

**“ModelFitness: Recomendador y afinador de parámetros de  
modelos a data obtenida empíricamente.”**

**ESTUDIANTE:**

DIANA BISCAY MANTILLA

**PROFESORES:**

OSCAR PINTO GARRALAGA  
GONZALO GUAJARDO BECCHI

## 1. Contexto

El Centro Interdisciplinario de Neurociencia de Valparaíso (CINV) es un centro de investigación en neurociencia donde se estudia el funcionamiento del sistema nervioso a diferentes niveles, desde el funcionamiento de proteínas presentes en las células hasta la dinámica que siguen las redes neuronales. El centro realiza publicaciones científicas a partir del avance en los conocimientos del área que obtienen en sus investigaciones. Entre sus departamentos de investigación se encuentra el de Estructura y Funciones de Sensores Moleculares, que estudia la respuesta de los canales de iones a las variaciones de voltaje en los BK<sup>1</sup> de humanos expresados en ovocitos de ranas del género *Xenopus*. Este departamento ya ha realizado estudios empíricos mediante la técnica de *patch clamp*<sup>2</sup> determinando cómo, en laboratorio, las variaciones de voltaje afectan a los mecanismos de compuerta de los canales de  $K^+$ .

## 2. Problema

Los datos empíricos obtenidos por el CINV, de las respuestas los canales de  $K^+$  a las variaciones de voltaje, parecen no ser explicados a partir de modelos teóricos anteriores

---

<sup>1</sup>Canales de  $K^+$  dependientes de voltaje y de la presencia de  $Ca^{++}$  intracelular.

<sup>2</sup>Registro de corriente utilizando una pipeta con un microelectrodo.

propuestos en la comunidad científica, por lo que el centro propone un nuevo modelo teórico (C-C-O) del funcionamiento de los mecanismos de compuerta de estos canales. A pesar de que el CINV es capaz por un lado de obtener en laboratorio data empírica de las respuestas de los canales de iones, y por otro lado, de contar con modelos que en teoría deberían ser capaces de acercarse a los datos reales si se encuentran los parámetros adecuados, pierden tiempo crucial en intentar determinar si realmente los modelos anteriores y el modelo que proponen explican o no los resultados, pues intentan ajustar los parámetros manualmente. En este proceso, los resultados hasta ahora obtenidos han sido desfavorables y no ha permitido validar ninguno de los modelos.

### 3. Propuesta

Para el proceso en el que se intenta validar los modelos, se propone como proyecto una herramienta que permita a investigadores dado un conjunto de datos obtenidos de manera empírica y un modelo que en teoría los explica, encontrar de manera mecánica el conjunto de valores para los parámetros del modelo que permiten ajustar lo más óptimo posible el modelo a los datos empíricos (recomendación de parámetros). Además que permita realizar análisis de sensibilidad de los parámetros a través de su modificación manual de manera de visualizar el impacto que tienen los cambios de éstos en el ajuste final (refinamiento de parámetros). Por último, que permita salvar instancias de los parámetros recomendados e instancias de experimentación en este proceso de afinamiento.

El producto, además, permitirá la inclusión de otros módulos que representen otros modelos teóricos que se propongan, ya sean modelos anteriores o futuros, sin llevar cambios en el resto de los módulos ya funcionales.

### 4. Validación

El proyecto será validado por diferentes clientes como proceso y como producto. La validación del proyecto como proceso la realizarán, de manera sistemática durante la realización del proyecto, docentes de la carrera de Ingeniería en Computación e Informática de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional Andrés Bello (UNAB), sede Viña del Mar. La validación del proyecto como producto se hará midiendo la satisfacción de los usuarios finales a través de encuestas en la tarea de encontrar el conjunto de parámetros que les permita el mejor ajuste a los datos, así como a su afinamiento manual. Los usuarios finales serán investigadores del CINV pertenecientes al departamento de Estructura y Función de

Sensores Moleculares.

## 5. Contribución

La mayor contribución de esta herramienta es facilitar a investigadores el proceso de determinación de valores para los parámetros del modelo C-C-O; parámetros que permitirían explicar un conjunto de datos obtenidos de manera empírica. Ésto puede tener un gran impacto en la comunidad, puesto que se podrá determinar si el modelo propuesto es válido o no para los datos obtenidos. Además, a través del afinamiento de parámetros se podrá analizar la influencia de cada uno de ellos en el funcionamiento de los mecanismos de compuerta de los canales de iones (determinando, por ejemplo, si algunos parámetros son redundantes), lo que pudiera llevar a la propuesta de nuevos modelos teóricos. Todo lo anterior, se reflejará en avances en conocimientos del área reflejados en mayores publicaciones científicas del CINV.