil OL aglicona (3,4-DHPEA-DEDA) fue identificado por HPLC-DAD-MS/MS como el polifenol más abundante y se estudió por primera vez para el OP. Se encontraron diferentes condiciones para optimizar cada compuesto clave. En un 67% menos de tiempo de extracción y un 38% menos de consumo de disolvente en comparación con la extracción convencional, se observó un aumento del 475% para OL, 428% para HT, 194% para TY, 373% para 3,4-DHPEA-DEDA, 89% para TPC y 158% para TFC. La actividad antioxidante mediante el ensayo de capacidad de absorción de radicales de oxígeno (ORAC) aumentó un 89% (condiciones óptimas) y se correlacionó con TPC, 3,4-DHPEA-DEDA y TFC. Así, se estableció un proceso de extracción eficiente, selectivo, escalable y ecológico.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55631> Krstić, Luna; González García, María Jesús; Diebold Luque, María Yolanda. Título: Ocular delivery of polyphenols: meeting the unmet needs. Publicación: Molecules, 2021, Vol. 26, N°. 2, 370, 26 pp. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules26020370>

Resumen: La naturaleza se ha convertido en una de las principales fuentes de exploración para los investigadores que buscan nuevas moléculas potenciales para ser utilizadas en la terapia. Los polifenoles están surgiendo como una clase de compuestos que han atraído la atención de los científicos farmacéuticos y biomédicos. Gracias a sus peculiaridades estructurales, los compuestos polifenólicos se caracterizan por ser buenos eliminadores de especies de radicales libres. Esto, entre otros efectos medicinales, les permite interferir en diferentes vías moleculares que intervienen en el proceso inflamatorio. Por desgracia, muchos compuestos de esta clase poseen una baja



solubilidad en disolventes acuosos y una baja estabilidad. Las patologías oculares están extendidas por todo el mundo. Se estima que cada individuo experimenta al menos una vez en su vida algún tipo de trastorno ocular. El estrés oxidativo o los procesos inflamatorios son los mecanismos etiológicos básicos de muchas patologías oculares. Diversos compuestos polifenólicos han demostrado ser eficaces para suprimir algunos de los indicadores de estas patologías en modelos *in vitro* e *in vivo*. La aplicación posterior de los compuestos polifenólicos en la terapia ocular carece de un enfoque de formulación adecuado. Por lo tanto, se debe poner más énfasis en las estrategias de administración avanzadas que superen los límites del lugar de administración, así como los relacionados con los polifenoles en uso. Esta revisión analiza las diferentes estrategias de administración de fármacos que se emplean para la formulación de compuestos polifenólicos cuando se utilizan para tratar patologías oculares relacionadas con el estrés oxidativo y la inflamación.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55636> Gómez Balcácer, Lucía; Somarriba Arechavala, María Noelia; Gómez Costilla, Patricia. Título: The Importance of different forms of social capital for happiness in Europe: A Multilevel Structural Equation Model (GSEM). Publicación: Applied Research in Quality of Life, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11482-022-10097-1>

Resumen: Este trabajo investiga los efectos de las diferentes dimensiones del capital social sobre la felicidad de los europeos. A diferencia de otros estudios, se aplica un análisis de componentes principales categóricos (CATPCA) para obtener las dimensiones del capital social. Los datos utilizados provienen de la novena ola de la Encuesta Social Europea (ESS), año 2018. La felicidad se modela mediante un modelo de ecuaciones estructurales multinivel (GSEM) por países para estudiar el papel del capital social en la felicidad de los europeos, cuando se controla el efecto de factores como el género, el desempleo, la edad, los bajos ingresos, la educación superior y la convivencia en pareja. El capital social se mide como un concepto multidimensional compuesto por la confianza institucional, la confianza social, los vínculos sociales y la asociación voluntaria, el civismo y el sentido de pertenencia, y la religiosidad. Entre los resultados, encontramos que las cinco dimensiones que construyen el capital social tienen un impacto positivo en la felicidad. Además de los efectos positivos del capital social, las variables de control tienen el impacto esperado. En un contexto marcado por el creciente individualismo y el aislamiento social, los resultados de este trabajo pueden orientar a los responsables políticos en el uso de las dimensiones del capital social para aumentar el bienestar subjetivo de la población.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55664> Lara, Luis Pedro; Gadella Urquiza, Manuel. Título: A modified Lyapunov method and its applications to ODE. Publicación: Mathematical Methods in the Applied Sciences, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1002/mma.8598>

