

# Projet W.R.E.T. (WebRegEfmTool)

Conception d'un projet de recherche

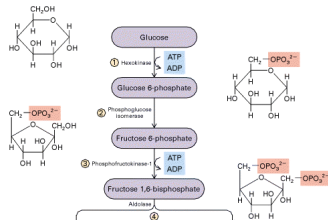
Arnaud FRÈCHE – Charlotte HÉRICÉ – Saraï MOLA –  
Typhaine PAYSAN-LAFOSSE – Joris SANSEN

Master 2 BioInformatique

21 février 2013

## Sujet

- ▶ Métabolisme d'une cellule :
  - ▶ Transformations moléculaires et énergétiques
  - ▶ Réactions métaboliques
- ▶ Calculs de modes élémentaires
- ▶ Quelques logiciels disponibles



**FIGURE:** Exemple d'une partie de la glycolyse

# Contexte - RegEfmttool

## Regular Elementary flux mode tool

- ▶ Calcul de modes élémentaires
- ▶ Environnement UNIX, ligne de commandes
- ▶ Plusieurs fichiers d'entrée au format *txt*

## Objectif


- ▶ Interface graphique
- ▶ Langages Web




# Interface graphique

## WebRegEfmTool

- ▶ Site Web
- ▶ Utilisation plus conviviale pour *regEfmtool*
- ▶ Génération des fichiers nécessaires à *regEfmtool*
- ▶ Création de fichiers fonctionnels au format DAT
- ▶ Simulations comparées de modes élémentaires

# Création - Fichiers



[Accueil](#)
[Création](#)
[Chargement](#)
[Aide](#)




## Création d'un nouveau réseau

Initialisez vos fichiers avant de créer un nouveau réseau

Ecrivez une nouvelle réaction

[Aide](#)

reaction :

Réversible :

☐ Oui ☐ Non

**Attention !**

Pas d'espaces dans les noms, utiliser un underscore '\_' à la place  
 La syntaxe des réactions est la suivante :  
 Nom\_reaction : 2 reactif1 + 5 reactif2 => 3 produit1 + 7 produit2  
 Attention a laisser un espace entre le coefficient stoechiométrique et le métabolite associé

FIGURE: Page de création d'un nouveau réseau

## Initialisation des fichiers

- ▶ Efface fichiers déjà existants
- ▶ Génère de nouveaux

# Création - Fichiers

## Fichiers d'entrée nécessaire à *regEfmttool*

- ▶ Réversibilité
- ▶ Métabolites
- ▶ Enzymes
- ▶ Stœchiométrie
- ▶ Règles des gènes

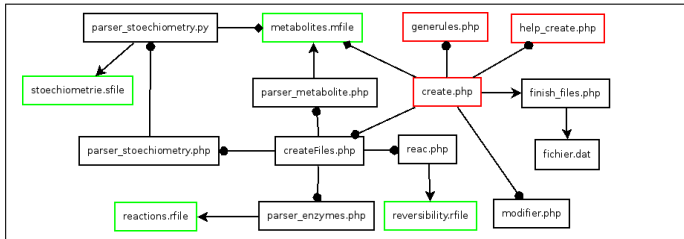


FIGURE: Diagramme de création

# Création - Fichiers

## Réactions et réversibilité

- ▶ Réactions une à une
- ▶ Syntaxe propre au format *DAT* : *"Pyk : PEP + ADP = Pyr + ATP ."*
- ▶ Réversibilité via `radioboutons`
- ▶ Ordre conservé

## Noms de réactions, métabolites

- ▶ Parsage liste de réactions
- ▶ Extraction métabolites
- ▶ Extraction noms réactions (enzymes)

## Stœchiométrie

- ▶ Parsage liste de réactions, métabolites
- ▶ 1 réaction = 1 liste
- ▶ Matrice = liste de listes

# Création - Modification et exportation *DAT*

## Modifications

- Zone de texte
- Affichages du réseaux enregistré
- Dépendances gérées

Réactions déjà entrées :

```

reaction : reag1 + reag2 => 2 prod1 + 4 prod2 .
reaction : reag1 + reag2 => 2 prod1 + 4 prod2 .
reaction : reag1 + reag2 => 2 prod1 + 4 prod2 .
reaction : reag1 + reag2 => 2 prod1 + 4 prod2 .

