



**ADDENDA AL CONVENIO DE COLABORACIÓN SUSCRITO ENTRE EL
GOBIERNO DE ARAGÓN Y LA UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA PARA EL
DESARROLLO DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN A TRAVÉS DE
INSTITUTOS DE INVESTIGACIÓN**

En la Ciudad de Zaragoza, a 5 de Mayo de 2005.

REUNIDOS

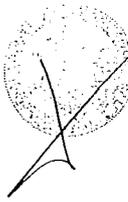
De una parte, el Excmo. Sr. Consejero de Ciencia, Tecnología y Universidad, D. Alberto Larraz Vileta, en virtud del Decreto de 24 de mayo de 2004 (BOA 25 de mayo), por el que se dispone su nombramiento, y actuando en nombre y representación del Gobierno de Aragón, según Acuerdo del Gobierno de Aragón de fecha 22 de junio de 2004 y del día 26 de abril de 2005.

De otra parte, el Excmo. Sr. D. Felipe Pétriz Calvo, en nombre y representación de la Universidad de Zaragoza, en ejercicio de su cargo de Rector, para el que fue nombrado por Decreto 71/2004 de 13 de abril del Gobierno de Aragón (BOA 16 de abril de 2004). Se encuentra facultado para este acto en virtud de la representación legal señalada en el artículo 20 de la Ley Orgánica 6/2001 de 21 de diciembre de Universidades.

EXPONEN



El Gobierno de Aragón en su reunión de fecha 22 de junio de 2004 acordó autorizar la firma del Convenio de Colaboración entre la Universidad de Zaragoza y el Gobierno de Aragón para el desarrollo de proyectos de investigación a través de Institutos Universitarios de Investigación, así como autorizar al Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad un gasto por importe de 800.000 euros con cargo a la aplicación presupuestaria 17.03.5423.440.00 A del Presupuesto de la Comunidad Autónoma de Aragón para el ejercicio 2004. Este convenio fue firmado con fecha 29 de julio de 2004. Posteriormente, fue aprobada con fecha 2 de noviembre de 2004 la modificación de la cláusula Quinta del mismo, firmándose con fecha 17 de noviembre la correspondiente Addenda.



La cláusula Novena del Convenio, determina que éste estará vigente desde su firma, hasta el 31 de diciembre de 2004, pudiendo ser prorrogado por anualidades con un máximo de dos años, previa comunicación y aceptación de las partes, y suscripción de anexo correspondiente. En este sentido tanto el Departamento de Ciencia,

Tecnología y Universidad como la Universidad de Zaragoza, han manifestado su voluntad de prorrogar el Convenio para el año 2005.

Sin embargo, tanto las cantidades que ahora se determinan para el año 2005, en concepto de compromisos del Gobierno de Aragón, incluidos en la cláusula Cuarta del Convenio, como la distribución de la financiación, determinada en la cláusula Tercera del mismo, son distintas a las estipuladas en el Convenio para el año 2004, por lo que debe procederse a su modificación.

Asimismo el anexo descriptivo de las líneas de investigación a desarrollar por cada uno de los institutos durante el año 2005, es diferente del contemplado en el texto del Convenio para el año 2004.

De conformidad con todo lo anterior las partes

ACUERDAN

PRIMERO. Aprobar la descripción de las líneas de investigación a desarrollar por cada uno de los Institutos de investigación durante el año 2005, que se resumen en el anexo (año 2005) de esta Addenda.

SEGUNDO. Modificar para el año 2005 la cláusula Tercera y el punto 1 de la cláusula Cuarta, que quedan redactadas como sigue:

Tercera. Presupuesto del Proyecto.

Los proyectos podrán desarrollarse en dos niveles o fases:

En la primera de ellas se consignará la misma financiación para cada uno de los cuatro Institutos (140.000 euros, 560.000 euros en total), con el objeto de que puedan desarrollar las líneas y proyectos de investigación antedichos. En una segunda fase, se podrá adjudicar un máximo de 290.000 euros adicionales, a propuesta de la Comisión de Seguimiento, en aquellos proyectos de determinados Institutos, cuya línea de investigación haya resultado más fructífera, teniéndose en cuenta la obtención de resultados de excelencia científica, la realización con éxito de transferencia de resultados de investigación a empresas aragonesas, y la captación de fondos externos para desarrollar la actividad investigadora del Instituto.

<i>Presupuesto a imputar a la primera fase</i>	<i>560.000,00 euros</i>
<i>Presupuesto a imputar a la segunda fase</i>	<i>290.000,00 euros</i>
<i>Presupuesto Total</i>	<i>850.000,00 euros</i>

Cuarta. Compromisos de las partes

1. Compromisos del Gobierno de Aragón.

El Gobierno de Aragón aportará como límite máximo, la cantidad de 850.000,00€ (OCHOCIENTOS CINCUENTA MIL EUROS) que se distribuirá por fases de la siguiente forma:

Fase primera: 560.000,00€. (QUINIENTOS SESENTA MIL EUROS.)

