

Víctor Rodríguez - Marisa Velasco - Pío García  
Compiladores

# **Epistemología y prácticas científicas**

Rodríguez, Víctor

Epistemología y prácticas científicas / Víctor Rodríguez; Marisa Velasco; Pío García; compilado por Víctor Rodríguez; Marisa Velasco; Pío García; editado por Víctor Rodríguez; Marisa Velasco; Pío García. - 1a ed.-Córdoba: Editorial de la UNC, 2015.

186 p.; 21 x 14 cm.

ISBN 978-987-707-010-1

1. Epistemología. 2. Actividad Científica. I. Rodríguez, Víctor, comp. II. Velasco, Marisa, comp. III. García, Pío, comp. IV. Rodríguez, Víctor, ed. V. Velasco, Marisa, ed. VI. García, Pío, ed.

CDD 121

Fecha de catalogación: Septiembre de 2015

1° Edición

Impreso en Argentina

ISBN: 978-987-707-010-1

Coordinación editorial: Víctor Rodríguez, Marisa Velasco, Pío García

Diseño de interior y tapa: Mariana Biasutti López  
nardoambar@gmail.com

Queda hecho el depósito que marca la ley 11.723

Ninguna parte de esta publicación, incluido el diseño de tapa, puede ser reproducida, almacenada o transmitida por ningún medio, ya sea electrónico, químico, óptico, de grabación o por fotocopia sin autorización previa.

# Simulaciones computacionales y modelos: consideraciones metodológicas\*

P. García

## Introducción

En los últimos años se ha intentado de diferentes formas una caracterización filosóficamente relevante de las simulaciones computacionales. Como una vía para abordar este problema, la literatura filosófica reciente ha destacado el contraste entre las simulaciones y otras prácticas científicas. De esta manera habría una diferencia nítida entre prácticas representacionales vinculadas con la modelización, entre las cuales estarían las simulaciones digitales, y prácticas interventivas vinculadas con sistemas físicos. Si las simulaciones computacionales ocupan un espacio genuino en la actividad científica, entonces estarían más fuertemente emparentadas con la teorización y en un claro contraste con la experimentación.

Aunque se acuerde con las líneas básicas de esta caracterización provisoria, en el presente artículo exploraremos aspectos que indicarían que hay una cierta continuidad o al menos aspectos en común entre simulaciones y prácticas experimentales. Argumentaremos que estos aspectos en común aparecen con mayor claridad a partir del concepto más general de simulación y en tanto se adopta una perspectiva metodológica. En un artículo anterior hemos propuesto una noción de simulación computacional a partir de prácticas experimentales en ciencias de la vida (García, 2015). En el presente trabajo retomaremos esta idea pero destacando su relevancia para una discusión acerca del rol de los modelos en prácticas científicas experimentales. Defenderemos, además, que la relación *in vivo- in vitro*,

---

\* Rodríguez, V. - Velasco, M. - García, P. - (Comps.), 2015, Epistemología y prácticas científicas. ISBN 978-987-707-010-1

central en ciencia de la vida, está vinculada con la manera en la cual los modelos son utilizados como herramienta de simulación en bioquímica. Finalmente sugeriremos que a partir del análisis de estas formas de simulación (experimental) se pueden establecer vínculos significativos con las simulaciones computacionales.

Nuestra propuesta supone reconsiderar la tarea de caracterización de las simulaciones computacionales. Esta tarea parece más fructífera si, en lugar de proponer un contraste de tipo *ontológico* entre aspectos abstractos y representacionales y aspectos concretos e interventivos, se destacan *las formas en las cuales se desarrollan las prácticas simulativas en el contexto experimental*. Con este objetivo en vista organizaremos nuestro trabajo de la siguiente manera: en la primera sección presentaremos algunos puntos centrales de la discusión actual sobre simulaciones computacionales. En la segunda sección explicitaremos aquellos aspectos de las prácticas experimentales que estimamos pueden ser relevantes para nuestro argumento.

