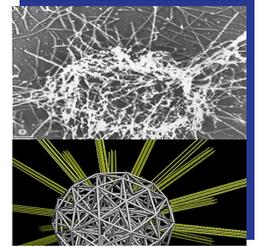




### ¿Qué es el modelado computacional?

El modelado computacional es el uso de computadoras para simular y estudiar el comportamiento de sistemas complejos mediante las matemáticas, la física y la informática. Un modelo computacional contiene numerosas variables que caracterizan el sistema bajo estudio. La simulación se realiza ajustando cada una de estas variables, solas o combinadas, y observando cómo los cambios afectan los resultados. Los resultados de las simulaciones de modelos ayudan a los investigadores a hacer predicciones acerca de qué pasará en el sistema real que se está estudiando en respuesta a condiciones cambiantes. El modelado puede agilizar la investigación al permitir que los científicos realicen miles de experimentos simulados por computadora a fin de identificar los experimentos físicos reales que más probablemente ayudarán al investigador a encontrar la solución al problema bajo estudio.



*El modelo de estructura de plaquetas ayuda a predecir los patrones de movimiento de plaquetas activadas.  
Fuente: Danny Bluestein, Universidad de Stony Brook.*

Una característica clave de los modelos computacionales actuales es que son capaces de estudiar un sistema biológico en múltiples niveles, incluyendo procesos moleculares, interacciones de célula a célula, y cómo dichas interacciones producen cambios a nivel de tejidos y órganos. La capacidad de estudiar un sistema en estos múltiples niveles se conoce como modelado multiescala.

### ¿Cómo puede el modelado computacional acelerar el descubrimiento?

Para entender mejor cómo funciona el modelado por computadora, piense en cómo se hornea un pastel que consta de 20 ingredientes. Si quiere saber cómo cada ingrediente contribuye al resultado del pastel, una opción sería hornear 20 pasteles y quitar un ingrediente diferente cada vez. Dicha estrategia llevaría mucho tiempo. Alternativamente, se podrían ingresar todos los 20 ingredientes en un modelo computacional, incluyendo las propiedades conocidas de cada ingrediente. Podría entonces realizar una simulación en la que se omitiera un ingrediente diferente cada vez. En cuestión de segundos, la computadora le podría decir el resultado probable de cada uno de los 20 pasteles si se hornearan en la vida real.

Digamos que ahora quiere saber cómo el cambiar la cantidad de cada ingrediente afectaría al pastel. En su modelo de computadora, podría ajustar las cantidades de cada uno de los 20 ingredientes, el número de veces que quisiera, hasta que el resultado de la simulación sea un pastel que se adecúe a sus necesidades (por ej. esponjoso, pegajoso, suave, duro, etc.). En la vida real, necesitaría hornear 190 pasteles para saber los resultados de cambiar 2 ingredientes cualquiera; 1,140 pasteles para saber los resultados de cambiar 3 ingredientes cualquiera; y 4,845 pasteles para saber los resultados de cambiar 4 ingredientes cualquiera. El poder del modelo computacional es que permite a los científicos e ingenieros simular variaciones por computadora con mayor eficiencia, ahorrando tiempo, dinero y materiales.

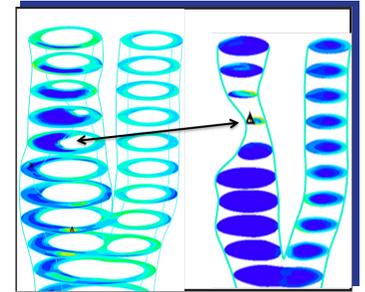
### ¿Cuáles son algunos ejemplos de modelado computacional y cómo se usa para estudiar sistemas complejos?

- **Pronóstico del clima.** El pronóstico del clima utiliza modelos computacionales que analizan y hacen predicciones basadas en numerosos factores atmosféricos. Esto es importante para proteger la vida, las propiedades y las cosechas, y para ayudar a las compañías de servicios públicos a planear aumentos en la demanda de electricidad, especialmente cuando se esperan cambios extremos en el clima.
- **Construcción de mejores aviones.** Los simuladores de vuelo recrean el vuelo de las aeronaves utilizando las ecuaciones complejas que regulan cómo vuelan las aeronaves y la reacción de estas ante factores ambientales externos como la turbulencia, la densidad del aire y la precipitación. Además de utilizarlos para capacitar a los pilotos, los simuladores de vuelo se usan para diseñar aeronaves y probar cómo las aeronaves pueden ser afectadas por diferentes condiciones.
- **Estudio de terremotos.** El modelado computacional se utiliza en el estudio de terremotos, con el objetivo de salvar vidas, edificios y otros tipos de infraestructura. Las simulaciones por computadora modelan cómo la construcción, la composición y el movimiento de estructuras, así como las superficies sobre las cuales se construyen, interactúan para afectar lo que sucede durante un terremoto.

### ¿Cómo puede el modelado computacional mejorar la atención médica y/o la investigación biomédica?

- Los investigadores están desarrollando modelos de la estructura y la función de los vasos sanguíneos, el flujo de sangre y las válvulas cardíacas para optimizar el diseño de dispositivos implantados, como las válvulas cardíacas artificiales y los stents para arterias coronarias. Los modelos computacionales ayudan también a crear instrumentos de decisión para los doctores que, basándose en un análisis detallado de las características específicas de cada paciente, puedan ofrecer asesoría para el tratamiento de enfermedades cardiovasculares.

