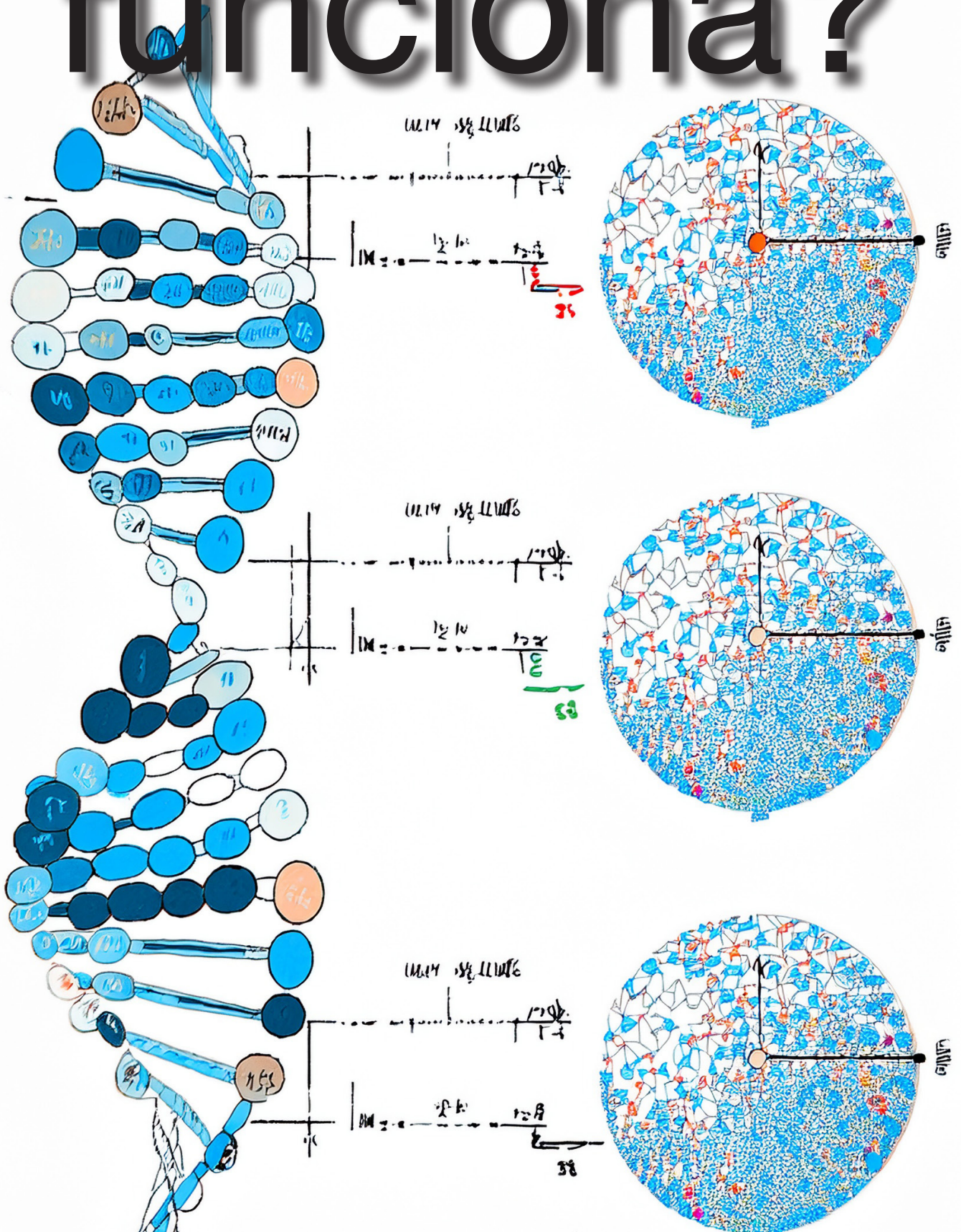


¿Cómo funciona?



Bioquímica a través del tiempo y espacio: Perspectiva desde el modelado matemático

Biochemistry through time and space: A perspective from mathematical modeling

Resumen

La vida, entendida como un sistema complejo, ha sido estudiada mediante el modelado matemático durante más de un siglo. Este enfoque ha sido fundamental desde sus primeras versiones simplificadas, y su alcance se ha ampliado gracias a la computación avanzada y a algoritmos sofisticados. A pesar de estos avances, persisten desafíos en la validación experimental y en la interpretación de grandes volúmenes de datos. En este contexto, la simulación por computadora, apoyada por herramientas de bioinformática y biología de sistemas, permite interpretar los datos de manera más precisa, fortaleciendo la predicción y el entendimiento del comportamiento de los organismos vivos.