### **Acerca de la noción de simulación computacional**

En la literatura filosófica sobre simulaciones computacionales se suele centrar en el análisis de las simulaciones basadas en modelos o en ecuaciones (Winsberg 2013, Humphreys 2004). Estas simulaciones suelen ser descritas simplemente como “un programa que se ejecuta en una computadora y que usa métodos paso a paso para explorar la conducta aproximada del modelo matemático” (Winsberg 2013). En campos como la bioquímica, este tipo de simulación suele ser utilizado para estudiar e investigar aspectos dinámicos de un sistema dado, típicamente a través de un modelo matemático implementado en un sistema digital. Por ejemplo, programas como el METAMOD, *Compasi* o *Scamp* han sido implementados para estudiar la dinámica de las reacciones metabólicas.

Una forma alternativa de caracterizar a las simulaciones consiste en establecer un contraste con las prácticas experimentales. Esta perspectiva aparece de manera insistente en publicaciones recientes; posiblemente por lo que sugiere la expresión “experimento numérico”

- referido a las simulaciones- pero también como una manera de poner en cuestión el lugar de este tipo de práctica, relativamente nueva, en el ámbito de categorías tradicionales de la filosofía de la ciencia. En esta línea se ha dicho que las simulaciones “están en algún lugar intermedio entre la ciencia (física) teórica tradicional y sus métodos empíricos de observación y experimentación” (Rohrlich 1991).

Además, esta manera de caracterizar a las simulaciones suele adoptar supuestos ontológicos fuertes y asume el esquema típico de sistema estudiado y “sistema referencia” (*target system*). La cuestión de la validez se entiende en términos de la relación entre un sistema (experimento o simulación) y el “sistema referencia”. Francesco Guala ha sugerido, por ejemplo, que la diferencia entre un experimento y una simulación estaría en el tipo de justificación de las inferencias que relacionan el sistema estudiado con el “sistema referencia” (Guala 2002). En el caso de un experimento, si en el sistema estudiado y en el “sistema referencia” están operando las mismas causas, entonces las inferencias que vinculan ambos sistemas estarían “fuertemente justificadas”. Por el contrario, entre una simulación computacional y un sistema simulado (“sistema referencia”) sólo habría una correspondencia abstracta y formal. Gilbert y Troitzsch (1998) también parecen suponer que las diferencias entre una simulación y un experimento estarían representadas por el tipo de relación que dichos sistemas establecen con sus “sistemas referenciados”. En el caso de un experimento aquello que se manipula es un “objeto real”, mientras que en una simulación aquello que se estudia o manipula es un modelo (Gilbert y Troitzsch p. 14). De manera implícita se está estableciendo una caracterización en términos de la cercanía ontológica con el fenómeno estudiado.

Este punto de vista ontológico también está presente en propuestas como la de Wendy Parker. En Parker (2009) se sugiere que la relación que debería considerarse entre un sistema y su “sistema referencia” es el de “similaridad relevante”. Un experimento es caracterizado como “una actividad de investigación en la cual se interviene en un sistema para ver cómo las propiedades que nos interesan cambian a partir de dicha intervención” (Parker 2009, p. 487).

Parece que, en principio, lo que distingue a una simulación de un experimento es la intervención. Y en esta perspectiva, sólo en un sistema “material”, se pueden realizar actividades interventivas. Este punto de vista aparece más claro cuando Parker presenta la idea de un “estudio de simulación computacional”. Cuando consideramos a un sistema computacional como un sistema físico -un programa computacional implementado en una máquina física-, entonces somos capaces de identificar actividades interventivas genuinas.

Esta perspectiva centrada en la “materialidad” de los experimentos ha sido matizada de diferentes maneras. Mary Morgan (2003; 2005) argumenta en favor de este punto de vista pero enfatizando los aspectos inferenciales involucrados. Parece indudable que los experimentos y las simulaciones tienen “poderes epistémicos” diferentes. Y esta diferencia se podría explicar, nuevamente, porque, en el caso de los experimentos, el sistema manipulado y el “sistema referencia” están hechos de la “misma cosa” (*same stuff*). Además, las simulaciones, dependiendo por completo de sus modelos, no pueden “sorprender” de manera genuina a los científicos. La diferencia ontológica entre simulaciones y experimentos genera una diferencia epistémica. Hay un sentido en el cual las simulaciones pueden ser experimentos, pero de una clase particular: “no materiales”. Por tanto, a pesar del cambio terminológico, no habría ninguna modificación en un sentido ontológico- y por ende tampoco habría una modificación en la consideración del alcance epistémico de las prácticas simulativas y experimentales. En contraste con estas perspectivas, hay algunos filósofos que han destacado aspectos metodológicos o funcionales en la relación entre experimentos y simulaciones. En este sentido, Eric Winsberg sugiere que la distinción entre simulaciones y experimentos se debería realizar en términos del tipo de inferencia que surge del conocimiento básico supuesto (*background knowledge*). En el caso de las simulaciones, este conocimiento básico es el que nos permite construir modelos matemáticos y computacionales. Y la confiabilidad del modelo descansa en la confiabilidad del conocimiento básico supuesto. Asimismo, Margaret Morrison ha destacado la dimensión funcional en la relación entre simulaciones y experimentos. En Morrison (2009), se

