



<https://doi.org/10.47993/gmb.v44i2.263>



## Estudios in Silico, Simulando Vida en un Entorno Virtual

In Silico Studies, Simulating Life in a Virtual Environment

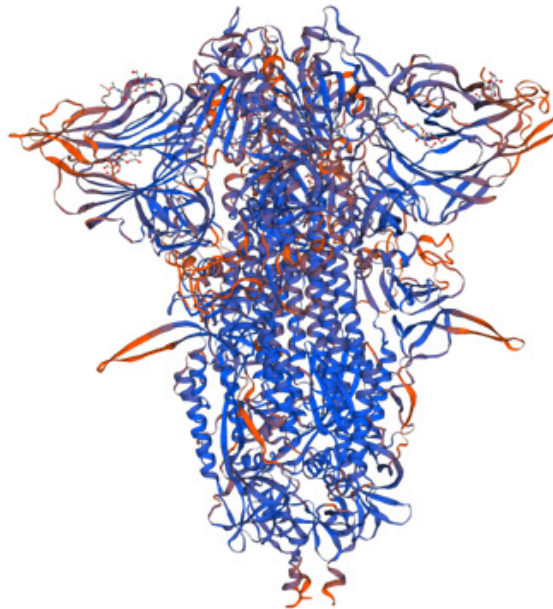
Alvaro Andre Vargas Aguilar<sup>1a</sup>, Rosy Fuentes Condori<sup>1a</sup>

### Sra. Editora:

La era digital cambió por completo el paradigma clásico de estudio en todas las áreas de la ciencia y el sector salud no ha sido ningún extraño a esta revolución, la transición y digitalización de muchos procesos ha traído consigo nuevas formas de entender el proceso salud-enfermedad, uno de estos abordajes son los estudios In Silico.

Los estudios In Silico pertenecen a una rama de la biología computacional cuyo objetivo es explorar y experimentar con procesos biológicos por medio de simulaciones hechas en computadora. Este nuevo enfoque digital ha permitido: visualizar las estructuras tridimensionales de numerosos péptidos, observar el rol y función de diferentes moléculas, proteínas o bien de una célula completa hasta poder llegar a predecir respuestas a estímulos a través de la modelación con experimentos in silico.

Un ejemplo perfecto de la aplicación de esta tecnología es en el área de farmacología, ya que ayuda no solo a predecir la eficacia de posibles moléculas terapéuticas sino también provee modelos del comportamiento farmacocinético de dichos compuestos, es decir, su perfil ADME (absorción, distribución, metabolismo y eliminación)<sup>1</sup>, este enfoque brinda un medio para acelerar el ritmo de producción de nuevas sustancias con aplicación clínica al mismo tiempo que garantiza una mayor seguridad y eficacia en los experimentos de desarrollo de nuevos fármacos que por métodos laboratoriales o clínicos nos resultan perjudiciales o bien inaccesibles e inapropiados para la vida.



**Figura 1.** Glicoproteína S del coronavirus, generada automáticamente en SWISS-MODEL, en base al formato FASTA para representación de péptidos simplificada en texto

<sup>1</sup>Estudiante Facultad de Medicina, Universidad Mayor de San Simón,

<https://orcid.org/0000-0002-5409-8854>.

<https://orcid.org/0000-0003-1469-5379>.

\*Sociedad Científica de Estudiantes de Medicina

\*Correspondencia a: Alvaro Andre Vargas Aguilar

Correo electrónico: [vargasaguilarandre@gmail.com](mailto:vargasaguilarandre@gmail.com)

Recibido el 30 de junio de 2021. Aceptado el 28 de agosto de 2021.

Con todo esto la información de las características de interacción de los fármacos obtenida y reunida por estudios clínicos y en seres humanos nos permite tener un avance limitado con definiciones de mecanismos e interpretación a un nivel básico de estas, por lo que si se requiere otras formas de estudio; los datos preclínicos in silico se utilizan de forma predictiva, para anticipar y disponer de información antes de la administración de un fármaco a los seres humanos.

Dentro del área de las ciencias de la medicina estas nuevas e innovadoras alternativas de estudio tienen gran relevancia dentro de los aportes científicos como brindar medios seguros de experimentación que como profesionales de salud estamos comprometidos a conocer.

Todos los métodos mencionados tienen como propósito optimizar sustancias químicas para mejorar su afinidad y selectividad hacia un objetivo farmacológico específico, o bien se pueden utilizar para estimar las propiedades fisicoquímicas y biológicas, como la solubilidad, biodisponibilidad o toxicidad<sup>2</sup>.

Sin embargo, es necesario mencionar que como todo avance científico, los estudios in silico poseen limitaciones: los modelos virtuales de sistemas biológicos poseerán siempre un margen de error ya que se trata solo con las representaciones digitales de estructuras, no con productos reales, por tanto los estudios in silico no pretenden reemplazar el clásico abordaje de descubrimiento y diseño molecular, sino busca complementarlo, otro gran inconveniente es que solo un pequeño porcentaje de fármacos producidos por este medio, muestran eficacia en el entorno clínico<sup>3</sup>.

Palabras claves: in Silico, computational biology, COVID-19

---

### Referencias bibliográficas

1. Pelkonen O, Turpeinen M, Raunio H. In Vivo-In Vitro-In Silico Pharmacokinetic Modelling in Drug Development: Current Status and Future Directions. *Clinical Pharmacokinetics*. 2011; 50(8):483-491. Disponible en: <https://doi.org/10.2165/11592400-000000000-00000>. [Consultado 10 de junio de 2021].
2. Rodwell W, Bender VA, Botham DM, Kennelly KJ, Weil P. 2015. *Harper's Illustrated Biochemistry*. 30th ed. McGraw-Hill, pp.97-108.
3. Alqahtani S. In silico ADME-Tox modeling: progress and prospects. *Expert Opinion on Drug Metabolism & Toxicology*. 2017;13(11):1147-1158. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17425255.2017.1389897>.