

# MODELADO DE SISTEMAS VIVOS

**Vicente Arnau**

[Vicente.Arnau@uv.es](mailto:Vicente.Arnau@uv.es)

Dpto. de Informática. ETSE.  
I2SysBio

VNIVERSITAT  
D VALÈNCIA [Gears]  
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria

i<sup>2</sup>sysbio

**Theory**



Carlos Peña

**Bioinformatics**



Vicente Arnau

**Computing**



Wladimiro Díaz

**Evolutionary Systems Virology Group**  
I2SysBio, CSIC-UV



**Symbiosis**

Institute of Integrative Systems Biology (I2SysBio) and  
Foundation for the Promotion of Sanitary and  
Biomedical Research (FISABIO)



**Genética  
Evolutiva**



**Genòmica  
funcional  
de levadures**

**INCLIVA | VLC**  
Instituto de Investigación Sanitaria  
UNIDAD DE GENÓMICA Y DIABETES



VNIVERSITAT  
D VALÈNCIA

**CSIC**

Institute for Integrative Systems Biology  
i<sup>2</sup>SysBio



### Definición del modelo inicial:

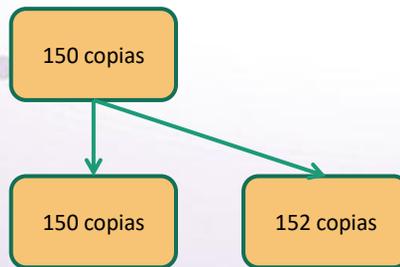
- La levadura de la cerveza (*Saccharomyces cerevisiae*) posee una división por **gemación asimétrica**. La célula madre crea 2 células hijas de dimensiones distintas pese a que el núcleo se divide por mitosis en 2 partes idénticas.



- El número de copias de los genes ribosomales en las células hijas no es el mismo.

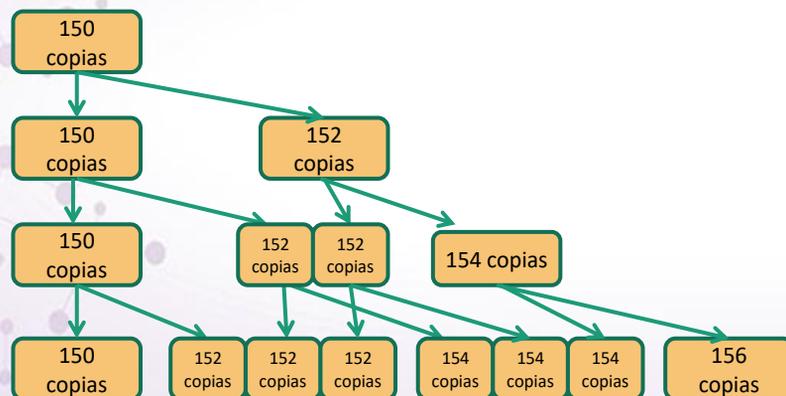
## Definición del modelo inicial:

- Sistema biológico con N células, cada una de ellas con 150 copias de genes.
- En cada reproducción (iteración del modelo) por cada célula se generan 2 nuevas células, una con el mismo número de genes y otra con un incremento delta de 2 genes. Inicialmente,  $\Delta = 2$  genes.



## MODELO I:

- Partimos con 1 células con 150 copias.
- Evolucionamos el sistema hasta que tengamos el 98% de las células con 300 copias (es el máximo de copias)