```

**Attention !**

Vous ne pouvez ni supprimer ni ajouter de réaction dans cette zone de modification  
Il ne doit pas y avoir d'espace après le dernier métabolite

FIGURE: Zone de modification

## Exportation au format *DAT*

- Après création réseau complet
- Parsage des métabolites
- Choix métabolites externes et internes

Choisir les métabolites externes et internes

**Métabolites externes :**

reag1  
reag2  
prod1  
prod2  
prcd1  
prcd2

**Métabolites internes :**

reacg2  
prcd1  
recag1

FIGURE: Choix des métabolites internes et externes



# Règles des gènes


## Utilité

Élimination modes élémentaires non possibles dans réseau chez organisme vivant




## États d'une réaction

- ▶ 1-active ( $R=1$ )
- ▶ 0-active ( $R=0$ )
- ▶ full-active ( $R=f$ )

# Règles des gènes



W  
R  
E  
T  
REG EFM TOOL

[Accueil](#) [Création](#) [Chargement](#) [Aide](#)   

## Règles des gènes

Ecrivez une nouvelle règle :

Choisissez le nombre de réaction :

3

IF Réaction:  Valeur:

Opérateur:  Réaction:  Valeur:

THEN Réaction:  Valeur:

Règles déjà créées :

```
reaction3 = (((!@reaction) & (!@reaction1)) | !reaction2))
reaction1 = (!!reaction)
```

[Aide](#)

FIGURE: Page de création des règles des gènes

# Règles des gènes

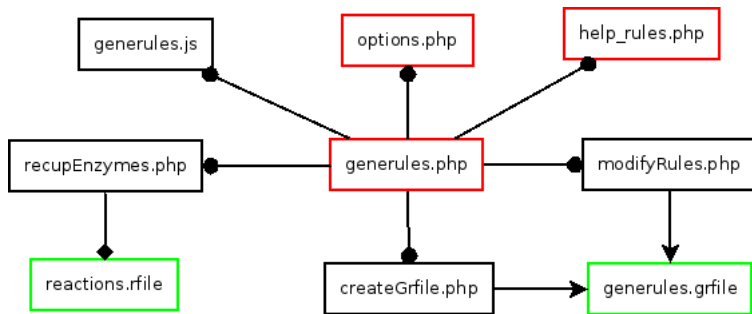


FIGURE: Diagramme de création des règles

# Règles des gènes

## Création des règles


Valeur R	THEN=0	THEN=1
0	!0R	0R
1	!1R	1R
f	!fR	fR

## Exemple


```
IF réaction: R1 valeur: 1  
Opérateur: AND réaction: R2 valeur: 0  
Opérateur: OR réaction: R3 valeur: 0  
THEN réaction: R4 valeur: 0
```

$$R4 = (!((1R1 \& (!0R2)) \mid (!0R3)))$$

# Options de lancement - Choix



AccueilCréationChargementAide



## Choix des options de lancement de WRET

Veuillez cocher les options nécessaires :  
(Les options obligatoires sont cochées par défaut)

### Enregistrement

Affichage des résultats	Type de messages d'erreurs / Niveau d'informations sur le déroulement des calculs	Format/méthode de l'enregistrement
<ul style="list-style-type: none"><li>En ligne sur WRET</li><li>Dans un fichier : Nom du fichier : <input type="text"/></li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Warning</li><li>Config</li><li>Info</li><li>Fine</li><li>Finer</li><li>Finest</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Par défaut</li><li>Complet</li></ul>

### Type des fichiers stoechiométriques

Flux-analyzer-dir	Analyseur de flux
<ul style="list-style-type: none"><li>Flux-analyzer-dir</li><li>Flux-analyzer-files</li><li>Reaction-list</li><li>Stoichiometry</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>Fichier .mfile : Nom du Fichier : <input type="text" value="metabolites.mfile"/></li><li>Fichier .rfile : Nom du Fichier : <input type="text" value="reactions.rfile"/></li><li>Fichier .grfile : Nom du fichier : <input type="text" value="generules.grfile"/></li><li>Fichier .sfile : Nom du fichier : <input type="text" value="stoichiometry.sfile"/></li><li>Fichier .rvfile : Nom du fichier : <input type="text" value="reversibility.rvfile"/></li></ul>

FIGURE: Partie de la page du choix des options

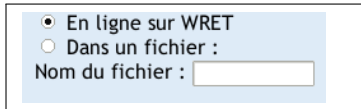
13/26

# Options de lancement - Choix

## Choix des paramètres de la commande

- ▶ `radioboutons` et zones de texte dans un formulaire
- ▶ Paramètre de la commande dans l'attribut *value*
- ▶ Attribut *name* identique pour les `radioboutons` d'une même section → un seul coché
- ▶ Paramètres par défaut pré-cochés avec l'attribut *checked="checked"*