Fase segunda: 290.000,00€. (DOSCIENTOS NOVENTA MIL EUROS.)

La aportación económica comprometida, será librada con cargo a la aplicación presupuestaria 17.03.5423.440.00 A del Presupuesto de gastos del Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad de la Diputación General de Aragón para el año 2004.

Las aportaciones del Gobierno de Aragón previstas en este Convenio, se destinarán indistintamente a cualquiera de los gastos del convenio. Cualquier otro gasto que supere las cuantías máximas mencionadas en esta cláusula no será imputable a la Administración de la Comunidad Autónoma."

TERCERO. Mantener el resto del Convenio en los mismos términos y entendiendo que las menciones al año 2004, están referidas al año 2005. En especial en el apartado 1 de la cláusula Quinta, en la redacción dada por la Addenda al convenio, firmada por las partes con fecha 17 de noviembre de 2004, en lo que se refiere a la justificación, por lo que son admisibles los gastos derivados del convenio durante todo el año 2005.

En prueba de conformidad, firman la presente addenda al citado Convenio de Colaboración, por triplicado ejemplar, en el lugar y fecha indicados en el encabezamiento.

Por el Gobierno de Aragón



Alberto Larraz Vileta
Consejero de Ciencia,
Tecnología, y Universidad

Por La Universidad de
Zaragoza



Felipe Pétriz Calvo
Rector

ANEXO

(Año 2005)

BREVE DESCRIPCIÓN DE LAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN, CORRESPONDIENTE AL AÑO 2005, A DESARROLLAR PARA CADA UNO DE LOS INSTITUTOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERIA DE ARAGON (I3A)

Líneas de trabajo a financiar dentro del Convenio:

- Simuladores de conducción y teleoperación de vehículos
- Planificación Preoperatoria

1. Simuladores de conducción y teleoperación de vehículos

Los simuladores de conducción se dividen en dos grandes categorías:

- Simuladores estáticos:* Este tipo de simuladores consta de un puesto de conducción, pantallas y altavoces. Transmite al conductor únicamente imágenes y sonidos.
- Simuladores dinámicos:* los simuladores dinámicos están formados por una carrocería o cabina de vehículo montada sobre una plataforma móvil. La plataforma se mueve transmitiendo al conductor las mismas aceleraciones que tendría conduciendo un vehículo real. Estas sensaciones se complementan con la transmisión de imágenes y sonido. De esta forma, la inmersión del conductor en el entorno virtual de conducción (carretera, ciudad, etc.) es total.

Debido a su coste y complejidad técnica, solamente los fabricantes de automóviles y algunos centros de investigación disponen de simuladores dinámicos.

El Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón-I3A cuenta con una amplia experiencia en el desarrollo de estos sistemas, siendo en este campo una de las instituciones líder en Europa. En los últimos años se han desarrollado numerosos proyectos sobre el tema, obteniendo resultados que han sido patentados.

Utilizando la misma tecnología de los simuladores es posible realizar la teleoperación de vehículos desde puestos de conducción situados sobre plataformas móviles. Así, el operador-conductor puede sentir el movimiento del vehículo como si estuviera en él. De esta forma se realiza la sensación de telepresencia o teleexistencia.

En el I3A se han desarrollado algunos proyectos de realización de viajes virtuales en vehículos de tierra y submarinos.

Como sublíneas de investigación derivadas podríamos citar las siguientes:

1. Formación de conductores.

La seguridad en el transporte por carretera es uno de los grandes problemas de la sociedad actual, junto con la necesidad de reducir las emisiones de gases contaminantes del creciente parque móvil.

La Directiva Europea 2003/59/CE plantea la necesidad de la cualificación inicial y la formación continuada de los conductores de vehículos destinados al transporte de mercancías o de viajeros por carretera.

En algunos países ya se están desarrollando programas de cualificación y entrenamiento continuado de conductores en simulador, con cifras de reducción del consumo de combustible de hasta un 40%

y una clara mejora en los hábitos de seguridad en la conducción.

Hasta ahora, los simuladores de conducción sólo han sido utilizados en la formación de conductores noveles y son pocos los conductores profesionales de camión que han recibido un entrenamiento específico después de obtener la licencia. La Comisión Europea ha adoptado la directiva 2003/59/CE a través de la cual ha destacado la importancia de la formación continuada de los conductores profesionales. El propósito fundamental de dicha directiva sería mejorar la calidad de los servicios de transporte, incrementar la seguridad vial y facilitar el libre movimiento de trabajadores. La propuesta de directiva sugiere un entrenamiento básico obligatorio para todos los conductores profesionales. Este entrenamiento sería de 420 horas para los menores de edad que quieran dedicarse a esta profesión y de 210 horas para todos los demás. Los profesionales en activo tendrían que someterse también a un proceso de formación continua basado en el seguimiento obligatorio, cada cinco años, de cursos de adiestramiento de 35 horas. La directiva no especifica el hecho de realizar un porcentaje de estas horas en simulador, pero deja abierta esta posibilidad, como de hecho se está realizando ya en algunos países de la Comunidad Europea.