defiende que, por la manera en la cual se construyen los modelos, habría semejanzas funcionales entre simulaciones e instrumentos de medida. En este sentido, se podría hablar de simulaciones que funcionan como instrumentos experimentales de medición.

También se presenta la relación entre simulación y experimento en términos de sustitución. Cuando no es posible hacer un experimento, por razones prácticas o éticas, entonces como una alternativa se implementa una simulación. Así, en algunos campos científicos una simulación puede cumplir las funciones de *y*, en este sentido, ser considerada como si fuese un experimento porque permite investigar un fenómeno no accesible a la experimentación. Una distinción que se discute en este contexto es entre los conceptos de representación y ser representativo. De esta manera se pretende dar cuenta de dos maneras en las cuales un sistema puede 'suplir a' o 'estar en lugar de' otro. En este contexto se entiende que una relación de representación descansa en una vinculación formal, mientras que una relación representativa sería una forma de suplir que es similar a la forma en la cual "una parte puede estar por el todo". Por esta razón se habla de "ser parte de lo mismo" (Peschard 2009), donde lo mismo parece entenderse como la misma clase de cosa o materia (*being of the same stuff*) (Peschard 2009). En términos más puntuales se podría reseñar las relaciones entre experimentos y simulaciones computacionales de la siguiente manera. En primer lugar, como ya hemos visto, se estima que la forma de entender el problema es analizando tanto las simulaciones como los experimentos en relación con el "sistema referencia" (*target*). En segundo lugar hay un conjunto de "intuiciones básicas" que funcionan como punto de partida y guías para la indagación. Siguiendo a Peschard, se podría decir que en un experimento, se interactúa de alguna forma con el sistema bajo estudio y se le "da la oportunidad (al sistema) de expresarse por medio de los efectos causales de los instrumentos" (Peschard 2009). Por contraste, si en una simulación se puede hablar de algún tipo de "expresión", sería únicamente la del modelo utilizado. De aquí que "la distinción epistémica sea clara: la experimentación produce información acerca de cómo se comporta el sistema, mientras que la simulación produce

información acerca del modelo” (Peschard 2009). La conclusión es muy similar a la ya citada de Morgan. Además, la discusión acerca de la sustitución vuelve sobre las distinciones ontológicas como una forma de justificar las diferencias de “poder epistémico” entre simulaciones y experimentos.

Si bien en la literatura filosófica que compara experimentos con simulaciones se discuten aspectos inferenciales, metodológicos y funcionales, son los aspectos ontológicos los que juegan un papel central para evaluar el valor epistémico de estas prácticas. Además, la oposición entre simulaciones y experimentos parece centrarse en la relación entre modelos y sistema físico sobre el que se interviene. En el presente trabajo sugerimos un cambio de perspectiva, destacando más bien alguno aspectos metodológicos de la relación entre simulaciones y experimentos, a la vez que presentaremos la relación entre modelos y “sistema de referenciado” de una manera diferente. Este cambio de perspectiva permite poner en primer plano las funciones epistémicas de las simulaciones en su relación con los experimentos. Además, la *oposición* entre simulaciones y experimentos parece centrarse en la relación entre modelos y sistema -físico- sobre el que se interviene. Sin embargo, se podría cuestionar algunos de los términos en los cuales parte de la literatura filosófica realiza esta oposición a partir de la consideración de contextos experimentales pertinentes.

### **Contextos experimentales y simulaciones: *in vivo* - *in vitro***

En el campo de las ciencias de la vida las expresiones *in vivo*- *in vitro* son habituales para hacer referencia a contextos experimentales diversos. En la presente sección argumentaremos que las condiciones metodológicas sugeridas por estas expresiones son relevantes para los objetivos de este trabajo. En particular sugeriremos que la relación *in vivo* - *in vitro* puede ser vista como un tipo de simulación.

