



PORTADA:

Traemos a la portada la simbología del paso del tiempo, que ha renovado imágenes y símbolos, pero manteniendo el carácter de servicio iniciado hace quince años por Addlink Software Científico.

Posiblemente muchos de nuestros lectores recordarán, sobre todo los que trabajaban en aquel entonces en la universidad, como hace quince años existía una seria dificultad para la importación o adquisición de herramientas de cálculo que facilitarían la realización de sus estudios de investigación. Además, en esa época tampoco contábamos con la profusión de programas de cálculo de diversa índole que existen hoy en día, y no existían las infraestructuras de información y comunicaciones que permitieran informarse sobre las herramientas adecuadas para conocerlas con cierta profundidad, probarlas o, todavía más difícil, que algún técnico especializado pudiera explicarnos su funcionamiento. Estas grandes dificultades fueron origen de una necesidad real para los científicos y docentes de nuestro país y, con su fundación hace quince años, Addlink Software Científico vino a cubrir ese espacio en el mercado.

Desde el origen de Addlink Software Científico en 1991, la empresa ha evolucionado constantemente intentando adaptarse a las nuevas necesidades de los usuarios de software científico-técnico y añadiendo nuevos servicios, muchos de ellos aprovechando las nuevas tecnologías e infraestructuras que han ido apareciendo durante estos años. El lector puede hacerse una idea sobre las muchas iniciativas que hemos ido llevando a cabo en estos años leyendo el artículo de nuestras páginas centrales.

Entre las novedades más importantes que hemos incorporado en nuestro catálogo de servicios para celebrar el decimoquinto aniversario, cabe destacar las nuevas páginas Web especializadas que hemos diseñado para centralizar información referente a diferentes áreas de la ingeniería (multifísica, ingeniería-electrónica, ingeniería-proyectos, ingeniería-cálculo, ingeniería-ambiental), sistemas (controltotal, addlink-crm) o GIS (geobase). Hemos relacionado todas las nuevas URL en el apartado de eventos de la página 15 de la revista. Para intentar promocionar el uso de las herramientas científicas tanto por los profesionales como por el personal docente y sus alumnos, este año convocamos la segunda edición de los premios "fórum Tecnológico" ampliándolo con una nueva categoría. Además de la categoría de Software Matemático (SOFMAT'07) este año se añade la categoría de Física Aplicada, circunscrita al congreso de usuarios de COMSOL Multiphysics, que se celebrará el próximo 15 de noviembre en Madrid. Este premio se otorgará al autor del mejor modelo realizado con esta herramienta que sea presentado durante el congreso.

Desde el convencimiento de que su proyecto es también el nuestro, continuamos creciendo, adaptando nuestro negocio y mejorando nuestras infraestructuras para, de esta manera, poder seguir ofreciéndole las herramientas más novedosas y los mejores servicios.

José María Cifuentes Torreño, Director
ADDLINK SOFTWARE CIENTÍFICO

FÓRUM TECNOLÓGICO NÚMERO 9 - AÑO 2006
fórum Tecnológico tiene una difusión de 15.000 ejemplares y es de periodicidad semestral. La revista es de difusión gratuita y está disponible para todos aquellos profesionales de la industria, la ciencia y la técnica que la soliciten. Así mismo, fórum Tecnológico puede solicitarse bajo suscripción.

REDACCIÓN, ADMINISTRACIÓN Y PUBLICIDAD
Fórum Tecnológico
c/ María Aurèlia Capmany 2-4 08001 Barcelona-España
Teléfono: 93 - 415.49.04 / Fax: 93 - 415.72.68
C/ Núñez de Balboa, 118 2º J 28006 Madrid-España
Teléfono: 91 - 515.82.76/ Fax: 93 - 411.51.11

Puede contactar con nosotros enviándonos un correo electrónico a las siguientes direcciones:
Información: info@forumtecnologico.com
Redacción: redaccion@forumtecnologico.com
Anuncios y Publicidad: anuncios@forumtecnologico.com
Suscripciones: suscripcion@forumtecnologico.com

Fórum Tecnológico es una marca registrada de Addlink Software Científico, S.L. Se reconocen las marcas y productos registrados como pertenecientes a sus legítimos propietarios.
D.L.B.-10.709-02 ISSN-1579-3818

QUÍMICA

- 4> BIOKMODWEB: MODELIZACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE ISÓTOPOS RADIACTIVOS EN LOS SERES VIVOS
- 6> MODELADO MOLECULAR PARA QUÍMICA MÉDICA

MATEMÁTICAS

- 8> MATHCODE: UN SISTEMA DE GENERACIÓN DE CÓDIGO C++ Y FORTRAN DESDE MATHEMATICA

ESTADÍSTICA

- 10> EL CONTROL DE SU PROCESO EN TIEMPO REAL CON MINITAB
- 14> DEL ANÁLISIS ESTADÍSTICO A LA MINERÍA DE DATOS (DATA MINING) MEDIANTE INSIGHTFUL MINER

EVENTOS

- 15> AGENDA DE PRÓXIMOS EVENTOS
- 16> ADDLINK SOFTWARE CIENTÍFICO, 15 AÑOS A LA VANGUARDIA DE LA CIENCIA.