2. Viajes virtuales y teleturismo.

Uniendo la tecnología de simulación y la de teleoperación se pueden implementar sistemas de teleoperación de vehículos en entornos de interés turístico-educativo (ruinas submarinas, interior de cuevas, naufragios, arrecifes, etc) que posibiliten la televisita en tiempo real a lugares que de otro modo sería imposible visitar.

Las imágenes captadas por el vehículo teleoperado se pueden mejorar y complementar añadiendo informaciones relevantes sobre los objetos o lugares visitados (*augmented reality*), de esta forma se pueden constituir sistemas de *edutainment*.

3. Teleexistencia y seres vivos.

La combinación de plataformas de simulación y sensores de movimiento implantados sobre personas, animales o robots en movimiento permite experimentar como se mueven otros seres vivos, robots, humanoides, etc.

4. Exploración de nanomundos.

Las tecnologías de simulación y teleoperación permiten la realización de viajes virtuales a lugares que, aunque reales, por su tamaño no permiten la presencia humana. Este es el caso de los nanomundos.

Con un sistema de estas características es posible visita y experimentación de las leyes físicas que imperan en el mundo a escala microscópica.

2. PLANIFICACIÓN PREOPERATORIA

La presente línea tiene como objeto el desarrollo de herramientas de Cirugía Virtual capaces de predecir los efectos a corto y medio plazo de la implantación de un determinado tipo de prótesis, implante o dispositivo médico en un enfermo específico, es decir, con una geometría de órganos concreta, una edad determinada, una fractura o enfermedad dadas y un planteamiento quirúrgico asimismo personalizado.

En los últimos años, la extensión y generalización de las técnicas computacionales para la representación geométrica de piezas de gran complejidad (técnicas CAD), unidas al avance realmente espectacular de los métodos de análisis (técnicas CAE), han permitido al diseñador alcanzar un grado tal de fiabilidad, flexibilidad y precisión en la simulación del comportamiento de sistemas complejos que han conducido a la reducción en un orden de magnitud del número de prototipos a realizar en la mayor parte de sectores industriales.

A pesar de ello, distintas particularidades han impedido que estas técnicas de modelado y diseño se hayan extendido de forma intensiva a algunos nichos industriales de gran importancia. Éste es el caso de la Ingeniería Biomédica, aún reconociendo los avances indudables que se han producido en los últimos años. Las causas son variadas pero la primera y más importante de ellas es, sin duda, la falta de formación en herramientas CAD-CAE de la mayoría de los investigadores en este campo, esencialmente el personal médico.

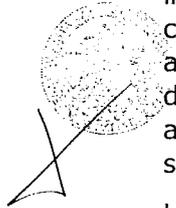
Un segundo aspecto lo constituye la dificultad intrínseca de las geometrías a considerar que hace que, en muchos casos, no sea suficiente con las herramientas de definición de superficies o sólidos disponibles, más adaptadas a geometrías clásicas en el diseño ingenieril que a las formas "caprichosas" con que, en muchas ocasiones, nos sorprende la naturaleza. Ello se complementa con el hecho de que la información disponible suele ser radicalmente distinta de la habitualmente encontrada en gabinetes ingenieriles ya que, en lugar de venir establecida mediante planos o prototipos, suele provenir de vistas o cortes del órgano en cuestión obtenidos mediante distintas técnicas de imagen (radiografías, ecografías, TACs, RMNs, etc.). Ello implica la necesidad de adaptar las herramientas de representación geométrica a este tipo de situaciones, lo que no es en absoluto simple ya que, en muchas ocasiones, las imágenes de partida están distorsionadas o son difusas. Además, el conjunto de ellas suele ser insuficiente para la definición del objeto completo, lo que conlleva la necesidad de sofisticados mecanismos de interpolación, extrapolación, filtrado, segmentación y, en general, el planteamiento de un tratamiento complejo hasta reconstruir el sólido en estudio.

Otra de las razones que han impedido la generalización de las técnicas computacionales en la simulación en Ingeniería Biomédica es la dificultad de generación de un modelo de análisis apropiado (i.e. mallas de elementos finitos suficientemente precisas) para geometrías tan complicadas. No debemos olvidar que un generador completamente automático y general esta todavía fuera del alcance de los analistas.

Un elemento adicional que ha impedido esta necesaria extensión de los últimos avances en simulación al campo de la Ingeniería Biomédica ha sido la extrema complejidad de los modelos de comportamiento de los materiales biológicos que en ella aparecen. No existe, de hecho, una base de datos suficientemente contrastada respecto de modelos de comportamiento de tejidos como el conjuntivo que conforma los ligamentos o el muscular, mientras que el tejido óseo, aunque más estudiado, es aún objeto de necesarias aproximaciones debido a sus características especiales de heterogeneidad, anisotropía y adaptabilidad a la edad, cargas y anatomía particular de cada individuo. Todo ello, sin considerar la no linealidad geométrica inherente a la mayoría de estas situaciones que obliga prácticamente siempre a trabajar con grandes desplazamientos y deformaciones, o los problemas tribológicos complejos que aparecen en el contacto en las uniones.

