



Modelado Computacional

Institutos Nacionales de Salud

¿Qué es el modelado computacional?

El modelado computacional es el uso de matemáticas, física e informática para estudiar el comportamiento de sistemas complejos mediante la simulación por computadora. Un modelo computacional contiene numerosas variables que caracterizan el sistema bajo estudio. La simulación se realiza ajustando estas variables y observando cómo los cambios afectan los resultados pronosticados por el modelo. 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 ya que permite que los científicos realicen miles de experimentos simulados por computadora a fin de identificar los experimentos físicos que con mayor probabilidad ayuden al investigador a encontrar la solución al problema bajo estudio.

¿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 contribuye cada ingrediente al resultado del pastel, una opción sería hornear 20 pasteles y quitar un ingrediente diferente cada vez. Dicho enfoque llevaría mucho tiempo. Alternativamente, se podrían ingresar todos los 20 ingredientes en un modelo computacional, explicando a la computadora qué hace cada ingrediente y cómo interactúa con otros ingredientes. Luego ejecutaría una simulación en la que se omitiera un ingrediente cada vez. En cuestión de segundos, la computadora le podría decir el resultado 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 el modelo computacional, podría ajustar las cantidades de cada uno de los 20 ingredientes el número de veces que quiera 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 cualquiera de 2 ingredientes; 1,140 pasteles para saber los resultados de cambiar cualquiera de 3 ingredientes; y 4,845 pasteles para saber los resultados de cambiar cualquiera de 4 ingredientes. 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.

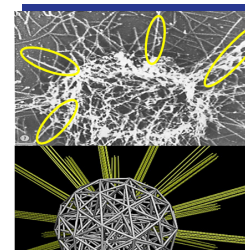
¿Cuáles son algunos ejemplos del modelado computacional y cómo se puede usar para estudiar sistemas complejos?

El modelado computacional se usa para estudiar un amplio rango de sistemas complejos. Algunos ejemplos incluyen:

- **Pronóstico del clima.** El pronóstico del clima utiliza modelos computacionales que analizan y hacen predicciones basadas en numerosos factores atmosféricos. Esto es importante por muchas razones incluyendo la protección de la vida, propiedades y cosechas y ayuda 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 vuela una aeronave y la reacción de la aeronave a factores ambientales externos tales 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 el diseño de las aeronaves e investigar cómo diferentes condiciones podrían afectar a las aeronaves.
- **Estudio de terremotos.** El modelado computacional se usa en el estudio de terremotos, con el objetivo de salvar vidas, edificios y otros tipos de infraestructura. Las simulaciones por computadora crean modelos para ver cómo interactúa la construcción, la composición y el movimiento de estructuras, así como las superficies en las que están construidas, durante un terremoto.
- **Artículos Domésticos.** Los modelos computacionales se usan para desarrollar muchos, si no la mayoría, de los artículos que utilizamos en nuestro hogar. Por ejemplo, los envases de productos químicos domésticos (por ej. para higiene, lavandería, limpieza) y alimentos (por ej. café, papas fritas, galletas), la producción de textiles (por ej. tela, ropa) y aún el diseño de pañales utilizan muchos métodos matemáticos complicados y herramientas de modelado.

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

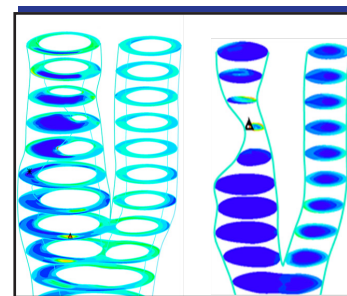
Tratamiento de cardiopatía. Los investigadores están desarrollando modelos de las mecánicas de los vasos sanguíneos, el flujo sanguíneo y las válvulas cardíacas. Estos modelos se pueden usar de varias maneras, incluyendo la optimización del diseño de dispositivos implantados tales como las válvulas cardíacas artificiales y los stents para las arterias coronarias. Los investigadores también están usando modelos computacionales para desarrollar herramientas para la toma de decisiones para uso de los doctores que, basándose en un análisis detallado de las características específicas de cada paciente, puedan ser una guía para el tratamiento de enfermedades cardiovasculares.



