

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



Venir voir ce poster (**n°178**) à JOBIM ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



Venir voir ce poster (**n°178**) à JOBIM ?

Journées Ouvertes en Biologie, Informatique et Mathématiques

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



Venir voir ce poster (**n°178**) à JOBIM ?

Journées Ouvertes en **Biologie**, Informatique et Mathématiques

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



Venir voir ce poster (**n°178**) à JOBIM ?

Journées Ouvertes en Biologie, **Informatique** et Mathématiques

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



Venir voir ce poster (**n°178**) à JOBIM ?

Journées Ouvertes en Biologie, Informatique et **Mathématiques**

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ?



# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatitieux ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatiticiens ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations différentielles ; réseaux booléens

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatitens ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations diff ; réseaux booléens

informaticiens théoriciens ?



# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatiticiens ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations différentielles ; réseaux booléens

informaticiens théoriciens ?

identification d'un réseau d'automates booléens à partir de sa table de transition d'état incomplète et inconsistante et en donnant sa structure ; modes de mise à jour (synchrone VS asynchrone)

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1,2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatitieux ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations différentielles ; réseaux booléens

informaticiens théoriciens ?

identification d'un réseau d'automates booléens à partir de sa table de transition d'état incomplète et inconsistante et en donnant sa structure ; modes de mise à jour (synchrone VS asynchrone)

stateux ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1,2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatitens ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations différentielles ; réseaux booléens

informaticiens théoriciens ?

identification d'un réseau d'automates booléens à partir de sa table de transition d'état incomplète et inconsistante et en donnant sa structure ; modes de mise à jour (synchrone VS asynchrone)

stateux ? identification de classificateur booléen sans surapprentissage ;

entropie de Shannon

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatitens ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations différentielles ; réseaux booléens

informaticiens théoriciens ?

identification d'un réseau d'automates booléens à partir de sa table de transition d'état incomplète et inconsistante et en donnant sa structure ; modes de mise à jour (synchrone VS asynchrone)

statisticiens ? identification de classificateur booléen sans surapprentissage ;

entropie de Shannon

des gens qui n'ont pas levé la main ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



biologistes ? division cellulaire de la levure à fission

modelisateurs ? éviter les modèles « Kleenex », valorisez 2 fois votre travail, en 3 clicks ! o/

gens intéressés par l'open science et la reproductibilité ?

SBML : format standard d'échange de modèles en biologie ;

technologies du web sémantique, Linked Open Dataset, ontologies, ...

automatitens ? systèmes dynamiques non linéaires ; équations différentielles ; réseaux booléens

informaticiens théoriciens ?

identification d'un réseau d'automates booléens à partir de sa table de transition d'état incomplète et inconsistante et en donnant sa structure ; modes de mise à jour (synchrone VS asynchrone)

statisticiens ? identification de classificateur booléen sans surapprentissage ;

entropie de Shannon

des gens qui n'ont pas levé la main ? j'aurai des bonbons ! <3

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)

---



Venir voir ce poster (**n°178**) à JOBIM ?

# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)



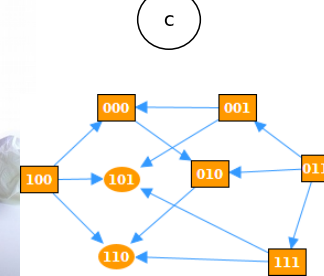
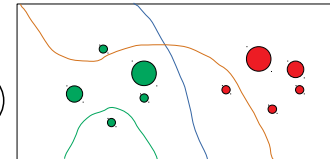
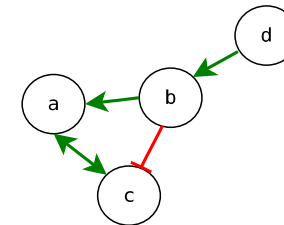
## Venir voir ce poster (n°178) à JOBIM ?