Como decíamos más arriba, las situaciones y contextos en donde son utilizadas las condiciones *in vivo* son de naturaleza muy variada: incluye estudios en tejidos, en órganos aislados (llamados a veces *ex vivo*) e incluso en los llamados “modelos animales”. Por contraste se



realizan estudios *in vitro* cuando se requiere un mayor control sobre condiciones experimentales específicas.

Revisemos en primer lugar algunos de los aspectos conceptuales involucrados en los estudios *in vitro*. Roger Strand, caracteriza, en un artículo acerca de la confiabilidad de los experimentos en bioquímica, lo que él llama “estudios de efectos *in vitro*” (Strand 1999). Con esta expresión Strand quiere remarcar que en este tipo de estudio se asume que el fenómeno estudiado se configura a partir de “un cambio o diferencia en un aspecto biológico o parámetro a partir de una perturbación del sistema *in vitro* o del sistema *in vitro* comparado con un sistema de control que no esté sujeto a la perturbación del diseño experimental (Strand 1999). La intención primordial de esta clase de estudio es obtener conocimiento de un fenómeno biológico en un organismo o sistemas de organismos (de un sistema *in vivo*). Asimismo, esta clase de estudio se suele realizar porque resulta metodológicamente imposible, no conveniente o éticamente cuestionable estudiar el fenómeno de interés de manera directa (el sistema *in vivo*). Por esta razón un sistema experimental sustituto *-in vitro-* se construye a partir de una o más partes de un sistema *in vivo*. En este sentido, se puede inferir algún conocimiento acerca del sistema *in vivo* interpretando la evidencia experimental de un sistema sustituto análogo (*putative analog*), esto es de un fenómeno o sistema *in vitro*. Evidentemente, el sistema *in vitro* tiene que ser diferente de aquél que se quiere estudiar para evitar o paliar las dificultades originales, típicamente de carácter metodológico<sup>1</sup>. Suele ocurrir que el diseño de un sistema *in vitro* involucra un tipo de “ruptura en un sentido físico” (*physical disruption*) (Strand 1999) del sistema *in vivo* e involucra a su vez un subsiguiente proceso que permita aislar una o más de sus partes con la intención de lograr acceso experimental a una característica o parámetro, o para reducir la complejidad de interacciones con el fenómeno interferido.

---

<sup>1</sup> Aunque, como ya hemos señalado, puede haber restricciones de otra naturaleza que motiven la construcción de sistemas *in vitro*, como aquellas de orden económico o ético.

A los fines de lograr una interpretación adecuada de los resultados, los investigadores, continúa Strand, suponen, por lo menos, que las condiciones seleccionadas son relevantes y que “imitan” de manera no trivial el sistema *in vivo*. Desde esta perspectiva se puede hablar, al menos en un primer momento, de simulaciones en contextos experimentales. Si este uso es adecuado, entonces, se podría decir que hay formas de simulación que han estado presentes en el campo de las ciencias de la vida mucho antes de la llegada de las computadoras.

Sin embargo, estas consideraciones generales no parecen suficientes para sostener un uso no trivial de la noción de simulación en contextos experimentales. Para hacer plausible esta sugerencia habría que decir algo acerca de la forma en la cual se constituye la relación de simulación en contextos experimentales en ciencias de la vida. Este punto de vista metodológico es el que haría plausible, en nuestra opinión, el uso no trivial de una noción de simulación en contextos experimentales.

En principio, podría verse esta relación de simulación en términos de una distinción entre condiciones naturales y artificiales. Así, habría una línea divisoria clara y fija entre la simulación y aquello que es simulado, esto es, entre lo natural y lo artificial. Sin embargo, una perspectiva metodológica parece más adecuada para caracterizar la relación de simulación. En el ejemplo que hemos tomado, el problema se transforma en dar cuenta del tipo de relación que se establece entre condiciones *in vitro* y condiciones *in vivo*.