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

Cirugía ocular. Con el aumento en la cirugía ocular con láser, los científicos están usando los modelos computacionales para mejorar el procedimiento y reducir la posibilidad de resultados deficientes. Específicamente, se están desarrollando modelos biomecánicos de la córnea humana para simular la cirugía con láser y refinar la técnica. Otro uso importante de estos modelos es para la capacitación virtual de médicos acerca de cómo realizar el procedimiento.

Predicción de los efectos secundarios de los fármacos. Los investigadores están usando el modelado computacional para predecir los efectos secundarios potenciales de los fármacos. Este enfoque ofrece la posibilidad, temprano en el proceso del desarrollo, de elegir el diseño de un medicamento más seguro para los pacientes. Este enfoque también puede permitir a los investigadores identificar nuevos usos posibles para fármacos que ya están en el mercado. La identificación de fármacos con menor probabilidad de tener efectos secundarios adversos también tiene el potencial de reducir los muchos años que se necesitan para llevar un fármaco candidato prometedor de la etapa experimental a una medicación para enfermedades y afecciones que no tienen tratamientos efectivos, de manera segura y aprobada.

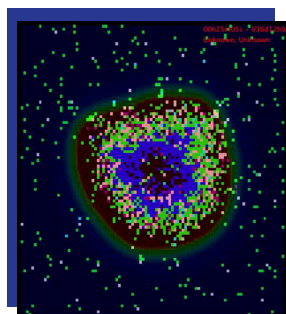


El modelo de arterias obstruidas identifica las áreas dañadas en las paredes (izquierda) y puntos de gran tensión por el flujo sanguíneo (derecha), que predicen la ruptura de la placa aterosclerótica.

Fuente: Dalin Tang, Instituto Politécnico de Worcester

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

Diseño de sistemas precisos de administración de fármacos. Un área apasionante de la investigación es la administración localizada de fármacos, la cual utiliza vehículos extremadamente pequeños y versátiles conocidos como nanopartículas. Los científicos son capaces de sintetizar nanopartículas compuestas de moléculas discretas, químicos y otras características físicas que permiten a la partícula suministrar un agente terapéutico a un sitio específico de la enfermedad, mientras que evita interacciones con tejidos sanos. Los investigadores apoyados por el NIBIB están usando modelos computacionales de las interacciones complejas de sistemas de nanopartículas dentro del entorno biológico del cuerpo humano. Este modelado estimula el destino de nanopartículas con diseños diferentes; la meta es desarrollar sistemas de administración de fármacos en nanopartículas que son mejores y más precisos.



Modelo computacional que muestra moléculas moviéndose adentro y afuera del sitio de la formación de granuloma tuberculoso.

Fuente: Denise Kirschner, Universidad de Michigan

Modelado de respuestas patógenas e inmunológicas para tratar la tuberculosis. La tuberculosis es todavía un problema mundial que infecta a un tercio de la población. Es difícil para los pacientes cumplir con la terapia actual, ya que requiere de 6 meses de tratamiento con antibióticos múltiples. Los investigadores están usando un enfoque combinado experimental/computacional para desarrollar un modelo realista que describa la respuesta inmunológica a la infección con la bacteria que provoca la tuberculosis. La meta es predecir el resultado de las estrategias de tratamiento que estimulen la inmunidad durante el tratamiento con antibióticos. Los resultados del modelo se usarán para desarrollar mejores terapias que optimicen los efectos combinados del tratamiento con antibióticos y la respuesta inmunológica. Este enfoque también proporcionará datos y herramientas para la amplia comunidad de investigadores que investigan diversas áreas relacionadas con la tuberculosis, la inmunidad y el modelado computacional.

