



MODELADO Y SIMULACIÓN

APLICACIONES

1. Dinámica de una neurona
2. Órbitas planetarias
3. Iluminación en gráficos digitales

1. Canales iónicos en neuronas

- ❖ Los **canales iónicos** son proteínas transmembrana que contienen poros acuosos que cuando se abren permiten el paso selectivo de iones específicos a través de las membranas celulares.
- ❖ Estos canales actúan como compuertas que se abren o se cierran en función de los estímulos externos, aunque algunas sustancias tóxicas pueden desactivar su función natural.
- ❖ En los mamíferos, los canales iónicos determinan importantes procesos como: la excitación del nervio y del músculo, la secreción de hormonas y neurotransmisores, la transducción sensorial, el control del equilibrio hídrico y electrolítico, la regulación de la presión sanguínea, la proliferación celular y los procesos de aprendizaje y memoria.

Canales iónicos: tipos

Mecanismos para la apertura o cierre de los canales iónicos (*gating*)

- Canales regulados por voltaje
 - Canales de sodio (Na^+)
 - Canales de potasio (K^+)
 - Canales de calcio (Ca^{2+})
 - Canales de cloro (Cl^-)
- Canales regulados por ligandos
- Canales mecanosensibles

- Los canales iónicos regulados por voltaje se abren en respuesta a cambios en el *potencial eléctrico* a través de la membrana plasmática. Su principal función es la *transmisión de impulsos eléctricos* (generación del potencial de acción) debido a cambios en la diferencia de cargas eléctricas en ambos lados de la membrana.

- ❖ Algunos de estos canales tienen un estado refractario conocido como *inactivación* cuyo mecanismo está dado por una subunidad independiente de aquellas responsables de la apertura y cierre.

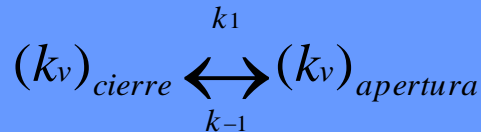
Modelo de canales regulados por voltaje

$$V = IR \quad I = \frac{1}{R}V = gV = g_{\max} * P_o * V$$

Canal del potasio (K_v) 2 configuraciones: *abierto o cerrado*

$$I_K = \bar{g}_K * n * V$$

y



donde \hat{g}_k es la máxima conductancia en el canal K_v
y n es la probabilidad de que el canal esté en configuración *abierto*
 k_1 y k_{-1} son dependientes del voltaje.

El cambio en la probabilidad de que un canal esté abierto (cinética) se puede expresar

$$\frac{dn}{dt} = (1 - n)k_1 - nk_{-1} = k_1 - (k_1 + k_{-1})n$$

Modelo de canales regulados por voltaje (2)

Canal del sodio (Na_v) 3 configuraciones: *abierto, cerrado o indiferente*

Podemos asumir que estas dos reacciones reversibles gobiernan el comportamiento del canal



Si m es la probabilidad de que el canal este *abierto* habiendo estado antes *cerrado* y h es la probabilidad de que el canal este *abierto* habiendo estado antes *inactivo*