FINANZAS

- 18> UNA MIRADA A .NET EN LAS FINANZAS

INGENIERÍA

- 20> COMSOL, MUCHO MÁS QUE ELEMENTOS FINITOS
- 22> LABORATORIO DE ELECTRÓNICA AL ALCANCE DE CUALQUIER ESCUELA
- 24> LAKES ENVIRONMENTAL, GESTIÓN MEDIOAMBIENTAL
- 26> MEJORAS EN LA CALIDAD Y PRODUCTIVIDAD DE LA INGENIERÍA GRACIAS A LA GESTIÓN DE CÁLCULOS
- 30> HERRAMIENTAS DE ÚLTIMA GENERACIÓN PARA SISTEMAS DE CONTROL DE MAPLESOFT

DOCENCIA

- 29> INSTRUCCIÓN MATEMÁTICA A TRAVÉS DE APLICACIONES BASADAS EN INTERNET

BiokmodWeb: modelización de la distribución de isótopos radiactivos en los seres vivos

GUILLERMO SÁNCHEZ, ENUSA INDUSTRIAS AVANZADAS S.A.

Introducción

El desarrollo de aplicaciones en *webMathematica*, que permite ejecutar *Mathematica* desde un navegador, abre extraordinarias posibilidades pues aprovecha la potencialidad de *Mathematica* sin que el usuario necesite tener conocimientos de este programa. *BiokmodWeb* [1] (<http://www3.enusa.es/webMathematica/Public/biokmod.html>), al que nos referiremos en este artículo, es una aplicación hecha utilizando *webMathematica* orientada a la resolución de modelos compartimentales, de interés en: dosimetría interna, farmacología, medicina nuclear y ecología. *BiokmodWeb* es un enlace recomendado en <http://www.mathematica.com>, sitio oficial de *Mathematica* y *webMathematica*. Está desarrollado en ENUSA Industrias Avanzadas S.A. (<http://www.enusa.es>) y puesto a disposición de la comunidad de Medicina Nuclear a través de su filial Molypharma (<http://www.molypharma.es>).

Modelización compartimental

Muchos procesos físicos y químicos pueden ser representados matemáticamente utilizando análisis compartimental [2,3,4]. Éste se basa en la descomposición de un proceso o fenómeno en un número finito de partes llamadas compartimentos que interactúan entre sí a través de intercambio de flujo. El flujo puede consistir en transmisión de partículas, sustancias químicas, individuos de una población, etc. El análisis compartimental tiene numerosas aplicaciones: medicina nuclear, ecología, reacciones químicas, etc.

Un modelo compartimental es usualmente representado por un diagrama de bloques (figura 1), donde los compartimentos se representan por rectángulos o circunferencias y, por flechas, los intercambios de compartimentos entre sí y de compartimentos con el exterior.

La retención en función del tiempo para un compartimento i se denota por $x_i(t)$ y el coeficiente de transferencia desde el compartimento i al compartimento j por k_{ij} . Los valores de k_{ij} se determinan a partir de valores experimentales. La cinética del modelo se representa matemáticamente

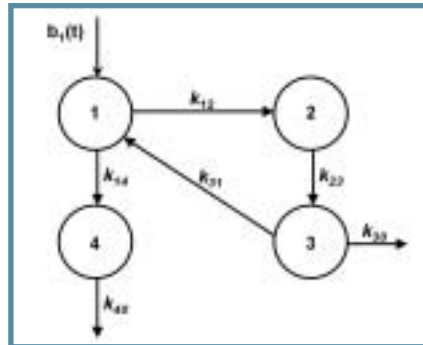


Figura 1: Modelo del yodo [5], con entrada a través de la sangre (compartimento 1)

por un sistema de ecuaciones diferenciales. Su resolución da las funciones $x_i(t)$ que describen el contenido del isótopo esperado en cada compartimento i .

En aplicaciones de medicina nuclear puede interesar predecir la evolución de un isótopo concreto en un órgano o glándula a partir de la cantidad suministrada al paciente (por ejemplo: retención en la tiroides del yodo 131 suministrado a un paciente por vía oral).