Finalmente, la inclusión de implantes conduce a la aparición de problemas adicionales de gran interés. Así, y aunque gran parte de los problemas iniciales inherentes a la inclusión de implantes, como fallos mecánicos de las prótesis o reacciones negativas de los tejidos, se han resuelto (en la actualidad el promedio de éxito de estas sustituciones la llegado a estar entre el 80 y el 90% después de 10 años de realizada la operación), considerando, por ejemplo, que cada año se incorporan alrededor de 500.000 prótesis de cadera en el mundo, ello significa que alrededor de 50.00 pacientes sufren fallos de uno u otro tipo.

La mayor parte de los implantes modernos falla debido al efecto denominado "aflojamiento aséptico" ("aseptic loosening"). Ello significa que un implante inicialmente unido rígidamente al tejido óseo circundante, pierde estabilidad apareciendo importantes micromovimientos relativos a dicho tejido bajo cargas funcionales. Estos micromovimientos dan lugar a reacciones inflamatorias, dolores y, en algunos casos, pérdida de masa ósea ("stress shielding"), reduciendo la funcionalidad y, eventualmente, dando lugar a la necesidad de una nueva operación. Ello supone un costo adicional de elevada cuantía para los servicios de salud. Un problema similar aparece en cirugía cardiovascular



donde la aparición de reestenosis inducidas por el implante (stents) puede dar lugar a la necesidad de una reintervención.

En el estado actual, se tiene un conocimiento limitado de los procesos que gobiernan el aflojamiento o la reestenosis, debido a la dificultad y duración de los ensayos clínicos a largo plazo, que hace muy difícil la realización de estudios completos sobre la influencia de las diversas causas posibles, si no es mediante el uso de modelos de comportamiento y simulaciones computacionales.

Los cirujanos ortopédicos y vasculares están pues interesados en disponer de elementos de planificación más precisos y sofisticados, capaces de simular las consecuencias de sus decisiones quirúrgicas tales como el tamaño, posición y orientación de la prótesis, el nivel de presión en el órgano, el espesor de la capa de cemento en prótesis cementadas, el tipo, número y ubicación de los tornillos de fijación en cirugía ortopédica, o la influencia del flujo sanguíneo y el estado de las paredes arteriales en la aparición de reestenosis en cirugía cardiovascular.

La literatura disponible sugiere que las herramientas de planificación actualmente utilizadas tienen una precisión muy pobre en la evaluación de las variables críticas antes citadas. Más aún, la práctica clínica actual no considera los efectos a largo plazo del nuevo entorno biomecánico resultante tras la realización de la operación, cuando es bien conocido que un ambiente favorable, sobre todo en los primeros momentos después de la operación, es esencial para el éxito de la misma.

Por ello, la utilización de herramientas de simulación biomecánica y mecanobiológica se espera que se configure en un futuro próximo como una ayuda decisiva para esta toma de decisiones basadas en consideraciones más objetivas y precisas.

Finalmente, los efectos de un determinado implante dependen de forma decisiva de la situación particular del paciente en el que se ubica, lo que ha planteado la *necesidad de tender hacia implantes personalizados* o, al menos, una variedad de tamaños y formas suficientes para solucionar las diferencias en edad, anatomía, fracturas o condiciones de flujo sanguíneo particulares. *Las actuales técnicas de prototipado rápido junto a una mayor flexibilidad de las líneas de producción integradas, va a permitir dar respuesta a esta demanda de series cortas (incluso únicas) en tiempos reducidos, siendo posible pensar en una fabricación individualizada.* Lo anterior, unido a la dificultad, en muchos casos imposibilidad, de realizar ensayos realistas, *ha hecho del área médica una candidata natural y especialmente adecuada para utilizar las técnicas de prototipado virtual-prototipado rápido (TPV_TPR)*, dándose por seguro que, durante los próximos 5 años, las compañías de seguros y los departamentos estatales encargados de la salud reconocerán las ventajas de estos sistemas entre las que podríamos resumir las siguientes:

- *Abaratamiento de costos* inducido por la reducción de tiempos en cada una de las fases preoperatoria, operatoria y postoperatoria.
- *Aumento de la seguridad* en los procedimientos de trabajo y en la fiabilidad de los resultados clínicos obtenidos.
- *Mejora de los elementos y técnicas de fijación*, tendiendo hacia un futuro próximo de prótesis personalizadas.
- *Un mejor conocimiento del comportamiento biomecánico de órganos y con ello de las causas de fallo de los implantes y del tratamiento en distintos tipos de fracturas* al disponer de una información más precisa del comportamiento antes y después del proceso de estabilización.
- *Una mejora sustancial en la enseñanza en Medicina Quirúrgica* ya que permitirá ensayar operaciones tanto virtuales como reales mediante el uso de los prototipos anatómicos y de prótesis realizados.