Palabras clave: *Biología de sistemas, bioinformática, sistemas biológicos.*

Summary

Life, understood as a complex system, has been studied through mathematical modeling for over a century. This approach has been fundamental since its earliest simplified versions, and its scope has expanded thanks to advanced computing and sophisticated algorithms. Despite these advances, challenges remain in experimental validation and in the interpretation of large volumes of data. In this context, computer simulations, supported by tools from bioinformatics and systems biology, allow for more accurate data interpretation, enhancing our understanding and predictive capacity of living organisms.

Keywords: *Systems biology, bioinformatics, biological systems.*

Bruno Alberto Ortiz García^{1*}
María Isabel Neria-González¹
Ricardo Aguilar-López²

¹División de Ingeniería Química y Bioquímica, TecNM: Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, C.P. 55210, Ecatepec de Morelos, Estado de México, México.

²Departamento de Biotecnología y Bioingeniería, CINVESTAV-IPN, C.P. 07360, San Pedro Zacatenco, CDMX, México.

*Autor para la correspondencia:
202322188@tese.edu.mx

La vida es el sistema tecnológico más potente y, al mismo tiempo, el más complejo del planeta. Esta asombrosa complejidad representa un fantástico rompecabezas para quienes estudian sus misterios; pero, más importante aún, ofrece una gran cantidad de oportunidades para quienes buscan utilizar el conocimiento sobre los sistemas biológicos para mejorar la calidad de vida humana [1].

Para comprender los procesos vivos, el modelado matemático ha sido una herramienta fundamental desde sus primeros intentos por describir el comportamiento de los sistemas biológicos mediante abstracciones que llamamos ecuaciones matemáticas, las cuales sirven de modelos abstractos de los diferentes sistemas biológicos. Inicialmente, estos modelos consistían en **descripciones simplificadas** de fenómenos biológicos, formuladas con un en-

foque teórico y muchas veces limitadas por la falta de datos experimentales detallados para su validación. Sin embargo, con el avance de la tecnología, la capacidad de desarrollar estos modelos ha **crecido exponencialmente**, permitiendo representaciones cada vez más precisas y detalladas. Desde la perspectiva de bioingeniería, esta metodología ofrece la posibilidad de explorar los **procesos bioquímicos a través del tiempo y el espacio**.

El desarrollo de la tecnología de la **computación** y sus algoritmos marcó un punto de inflexión en explotación de los **modelos matemáticos** para **sistemas biológicos**, ya que ahora es posible resolver un gran número de ecuaciones en tiempos relativamente cortos. Este artículo analiza la evolución de estos modelos y su impacto en la comprensión de sistemas biológicos. La aparición de potentes computadoras, junto con el avance de métodos matemáticos sofisticados y la capacidad de procesamiento de grandes volúmenes de datos, ha permitido modelar estos sistemas con un nivel de detalle sin precedentes. En este contexto, los **modelos probabilísticos, redes neuronales artificiales, modelos multiescala** y enfoques de **inteligencia artificial** han **revolucionado** la forma en que **representamos** y **predicimos** el comportamiento de los sistemas biológicos. Hace décadas, los modelos biológicos eran como los primeros mapas de exploradores: útiles, pero llenos de zonas “**desconocidas**” y con trazos aproximados. Con el avance computacional, es como haber pasado de esos mapas antiguos a un Sistema de Posicionamiento Global (GPS por sus siglas en inglés) más detalle y precisión.

El empleo de modelos matemáticas para comprender los sistemas biológicos se ha llevado a cabo durante **más de un siglo** [2]. Con el avance en la secuenciación del genoma, se ha producido una **expansión sin precedentes** en la cantidad de información biológica disponible. Actualmente, podemos **acceder a datos completos** sobre el **código genético**, y un mayor entendimiento sobre la bioquímica de

los genes, su funcionamiento e interrelación, lo que conduce a conocer con mayor detalle, los **procesos metabólicos** en los que participan [3].

Comprender y utilizar toda esta información se ha convertido en un **reto clave** para el estudio de sistemas biológicos, lo que ha impulsado el desarrollo de herramientas computacionales **avanzadas**, que han desembocado en lo que actualmente se denomina la bioinformática, la cual ha adquirido un papel fundamental, ya que permite organizar y analizar estos datos de manera eficiente.