Consideremos como ejemplo algunos aspectos vinculados con las investigaciones acerca del desarrollo de productos farmacéuticos. Para el desarrollo de un medicamento se debe tomar en consideración cuestiones como la toxicidad y las fallas en el mecanismo central de la droga. Uno de las formas que adquiere esta investigación es indagar en las variaciones de condiciones que permitan anticipar lo que podría ocurrir cuando el paciente consume la droga.

Las condiciones *in vivo* pueden modificar el mecanismo de acción de la droga o su grado de toxicidad – entre otros escenarios posibles-. En un área particular de estos estudios, las mencionadas modificaciones pueden deberse a cuestiones como una “inapropiada

absorción, distribución, metabolismo o excreción” (llamadas “propiedades” ADME) (Williams et al. 2012). De esta manera:

“Las fallas de los nuevos medicamentos, debido a las propiedades ADME a menudo resultan debido a que la exposición en los seres humanos es menor de lo deseado o de lo necesario, obligando a que la dosis sea mayor que la posible o que la frecuencia de administración sea tan alta que resulte poco razonable” (Williams et al 2012, p. 291).

Esta situación motiva la realización de estudios *in vitro* porque

“La disolución de drogas es casi imposible de estudiar en el medio que se supone que debe ocurrir, esto es, el tracto gastrointestinal humano. Por esta razón como un sustituto, se requiere la puesta a prueba de la disolución *in vitro* para asegurarse que, en cada partida de la droga formulada, esta se disuelve a una tasa constante” (Johnson 2007, p. 2)

En esta cita aparece la idea de sustitución de un sistema por otro en razón de las dificultades que implicaría estudiar el sistema original. Esta descripción se corresponde de manera directa con el contexto experimental, pero podría ser utilizada, casi sin modificaciones, para caracterizar una simulación - entendida como un sustituto o estar en lugar de -. Es en este sentido que se podría hablar de un primer sentido de simulación en contextos experimentales<sup>2</sup>.

Una forma de ver esta relación de simulación en contextos experimentales es a través de la vinculación entre modelos. En la colección de artículos recién citada se pretende mostrar cómo modelar el proceso de una propiedad particular (la disolución) en el contexto apropiado, con el objetivo de obtener indicios acerca de los factores que pueden ser relevantes para controlar la tasa de disolución. Dicha modelización permitiría, entre otras cosas, predecir una correlación entre la disolución *in vitro* y el perfil de tiempo *in vivo* de la droga en la sangre (Apparajuet al 2007). La correlación entre condiciones *in vitro* y condiciones *in vivo* en el caso del desarrollo de drogas es definida

---

<sup>2</sup> En García (2015) defendemos que esta noción de simulación puede caracterizarse además a partir de aspectos disruptivos e imitativos.

“como un modelo (matemático) que describe la relación entre una propiedad de un dosaje (usualmente la propiedad de interés es tasa de disolución) y una respuesta *in vivo* relevante (v.gr. Cantidad de droga absorbida o concentración plasmática de la droga) (Food and Drug Administration 1997, p. 6)

La FDA define cinco niveles de correlación entre estas condiciones dependiendo de la combinación de propiedades ADME involucradas. En este ejemplo la relación entre condiciones *in vivo* e *in vitro* es caracterizada por medio de un “modelo de correlación” que permite estimar la confiabilidad de la dicha relación.

Ahora bien, como decíamos arriba, tanto por el esquema utilizado como por las funciones señaladas por Strand para describir la relación *in vitro*- *in vivo*, parece que es posible ver dicha relación en términos experimentales, pero también como una simulación. Y esta adscripción estaría de acuerdo con un uso terminológico extendido en el campo de la bioquímica. Así, en algunas ocasiones se habla de 'simulación' cuando se quiere hacer referencia al tipo de relación entre condiciones *in vitro* -*in vivo* (Wilke 1994).

Este sentido más general de simulación también serviría para comprender las simulaciones computacionales en ciencias de la vida. Este punto de vista alternativo en el cual el concepto mismo de “simulación” - en un sentido general - sirve para comprender a la noción de simulación computacional, ha sido considerado por algunos filósofos:

“Una simulación consiste en cualquier sistema que se cree o espera que tenga una dinámica suficientemente similar a otro sistema tal que el primero puede ser estudiado para aprender acerca del segundo.”  
(Winsberg 2013)

También en este lugar podría ubicarse la sugerencia de Hartmann cuando presenta a las simulaciones como un proceso que tiene una relación de imitación con otro proceso. Aquí un proceso es sólo “una secuencia temporal de estados de un sistema” (Hartmann 1996).