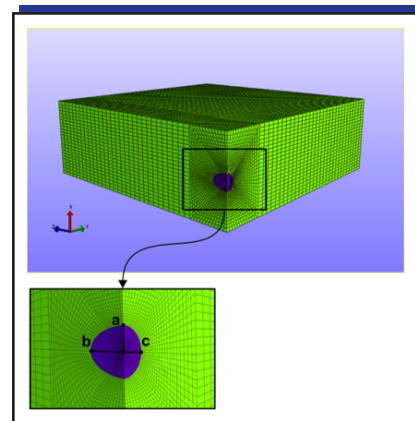
La combinación de imágenes para el panorama completo. En los últimos años, ha habido un progreso rápido en el desarrollo de tecnologías de imágenes para estudiar la estructura y la función del cerebro. Los investigadores están actualmente trabajando para adquirir información más detallada

mediante el uso de combinaciones de técnicas de imágenes, incluyendo imagen por resonancia magnética funcional (IRMf), tomografía óptica difusa (TOD) y mediciones de la electroencefalografía (EEG) y magnetoencefalografía (MEG). Esto requiere la integración de experimentos de imágenes utilizando dos o más técnicas simultáneamente para optimizar los detalles de la estructura y la función del cerebro. Los investigadores usarán modelos computacionales que combinen múltiples modalidades de imágenes para estudios de investigación y administración clínica de pacientes. Este enfoque tendrá implicaciones importantes para entender las dinámicas de la función normal del cerebro y cómo cambian estas dinámicas en enfermedades como la epilepsia, la enfermedad de Alzheimer, el infarto cerebral y la enfermedad de Parkinson. Dicha técnica también se puede usar para monitorear la función del cerebro durante el sueño, bajo anestesia y en pacientes tratados en la unidad de cuidados intensivos.

Optimizar condiciones para la reparación de tejidos. El daño a los tejidos debido a traumatismo, edad o enfermedad ha creado una demanda de estrategias exitosas de reemplazo y regeneración de tejidos. Actualmente, estos enfoques se han visto entorpecidos por la incapacidad para diseñar biomateriales que satisfagan las necesidades específicas de cada sitio de reparación. Los investigadores están desarrollando un juego de herramientas de modelado que pueda predecir la mejor composición de biomateriales para diferentes entornos biológicos -- tales como en partes diferentes del cuerpo. El enfoque actual está en biomateriales que soporten carga para la reparación de hueso y tejidos relacionados. Es importante destacar que los componentes del juego de herramientas de modelado tendrán una amplia utilidad para un rango de aplicaciones biomateriales y regenerativas, incluyendo la reparación del tendón, córnea y vasos sanguíneos.

Modelado de lesión de rodilla y tratamiento. En la articulación de la rodilla, los movimientos que se hacen al caminar, correr y al practicar deportes pueden ejercer tensión y deformar el tejido del cartílago subyacente. Patrones de deformación anormales pueden estimular las células en el cartílago para producir respuestas bioquímicas que crean lesión al cartílago. Por lo tanto, las respuestas a nivel celular afectan la función a nivel del tejido, lo cual afecta la función a nivel de todo el cuerpo, ocasionando que la gente sienta dolor al mover la rodilla. Cada uno de estos niveles diferentes se conoce como una escala biológica. Los modeladores están desarrollando “modelos multiescalas” para estudiar las enfermedades y padecimientos, viendo todas las escalas que afectan el sistema o el problema bajo consideración. En el ejemplo de una lesión de rodilla, se usan modelos de células, tejidos y músculo-esqueléticos conjuntamente para trazar un mapa de la deformación celular en el cartílago, los ligamentos y los meniscos cuando el ligamento de la rodilla es sometido a varias fuerzas.

Los modelos multiescalas pueden identificar las razones estructurales y mecánicas para patologías (como osteoartritis) y proporcionan una evaluación del riesgo de un daño celular inducido mecánicamente. En el futuro, las plataformas de modelado multiescala como esta avanzarán los cuidados de salud pública a través del diseño de intervenciones quirúrgicas, terapéuticas y de rehabilitación, dirigidas específicamente a la mecánica de células y tejidos para restaurar la función mecánica en varias escalas biológicas.



Este modelo predice cambios en la tensión dentro de un tejido en respuesta a cambios en las propiedades físicas y químicas.

Fuente: Jay Humphrey, Universidad de Yale

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 diversos temas de la investigación biomédica, biológica y del comportamiento.

