

Título de la memoria como alumno interno

Aplicación de la herramienta PhysiBoSS para la creación de gemelos
digitales.

Carlos Martínez de la Fuente



Tecnun – Universidad de Navarra
Alumno Interno
Departamento de Biología Computacional
17 de enero de 2024

ÍNDICE

1. Introducción 2

1.1. ¿Que es un gemelo digital? 2

1.2. ¿Que es *PhysiBoSS*? 2

1.2.1. Modelos Booleanos con *MaBoSS* 2

1.2.2. Simulación de sistemas pluricelulares con *PhysiCell* 2

Bibliografía consultada 3

1 INTRODUCCIÓN

En esta memoria se recoge lo aprendido y las experiencias adquiridas como alumno interno en el Departamento de Biología Computacional bajo la tutela del profesor D. Francisco Javier Planes.

1.1 ¿Que es un gemelo digital?

Con la capacidad computacional de la que disponemos en el presente es posible generar y simular un sistema complejo de respuestas químicas y estructuras que nos permita ver la evolución dinámica de dicho sistema. Esto es fundamentalmente en lo que consiste la técnica del gemelo digital.

Un ejemplo de esto lo tenemos en el trabajo de *Ponce-de-Leon et al.*¹, donde se simula la interacción de un sistema de células tumorales con un producto antitumoral.

En este artículo¹ también se emplea y enseña la herramienta *PhysiBoSS*² que será también el foco de este estudio como alumno interno.

1.2 ¿Que es *PhysiBoSS*?

PhysiBoSS es la herramienta que utilizaremos. Se puede obtener desde el repositorio de Github: <https://github.com/PhysiBoSS/PhysiBoSS>.

Esta herramienta busca fusionar las funciones de las herramientas de *PhysiCell*³ y *MaBoSS*⁴ (de donde obtiene su nombre) de tal forma que no dependa de las anteriores, evitando que al actualizar cualquiera de las dos ocasione algún tipo de incompatibilidad.

1.2.1. Modelos Booleanos con *MaBoSS*

Como indican en su artículo *Stoll et al.*⁴, "MaBoSS es un software que permite simular poblaciones de células y modelar de forma estocástica los mecanismos intracelulares". Un sistema Booleano (como el que se ve en la Fig. 1.2.1.1) consiste en una red de condiciones que son verdaderas o falsas (*True* o *False*) que implican o inhiben otra condición.

En el ámbito celular, un modelo Booleano nos permite describir las relaciones que existen dentro de la célula a través de los diversos mensajeros químicos.

MaBoSS se apoya en esto para sus simulaciones dinámicas y estocásticas de sistemas.

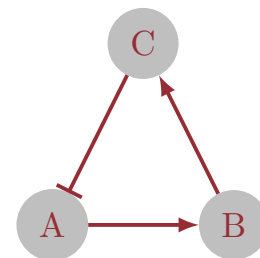


Figura 1.2.1.1: Ejemplo de un sistema Booleano en el que A produce B, que produce C. C inhibe A.

1.2.2. Simulación de sistemas pluricelulares con *PhysiCell*

BIBLIOGRAFÍA CONSULTADA

- [1] Miguel Ponce-de-Leon et al. “PhysiBoSS 2.0: a sustainable integration of stochastic Boolean and agent-based modelling frameworks”. En: *npj Systems Biology and Applications* 9.54 (2023). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41540-023-00314-4>.
- [2] Miguel Ponce-de-Leon. *PhysiBoSS*. <https://github.com/PhysiBoSS/PhysiBoSS>. 2023.
- [3] Ahmadsreza Ghaffarizadeh et al. “PhysiCell: An open source physics-based cell simulator for 3-D multicellular systems”. En: *PLOS Computational Biology* (2018). DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1005991>.
- [4] Gautier Stoll et al. “MaBoSS 2.0: and environment for stochastic Boolean modeling”. En: *Bioinformatics* 33.14 (2017), págs. 2226-2228. DOI: <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btx123>.