Resumen: Aquí proponemos un método para obtener soluciones analíticas locales aproximadas de ecuaciones diferenciales ordinarias con coeficientes variables, o incluso de algunas ecuaciones no lineales, inspirado en el método de Lyapunov, donde en lugar de aproximaciones polinómicas, utilizamos series de Fourier truncadas con coeficientes variables como soluciones aproximadas. En el caso de las ecuaciones que admiten soluciones periódicas, un promedio sobre los coeficientes da soluciones globales. Demostramos que, bajo cierta condición restrictiva, el método es equivalente al método de Picard-Lindelöf. Tras algunos experimentos numéricos que muestran la eficiencia del método, lo aplicamos a ecuaciones de interés en física, en las que mostramos que nuestro método posee una excelente precisión incluso con bajas iteraciones.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55695> Andújar Muñoz, Francisco José; Coll, Salvador; Alonso, Marina; Martínez Rubio, Juan Miguel; López, Pedro; Sánchez, José Luis; Alfaro Cortés, Francisco José. Título: Energy efficient HPC network topologies with on/off links. Publicación: Future Generation Computer Systems, 2022, In Press DOI: <https://doi.org/10.1016/j.future.2022.09.012>



Resumen: La eficiencia energética es una necesidad en los sistemas HPC actuales. Para lograr este objetivo, se debe realizar un diseño holístico basado en el uso de componentes con conciencia energética. Uno de los componentes clave de un sistema HPC es la interconexión de alta velocidad. En este artículo, comparamos y evaluamos varias opciones de diseño para la red de interconexión de un sistema HPC, incluyendo torus, fat-trees y dragonflies. En las redes de interconexión también se utilizan los modos de bajo consumo más avanzados. El documento no sólo considera la eficiencia energética a nivel de la red de interconexión, sino también del sistema en su conjunto. El análisis se realiza utilizando un modelo de potencia simple pero realista del sistema. El modelo se ha ajustado utilizando valores reales de consumo de energía medidos en un sistema real. Utilizando este modelo, se han utilizado cargas de trabajo realistas basadas en la traza de varios trabajos, obteniendo el tiempo de ejecución y la energía consumida. Los resultados se presentan para facilitar la elección de un sistema, dependiendo de qué parámetro, el rendimiento o el consumo de energía, recibe más importancia.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55698> Bermúdez Arias, Celina; Motiyenko, Roman; Cabezas, Carlos; Ilyushin, Vadim V.; Margulès, Laurent D.; Endo, Yasuki; Guillemin, Jean-Claude. Título: Internal rotation analysis of the microwave and millimeter wave spectra of fluoral (CF₃CHO). Publicación: Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2022, vol. 274, 121071. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121071>

Resumen: Se ha medido y analizado el espectro rotacional (4-40 GHz y 50-330 GHz) del trifluoroacetaldehído, también conocido como fluoral (CF₃CHO), que es uno de los productos de degradación de los contaminantes fluorados emitidos a la atmósfera. La complejidad del análisis espectroscópico de esta molécula surge del fuerte acoplamiento entre el movimiento de rotación interno del grupo CF₃ y la rotación global de la molécula. El valor obtenido para su constante de acoplamiento ($\rho = 0,91723481(49)$) es comparable al valor correspondiente del metanol (CH₃OH, $\rho = 0,81$), conocido por su complejo espectro. Se incluyeron un total de 12.322 transiciones de los estados torsional básico, primero y segundo excitado ($\Delta E_{1ut} = 62,0183(13)\text{cm}^{-1}$; $\Delta E_{2ut} = 120,3315(13)\text{cm}^{-1}$) con $J \leq 50$ en el análisis que se realizó empleando el método del eje rho (RAM), y el código RAM36. Se ha logrado un ajuste dentro del error experimental (la desviación media cuadrática es igual a 35 kHz) para este conjunto de datos utilizando 47 parámetros del Hamiltoniano de torsión-rotación de RAM. En el curso del análisis, se hizo evidente que para un valor ρ tan alto, como el que se determina para el fluoral, se requiere un conjunto de bases de torsión más grande de lo habitual en el primer paso de diagonalización del procedimiento de diagonalización de dos pasos para lograr un ajuste dentro del error experimental.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55700> Aguado Vesperinas, Raúl; Sanz Novo, Miguel; Mata, Santiago; León Ona, Iker; Alonso Hernández, José Luis. Título: Unveiling the shape of N-Acetylgalactosamine: A cancer-associated sugar derivative. Publicación: The Journal of Physical Chemistry A, 2022, In Press DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c04595>