Algunos trabajos pioneros en los que ya se han utilizado los modelos TPV_TPR han sido aplicados esencialmente a:

- Neurocirugía: aparatos de fijación de la cabeza y aparatos para la detección de tumores y otras neuropatologías y elementos de guiado mediante captación y tratamiento de imágenes que permiten



alcanzar precisiones de cirugía por debajo del milímetro.

- Modelos anatómicos: los modernos aparatos de generación de sólidos, junto a las técnicas de prototipado rápido (estereolitografía) permiten la reconstrucción de réplicas poliméricas prácticamente exactas a las del paciente.
- Prótesis personalizadas: la generación de sólidos junto a técnicas de diseño de implantes "ad hoc" permiten la construcción de implantes y fijaciones adaptadas a la anatomía particular de cada paciente en un tiempo récord (que es el objetivo esencial de este proyecto).
- Telecirugía: procesos de captación de imagen y robots teleguiados permitirán alcanzar precisiones y sobre todos utilizar técnicas a distancia con un grado mínimo de riesgo y máximo de asepsia.
- Visualización realista y realidad virtual se asocian en la enseñanza reproduciendo elementos y situaciones "reales" de cirugía con un riesgo nulo para el paciente en un entorno simulado.
- No se ha planteado específicamente que conozcamos proyectos en la línea de cirugía cardiovascular, salvo DISHEART, proyecto europeo en el que participa el I3A.

En cuanto a aplicaciones clínicas directas, podemos citar

- Reconstrucción maxilofacial.
- Synostosis craneal.
- Cirugía tumoral maxilofacial.
- Cirugía plástica craneal.
- Cirugía ortodóncica.
- Estudio de deformaciones de huesos largos.
- Estudio de articulaciones de rodilla y codo.
- Fracturas pélvicas.
- Displasia de la cadera.
- Traumatismos de la columna.
- Enfermedades degenerativas y congénitas de la columna.
- Malformaciones de manos y pies.
- Quirúrgica cardiovascular.
- Predicción de reestenosis.

Dentro de esta línea, y como sublíneas específicas de investigación, podemos citar las siguientes:

- *Planificación quirúrgica de operaciones cardiovasculares*, incluyendo angioplastias y tratamiento de aneurismas.
- *Evaluación de la cirugía de prótesis de cadera cementadas.*
- *Evaluación de la cirugía de prótesis totales de rodilla.*

Esta línea es una de las prioritarias del área estratégica de Ingeniería Biomédica de I3A que se trata de priorizar en el nuevo plan estratégico 2006-08 del Instituto, a desarrollar en el presente año 2005 y en la que se pretende conseguir algún proyecto europeo, plantear un programa formativo de postgrado y, finalmente, fomentar, de forma importante, la colaboración con las instituciones de salud de la Comunidad Autónoma.

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN BIOCOMPUTACIÓN Y FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS (BIFI)

Líneas de trabajo a financiar dentro del Convenio:

- Plegamiento de proteínas: Desarrollo de modelos simplificados de intermediarios del plegamiento de las proteínas
- Desarrollo de un ordenador dedicado para Modelos locales con aritmética entera.
- Colaboración con el Laboratorio Nacional de Fusión para la simulación de Plasma y de daño por Radiación.

1. Plegamiento de proteínas: Desarrollo de modelos simplificados de intermediarios del plegamiento de las proteínas.

Como resultado de la colaboración interdisciplinar entre diversos grupos del Instituto se están desarrollando modelos teóricos de los intermediarios del plegamiento de las proteínas que pueden ser contrastados con la información experimental realizada dentro del Instituto.

En concreto se desea poder calcular las regiones de cualquier proteína susceptibles de iniciar su desplegamiento como consecuencia de diversos fenómenos de estrés, tales como un ligero aumento de la temperatura. La aparición de estas conformaciones intermediarias en equilibrio con las conformaciones nativas está relacionada con diversas patologías humanas que comienzan a ser de forma genérica como enfermedades conformacionales. La caracterización de los intermediarios puede ser abordada experimentalmente (estudiando de forma laboriosa cada proteína objeto de interés) o bien mediante su comprensión desde una perspectiva física.

En concreto vamos a trabajar en el desarrollo de modelos que permitan predecir qué regiones de una proteína determinada se desnaturalizan en primer lugar al ir aumentando la temperatura de la disolución.

En una primera fase se desarrollarán los modelos más sencillos que describan de forma realista la desnaturalización de una proteína (número de transiciones, capacidad calorífica) y se compararán con la información disponible para una proteína que está siendo estudiada experimentalmente en el BIFI (apoflavodoxina) y cuyo intermediario térmico ha sido caracterizado mutacional y energéticamente. El modelo teórico inicial que se ha planteado es marcadamente sencillo interacciones débiles entre residuos de dos tipos (en los que clasificamos los 20 aminoácidos presentes en las proteínas) y, a pesar de su sencillez ha proporcionado ya resultados esperanzadores.