Este punto de vista general puede ser desarrollado a partir del contexto científico particular que estamos considerando. Un estudio de

simulación puede ser caracterizado como aquellos recursos metodológicos que permiten aprender de la dinámica de un sistema a partir de su comparación con la dinámica de otro sistema. Es más, el alcance y confiabilidad de la relación mimética depende también de los mencionados recursos metodológicos.

Si una simulación se caracterizara por su pretensión mimética, un experimento podría ser caracterizado, siguiendo posiciones ya clásicas en filosofía de la ciencia, por sus aspectos interventivos. Sin embargo, habría experimentos en donde los aspectos simulativos tienen un papel central. Tal es caso de algunos contextos experimentales particulares en ciencias de la vida. Los estudios *in vitro* califican como experimentos en el sentido de realizarse en sistemas físicos y de involucrar aspectos interventivos. Pero también pueden ser considerados como simulaciones en tanto, estando en lugar de otro sistema, cumplen la función de permitir el estudio de dicho sistema imitando su dinámica. De esta manera podríamos tener, además de las simulaciones computacionales, las simulaciones experimentales (sistemas *in vitro*). Un aspecto que queremos destacar es que ambos tipos de simulación (la computacional y la *in vitro*) funcionan como un sustituto controlable de un sistema *in vivo* y suelen tener como finalidad estudiar aspectos dinámicos de dichos sistemas biológicos (sistemas *in vivo*).

Ahora bien, como dijimos más arriba, el que un sistema *in vitro* sea una simulación parece depender de la manera en la cual cumple la función de permitir estudiar un sistema imitando la dinámica de otro que sea más accesible o controlable. Pero, como parece seguirse de esta manera de presentar el problema, esta distinción entre simulación (estudio *in vitro*) y aquello que es simulado (sistema *in vivo*) no es fija. En particular la adopción de una perspectiva metodológica- y hasta cierto punto, histórica- permite presentar más claramente este aspecto. En un artículo reciente, Winsberg nos invita a imaginar dos científicos que pretenden investigar aspectos del comportamiento de fluidos, pero mientras uno de ellos utiliza un tanque de agua, el otro utiliza una computadora (Winsberg 2009). En principio las diferencias entre ambas estrategias podrían resumirse de la siguiente manera: mientras en el primer caso un científico “genera conocimiento empírico nuevo acerca

de los fluidos a través de la manipulación de un fluido real”, el otro científico “sólo explora las consecuencias” del conocimiento existente (representado por el modelo). Así, habría una diferencia significativa entre manipular un objeto (real) de interés y manipular – si hay algo como esto – un modelo de dicho objeto.” (Winsberg 2009).

Pero, continúa Winsberg, es habitual que en los experimentos no se manipule el objeto de interés sino otro que puede ser “relevante”. En el caso del científico que manipula un tanque de agua lo hace para comprender el “objeto de interés” o el sistema que se quiere estudiar (“sistema referenciado”). En este sentido, podemos considerar a las condiciones *in vitro* como una simulación – experimental – de las condiciones *in vivo*. Pero podríamos avanzar en esta dirección aún más.

Hasta aquí se está suponiendo que la modelización del fenómeno a estudiar se corresponde con el sistema computacional o el sistema *in vitro*. Sin embargo, este no es siempre el caso. En diversas áreas es muy común el uso de modelos denominados *in vivo*. Podemos encontrar varios ejemplos en los manuales de protocolos de investigación sobre nuevas drogas. En un artículo reciente al preguntarse por qué se necesitan “modelos *in vivo*” de procesos tumorales, se indica que no es evidente cuál podría ser el contexto relevante para determinar el alcance de una droga determinada (Eccles 2001). En general estos modelos *in vivo* suelen hacer referencia a modelos animales. Con “modelo animal” se quiere señalar no sólo que se usan animales para experimentar sino que se encuentran aquí distintos niveles de intervención: desde intervención en el proceso que se quiere estudiar hasta la modificación genética de los especímenes para hacer el modelo más “semejante” al sistema a estudiar, tales como los ratones NSG (llamados también “modelos de ratones humanizados”).