- Los modelos computacionales de la córnea humana pueden ayudar a simular la cirugía ocular con láser y refinar la técnica. Se utilizan también para la capacitación virtual de los médicos acerca de cómo realizar dicho procedimiento.
- Los investigadores están utilizando el modelado computacional para ayudar a diseñar fármacos, en las etapas tempranas del desarrollo, que serán más seguros para los pacientes. Identificar cuáles fármacos son los que tienen menos probabilidades de tener efectos secundarios adversos también tiene el potencial de reducir los muchos años que se requieren para llevar un fármaco candidato prometedor desde la etapa experimental hasta la aprobación ganadora como un medicamento seguro y eficaz.

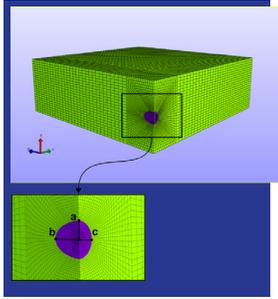


El modelo de arterias obstruidas identifica las áreas dañadas en las paredes (izquierda) y los puntos de gran tensión por el flujo de sangre (derecha), que predicen la ruptura de la placa aterosclerótica.

Fuente: Dalin Tang, Instituto Politécnico de Worcester.

## ¿Qué están desarrollando los investigadores financiados por el NIBIB en el área de modelado computacional?

**Mejoramiento de la cicatrización de heridas crónicas.** La heridas crónicas en la piel, especialmente en personas que sufren enfermedades como diabetes y obesidad, son un grave problema de salud y económico en los Estados Unidos y en el mundo. La cicatrización requiere la atracción de nuevos fibroblastos de la piel hacia la región de la herida, que es dirigida por una proteína llamada factor de crecimiento derivado de plaquetas (FCDP). Aunque mucho se sabe sobre las señales que activan el FCDP, poco se sabe sobre cómo se distribuyen diferentes concentraciones de FCDP en el sitio de la herida y cómo esto dirige el movimiento de los fibroblastos en la herida para promover la cicatrización. Los científicos financiados por el NIBIB están desarrollando un modelo computacional que incorpora una gran cantidad de información experimental acerca de las señales que activan el FCDP. El modelo se utilizará para entender y predecir los desencadenantes clave del proceso de cicatrización en múltiples niveles, incluyendo el autoensamblaje de proteínas contráctiles, la migración celular y las interacciones de célula a célula para formar tejido nuevo. El modelo se utilizará para identificar, probar y refinar los enfoques de cicatrización de heridas en pacientes con heridas crónicas persistentes.



Este modelo predice cambios en la tensión dentro de un tejido en respuesta a los cambios en las propiedades físicas y químicas. Fuente: Jay Humphrey, Universidad de Yale.

**Reducción de la osteoartritis después de la cirugía de rodilla.** Los desgarros en el ligamento cruzado anterior (LCA) son una lesión común de rodilla. Las cirugías reconstructivas de LCA son a menudo exitosas para mejorar la estabilidad articular, pero los pacientes tienen un alto riesgo de desarrollar aparición temprana de osteoartritis (OA). Los investigadores están trabajando para entender por qué se desarrolla la OA en estos pacientes y la mejor estrategia de tratamiento para reducir el riesgo. Están creando un nuevo modelo computacional multiescala para examinar la mecánica del caminar en términos de músculo, hueso y tejidos blandos. El modelo se utilizará para probar la variables quirúrgicas

clave que afectan las tensiones del cartílago después de la reconstrucción del LCA, que se cree que aumentan los cambios osteoartroticos en la articulación, que incluyen la rigidez del injerto del LCA y el ángulo de la unión del LCA a los huesos. El modelo examinará entonces la influencia de los procedimientos quirúrgicos en la mecánica de la rodilla mediante una resonancia magnética. Los estudios pretenden identificar los protocolos clínicos y quirúrgicos que mejor pueden reducir el riesgo de aparición temprana de OA después de una lesión de ligamento y reparación quirúrgica.

**Modelado multiescala de biopelículas microbianas para el tratamiento mejorado de infecciones resistentes a antibióticos.** La mayoría de las bacterias que se producen de manera natural crecen como biopelículas—grandes cantidades de bacterias que se auto-organizan en estructuras tridimensionales—lo que a menudo las hace resistentes a los tratamientos con antibióticos. A pesar de que representan la gran mayoría de la vida microbiana en el planeta, las características estructurales y bioquímicas básicas de las biopelículas se conocen muy poco todavía. Los científicos están combinando herramientas computacionales y experimentales para abordar el desafío de caracterizar, predecir, y tratar estos sistemas complejos. El objetivo es desarrollar un modelo computacional experimentalmente conducido que genere predicciones exactas del comportamiento de la biopelícula. Las predicciones se utilizarán para desarrollar maneras novedosas de tratar biopelículas resistentes que se encuentran en las superficies de dispositivos médicos implantados, como los catéteres urinarios y venosos, los implantes de senos, y los marcapasos.

## Contacto en el NIBIB

Instituto Nacional de  
Bioingeniería e Imágenes  
Biomédicas

6707 Democracy Blvd.  
Suite 200  
Bethesda, MD 20892  
Phone: 301-496-8859  
info@nibib.nih.gov  
www.nibib.nih.gov

Sala de prensa de la Oficina de  
Política Científica y Comunicaciones  
Press Office:  
Phone: 301-496-3500  
Fax: 301-480-1613  
nibibpress@mail.nih.gov

El NIBIB apoya al Grupo de Modelado y Análisis Entre Agencias (IMAG, por sus siglas en inglés,) el cual coordina el Consorcio de Modelado Multiescalas (MSM, por sus siglas en inglés) de investigadores que desarrollan modelos multiescalas, para solucionar diversas temas de la investigación biomédica, biológica y del comportamiento.