Una vez alcanzado un modelo que capture las características principales de la desnaturalización se comprobará su capacidad predictiva evaluando la correspondencia con la información experimental disponible para otras proteínas. La consecución de un modelo suficientemente predictivo será de extraordinaria ayuda a la hora de determinar los puntos "débiles" de cualquier otra proteína y servirá de ayuda para la identificación de compuestos "reparadores".

En el BIFI contamos con los medios humanos, computacionales y experimentales necesarios para comenzar a abordar este problema.

2. Desarrollo de un ordenador dedicado para Modelos locales con aritmética entera.

El desarrollo de chips de lógica programable de alta densidad permite construir máquinas capaces de realizar tareas específicas miles de veces más rápido que un procesador de propósito general.

Esto nos llevó hace 4 años a desarrollar SUE (Spin Update Engine), que ha permitido a nuestro grupo simular vidrios de spin en la red con la precisión más alta hasta ahora en las publicaciones científicas del tema.

Nuestro objetivo actual es construir una nueva versión de la máquina, que llamaremos Super SUE (SSUE) con componentes más modernos que nos permita alcanzar velocidades cercanas a los 10000 PC's y que sea aplicable además a una amplia variedad de modelos, con tal de que mantengan una interacción local y toda la aritmética pueda ser convertida en entera.

Actualmente estamos comenzando ya los trabajos, y para ello estamos avanzando en diferentes tareas.

En primer lugar estamos poniendo en marcha el Laboratorio de Electrónica del BIFI, con fondos provenientes de la Convocatoria de Infraestructura.

Como primer paso para el desarrollo de los programas y modelos a ser utilizados en SSUE hemos comenzado un debate científico sobre los problemas abiertos, de interés y con perspectivas de serlo durante los siguientes años. Algún problema ya decidido, esta siendo implementado en un ordenador convencional para evaluar sus posibilidades, lo que servirá además para extraer los primeros resultados que permitirán comprobar el correcto funcionamiento de SSUE.

Ya hemos comenzado a implementar el primer problema en VHDL para ser ejecutado sobre una FPGA, con resultados preliminares correctos.

Este proyecto se realiza en estrecha colaboración con otros investigadores de la Universidad Complutense de Madrid y la Universidad de Extremadura en España, y con la Universidad de Ferrara y la Universidad de Roma I (La Sapienza) en Roma.

A través de estas colaboraciones ya disponemos de un driver bajo Linux para comunicar con una FPGA de la familia Stratix de Altera y de las primeras pruebas de comunicación.

3. Colaboración con el Laboratorio Nacional de Fusión para la simulación de Plasma y de daño por Radiación.

Tras la firma de un convenio de colaboración con el CIEMAT, y en concreto con el Laboratorio Nacional de Fusión, hemos iniciado las primeras discusiones para comenzar el trabajo conjunto en temas relacionados con el proyecto internacional ITER, proyecto que tiene como objetivo desarrollar un prototipo de Tokamak que sirva de paso previo a la construcción del primer reactor operativo de fusión por confinamiento magnético.

En este campo pretendemos consolidar una colaboración en la que el BIFI aporte su experiencia en simulaciones numéricas intensivas, tanto en paralelo como en modo granja, para resolver problemas con alto interés tecnológico.

En concreto nuestro objetivo es simular el comportamiento del plasma, para estudiar especialmente los fenómenos de difusión y transporte.

Para algunos de estos aspectos no es necesaria una comunicación masivamente paralela, por lo que una tecnología tipo GRID podría ser muy adaptada. Dado que el BIFI cuenta con experiencia en este tipo de desarrollos, siendo un nodo de IRISGRID, pensamos implementar algunos problemas específicos para ser ejecutados en modo distribuido.

También consideraremos el estudio del comportamiento de materiales sometidos a un intenso flujo de neutrones altamente energéticos (varios MeV), que serán las condiciones reinantes en ITER para el material en torno a la cavidad de Fusión. Estos problemas pueden ser atacados con diferentes técnicas, como Dinámica Molecular, Monte Carlo, dinámica de Langevin,... en las cuales el BIFI cuenta con investigadores expertos.

Para poner en marcha todo esto, el BIFI y el CIEMAT dentro del convenio firmado, realizarán reuniones periódicas y convocarán 2 becas predoctorales que serán codirigidas por investigadores del BIFI y del CIEMAT.

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN NANOCIENCIA DE ARAGÓN (INA)

Línea de trabajo a financiar dentro del Convenio:

Fabricación de nanopartículas de metales y óxidos metálicos. Aplicaciones en biomedicina y materiales avanzados.

Fabricación de nanopartículas de metales y óxidos metálicos. Aplicaciones en biomedicina y materiales avanzados.