La **bioinformática** se encuentra en la intersección de la biología, la computación y las matemáticas. Su campo de **estudio** abarca el **almacenamiento, búsqueda, manipulación** y **modelado** de datos biológicos. Entre sus aplicaciones destacan la **construcción** representaciones **estructurales** y **funcionales** del genoma, que permiten no solo localizar genes codificantes, sino también explorar regiones no codificantes, a menudo denominadas la “**materia oscura**” del ADN, el **análisis** de **secuencias** de **nucleótidos** y **aminoácidos**, la **predicción** de las **estructuras proteicas, entre otros**. Gracias a estas herramientas, es posible formular hipótesis y realizar simulaciones computacionales **antes** de llevar a cabo experimentos en el laboratorio, **entendiendo** mejor el sistema de estudio, **optimizando** el tiempo de investigación y **reduciendo** significativamente el gasto de recursos.

A medida que la bioinformática ha avanzado en la recopilación y análisis de **grandes volúmenes** de datos biológicos, ha surgido la necesidad de comprender no solo los componentes individuales de los sistemas biológicos, sino también sus interacciones y dinámicas globales. Es aquí donde la biología de sistemas cobra **relevancia**, ya que busca integrar diferentes tipos de datos genómicos, transcriptómicos, proteómicos y metabolómicos para modelar y predecir el comportamiento de sistemas biológicos completos. La **biología de sistemas** como disciplina que estudia las propieda-

des sistemáticas y sus interacciones dinámicas en un **agente biológico** ya sea una célula, un organismo, un virus o un huésped infeccioso (**Figura 1**), desde un punto de vista cualitativo, cuantitativo y por combinación de estudios experimentales con modelado matemático [4].

Modelado matemático en sistemas biológicos

Al estudiar procesos bioquímicos y genéticos, es fundamental comprender su comportamiento en un momento específico, como si les tomáramos una “**fotografía**” que capture su **estado** en ese instante. Esta fotografía nos permite analizar las condiciones actuales del sistema y entender cómo interactúan sus componentes (**Figura 2**) [5].

Por ello, usamos ecuaciones matemáticas que incluyen variaciones o tasas de cambio, que técnicamente se llaman ecuaciones diferenciales ordinarias (**EDO's**) como herramientas fundamentales para describir cómo varían ciertas variables en un sistema a lo largo del tiempo. En el ámbito de las **redes bioquímicas**, como las interacciones entre diversas sustancias dentro de una célula, las EDO's se emplean para modelar los cambios a través del tiempo de las especies bioquímicas que participan en estas redes. En contraste, las ecuaciones en derivadas parciales (**EDP's**) son esenciales cuando el fenómeno depende de múltiples variables como la posición y el tiempo, como la difusión de metabolitos en medios heterogéneos.