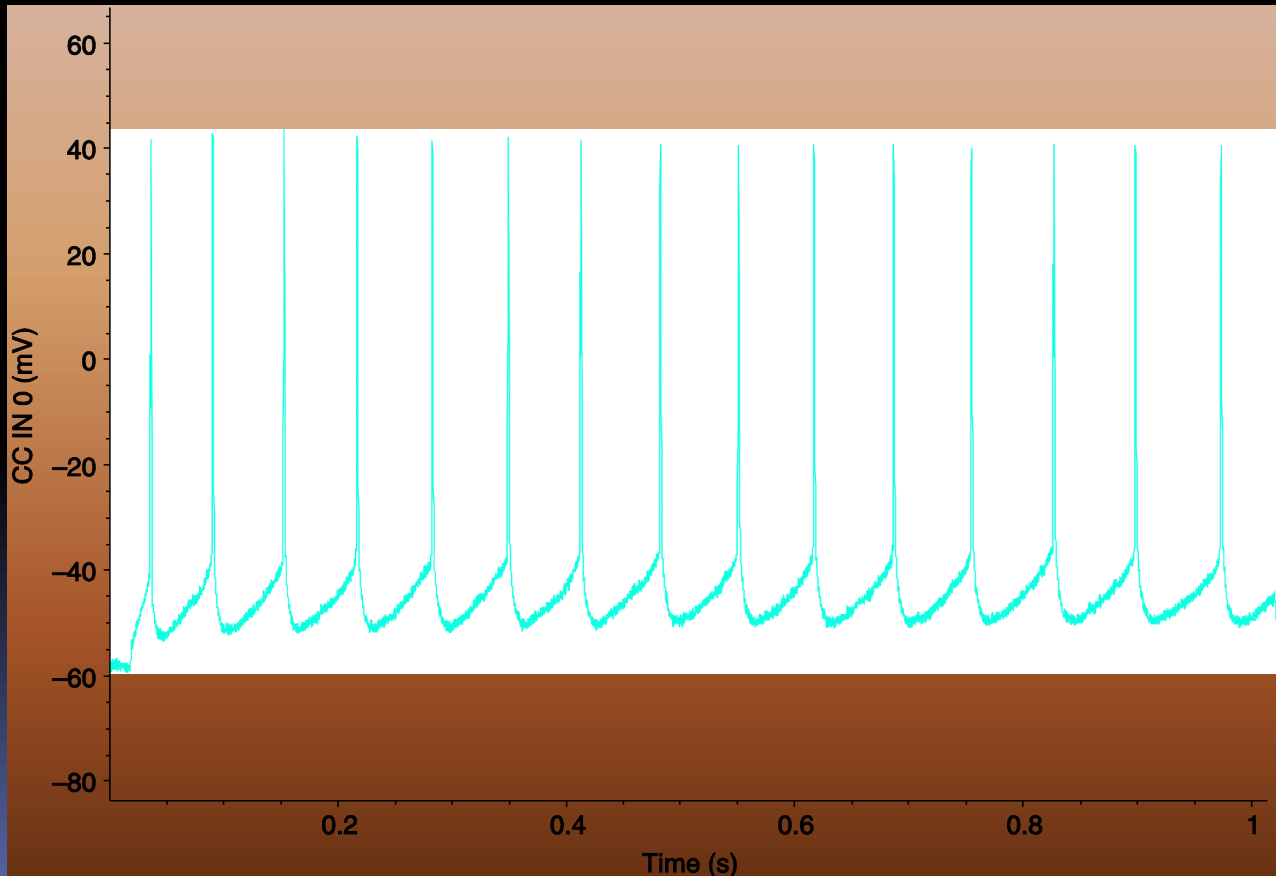
$$I_{Na} = g_{Na} * m * h * V$$

y así, las variaciones temporales de las probabilidades

$$\frac{dm}{dt} = (1-m)k_1 - mk_{-1} = k_1 - (k_1 + k_{-1})m \quad \text{y} \quad \frac{dh}{dt} = (1-h)k_1 - hk_{-1} = k_1 - (k_1 + k_{-1})h$$

Dinámica de una neurona

- ❖ Las neuronas se comunican entre ellas transmitiendo y recibiendo señales electroquímicas llamadas *potenciales de acción*.
- En el sistema nervioso central estas variaciones de potencial son del orden de milisegundos.



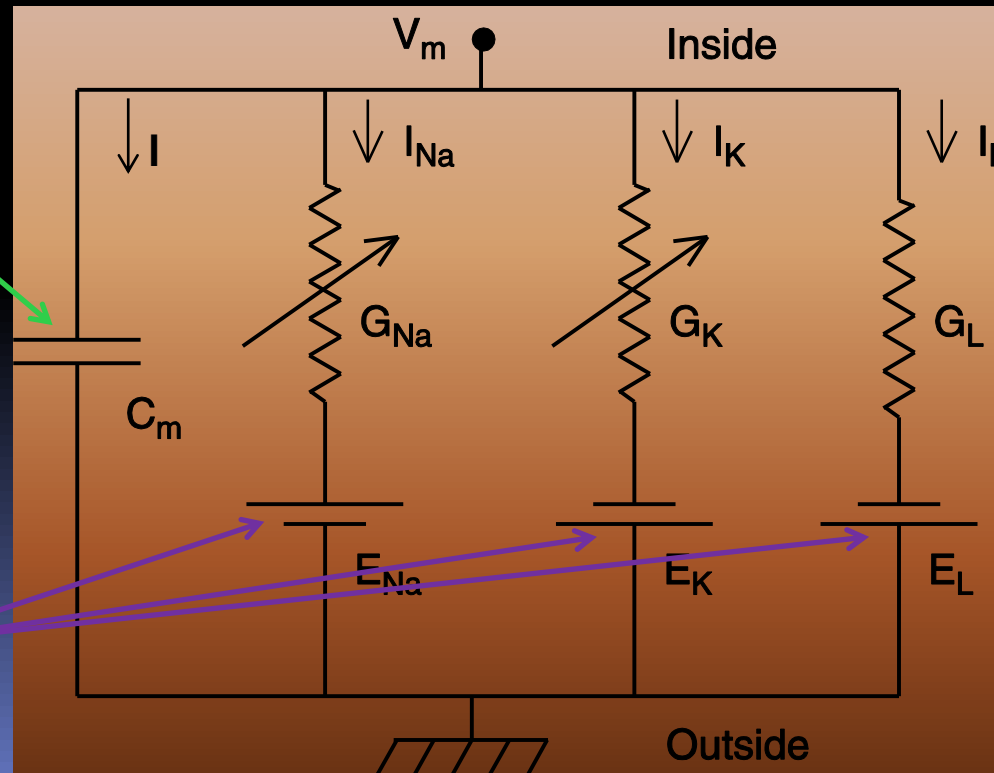
Intracellular action potential spike train from a deep pyramidal neuron recorded from the frontal cortex of a mouse. (Courtesy of Amber Martell)

Modelo de Hodgkin-Huxley

- Las neuronas son células eucariotas y como tales muy complejas. Pretendemos modelar únicamente la generación de los potenciales de acción. En general no está claro que elementos de un sistema biológico complejo están directamente relacionados con un comportamiento determinado.
- En este modelo se asume que la generación de los potenciales está determinada por las propiedades eléctricas de la membrana de la célula.