Las investigaciones a desarrollar en el INA en este campo estarán basadas en la reducción de escala de forma controlada de los materiales. Se abren nuevas perspectivas en la investigación científica y en las nuevas tecnologías basadas en el cambio de escala. Este es el ámbito de la nanotecnología que dominará los avances más espectaculares de esta década en los ámbitos más diversos, entre los que podemos destacar:

- Farmacia: Se investiga la posibilidad de crear biomoléculas que desempeñen el papel de "farmacia a nivel celular" que puedan suministrar nanopartículas anticancerígenas.
- Fármacos nanoscópicos: es posible la obtención de nuevas medicinas de estado sólido en forma de nanopartículas. La elevada superficie de estas, posibilita su disolución en el torrente sanguíneo mientras que en forma micro o macroscópica no es posible. Muchas medicinas no han podido ser utilizadas y esta simple transformación de escala permitiría su utilización.
- Portadores magnéticos: Nanopartículas magnéticas recubiertas por capas que la hacen biocompatible y pueden adsorber quimioterápicos pueden ser utilizadas para dirigir el fármaco hacia tumores, donde desorben el medicamento. Estos métodos pueden suponer una revolución en Oncología.
- Hipertermia: Nanopartículas metálicas pueden ser focalizadas sobre dianas tumorales y mediante el uso de radiación electromagnética externa producir un sobrecalentamiento que destruye la zona afectada.
- Biosensores: El diseño y puesta a punto de biosensores ópticos para la determinación de compuestos orgánicos en fluidos biológicos, sigue siendo uno de los retos más importantes que tiene planteada la Química actual. El uso de reactivos naturales de bio-reconocimiento molecular, sobre todo proteínas (de transporte, hormonas, inmunoglobulinas o enzimas), presenta una alternativa muy atractiva. El uso de sistemas nanoestructurados en combinación con proteínas (sobre todo enzimas), para el desarrollo de biosensores electroquímicos es muy reciente y es una de las líneas con más proyección en el futuro.
- Etiquetado de DNA y biochips: Reconocimiento de secuencias de DNA mediante el recubrimiento de nanopartículas de oro y su posterior hibridación cuando son expuestas a secuencias complementarias produce una agregación de partículas coloidales originando un cambio de color. Identificación de secuencias de DNA utilizando su hibridación en determinadas posiciones de "microarrays".
- Separación de proteínas y celular: Mediante la funcionalización de la superficie de nanopartículas magnéticas se pueden adherir anticuerpos de alta especificidad que se ligan a antígenos y mediante atracción magnética separar proteínas. Estas técnicas se pueden utilizar en diagnóstico, terapia y detección de agentes específicos como el caso de antibióticos en salud alimentaria.
- Optoelectrónica: Esta línea se centra en el estudio de las propiedades físicas de cristales líquidos confinados en sistemas nano-estructurados. Este es un estudio básico previo a la aplicación de nuevas propiedades que presentan los cristales líquidos debido a su confinamiento, tanto ordenado como desordenado, a escala nanométrica. En la actualidad estos sistemas se plantean como sustitutos de cristales fotónicos, como materiales para láseres sintonizables y como conmutadores

electroópticos entre otras posibles aplicaciones derivadas de la propia naturaleza del cristal líquido confinado, memorias ópticas, biestabilidad en el caso de materiales ferroeléctricos etc.

- Almacenamiento de la información: En la actualidad se utilizan partículas ultrafinas para almacenamiento magnético, la necesidad una mayor densidad de almacenamiento lleva a la necesidad de obtener partículas magnéticas en la escala nanométrica pero lejos del límite superparamagnético, por lo que se necesita optimizar sus propiedades magnéticas (anisotropía, coercitividad, etc.).

- Electrónica molecular: La auto-organización molecular permite la obtención de macromoléculas con funciones de dispositivos electrónicos cuánticos. Se han podido medir las propiedades eléctricas de molécula individuales y se ha demostrado la capacidad de algunas moléculas de hacer de interruptores de la corriente eléctrica.

- Refrigeración magnética: Basada en la utilización del efecto magnetocalórico en partículas. Los refrigeradores basados en nanopartículas magnéticas no necesitan la utilización de fluidos como Freon o HFC altamente contaminantes, lo que supondría un gran beneficio medioambiental.

- Cerámicas altamente resistentes: Mediante la compresión de nanopartículas cerámicas se pueden obtener materiales más sólidos y resistentes, debido a la existencia del incremento de las fronteras de grano al reducir la escala. Estos materiales podrían sustituir a metales en muchas aplicaciones en que se necesiten aislantes eléctricos.

- Metales de elevada dureza: Los metales formados por nanopartículas exhiben durezas hasta cinco veces superiores a los que se obtienen formados por micro-agregados.

- Polímeros de altas prestaciones mecánicas: Se pretenden utilizar nanotubos de carbono como elementos rígidos reforzantes de polímeros cristal líquido (PCL), capaces de generar fibras autorreforzadas gracias a su elevada orientación molecular.

- Sensores: muchos ámbitos se abren en este campo utilizando la multifuncionalidad de las nanopartículas, citemos como ejemplo:

*Composites poliméricos de nanopartículas magnéticas con efectos magnetorresistivos para la producción de sensores o potenciómetros magnéticos.

*Agregados de partículas de semiconductores que cuando adsorben gases cambian su resistencia eléctrica.