# Options de lancement - Choix



☒ En ligne sur WRET  
☐ Dans un fichier :  
Nom du fichier :

FIGURE: Exemple

```
<input type="radio" name="choix1" value="log console"  
checked="checked">
```

```
<input type="radio" name="choix1" value="log file">  
<input type="text" name="log_nomFichier" size="10" id="textel">
```

# Options de lancement - Récupération

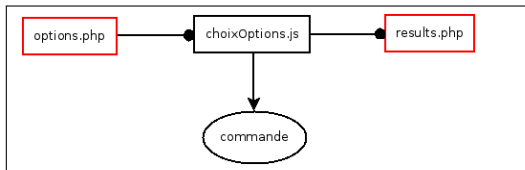


FIGURE: Diagramme d'organisation pour les options

## JavaScript pour

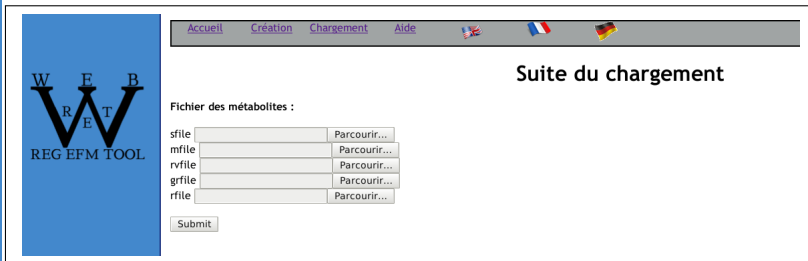
- ▶ Récupérer l'attribut *value*
- ▶ Générer la commande de lancement
- ▶ Commande → cookie



# Chargement

But

Charger les fichiers d'un réseau pré-existant



The screenshot shows a web interface for the WRET REG EFM TOOL. On the left is a blue sidebar with the logo 'WRET REG EFM TOOL'. The main content area has a grey navigation bar with links: 'Accueil', 'Création', 'Chargement' (highlighted), and 'Aide'. To the right of the links are three flags: UK, France, and Germany. Below the navigation bar, the title 'Suite du chargement' is displayed. The main section is titled 'Fichier des métabolites :'. It contains five rows of input fields for file names: 'sfile', 'mfile', 'rvfile', 'grfile', and 'rfile'. Each input field is followed by a 'Parcourir...' button. At the bottom of this section is a 'Submit' button.

WRET  
REG EFM TOOL

Accueil Création **Chargement** Aide

UK France Germany

Suite du chargement

Fichier des métabolites :

sfile  Parcourir...

mfile  Parcourir...

rvfile  Parcourir...

grfile  Parcourir...

rfile  Parcourir...

Submit

FIGURE: Page de chargement des fichiers

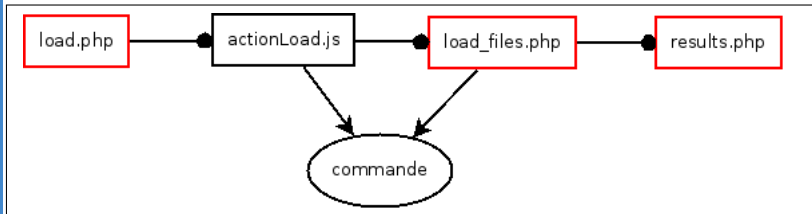


FIGURE: Diagramme d'organisation pour le chargement

- ▶ **Récupération** des données :
  - ▶ Une fonction PHP copie les fichiers dans le répertoire courant
  - ▶ Utilisation de la fonction PHP `move_uploaded_file()`
- ▶ **Compléter** la commande générée

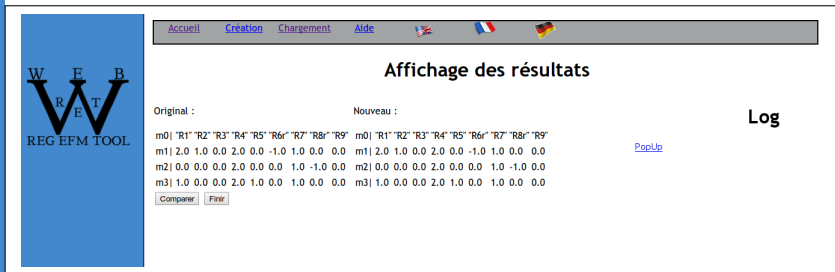


FIGURE: Page d'affichage des résultats

- ▶ **Exécution** de la commande par une fonction PHP  
`shell_exec()`
- ▶ **Récupération** des résultats et **Parsage**