Los fosfolípidos de la membrana actúan como un aislante

También hay otras proteínas que ayudan a mantener la concentración de iones en la célula



An electrical circuit diagram of a single axonal compartment of a neuron. (Bower JM, Beeman D. *The Book of Genesis: Exploring Realistic Neural Models with the GENeral NEural Simulation System*, 2003)

- Para expresar el circuito como un conjunto de ecuaciones, necesitamos utilizar la ley de Ohm, los lemas de Kirchhoff y la definición de capacidad eléctrica

la ddp entre las armaduras del condensador coincide con el potencial de la membrana

$$V_M = \frac{1}{C_M} \int I(t) dt \quad I = C_M \frac{dV_M}{dt}$$

$$V_M = V_R + E_{Na} \Rightarrow V_R = V_M - E_{Na}$$

$$I_{Na} = g_{Na} * (V_M - E_{Na})$$

$$I_K = g_K * (V_M - E_K)$$

$$I_L = g_L * (V_M - E_L)$$

y por la regla de Kirchhoff de la corriente

$$I_{inj} = I + I_{Na} + I_K + I_L \quad (1)$$

Sustituyendo los valores de las corrientes en la ecuación (1) y reordenándola, obtenemos (2)

$$C_V \frac{dV_M}{dt} = -g_{Na} * (V_M - E_{Na}) - g_K * (V_M - E_K) - g_L * (V_M - E_L) + I_{inj} \quad (2)$$

como hemos supuesto que $g_K = \bar{g}_K * n$ y $g_{Na} = \bar{g}_{Na} * m * h$

y que sus variaciones temporales son

$$\frac{dn}{dt} = k_{1n} - (k_{1n} + k_{-1n})n$$

$$\frac{dm}{dt} = k_{1m} - (k_{1m} + k_{-1m})m$$

$$\frac{dh}{dt} = k_{1h} - (k_{1h} + k_{-1h})h$$

⇒ Sustituyendo las conductancias y las derivadas de sus probabilidades en (2)

$$C_M \frac{dV_M}{dt} = -\bar{g}_{Na} m h (V_M - E_{Na}) - \bar{g}_K n (V_M - E_K) - g_L (V_M - E_L) + I_{inj}$$

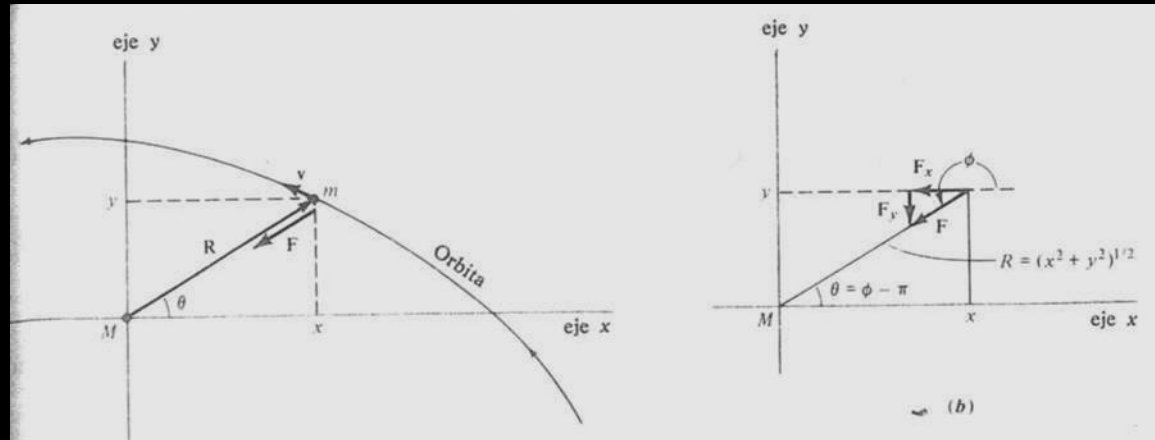
⊗ En el modelo original de Hodgkin–Huxley las 4 ecuaciones eran

$$C_M \frac{dV_M}{dt} = -\bar{g}_{Na} m^3 h (V_M - E_{Na}) - \bar{g}_K n^4 (V_M - E_K) - g_L (V_M - E_L) + I_{inj}$$

y las 3 de las derivadas.