Sugeríamos más arriba que este aspecto “móvil” de la relación de simulación puede acentuarse destacando los aspectos metodológicos desde una perspectiva temporal. En efecto, a medida que se va ganando comprensión y control sobre mecanismos biológicos es posible, al menos en algunos casos, sustituir estudios que se realizaban con modelos animales por estudios más acotados en tejidos. Así no parece del todo apropiado el análisis que citábamos más arriba de

Strand, quien supone que con la expresión *in vitro* que hay una “condición artificial” en comparación con el sistema que se quiere estudiar. Siguiendo el esquema que presentábamos antes, el sistema a estudiar son justamente las condiciones *in vivo*. Y este suele ser el caso en algunas circunstancias. Pero típicamente la situación es otra. Lo que suele ocurrir es que ambas condiciones, *in vitro* - *in vivo*, son consideradas como artificiales, en relación con aquello que se quiere estudiar. Entonces, más que acentuar el carácter intrínseco de las nociones de *in vitro* o *in vivo* lo que parece relevante es el tipo de relación que se establece con el sistema a estudiar o, podríamos decir, con la forma en la cual se simula el sistema a estudiar. Este tipo de relación sería una forma de estar en lugar de otro sistema. Y esta forma de estar por otro se caracterizaría principalmente en términos metodológicos. Es la manera particular en la cual la simulación aísla y controla la que permite su vinculación significativa con algún aspecto del sistema que se quiere estudiar.

### Consideraciones finales

Comenzamos este trabajo haciendo referencia a aquellas perspectivas que pretenden comprender las simulaciones computacionales a partir de una distinción nítida con los experimentos. Nuestro objetivo en este trabajo ha sido destacar una noción de simulación a partir de algunas prácticas experimentales. Se podría objetar esta propuesta señalando que, a partir de la descripción realizada, hay muchos aspectos de la noción de simulación que se podrían adscribir a los experimentos. Y por tanto no habría aquí, fuera de los aspectos interventivos, una distinción clara. Sin embargo, nuestro interés aquí no es disolver los límites entre simulaciones computacionales y experimentos, sino más bien presentar una caracterización de simulación que sea útil no sólo para ámbitos experimentales sino también para nuestras herramientas digitales. Habría una segunda objeción vinculada con la anterior: parece que, finalmente, el contraste central se daría entre los *aspectos computacionales* y los *aspectos experimentales*, más que en la noción de simulación. En realidad esta

objeción debería circunscribirse a los aspectos *digitales* porque hacia mediados del siglo pasado se utilizaban, en el campo de la bioquímica, simulaciones analógicas (de tipo mecánicas) con fines computacionales<sup>3</sup>.

Pero incluso en esta última versión más refinada podrían indicarse continuidades metodológicas interesantes. En primer lugar, al principio de este trabajo, citábamos simulaciones computacionales cuyo funcionamiento podría interpretarse como asistentes para la construcción y puesta a prueba de modelos. Como hemos sugerido en otros trabajos, aspectos metodológicos de la distinción *in vivo in vitro*, suelen estar operantes en la construcción de los modelos computacionales, por ejemplo en los supuestos de la relevancia de los aspectos globales o sistémicos de las modelizaciones que utilizan Análisis de Control Metabólico. Estos supuestos son interpretados por Pedro Mendes (bioquímico y programador del *Compasi*) como un indicio de la importancia de las condiciones *in vivo*). Además, se podría establecer una continuidad entre simulaciones computacionales y condiciones experimentales señalando las similitudes entre las *funciones* de ambas prácticas. De esta manera, siguiendo a Winsberg, la noción de simulación computacional puede ser ampliable a los fines de incluir consideraciones acerca de la elección, construcción e implementación del modelo y del programa. Inclusive se podrían incorporar aquí las inferencias referidas a la interpretación de los datos y la consideración de su tipo de representación. Así, la noción de simulación computacional haría referencia ahora al *proceso completo que permite comprender y estudiar un sistema* (Winsberg 2013). En principio esta perspectiva parece más adecuada porque programas como los citados pueden ser considerados como un asistente en la tarea de *construcción y puesta a prueba de modelos*, puesto que a través de ellos se trasladan fórmulas químicas a una forma matemática implementable para realizar luego una aproximación.

---

<sup>3</sup> En otro trabajo presentamos algunas de las implicaciones de la noción de simulación asociadas con las computadoras analógicas en el campo de la bioquímica (García 2015).