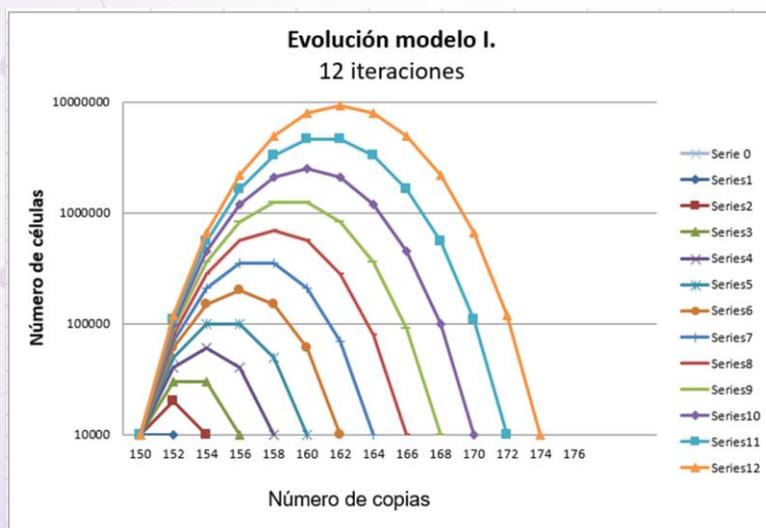
**MODELO I:**

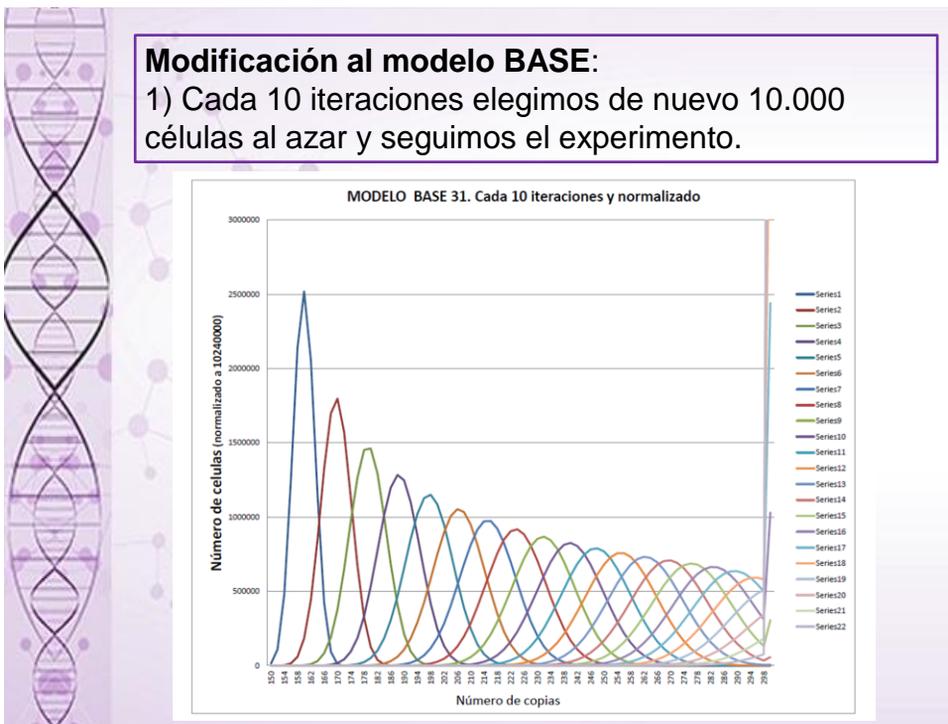
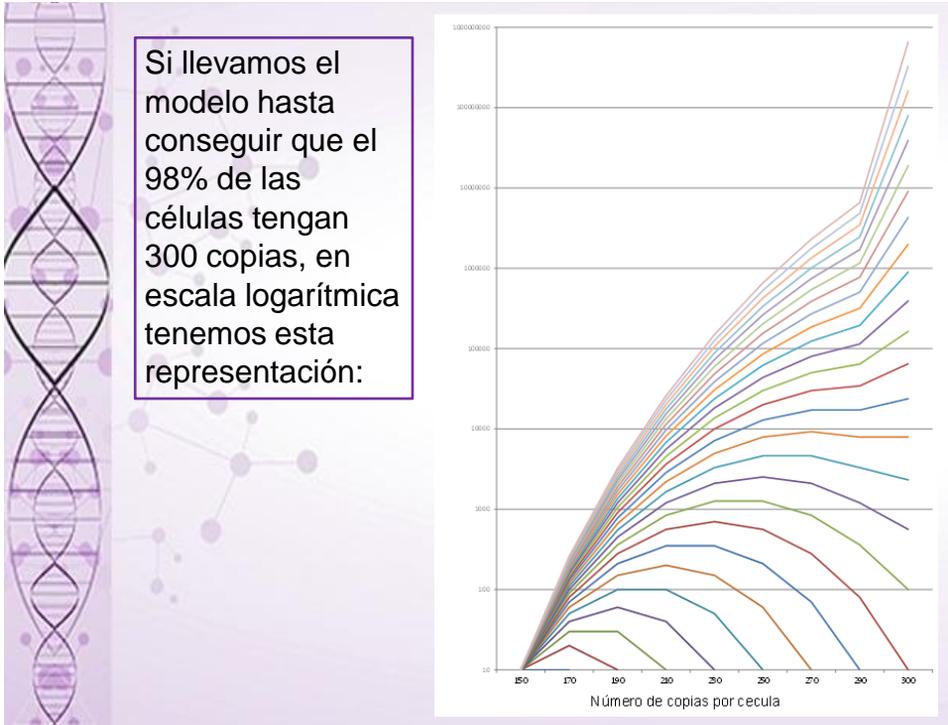
- Partimos con 10000 células con 150 copias.