2. Mecánica orbital. Modelo

Escribimos la 2ª ley de Newton, para un cuerpo de masa m girando respecto a otro de masa M que se considera fijo. Utilizando coordenadas xy Obtenemos las ecuaciones (1)



$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F_x}{m} \quad \text{y} \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{F_y}{m} \quad (1)$$

de la figura

$$F_x = F \cos \phi = -F \frac{x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} \quad F_y = F \sin \phi = -F \frac{y}{(x^2 + y^2)^{1/2}}$$

y de acuerdo con la ley de gravitación

$$F = GMm \frac{1}{x^2 + y^2}$$

Si hacemos $\alpha \equiv GM$ y $\beta = -3/2$ las ec. diferenciales acopladas (1) quedan

$$\frac{d^2x}{dt^2} = Q_x \quad \text{y} \quad \frac{d^2y}{dt^2} = Q_y \quad (2)$$

$$\text{con } Q_x \equiv -\alpha x(x^2 + y^2)^\beta \quad \text{y} \quad Q_y \equiv -\alpha y(x^2 + y^2)^\beta$$

Resolución numérica

1. Se elige Δt
2. Determinar los valores de Q_x y Q_y de (2), en $t_0=0$
3. Calculamos la velocidad a mitad del intervalo

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{1/2} \approx \left(\frac{dx}{dt}\right)_0 + Q_x \frac{\Delta t}{2} \quad y \quad \left(\frac{dy}{dt}\right)_{1/2} \approx \left(\frac{dy}{dt}\right)_0 + Q_y \frac{\Delta t}{2}$$

4. Con los valores anteriores calculamos la posición al final del primer intervalo

$$x_1 \approx x_0 + \left(\frac{dx}{dt}\right)_{1/2} \Delta t \quad y \quad y_1 \approx y_0 + \left(\frac{dy}{dt}\right)_{1/2} \Delta t$$

5. Hacemos $t_1 = \Delta t$
6. Volvemos a determinar Q_x y Q_y y repetimos todo el proceso

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)_{3/2} \approx \left(\frac{dx}{dt}\right)_{1/2} + Q_x \Delta t \quad y \quad \left(\frac{dy}{dt}\right)_{3/2} \approx \left(\frac{dy}{dt}\right)_{1/2} + Q_y \Delta t$$

$$x_2 \approx x_1 + \left(\frac{dx}{dt}\right)_{3/2} \Delta t \quad y \quad y_2 \approx y_1 + \left(\frac{dy}{dt}\right)_{3/2} \Delta t$$

y hacemos $t_2 = 2\Delta t$ y repetimos el proceso hasta que t alcance el valor fijado

Leyes de Kepler

1. La órbita de cualquier planeta del sistema solar es una elipse con el Sol en uno de sus focos.

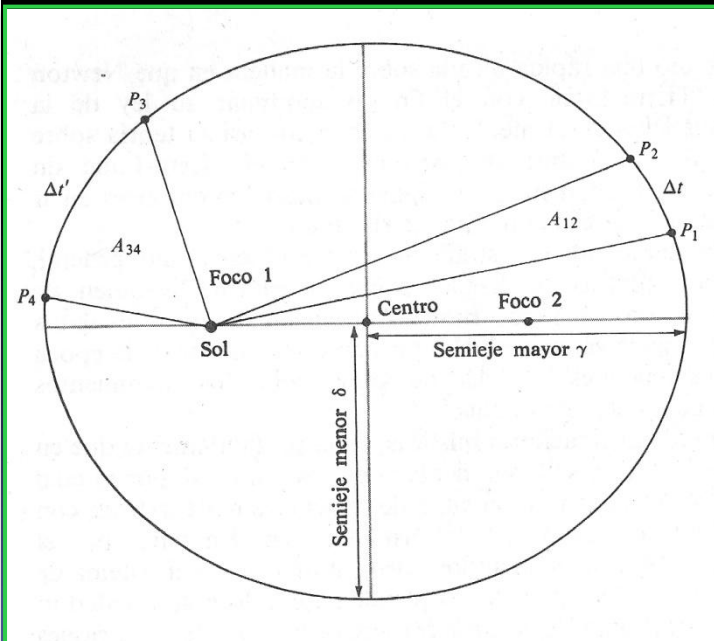
$$d(P_1, F_1) + d(P_1, F_2) = d(P_2, F_1) + d(P_2, F_2) = d(P_3, F_1) + d(P_3, F_2) = \dots$$