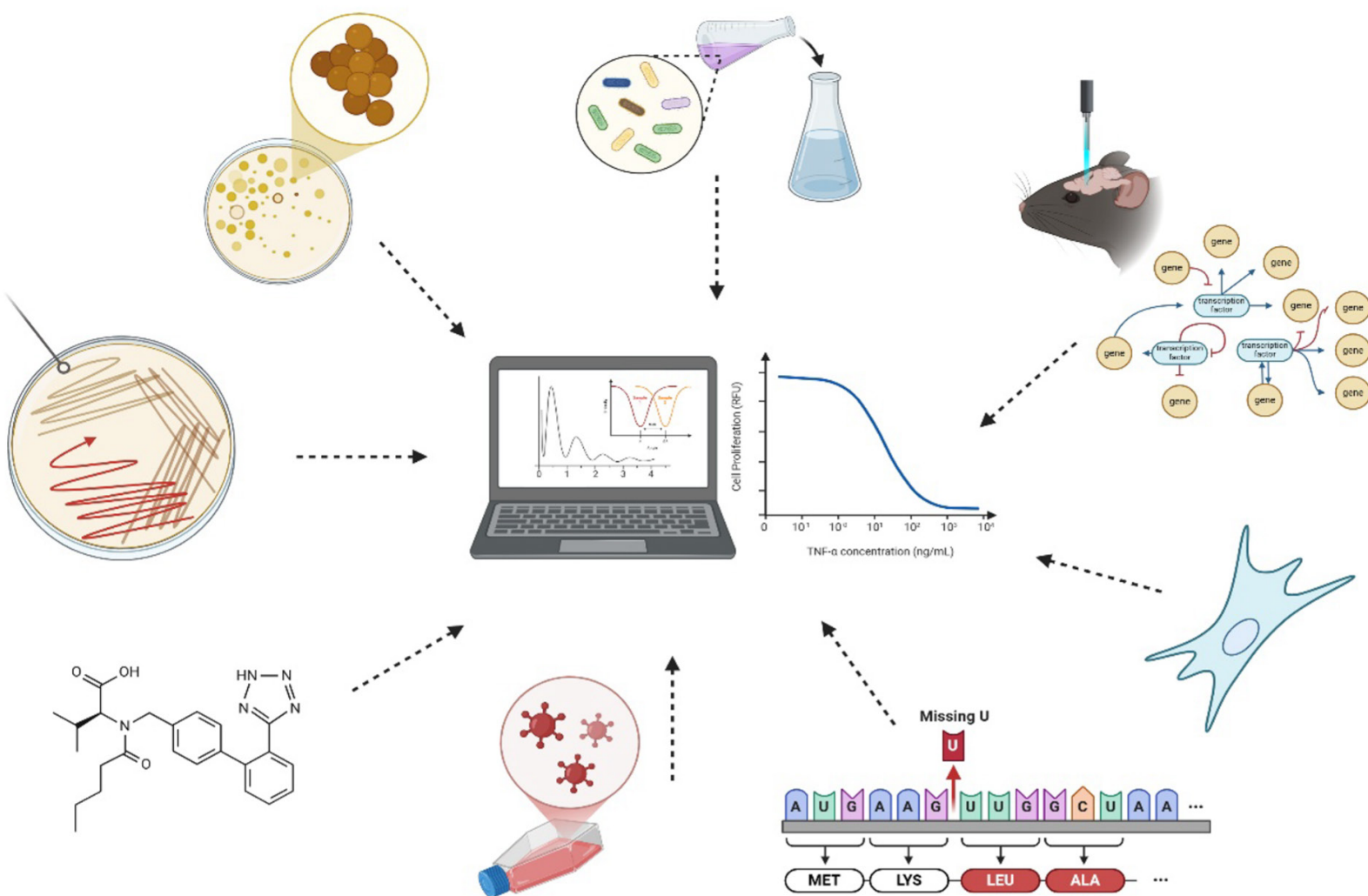


Figura 1. Ejemplos de sistemas biológicos que se simulan y modelan en ingeniería de procesos biológicos.