Iter.	Número de células N copias							
	150	152	154	156	158	160	162	...
0	10000	0	0	0	0	0	0	
1	10000	10000	0	0	0	0	0	
2	10000	20000	10000	0	0	0	0	
3	10000	30000	30000	10000	0	0	0	
4	10000	40000	60000	40000	10000	0	0	
5	10000	50000	100000	100000	50000	10000	0	
6	10000	60000	150000	200000	150000	60000	10000	
...								

**MODELO I:**

- Partimos con 10000 células con 150 copias.





## Definición de función evolución para el modelo BASE.

Iteración	Número de células N copias. Variable "i".							
	146	148	150	152	154	156	158	...
vector_1	0	0	10000	20000	10000	0	0	

Vector_2	0	0	10000	30000	30000	10000	0	
----------	---	---	-------	-------	-------	-------	---	--

$$\text{vector\_2}[i] = \text{vector\_1}[i] + \text{vector\_1}[i - \text{delta}]$$

## Modificación al modelo BASE:

2) El incremento de 2.7 en el número de genes.

2.7  $\rightarrow$  30% 2 copias + 70% 3 copias

delta1= 2  $\rightarrow$  fac1 = 0.3

delta2= 3  $\rightarrow$  fac2 = 0.7

Iteración	Número de células N copias							
	148	149	150	151	152	153	154	...
vector_1	0	0	10000	0	0	0	0	

Vector_2	0	0	10000	0	3000	7000	0	
----------	---	---	-------	---	------	------	---	--

$$\text{vector\_2}[i] = \text{vector\_1}[j] + \text{vector\_1}[i - \text{delta}_1] * \text{fac1} + \text{vector\_1}[i - \text{delta}_2] * \text{fac2}$$

**Modificación al modelo BASE:**  
 2) El incremento de 2.7 en el número de genes.  
 2.7 → 30% 2 copias + 70% 3 copias  
 delta1=2 → fac1 = 0.3  
 delta2=3 → fac2 = 0.7

Vector_ini	10000	0	0	0	0	0	0	0
------------	-------	---	---	---	---	---	---	---

Iteración	Número de células N copias							
	150	151	152	153	154	155	156	...
vector_1	10000	0	3000	7000	0	0	0	

Vector_2	10000	0	6000	14000	0	0	0	...
----------	-------	---	------	-------	---	---	---	-----

$$\text{vector\_2}[i] = \text{vector\_1}[j] + \text{vector\_1}[i-\text{delta\_1}] * \text{fac1} + \text{vector\_1}[i-\text{delta\_2}] * \text{fac2}$$