2. El radio vector del Sol al planeta barre áreas iguales en tiempos iguales.

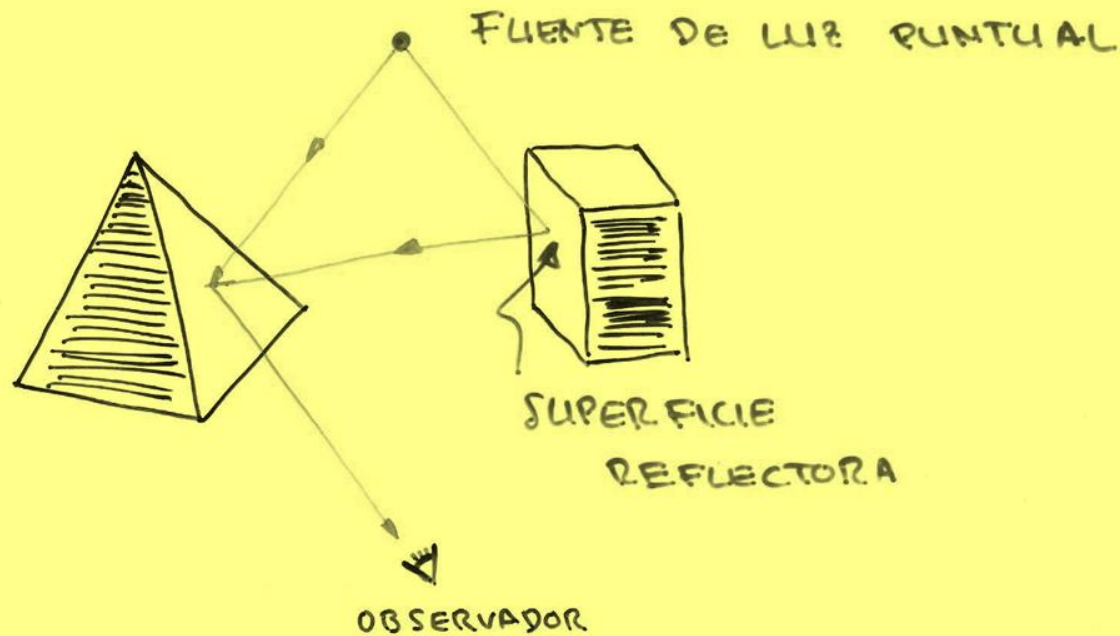
$$\text{Si } \Delta t = \Delta t' \longrightarrow A_{12} = A_{34}$$

3. La relación γ^3/T^2 entre el semieje mayor de la elipse y el periodo, es igual para todos los planetas.

el periodo es el tiempo que tarda en dar una vuelta alrededor del Sol



3. Modelos de iluminación



LA LUZ Q. PROVIENE DE LA SUPERFICIE

PROBLEMA TIENE VARIAS COMPONENTES

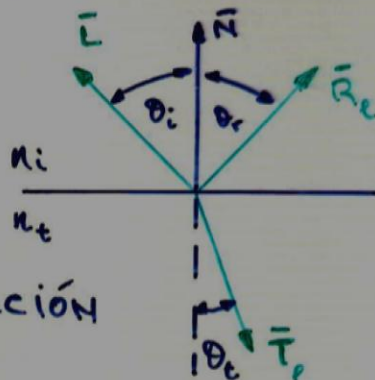
- LUZ DIRECTA DE FUENTES "PUNTALES"
- " REFLEJADA EN OTROS OBJETOS
- " DEL INTERIOR DEL PROPIO OBJETO
(SI ES TRANSPARENTE)

- DESDE UN PUNTO DE VISTA EXPERIMENTAL

LAS MÚLTIPLES REFLEXIONES DE LA LUZ EN TODOS LOS OBJETOS VECINOS PRESENTES EN LA ESCENA, SE MODELIZAN COMO UNA ILUMINACIÓN UNIFORME →
→ LUZ AMBIENTAL

- LA LUZ Q. LLEGA A LA SUPERFICIE (FUENTES PUNTUALES + LUZ AMBIENTAL) SE REFLEJA Y SE REFRACTA

= REFLEXIÓN ESPECULAR



= REFRACCIÓN

LEY DE SNELL

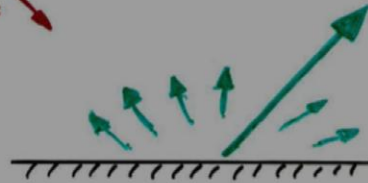
- $\theta_i = \theta_r$
- $n_i \text{ sen } \theta_i = n_t \text{ sen } \theta_t$

= REFLEXIÓN DIFUSA



- ATENUACIÓN DE LA REFLEXIÓN

- RESPUESTA ISÓTROPA



ESPEJULAR + DIFUSA

Cuantificación de cada término

- ① LUZ AMBIENTAL INDEPENDIENTE DE LA POSICIÓN DEL OBSERVADOR Y CTE PARA UNA ESCENA DADA

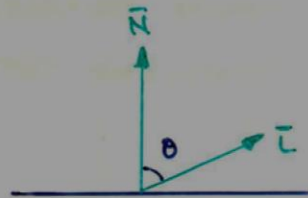
$$\Rightarrow I_a K_a$$

INT. DE LA LUZ AMBIENTAL

PROPORCIÓN DE LUZ REFLEJADA POR UNA SUPERFICIE DETERMINADA
 $[0 \leq K_a \leq 1]$

- ② REFLEXIÓN DIFUSA

LEY DE LAMBERT: LA LUZ REFLEJADA DEPENDE SOLO DE $\cos \theta$ Y NO DE LA POSICIÓN DEL OBSERVADOR



\Rightarrow SI I_p ES LA INT. DE LA LUZ INCIDENTE

$$\Rightarrow I_p K_d \cos \theta$$

$[0 \leq K_d \leq 1]$
 $[0^\circ \leq \theta \leq 90^\circ]$

$$\Rightarrow \boxed{I = I_a \kappa_a + I_p \kappa_d (\bar{n} \cdot \bar{L})} \quad (1)$$

