

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

20 février 2013

Création d'un nouveau réseau

Règles des gènes

Choix des options de lancement

Chargement

Résultats

Ergonomie de l'interface

Difficultés et améliorations

Sujet

- ▶ Métabolisme d'une cellule :
 - ▶ Transformations moléculaires et énergétiques
 - ▶ Réactions métaboliques
- ▶ Représentation visuelle des grandes fonctions métaboliques.
- ▶ Quelques logiciels disponibles.

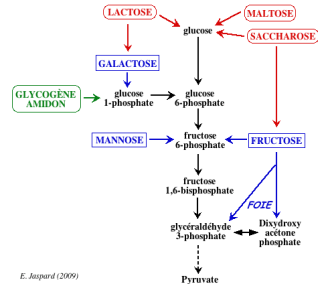


FIGURE: Réseaux Métaboliques de la glycolyse

Contexte - RegEfmttool

Objectif

- ▶ Interface graphique
- ▶ Langages Web

Regular Elementary flux mode tool


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

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



REG EFM TOOL

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

Création d'un nouveau réseau

Initialisez vos fichiers avant de créer un nouveau réseau

[Initialiser fichiers](#)

Ecrivez une nouvelle réaction

[Aide](#)

reaction :

Réversible :

☐ Oui
 ☐ Non

Attention !

Pas d'espaces dans les noms, utiliser un underscore
 La syntaxe des réactions est la suivante :
 Nom_reaction : 2 reactif1 + 5 reactif2 => 3 prod1
 Attention a laisser un espace entre le coefficient

[Ajouter](#)

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 *regEfmtool*

- Réversibilité
- Métabolites
- Enzymes
- Stœchiométrie
- Generules

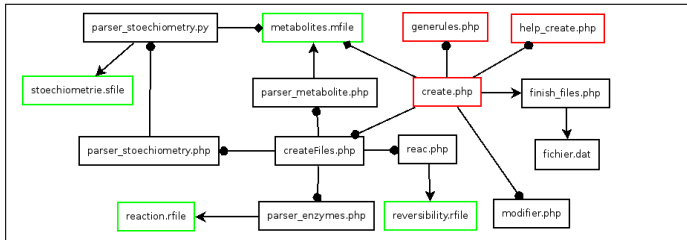


FIGURE: Diagramme de création

Création - Fichiers

Réactions et réversibilité

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

Nom 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*

Exportation au format *DAT*

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

FIGURE: Choix des métabolites internes et externes

Modifications

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

Réactions déjà entrées :

```

reaction : reag1 + reag2 ==> 2 prod1 + 4 prod2 .
reaction : reag1 + reag2 ==> 2 procd1 + 4 procd2 .
reaction : reag1 + reag2 ==> 2 prcod1 + 4 prcod2 .
    
```

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

Modifier

FIGURE: Zone de modification

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



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

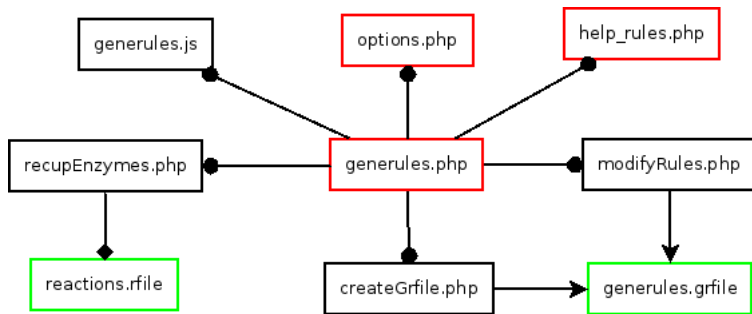


FIGURE: Diagramme de création des règles

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

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

Options de lancement - Choix





Accueil


Cotation

Chargement

Aide







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">* En ligne sur WRET<input type="checkbox"/> Dans un fichier : Nom du fichier : <input type="text"/>	<ul style="list-style-type: none"><input type="checkbox"/> Warning<input type="checkbox"/> Config<input type="checkbox"/> Info<input type="checkbox"/> Fine<input type="checkbox"/> Finer* <input checked="" type="checkbox"/> Finest	<ul style="list-style-type: none"><input type="checkbox"/> Par défaut* <input checked="" type="checkbox"/> Complet

Type des fichiers stoechiométriques

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

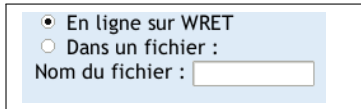
FIGURE: Partie de la page du choix des options