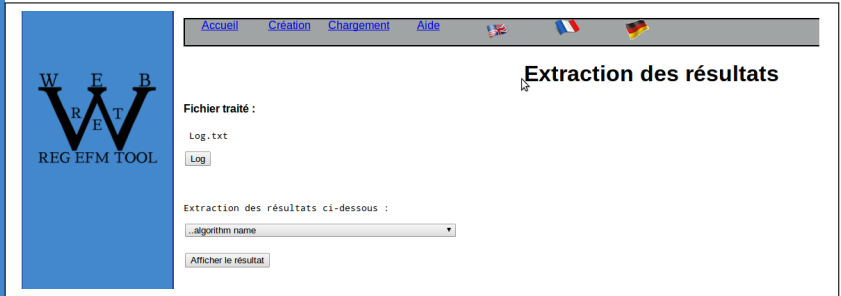


FIGURE: Page d'extraction des résultats

## Affichage des Résultats

- ▶ En fonction de la session : comparaison ou non
- ▶ Possibilité d'afficher le *log* complet ou sélection d'un mot-clé

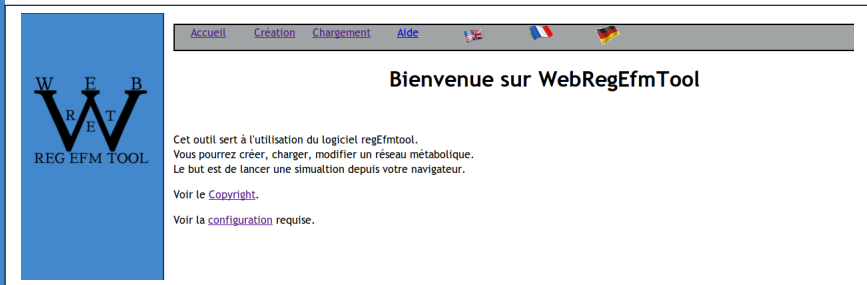


FIGURE: Page d'accueil

# Ergonomie - Mise en page

Enregistrement		
Affichage des résultats	Type de messages d'erreurs / Niveau d'informations sur le déroulement des calculs	Format/méthode de l'enregistrement
<ul style="list-style-type: none"><li>• En ligne sur WRET</li><li>• Dans un fichier :</li></ul> Nom du fichier : <input type="text"/>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Warning</li><li>• Config</li><li>• Info</li><li>• Fine</li><li>• Finer</li><li>• Finest</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Par défaut</li><li>• Complet</li></ul>

FIGURE: Exemple d'organisation dans la page

Organisation par `<div>` :

- ▶ `div part`
- ▶ `div subPart`
- ▶ `div buttons`

# Ergonomie - Langues

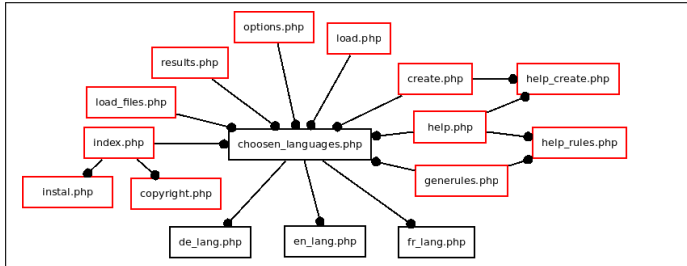


FIGURE: Diagramme d'organisation pour le changement de langue

## Exemple du titre de la page d'accueil

```
<?php echo TXT\_SITE\_TITLE; ?>
```

```
define('TXT_SITE_TITLE', "Page d'accueil de WebRegEfmTool");
define('TXT_SITE_TITLE', "Homepage of WebRegEfmTool");
define('TXT_SITE_TITLE', "Starseite von WebRegEfmTool");
```

# Difficultés et améliorations

## Difficultés

- ▶ Navigateur :
  - ▶ Fonction `move_uploaded_file()`
  - ▶ Récupération des fichiers `$_FILES`
- ▶ Affichage des résultats
- ▶ Configuration du serveur Web

## Améliorations

- ▶ Ajout et amélioration de fonctionnalités (ex : édition)
- ▶ Intégrer d'autres logiciels tels que METATOOL



## Conclusion

- ▶ Réalisation d'une interface graphique pour le logiciel de calculs de modes élémentaires *regEfmtool*
- ▶ Familiarisation avec les langages propres aux communications et protocoles Web

Merci de votre attention