SI HAY VARIAS FUENTES DE LUZ Y TENEMOS EN CUENTA EL COLOR

$$\Rightarrow I(\lambda) = I_a(\lambda) \kappa_a(\lambda) + \kappa_d(\lambda) \sum_{n=1}^{I_s} (\bar{n} \cdot \bar{L}_n) I_{pn}(\lambda)$$

$$\lambda \equiv \text{LONGITUD DE ONDA} \quad \lambda = c \cdot T = \frac{c}{\nu}$$

$$n = \frac{c}{v}$$

POR EJ. EN UN MONITOR DE VIDEO RGB

TENDREMOS $\kappa_{dr}, \kappa_{dg}, \kappa_{db}$

- SE PUEDE TENER EN CUENTA TAMBIEN ATENUACIÓN DE LA INTENSIDAD DEBIDO A LA ATMÓSFERA

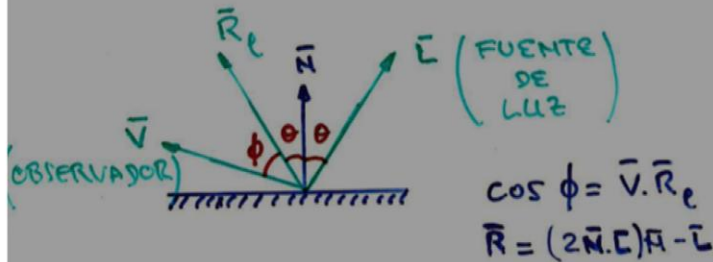
$$\left[\text{por ejemplo} \right] \Rightarrow \frac{I_p}{d^x} \quad \text{EN (1)}$$

- $d \equiv$ distancia luz-objeto

$$\bullet \quad 2 \leq x \leq 4$$

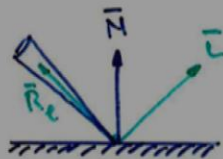
⊙ REFLEXIÓN ESPECULAR (MODELO DE PHONG)

PARA UN REFLECTOR IDEAL LOS ÁNGULOS DE INCIDENCIA DE LA LUZ Y DE REFLEXIÓN SON LOS MISMOS

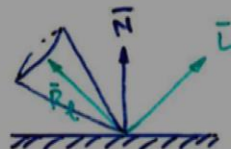


PHONG : INTENSIDAD REFLEJADA
(SUP. REALES) ESPECULARMENTE $\propto (\vec{V} \cdot \vec{R}_e)^m$

Ⓜ ES UNA MEDIDA DE LA RUGOSIDAD DEL MATERIAL



SUPERFICIE
BRILLANTE
 m GRANDE
(~ 200)



S. OPACA
 m PEQUEÑO
(próxima a 1)



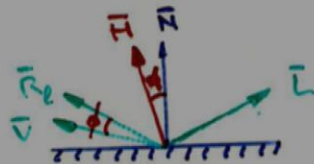
$$\Rightarrow I(\lambda) = I_a(\lambda)k_a(\lambda) + I_p(\lambda) \left[k_d(\lambda)(\bar{N} \cdot \bar{L}) + k_s(\bar{V} \cdot \bar{R}_e)^m \right] \quad (2)$$

- EN EL MODELO DE PHONG $k_a(\lambda)$, $k_d(\lambda)$
PERO $k_s \Rightarrow$ LOS BRILLOS SIEMPRE BLANCOS
 $[0 \leq k_s \leq 1]$

→ ALTERNATIVAMENTE (COSENO DE BLINN)

$$\cos \phi = \bar{V} \cdot \bar{R}_e \approx \bar{H} \cdot \bar{H}$$

Y SI HAY VARIAS FUENTES
 PUNTALES DE LUZ



$$\bar{H} = \frac{\bar{V} + \bar{L}}{|\bar{V} + \bar{L}|}$$

$$\alpha \geq \frac{\phi}{2}$$

$$I(\lambda) = I_a k_a(\lambda) + k_d(\lambda) \sum_{n=1}^{l_s} (\bar{N} \cdot \bar{L}_n) I_{pn}(\lambda) + k_s \sum_{n=1}^{l_s} (\bar{N} \cdot \bar{H}_n)^m I_{pn}(\lambda)$$

EN RESUMEN, k_a , k_d , k_s Y m HAN DE SER DETERMINADOS EMPÍRICAMENTE, Y EN ÚLTIMA INSTANCIA DEPENDEN DE LA "HABILIDAD DEL ARTISTA".