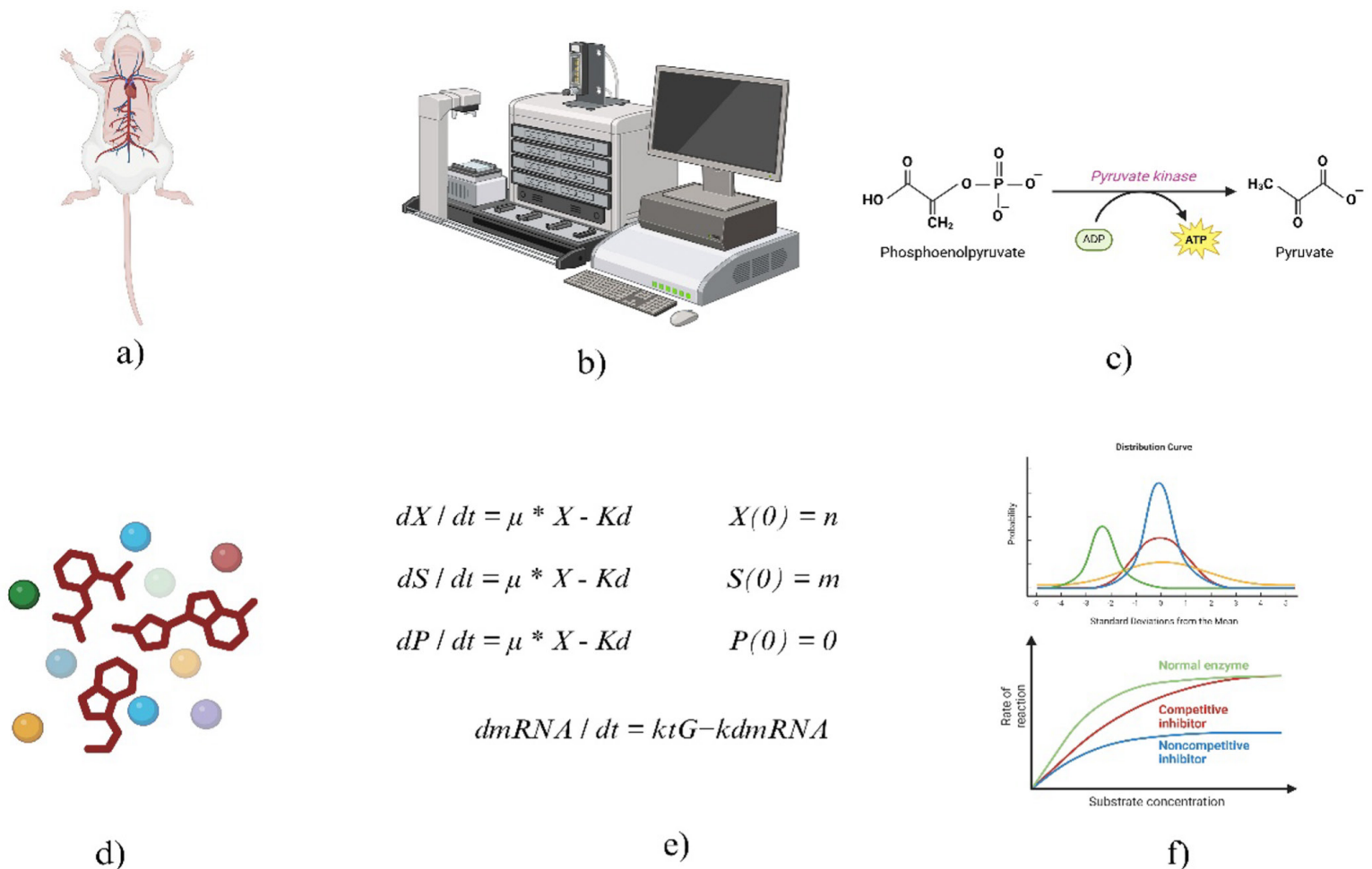


Figura 2. Pasos generalizados del modelado matemático. a) Sistema biológico en estudio. b) Compilación de datos experimentales. c) Esquema del modelo de estudio. d) Variables y parámetros involucrados. e) Modelo dinámico y uso de herramientas de simulación numérica. f) Validación y resultados.

Cuando hablamos de comportamientos dinámicos, generalmente nos referimos a sistemas inherentemente no lineales que pueden **exhibir** una amplia **gama** de **respuestas**. Estos sistemas se consideran no lineales porque su comportamiento no es proporcional: pequeños cambios pueden producir **efectos significativos**, mientras que grandes modificaciones a veces generan impactos mínimos.

En contraste, los sistemas lineales presentan relaciones **proporcionales** y **predecibles** entre sus variables. En estos casos, un cambio en una variable genera una variación proporcional en otra. Esta proporcionalidad facilita el análisis y la predicción del comportamiento del sistema.

Para comprender y predecir el comportamiento de estos sistemas complejos, se em-

plean **simulaciones numéricas**. Esto implica la creación de modelos matemáticos que representan las interacciones dentro del sistema, los cuales se resuelven utilizando **software especializado** (Figura 3). Dado que obtener soluciones exactas es a menudo difícil o imposible debido a la complejidad del sistema, se aplican **métodos de aproximación** que permiten obtener resultados suficientemente precisos para su análisis.

Estas técnicas de aproximación permiten obtener **soluciones cercanas** cuando los problemas matemáticos son complejos. En lugar de buscar una solución exacta, que a veces no es posible, nos ayudan **a entender de forma realista** cómo se comporta un sistema. Por ejemplo, al modelar el crecimiento de bacterias según la disponibilidad de nutrientes, los **métodos numéricos** permiten predecir su evolu-