- Catalizadores basados en nanomembranas inorgánicas: La utilización de dendrímeros organometálicos o los dendrímeros con nanopartículas metálicas encapsuladas en su interior como templates, y el posterior tratamiento mediante calcinación permite generar o liberar las nanopartículas en el interior del nanotubo. Este hecho puede aprovecharse para la preparación de substratos inorgánicos activos para catálisis heterogénea.

Estos son solo algunos ejemplos en los que la utilización de propiedades asociadas a la nanoescala tiene una incidencia cada vez más acusada en nuestro entorno socio-económico. El campo de desarrollo y uso de nanopartículas presenta un potencial excepcional tanto en investigación básica como en transferencia de tecnología.

INSTITUTO UNIVERSITARIO DE CATÁLISIS HOMOGÉNEA (IUCH)

Línea de trabajo a financiar dentro del Convenio:

Preparación y caracterización de nuevos sistemas catalíticos, estudio de su modo de acción y de sus aplicaciones.

Preparación y caracterización de nuevos sistemas catalíticos, estudio de su modo de acción y de sus aplicaciones

Los nuevos sistemas catalíticos se basarán, en la mayor parte de los casos, en complejos metálicos insaturados o lábiles, adecuados para promover la reacción deseada. En este conjunto se incluyen también los sistemas polinucleares, con al menos dos centros metálicos, en los que la actividad de uno de dichos centros resulta modulada por la proximidad del otro. Además, dichos sistemas polinucleares pueden actuar como catalizadores multifuncionales. También se prestará atención a la preparación de complejos organometálicos enantioméricamente puros para su aplicación en procesos enantioselectivos, esenciales en la preparación de compuestos de alto valor añadido.

La caracterización adecuada de los sistemas mono y polinucleares y los complejos quirales, es fundamental y para ello se usarán la variedad de técnicas disponibles en el Instituto. Por otra parte, la optimización de los nuevos catalizadores requiere la comprensión del mecanismo de las reacciones en los que se utilizan, aspecto que se abordará mediante estudios experimentales y teóricos.

Dada la gran variedad de metales y catalizadores con los que se trabaja, se está en disposición de aplicarlos a una amplia variedad de reacciones orgánicas, tanto de transformación de grupos funcionales como de creación de sistemas activos y de enlaces carbono-carbono. Conviene resaltar que se potenciará el estudio de procesos de interés industrial, entre los que deben destacarse la funcionalización de hidrocarburos a través de la activación de enlaces C-H, y las reacciones de oligomerización, polimerización y metátesis.

De cara a optimizar la aplicación a gran escala de los catalizadores preparados se explorará su uso en sistemas bifásicos sólido:líquido y líquido:líquido, incidiendo en el uso de disolventes neotéricos. En este apartado se estudiarán reacciones catalíticas en espacios confinados, con el objeto de aprovechar las modificaciones debidas al confinamiento para mejorar la actividad o modificar la selectividad.

Dado el interés en el desarrollo de procesos catalíticos enantioselectivos se abordará también la preparación de compuestos orgánicos en forma enantiopura, mediante técnicas de síntesis asimétrica y resolución por HPLC con fases estacionarias quirales. Estos compuestos tienen interés como productos finales o como ligandos quirales para la preparación de catalizadores enantioméricamente puros. En este apartado se trabajará de modo fundamental en la síntesis de aminoácidos y de derivados de los mismos.

Por último, es bien conocida la estrecha relación entre la catálisis y la química verde. Durante este año se profundizará en estos aspectos al estudiar el uso de la catálisis para la transformación de residuos vegetales en productos de alto valor añadido.

EDUARDO BANDRES MOLINE, SECRETARIO DEL GOBIERNO DE ARAGON

C E R T I F I C O: Que el Gobierno de Aragón, en su reunión celebrada el día 26 de abril de 2005, adoptó, entre otros, un acuerdo que copiado literalmente dice lo siguiente:

"Se acuerda. Primero.- Aprobar el texto de la Addenda al Convenio de Colaboración suscrito entre el Gobierno de Aragón y la Universidad de Zaragoza, para el desarrollo de proyectos de investigación a través de Institutos Universitarios de Investigación, que figura como anexo al presente acuerdo. Segundo.- Autorizar la firma de la Addenda que supone una aportación económica para el ejercicio 2005 de 850.000 euros (OCHOCIENTOS CINCUENTA MIL EUROS), con cargo a la aplicación presupuestaria 17.03.542.3.440.00A del presupuesto de gastos del Departamento de Ciencia, Tecnología y Universidad. Tercero.- Facultar al Consejero de Ciencia, Tecnología y Universidad para la firma de la addenda en nombre y representación del Gobierno de Aragón".

Y para que así conste y su remisión a EXCMO. SR. CONSEJERO DE CIENCIA, TECNOLOGIA Y UNIVERSIDAD expido la presente certificación, en Zaragoza y en la sede de la Diputación General de Aragón, a veintisiete de abril de dos mil cinco.

EL SECRETARIO DEL GOBIERNO,