**Modificación al modelo BASE:**  
 2) El incremento de 2.7 en el número de genes.  
 2.7 → 30% 2 copias + 70% 3 copias  
 delta1=2 → factor 0.3  
 delta2=3 → factor 0.7

Vector_ini	10000	0	0	0	0	0	0	0
------------	-------	---	---	---	---	---	---	---

Iteración	Número de células N copias							
	150	151	152	153	154	155	156	...
vector_1	10000	0	3000	7000	0	0	0	

Vector_2	10000	0	6000	14000	0	0	0	...
----------	-------	---	------	-------	---	---	---	-----

Vector_2	10000	0	9000	14000	900	2100	0	...
----------	-------	---	------	-------	-----	------	---	-----

$$\text{vector\_2}[i] = \text{vector\_1}[j] + \text{vector\_1}[i-\text{delta\_1}] * \text{fac1} + \text{vector\_1}[i-\text{delta\_2}] * \text{fac2}$$

**Modificación al modelo BASE:**

2) El incremento de 2.7 en el número de genes.

2.7  $\rightarrow$  30% 2 copias + 70% 3 copiasdelta1=2  $\rightarrow$  factor 0.3delta2=3  $\rightarrow$  factor 0.7

Vector_ini	10000	0	0	0	0	0	0	0
------------	-------	---	---	---	---	---	---	---

Iteración	Número de células N copias							
	150	151	152	153	154	155	156	...
vector_1	10000	0	3000	7000	0	0	0	

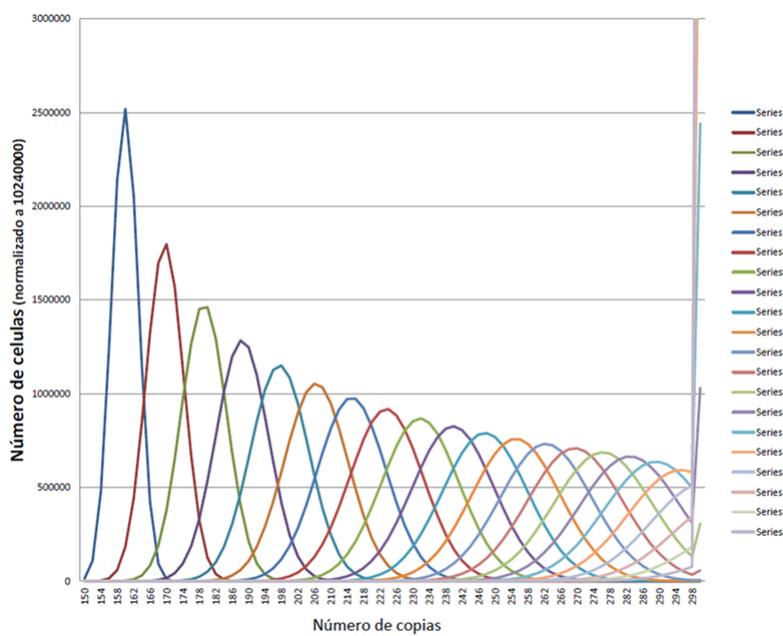
Vector_2	10000	0	6000	14000	0	0	0	...
----------	-------	---	------	-------	---	---	---	-----

Vector_2	10000	0	9000	14000	900	2100	0	...
----------	-------	---	------	-------	-----	------	---	-----

Vector_2	10000	0	9000	21000	900	4200	4900	...
----------	-------	---	------	-------	-----	------	------	-----

$$\text{vector\_2}[i] = \text{vector\_1}[j] + \text{vector\_1}[i-\text{delta\_1}] * \text{fac1} + \text{vector\_1}[i-\text{delta\_2}] * \text{fac2}$$