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

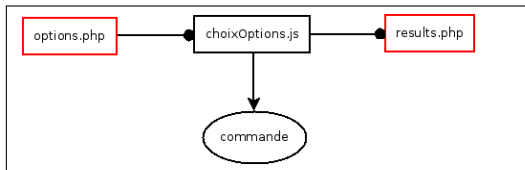


FIGURE: Diagramme d'organisation pour les options

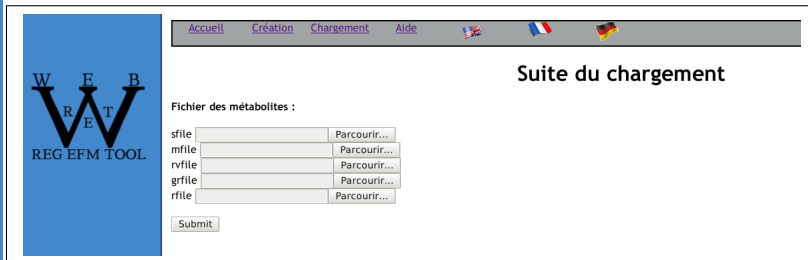
JavaScript pour

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




Chargement

But

Charger les fichiers d'un réseau pré-existant



W R E T
REG EFM TOOL

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

Suite du chargement

Fichier des métabolites :

sfile	<input type="text"/>	<input data-bbox="573 570 662 591" type="button" value="Parcourir..."/>
mfile	<input type="text"/>	<input data-bbox="581 593 662 614" type="button" value="Parcourir..."/>
rvfile	<input type="text"/>	<input data-bbox="581 616 662 637" type="button" value="Parcourir..."/>
grfile	<input type="text"/>	<input data-bbox="581 639 662 659" type="button" value="Parcourir..."/>
rfile	<input type="text"/>	<input data-bbox="573 662 662 682" type="button" value="Parcourir..."/>

FIGURE: Page de chargement des fichiers

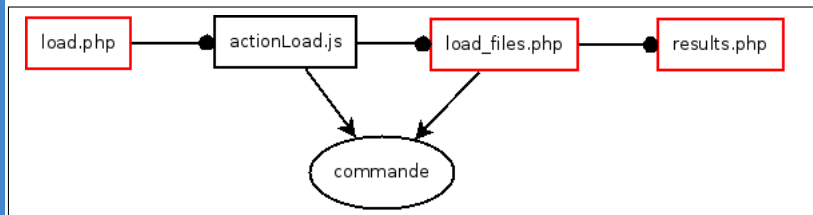


FIGURE: Diagramme d'organisation pour le chargement

- ▶ **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

W R E T
REG EFM TOOL

Accueil Création Chargement Aide

Affichage des résultats

Original : Nouveau :

Log

[PopUp](#)

Comparer Finir

Original	Nouveau
m0 "R1" "R2" "R3" "R4" "R5" "R6r" "R7" "R8r" "R9"	m0 "R1" "R2" "R3" "R4" "R5" "R6r" "R7" "R8r" "R9"
m1 2.0 1.0 0.0 2.0 0.0 -1.0 1.0 0.0 0.0	m1 2.0 1.0 0.0 2.0 0.0 -1.0 1.0 0.0 0.0
m2 0.0 0.0 0.0 2.0 0.0 0.0 1.0 -1.0 0.0	m2 0.0 0.0 0.0 2.0 0.0 0.0 1.0 -1.0 0.0
m3 1.0 0.0 0.0 2.0 1.0 0.0 1.0 0.0 0.0	m3 1.0 0.0 0.0 2.0 1.0 0.0 1.0 0.0 0.0

FIGURE: Page d'affichage des résultats

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

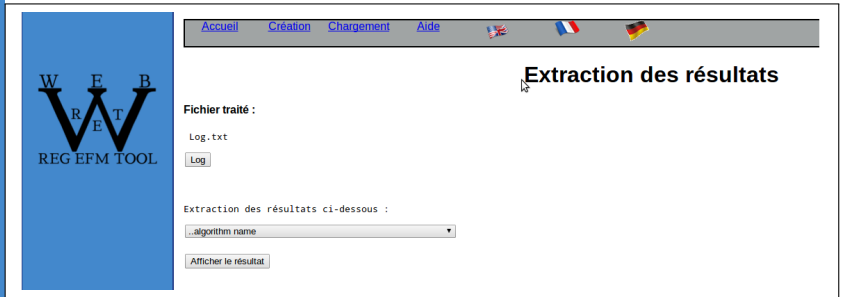


FIGURE: Page d'extraction des résultats

Affichage des Résultats

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

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

Bienvenue sur WebRegEfmTool

Cet outil sert à l'utilisation du logiciel regEfmtool.
Vous pourrez créer, charger, modifier un réseau métabolique.
Le but est de lancer une simulation depuis votre navigateur.

Voir le [Copyright](#).

Voir la [configuration](#) requise.

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">• En ligne sur WRET• Dans un fichier : Nom du fichier : <input type="text"/>	<ul style="list-style-type: none">• Warning• Config• Info• Fine• Finer• Finest	<ul style="list-style-type: none">• Par défaut• Complet

FIGURE: Exemple d'organisation dans la page

Organisation par `<div>` :

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

Ergonomie - Langues

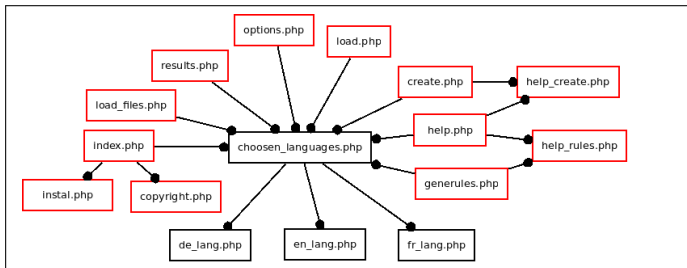


FIGURE: Diagramme d'organisation pour le changement de langue

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 (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