Métodos para iluminar superficies poligonales

Intensidad constante

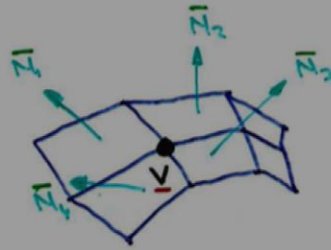
se calcula la intensidad de cada polígono con algún modelo de luz y se les aplica un relleno sólido (color o intensidad constante)

- ✓ *problema: discontinuidades en las fronteras*
- ✓ *a favor: poco tiempo de cálculo*

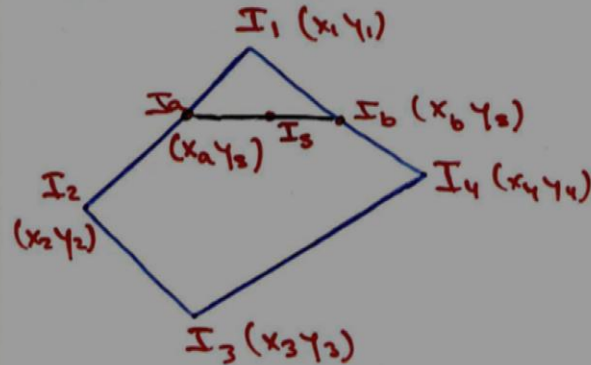
Gouraud

interpolación lineal de la intensidad, a lo largo de las líneas de barrido del monitor, a partir de las intensidades en los vértices de cada polígono.

- calcular la normal media unitaria para cada vértice del polígono.*
- con un modelo de iluminación, calcular las intensidades de los vértices*
- interpolación lineal de éstas sobre toda la superficie*



$$N_v = \frac{\sum_{k=1}^n N_k}{\sum_{k=1}^n |N_k|}$$



$$I_a = \frac{1}{y_1 - y_2} [I_1(y_3 - y_2) + I_2(y_1 - y_3)]$$

$$I_b = \frac{1}{y_1 - y_4} [I_1(y_3 - y_4) + I_4(y_1 - y_3)]$$

$$I_s = \frac{1}{x_b - x_a} [I_a(x_b - x_s) + I_b(x_s - x_a)]$$

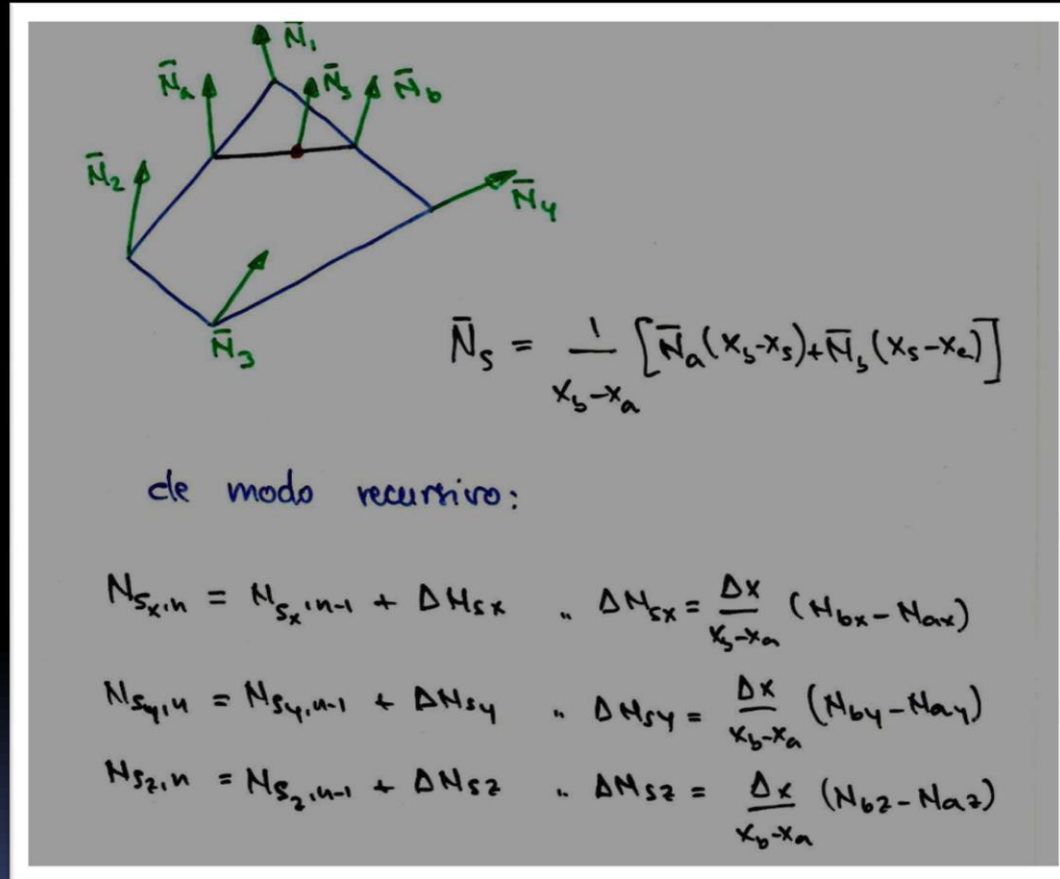
De modo iterativo:

$$\Delta I_s = \frac{\Delta x}{x_b - x_a} [I_b - I_a]$$

$$I_{s_n} = I_{s_{n-1}} + \Delta I_s$$

Phong

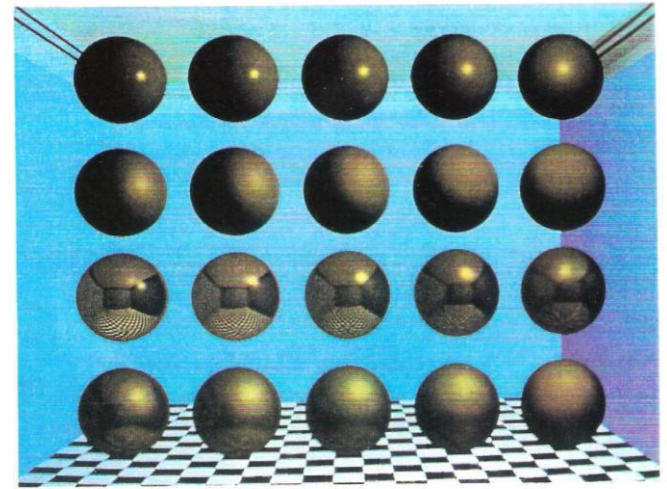
interpolación lineal de las normales, a partir de las normales de vértice de cada polígono.



- Gouraud es mejor para el cálculo de la componente difusa.
- Phong mejor para obtener la componente de reflexión especular, pero implica muchos más cálculos.

Ejemplo

Ejemplo visual de Cu con diferentes rugosidades.



	column 1	column 2	column 3	column 4	column 5
row 1	$C_{Ka} = 0.35$	$C_{Ka} = 0.35$	$C_{Ka} = 0.05$	$C_{Ka} = 0.36$	$C_{Ka} = 0.37$
no reflection	$C_{Kd} = 0.35$	$C_{Kd} = 0.35$	$C_{Kd} = 0.05$	$C_{Kd} = 0.36$	$C_{Kd} = 0.37$
mapping	$C_{Ks} = 0.95$	$C_{Ks} = 0.85$	$C_{Ks} = 0.75$	$C_{Ks} = 0.65$	$C_{Ks} = 0.55$
	$Ns = 330$	$Ns = 215$	$Ns = 135$	$Ns = 80$	$Ns = 45$
row 2	$C_{Ka} = 0.385$	$C_{Ka} = 0.40$	$C_{Ka} = 0.43$	$C_{Ka} = 0.46$	$C_{Ka} = 0.50$
no reflection	$C_{Kd} = 0.385$	$C_{Kd} = 0.40$	$C_{Kd} = 0.43$	$C_{Kd} = 0.46$	$C_{Kd} = 0.50$
mapping	$C_{Ks} = 0.45$	$C_{Ks} = 0.35$	$C_{Ks} = 0.25$	$C_{Ks} = 0.15$	$C_{Ks} = 0.05$
	$Ns = 25$	$Ns = 15$	$Ns = 10$	$Ns = 7$	$Ns = 5$
row 3	$C_{Ka} = 0.025$	$C_{Ka} = 0.050$	$C_{Ka} = 0.075$	$C_{Ka} = 0.100$	$C_{Ka} = 0.125$
reflection	$C_{Kd} = 0.025$	$C_{Kd} = 0.050$	$C_{Kd} = 0.075$	$C_{Kd} = 0.100$	$C_{Kd} = 0.125$
mapped	$C_{Ks} = 0.95$	$C_{Ks} = 0.90$	$C_{Ks} = 0.80$	$C_{Ks} = 0.70$	$C_{Ks} = 0.65$
	$Ns = 330$	$Ns = 215$	$Ns = 135$	$Ns = 80$	$Ns = 45$
row 4	$C_{Ka} = 0.150$	$C_{Ka} = 0.175$	$C_{Ka} = 0.200$	$C_{Ka} = 0.225$	$C_{Ka} = 0.250$
reflection	$C_{Kd} = 0.150$	$C_{Kd} = 0.175$	$C_{Kd} = 0.200$	$C_{Kd} = 0.225$	$C_{Kd} = 0.250$
mapped	$C_{Ks} = 0.60$	$C_{Ks} = 0.55$	$C_{Ks} = 0.50$	$C_{Ks} = 0.45$	$C_{Ks} = 0.40$
	$Ns = 25$	$Ns = 15$	$Ns = 10$	$Ns = 7$	$Ns = 5$

Parámetros usados en la figura superior