En el caso de personas expuestas a la inhalación de partículas radiactivas resulta interesante conocer la retención en el pulmón y/o la excreción urinaria y fecal predichas por el modelo y contrastarla con los datos experimentales medidos utilizando bioensayos (por ejemplo: para medir la cantidad de un isótopo retenida en los pulmones se suele emplear un contador de radiactividad corporal, y para medir la concentración en orina y heces se puede emplear espectrometría alfa o gamma). Utilizando la solución del modelo y los resultados de los bioensayos se puede estimar las cantidades incorporadas.

En otras ocasiones lo que interesa es obtener (normalmente en experimentos con animales) las constantes de transferencia k_{ij} a partir de medidas experimentales de la concentración $x_i(t)$ en ciertos compartimentos.

Biokmod y BiokmodWeb

Biokmod [1] es una aplicación formada por un conjunto de paquetes o subprogramas desarrollados en *Mathematica* que permite definir y resolver modelos compartimentales

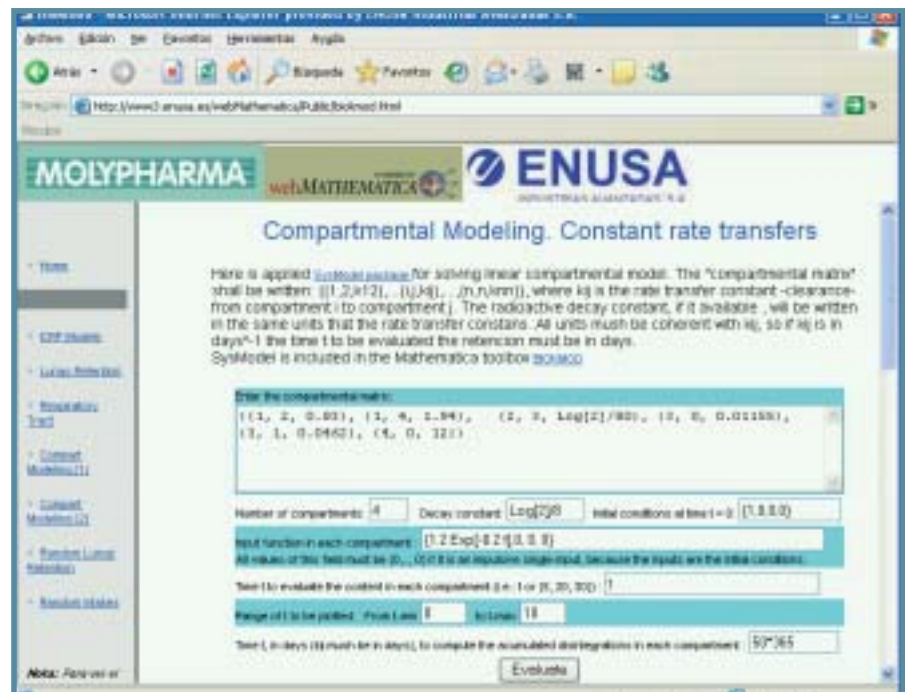


Figura 2: Pantalla de acceso a la opción Compartmental Modeling de BiokmodWeb. El ejemplo incluido corresponde al modelo de yodo-131 (figura 1) cuyo periodo de semidesintegración es 8 días.

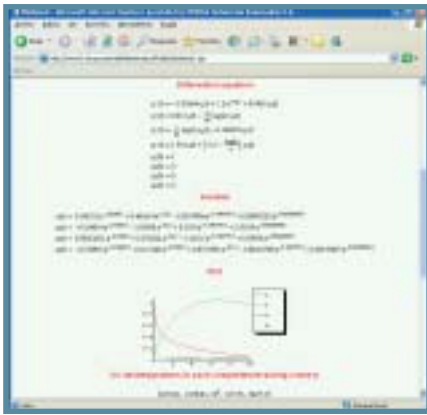


Figura 3: Salida que da el programa al ejemplo introducido en la figura 1.

de forma sencilla, incluso por personas sin gran formación matemática. *BiokmodWeb* es un *interfaz* con *Biokmod* que utiliza *webMathematica* para ejecutar vía web muchas de las funciones incluidas en *Biokmod*.

Con *BiokmodWeb* el usuario puede construir sus propios modelos o puede ejecutar modelos ya incluidos en la aplicación.

Construcción y resolución de un modelo compartimental

El usuario a partir del diagrama de flujo, utilizando una sintaxis bastante sencilla, puede definir el modelo. El programa genera las ecuaciones diferenciales y las resuelve, dando tanto las soluciones analíticas como la representación gráfica. Como ejemplo utilizaremos el modelo biocinético del yodo que se muestra en la figura 1 y que representa esquemáticamente el flujo que sigue el yodo desde que llega a la sangre (por inyección o vía oral) hasta que es eliminado por vía urinaria. El compartimento 1 corresponde a la sangre, el compartimento 2 representa al tiroides y el compartimento 3 al resto del cuerpo. Los coeficientes de transferencia [5] para varones son los siguientes (en día⁻¹): $k_{10}= 1.9404$, $k_{12}= 0.8316$, $k_{23}= 0.0086625$, $k_{30} = 0.01155$ y $k_{31} = 0.0462$.