Resumen: En el presente trabajo, informamos del primer estudio rotacional de la N-acetilgalactosamina, un derivado del azúcar asociado al cáncer, mediante espectroscopia rotacional de alta resolución. Se han caracterizado de forma concluyente dos conformadores diferentes mediante espectroscopia de microondas por transformada de Fourier de banda ancha acoplada a un sistema de vaporización por ablación láser. Además, realizamos un análisis exhaustivo de las interacciones intramoleculares que gobiernan estas estructuras, lo que nos permitió tanto caracterizar la existencia de redes de enlaces de hidrógeno intramoleculares que dirigen el panorama de conformaciones intrínsecas de la N-acetilgalactosamina como racionalizar aún más el papel biológico de este derivado del aminosugar como parte del antígeno Tn.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55731> Sánchez Calderón, Silvia; Fernández Fuertes, Raquel. Título: The acquisition of English active and passive monotransitive constructions by English-Spanish



simultaneous bilingual children. Publicación: *International Journal of Bilingualism*, 26(4), 2022, 502–526. DOI: <https://doi.org/10.1177/1367006921105674>

Resumen: Se examina la adquisición de monotransitivos activos y pasivos en inglés por parte de niños bilingües inglés-español. Estos datos se comparan con los monolingües ingleses de estudios anteriores. Exploramos si los bilingües y los monolingües muestran patrones de inicio similares dadas las propiedades gramaticales compartidas de los activos en las dos lenguas de los bilingües, y si difieren en el inicio de las pasivas dadas las propiedades gramaticales en inglés (movimiento canónico de la frase determinante [DP]) y en español (movimiento canónico de la DP y se-pasivas). También investigamos el papel que desempeña el input del adulto en el output del niño. [...] Este es el primer estudio que aborda datos de adquisición bilingüe y compara la producción infantil con el input adulto. Importancia/implicaciones: Contribuye a dilucidar cómo interactúan las dos lenguas de los bilingües en la adquisición e incidencia de los activos y pasivos del inglés.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55728> Bermejo Berros, Jesús. Título: Influencia educativa del conocimiento de la presencia enmascarada de alcohol en Instagram en el cambio de conducta. Publicación: *Profesional de la información*, 2022, v. 31, n. 4, e310404. DOI: <https://doi.org/10.3145/epi.2022.jul.04>

Resumen: La estrategia push de las campañas anti-alcohol dirigidas a jóvenes, tanto en medios de comunicación tradicionales como en las redes sociales, ha mostrado una capacidad limitada para contribuir a desarrollar conductas saludables. Aun cuando los jóvenes conocen los efectos perniciosos del alcohol, desarrollan actitudes de reactancia, reacciones de autoafirmación, respuestas defensivas y neutralización de los intentos persuasivos de los mensajes institucionales. Es necesario buscar nuevas estrategias educativas de comunicación que sean eficaces para modificar las conductas favorables al consumo de alcohol entre los jóvenes. Esta investigación busca implementar un método educativo que favorezca ese cambio hacia conductas saludables. Partiendo de la campaña en Instagram “Like my addiction”, 124 jóvenes (M=23,6, DM=2,8) participantes durante tres semanas en tres fases en las que se va a testar si la presencia de alcohol en Instagram tiene impacto en sus creencias, actitudes y conductas, así como la eficacia del método educativo testado. La mitad de los sujetos sigue un proceso de toma de conocimiento de la presencia de alcohol en esta campaña de Instagram y luego participa en un proceso interactivo de discusión según el método formativo dialógico-crítico. Los resultados muestran que este método educativo es eficaz. Los sujetos del grupo control que no siguen el método no modifican su conducta en Instagram. En cambio, el grupo experimental toma conciencia de la presencia enmascarada del alcohol en Instagram. Estos sujetos tienen una autopersuasión que hace que modifiquen favorablemente su actividad entre la fase de pre-test y la fase post-test pues cambian sus actitudes y conductas hacia el alcohol. Estos resultados tienen el interés de mostrar que el método formativo dialógico-crítico puede ser aplicado favorablemente para implementar campañas y acciones educativas de lucha contra la adicción al alcohol entre los jóvenes.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55659> Fernández Crespo, Teresa Pilar;Schulting, Rick J.;Czermak, Andrea;Ordoño, Javier;Lorenzo, José Ignacio;Rodanés, José María. Título: The “post-weanling’s conundrum”: exploring the impact of infant and child feeding practices on early mortality in the Bronze Age burial cave of Moro de Alins, north-eastern Iberia, through stable isotope analysis. Publicación: *Archaeological and Anthropological Sciences*, 2022, vol. 14, n.10 DOI: <https://doi.org/10.1007/s12520-022-01658-4>