MODELO BASE 31. Cada 10 iteraciones y normalizado



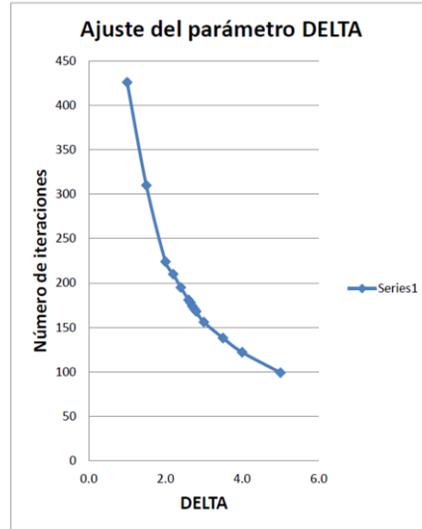
**PREGUNTA:**

¿Cuántas iteraciones del modelo necesitamos para que saturé?

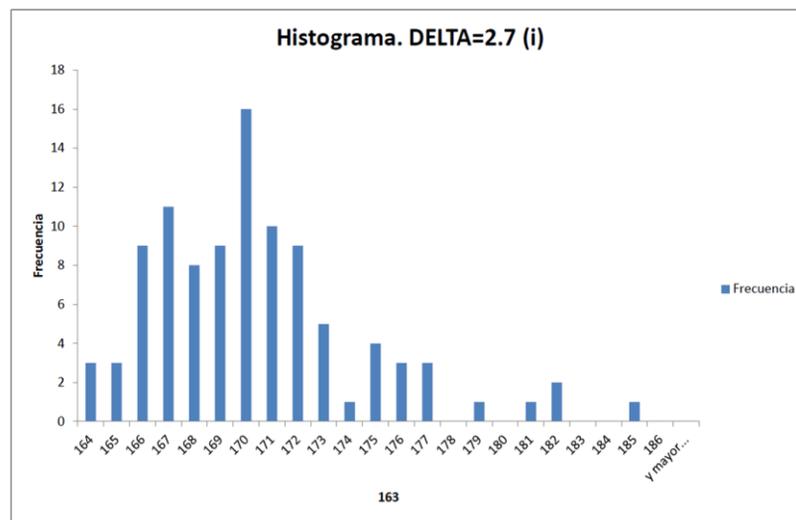
**RESPUESTA:**

Dependerá del valor de DELTA.

DELTA	Número de iteraciones
1.0	426
1.5	310
2.0	224
2.2	210
2.4	195
2.6	181
2.65	178
2.7	174
2.75	171
2.8	168
3.0	156
3.5	138
4.0	122
5.0	99



Para un valor de DELTA dado, realizamos 100 iteraciones y obtenemos una distribución de valores.



¿Qué más cosas se pueden añadir?

- Una mortalidad de las células dependiendo de su antigüedad.

Iteración	Número de células N copias. Variable "i".							
	146	148	150	152	154	156	158	...
vector_1	0	0	10000	20000	10000	0	0	

Factor de mortalidad  $\rightarrow fm = 0.02$  (2%)

Vector_2	0	0	10000	30000	30000	10000	0	
	$\downarrow * (1-fm)$	$\downarrow * (1-fm)$	$\downarrow * (1-fm)$	$\downarrow * (1-fm)$	$\downarrow \dots$	$\downarrow$	$\downarrow$	
Vector_3	0	0	9800	29400	29400	9800	0	

Sugerencias??

### CPD del I2SysBio:



- ❖ 17 nodos con 648 núcleos Intel Xeon Cascade Lake, con 17.34 TB de RAM y 2.37 PB de almacenamiento (discos SAS HDD, SAS SDD y NVMe).
- ❖ Conexiones con anchos de banda de 50 GB/s y 20 GB/s
- ❖ 9 Nodos de cálculo intensivo:
  - 40 cores + 1.5 TB RAM + 400 TB almacenamiento.



# MODELADO DE SISTEMAS VIVOS

**Vicente Arnau**

[Vicente.Arnau@uv.es](mailto:Vicente.Arnau@uv.es)

Dpto. de Informática. ETSE.

I2SysBio

VNIVERSITAT  
D VALÈNCIA [Gears]  
Escola Tècnica Superior d'Enginyeria

i<sup>2</sup>sysbio