Supondremos que en el compartimento 1 la cantidad retenida en $t = 0$ es 1, y en el resto es 0, que equivale a tomar como condición inicial {1, 0, 0}. Asimismo consideraremos que la entrada hacia la sangre (compartimento 1) puede ajustarse a una función de la forma $1.2 \text{Exp}[-0.2 t]$ (obsérvese que se emplean corchetes en vez de paréntesis). Introducimos estos datos según la sintaxis antes descrita (figura 2) obteniéndose la salida que se muestra en la figura 3. Se puede observar que el programa genera las ecuaciones diferenciales del modelo, da la solución analítica (retención en cada compartimento), representación gráfica para el periodo elegido y desintegraciones totales en cada compartimento.

El ejemplo descrito corresponde a un modelo donde los coeficientes son constantes. El programa también tiene la posibilidad de usar coeficientes variables en el tiempo, pero en este caso dará una solución numérica.

Modelos de la ICRP

Uno de los usos principales de *Biokmod* es su aplicación para modelizar la incorporación de isótopos radiactivos en personas expuestas a la incorporación de isótopos radiactivos (público en general o trabajadores profesionalmente expuestos). Para ello



Figura 4: Entrada de datos de los modelos de la ICRP. El usuario accederá a varias de las opciones en menús desplegables, optativamente puede introducir valores propios.

se aplican modelos patrón, específicos para cada elemento, definidos por la ICRP [5] (acrónimo en inglés de Comisión Internacional de Protección Radiológica) Para ello previamente hemos desarrollado [6] técnicas matemáticas que permiten resolver analíticamente modelos que implican un gran número de compartimentos.

La pantalla de acceso a *BiokmodWeb* para resolver los modelos de la ICRP se muestra en la figura 4. Los datos que debe introducir el usuario son: *Elemento*, *Vía de incorporación* (inhalación, ingestión o inyección) *Tipo de incorporación* (puntual,



Figura 5: Ejemplo de salida correspondiente a una incorporación aleatoria.

constante, variable en el tiempo, aleatoria), *Presentación de resultados* (Solución analítica, datos numéricos, gráficos), *Cantidad incorporada*, *Tamaño aerodinámico* (si es por inhalación), *Tipo de metabolización* (rápida, media o lenta), constante de desintegración radiactiva. Para una descripción detallada ver la ayuda del programa.

La figura 5 muestra un ejemplo correspondiente a un caso de incorporación aleatoria por inhalación. Esta situación se da cuando un trabajador está expuesto habitualmente a aerosoles radiactivos en un área en la que la concentración ambiental puede ser aproximada a una distribución estadística con parámetros conocidos. El resultado muestra la retención pulmonar esperada, en función del tiempo, con su correspondiente intervalo de confianza.

Como se ha visto, las posibilidades de *webMathematica* son enormes al permitir construir sofisticadas aplicaciones utilizando la potencia de *Mathematica* sin que el usuario tenga que conocer el uso de este programa ni tenga que tener una elevada formación en matemáticas. Además del programa *BiokmodWeb*, pueden verse otras utilidades, también desarrolladas en ENUSA Industrias Avanzadas S.A. usando *webMathematica*, en el enlace: <http://www3.enusa.es/webMathematica/Public/Public-index.html>.

Referencias

- [1] Sánchez G., *Biokmod, A Mathematica toolbox for modeling Biokinetic Systems. Mathematica and Research*, Vol.10 No.2; 2005.
- [2] Anderson, D.H., *Compartmental analysis and tracer kinetics*, Berlin: Springer-Verlag; 1983.
- [3] Godfrey, K., *Compartmental models and their application*, London: Academic Press; 1983.
- [4] Jazquez, J. A. *Compartmental analysis in biology and medicine*, Ann Arbor. The University of Michigan Press, 1985
- [5] International Commission on Radiological Protection. *ICRP Database of Dose Coefficients, Workers and Members of the Public*. Version 2.0.1 (CD-ROM), Oxford: Pergamon Press; (ICRP); 2001.
- [6] Sánchez G, López-Fidalgo J, *Mathematical techniques for solving analytically large compartmental systems*, Health Phys. 85(2):184-193 (2003).

Para más información:

www.forumt.net/09-01
info@forumtecnologico.net
 Telf. 902 43 00 38