

Número 197

22 de marzo de 2018

LA BIOLOGÍA COMPUTACIONAL, UNA PODEROSA HERRAMIENTA PARA LA CIENCIA

*Es relevante predecir el comportamiento dinámico de interacción de estas biomoléculas que generan la función en las células

La simulación de sistemas biomoleculares a través de programas computacionales permite observar comportamientos que de otra manera sería imposible captar por su dificultad y costo, aseguró el doctor Diego Prada Gracia durante el V Simposio de Divulgación, Ciencia y Medios de Comunicación, realizado en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM).

En su charla Observando el comportamiento de las proteínas con ayuda de las computadoras, el investigador responsable de la Unidad de Investigación en Biología Computacional y Diseño de Fármacos del Hospital Infantil de México Federico Gómez, habló sobre estos procesos y sus alcances.

Desde hace varios años, dijo, se ha dedicado al desarrollo de marcos teóricos estadísticos para el análisis de sistemas dinámicos complejos y el desarrollo de software para entender la dinámica de los sistemas biomoleculares.

Su trabajo se ha centrado principalmente en el estudio y la simulación de la dinámica molecular en los procesos de interacción de las proteínas, así como en el diseño y la optimización computacional de moléculas con potencial farmacológico.

El investigador explicó que estos métodos surgen ante la necesidad de estudiar aquellos procesos que no se pueden observar en el laboratorio, ya que se presentan a escalas tan pequeñas que no pueden medirse con microscopios electrónicos.

“Es muy relevante poder predecir el comportamiento dinámico de interacción de estas biomoléculas, que al fin y al cabo son las responsables de generar la función en las células”, abundó.

En muchas ramas de la ciencia estos modelos de simulación han tenido un papel significativo por las posibilidades que brindan, a partir de la creación de ambientes controlados basados en principios matemáticos, algoritmos y ecuaciones numéricas.

Dichos procesos son analizados a través de programas informáticos

especializados que permiten aproximarse a las dinámicas moleculares y representarlas con mayor claridad en entornos de apariencia real.

En estos procesos se utilizan tarjetas gráficas mediante las cuales se realiza la simulación y visualización a través de un software que en muchas ocasiones es gratuito, ya que en esta área hay una gran derivación hacia la open science y la open source.

El doctor en Biofísica y Física Estadística de la Universidad de Zaragoza, España, compartió algunos de estos modelos de simulación, videos de realidad virtual que muestran el comportamiento de las proteínas y sus membranas, los flujos y dinámica de los lípidos, el colesterol y otras sustancias.

“Predecimos la probabilidad de que las cosas sucedan, por lo que es posible anticipar cuál es el flujo de iones de sodio que pasan por un canal; no puedo predecir perfectamente en qué tiempo pasa uno y el siguiente, pero pronostico muy bien cuál es el flujo, la velocidad, el mecanismo y el número de iones por unidad de tiempo para ajustarlo al modelo real”.

Aunque estos esquemas no son exactos indicó que se basan en la entropía y plantean la imprecisión, el ruido y la variación, además se ha introducido aleatoriedad, ajustándolos para poder predecir su comportamiento.

Finalmente, destacó la importancia de que existan espacios como el Laboratorio de Instrumentación Biomédica de la Unidad Iztapalapa de la UAM –uno de los más distinguidos en su tipo en el país– ya que gracias a él estudiantes e investigadores pueden materializar sus proyectos de investigación.