De todas formas, nuestro interés en este trabajo ha estado centrado en defender algún sentido de simulación en contextos experimentales en ciencias de la vida. Para esto hemos destacado la importancia de adoptar una perspectiva metodológica. En este sentido las relaciones *in vivo*- *in vitro* permiten entender la relación entre tipos particulares de modelos como una simulación. Lo relevante en esta relación parece estar en la forma en la cual un sistema puede sustituir a otro. Dicha sustitución se comprende en términos metodológicos, en tanto se pueden obtener resultados confiables a partir de la manipulación del sistema que simula. Probablemente esta noción de simulación en contextos experimentales como sustitución pueda ser útil para comprender las simulaciones computacionales.

## Bibliografía

- Apparaju, S. K. & Nallani, S. C. (2007) Pharmacokinetics: Basics of Drug Absorption from a Biopharmaceutical Perspective *Drugs and the Pharmaceutical Sciences, Informa Healthcare, 29-46*
- Brooks, S. A., & Schumacher, U. (Eds.) (2001) *Metastasis research protocols* (Vol. 58) Humana Press.
- Eccles, S. A. (2001) Basic principles for the study of metastasis using animal models. In *Metastasis Research Protocols*, 161-171. Humana Press.
- Food and Drug Administration. (1997) Guidance for industry: extended release oral dosage forms: development, evaluation, and application of *in vitro*/*in vivo* correlations. Rockville, MD: Food and Drug Administration.
- García, P. (2015) "Computer simulations and experiments: *in vivo*-*in vitro* conditions in biochemistry." *Foundations of Chemistry: Volume 17, Issue 1*, 49-65
- Gilbert, G. N., & Troitzsch, K. G. (1999) *Simulation for the social scientist*. Maidenhead, England; New York, NY: Open University Press.

- Guala, F. (2002) Models, simulations, and experiments. *Model-based reasoning: Science, technology, values*, 59-74.
- Hartmann, S. (1996) The world as a process: Simulations in the natural and social sciences. *Modelling and simulation in the social sciences from the philosophy of science point of view*, 77-100.
- Humphreys, P. (2004) *Extending ourselves: Computational science, empiricism, and scientific method*, New York: Oxford University Press.
- Johnson, K. C. (2007) Dissolution: fundamentals of in vitro release and the biopharmaceutics classification system. *Pharmaceutical Product Development: In Vitro-In Vivo Correlation*. February, 1-28
- Morgan, M. S. (2005) Experiments versus models: New phenomena, inference and surprise. *Journal of Economic Methodology*, 12(2), 317-329
- (2003) Experiments without material intervention: model experiments, virtual experiments and virtually experiments. In H. Radder (Ed.), *The philosophy of scientific experimentation*. University of Pittsburgh Press.
- Morrison, M. (2009) Models, measurement and computer simulation: the changing face of experimentation. *Philosophical Studies*, 143(1), 33-57.
- Parker, W. (2009) Does matter really matter? Computer simulations, experiments, and materiality. *Synthese*, 169(3), 483-496
- Peschard, I. (2009) Modeling and Experimenting. Retrieved from <http://philsci-archive.pitt.edu/5111/>
- Rohrlich, F. (1991) Computer simulation in the physical sciences. In *PSA: Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association*, 507-518. Philosophy of Science Association.
- Strand, R. (1999) Towards a useful philosophy of biochemistry: sketches and examples. *Foundations of chemistry*, 1(3), 269-292.

- Wilke, H. J., Claes, L., Schmitt, H., & Wolf, S. (1994) A universal spine tester for in vitro experiments with muscle force simulation. *European Spine Journal*, 3(2), 91-97.
- Williams, J. A., Koup, J. R., Lalonde, R., & Christ, D. D. (Eds.) (2012) *Predictive Approaches in Drug Discovery and Development: Biomarkers and in Vitro/in Vivo Correlations* (Vol. 11) John Wiley & Sons.
- Winsberg, E. (2009) A tale of two methods. *Synthese*, 169(3), 575–592.
- (2013)"Computer Simulations in Science", *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, Edward N. Zalta (ed.), forthcoming  
URL =  
<<http://plato.stanford.edu/archives/sum2015/entries/simulations-science/>>.