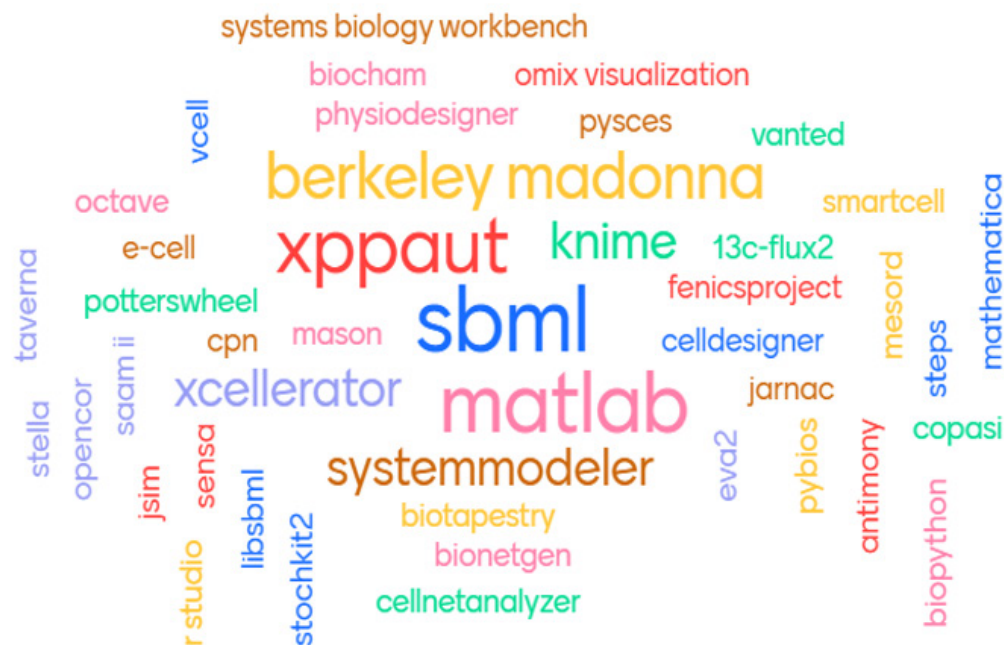


Figura 3. Paquetes de softwares especializados que sirven como herramienta para modelar y simular sistemas biológicos.

ción en diferentes condiciones.

A medida que profundizamos en el **modelado biológico**, queda en evidencia como todos los modelos son aproximaciones de la realidad. Cada ecuación es una interpretación de múltiples factores que influyen en el comportamiento de un sistema vivo [6]. Sin embargo, aunque los modelos no son la realidad misma, se vuelven una **herramienta imprescindible** en la ciencia actual, facilitándonos tomar decisiones informadas y formular hipótesis sobre futuros escenarios en ámbitos tan diversos como la salud, la biotecnología, la medicina o el cuidado del medio ambiente.

En el futuro, los modelos combinarán la precisión de las ecuaciones con la flexibilidad de la inteligencia artificial. Esto permitirá ajustar procesos **en tiempo real**, como si se tratara de un “**control remoto**” para la vida. **iBIO**

Agradecimiento

Los autores agradecen el uso de la herramienta de IA **ChatGPT (OpenAI)** como apoyo

en la organización lingüística del presente texto. Se deja constancia de que todos los contenidos técnicos e interpretaciones científicas presentados son de autoría exclusiva, y que la herramienta fue utilizada únicamente para mejorar la estructura, claridad y coherencia del documento.

Referencias

- [1] Feig, M., & Sugita, Y. (2019). Whole-Cell Models and Simulations in Molecular Detail. *Annual Review Of Cell And Developmental Biology*, 35(1), 191-211. <https://doi.org/10.1146/annurev-cellbio-100617-062542>
- [2] Smith, R. W., & Fleck, C. (2017). Derivation and use of mathematical models in systems biology. In *Pollen Tip Growth: From Biophysical Aspects to Systems Biology* (pp. 339-367). Cham: Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-56645-0_13
- [3] Lucido, A., Basallo, O., Marin-Sanguino, A., Eleiwa, A., Martinez, E. S., Vilapriyo, E., Sorribas, A., & Alves, R. (2025). Multiscale Mathematical Modeling in Systems Biology: A Framework to Boost Plant Synthetic Biology. *Plants*, 14(3), 470. <https://doi.org/10.3390/plants14030470>
- [4] Saltelli, A., & Di Fiore, M. (Eds.). (2023). *The politics of modelling: Numbers between science and policy*. Oxford University Press. <https://doi.org/10.1093/oso/9780198872412.001.0001>
- [5] Zupanec, A., Bernstein, H. C., & Heiland, I. (2020). Systems biology: current status and challenges. *Cellular And Molecular Life Sciences*, 77(3), 379-380. <https://doi.org/10.1007/s00018-019-03410-z>
- [6] Aguilar López, R. (2024). Fermentation Processes. Modeling, Optimization and Control. *MDPI*. <https://www.mdpi.com/books/reprint/10183-fermentation-processes-modeling-optimization-and-control>