Resumen: La relación entre las prácticas de alimentación de lactantes y niños y la mortalidad temprana es difícil de abordar en las sociedades del pasado. Aquí, mediciones de isótopos estables de carbono ($\delta^{13}C$) y nitrógeno ($\delta^{15}N$) de muestras de hueso a granel y de dentina secuencial de segundos molares deciduos y/o primeros molares permanentes de cuatro niños pequeños, un niño mayor, un adolescente tardío y dos adultos jóvenes (n = 8) de la cueva de Moro de Alins, en el noreste de Iberia, se utilizan para explorar el impacto potencial de la nutrición en la vida temprana



sobre la mortalidad en la Edad del Bronce. Los resultados de los isótopos son compatibles con la lactancia materna exclusiva generalmente corta y los períodos de destete estándar en comparación con otras poblaciones premodernas. Sin embargo, existen diferencias en los valores medios de $\delta^{13}\text{C}$ de la lactancia exclusiva y en los cambios tróficos de $\Delta^{13}\text{C}$ entre la lactancia exclusiva y los valores de isótopos inmediatamente posteriores al destete para las personas que sobrevivieron hasta la adolescencia y la edad adulta y las que no. Mientras que las primeras parecen ser consistentes con las distancias tróficas publicadas para las parejas modernas de madre e hijo, las segundas están por encima de la mayoría de ellas. Esto puede sugerir que las personas que consumieron alimentos similares a los de sus madres o sufrieron menos estrés fisiológico durante o después del destete tenían mayores posibilidades de supervivencia durante la primera infancia y más allá. El posdestete parece haber sido un período de la vida particularmente estresante, en el que se detectan varios casos de patrones de covarianza isotópica opuesta compatibles con cambios catabólicos, que a menudo preceden a la muerte entre los no sobrevivientes. Este resultado muestra el papel clave del estado nutricional y/o fisiológico en la morbilidad y mortalidad en la vida temprana entre los niños destetados parcial y especialmente en contextos previos a los antibióticos, antes de la vacunación y de saneamiento deficiente, y propone que la supervivencia de los adultos está arraigada en la vida temprana. experiencias, de acuerdo con los orígenes evolutivos de la salud y la enfermedad.

<http://uvadoc.uva.es/handle/10324/55696> París I Bandrés, Guillem Lluís;Piecjak, Tomasz;Aja Fernández, Santiago;Tristán Vega, Antonio. Título: Efficient estimation of propagator anisotropy and non-Gaussianity in multishell diffusion MRI with micro-structure adaptive convolution kernels and dual Fourier integral transforms. Publicación: Magnetic Resonance in Medicine, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1002/mrm.29435>

Resumen: Buscamos reformular las denominadas Anisotropía del Propagador (PA) y No Gaussianidad (NG), originalmente concebidas para el MRI de Propagador de Difusión Aparente Media (MAP-MRI), a los núcleos de convolución adaptativa de Micro-Estructura e Integral de Fourier dual Transformadas (MiSFIT). Estas medidas describen características normalizadas relevantes del propagador promedio de conjuntos (EAP). Teoría y métodos: primero, los índices, que se definen como la diferencia entre el EAP y uno isotrópico (PA) o gaussiano (NG), se reformulan analíticamente dentro del MiSFIT. estructura. Luego se dibuja una comparación entre los mapas resultantes por medio de un análisis visual, una evaluación cuantitativa a través de simulaciones numéricas, un estudio de prueba y repetición en el conjunto de datos MICRA (6 sujetos escaneados cinco veces) y, finalmente, una evaluación de tiempo computacional. Resultados: Los hallazgos ilustran la similitud visual entre los índices calculados con cualquiera de las dos técnicas. Sin embargo, la evaluación frente a datos reales sintéticos demuestra la precisión mejorada de MiSFIT. Además, el estudio test-retest revela un mayor grado de confiabilidad de MiSFIT en la mayoría de las regiones de sustancia blanca. Finalmente, la evaluación del tiempo computacional muestra la reducción del tiempo de MiSFIT hasta dos órdenes de magnitud. Conclusiones: A pesar de ser un desarrollo directo en la representación de MAP-MRI, tación, el PA y el NG se pueden calcular de manera confiable y eficiente dentro del marco de MiSFIT. Esto, junto con los hallazgos previos en el artículo original de MiSFIT, podría significar la diferencia que definitivamente califica la RM de difusión para ser incorporada en entornos clínicos regulares.