$$\begin{aligned} \frac{d[Cdc13_7]}{dt} &= k_1 M - (k_2' + k_2''[Ste9] + k_2'''[Slp1])[Cdc13_7], \\ \frac{d[preMPPF]}{dt} &= k_{wee}[Cdc13_7] - [preMPPF] - k_{25}[preMPPF] - (k_2' + k_2''[Ste9] + k_2'''[Slp1])[preMPPF], \\ \frac{d[Ste9]}{dt} &= (k_4' + k_4''[Slp1]) \frac{1 - [Ste9]}{J_3 + 1 - [Ste9]} - (k_4[SK] + k_4[MPPF]) \frac{[Ste9]}{J_4 + [Ste9]}, \\ \frac{d[Slp1_7]}{dt} &= k_5' + k_5'' \frac{[MPPF]^2}{[MPPF]^4 + [MPPF]^2} - k_6[Slp1_7], \\ \frac{d[Slp1]}{dt} &= k_7[IEP] \frac{[Slp1_7] - [Slp1]}{J_7 + [Slp1_7] - [Slp1]} - k_8 \frac{[Slp1]}{J_8 + [Slp1]} - k_9[Slp1], \\ \frac{d[IEP]}{dt} &= k_9[MPPF] \frac{1 - [IEP]}{J_9 + 1 - [IEP]} - k_{10} \frac{[IEP]}{J_{10} + [IEP]}, \\ \frac{d[Rum1_7]}{dt} &= k_{11} - (k_{12} + k_{12}'[SK] + k_{12}''[MPPF])[Rum1_7], \\ \frac{d[SK]}{dt} &= k_{13}[TF] - k_{14}[SK], \\ \frac{dM}{dt} &= \mu M, \\ [Trimer] &= \frac{2[Cdc13_7][Rum1_7]}{\Sigma + \sqrt{\Sigma^2 - 4[Cdc13_7][Rum1_7]}}, \\ [MPPF] &= \frac{([Cdc13_7] - [preMPPF])[Cdc13_7] - [Trimer]}{[Cdc13_7]}, \\ [TF] &= G(k_{13}M, k_{14}'[a] + k_{14}''[MPPF], J_{13}, J_{14}), \end{aligned}$$

Cdc13 synthesis and degradation:  
 $k_1 = 0.03, k_2' = 0.03, k_2'' = 1, k_2''' = 0.1$ .  
 Ste9 activation and inactivation:  
 $k_4' = 1, k_4'' = 10, J_3 = 0.01, k_4' = 2, k_4 = 35, J_4 = 0.01$ .  
 Slp1 synthesis, degradation, activation and inactivation:  
 $k_5' = 0.005, k_5'' = 0.3, k_6 = 0.1, J_5 = 0.3$   
 $k_7 = 1, k_8 = 0.25, J_7 = 0.001, J_8 = 0.001$ .  
 IE activation and inactivation:  
 $k_9 = 0.1, k_{10} = 0.04, J_9 = 0.01, J_{10} = 0.01$ .  
 Rum1 synthesis, degradation and inhibition:  
 $k_{11} = 0.1, k_{12} = 0.01, k_{12}' = 1, k_{12}'' = 3, K_{dis} = 0.001$ .  
 SK synthesis and degradation:  
 $k_{13} = 0.1, k_{14} = 0.1$ .  
 TF activation and inactivation:  
 $k_{13} = 1.5, k_{14}' = 1, k_{14}'' = 2, J_{13} = 0.01$ .  
 Wee1 activation and inactivation:  
 $V_{wee} = 0.25, V_{wee} = 1, J_{wee} = 0.01$ .  
 Cdc25 activation and inactivation:  
 $V_{25} = 1, V_{25} = 0.25, J_{25} = 0.01, J_{25}$   
 Rate of typhosphorylation and dephosphorylation:  
 $k_{wee}^+ = 0.15, k_{wee}^- = 1.3, k_{25}^+ = 0.05, k_{25}^-$   
 Growth rate:  
 $\mu = 0.005$ .

$$\begin{cases} da/dt = \alpha(t, a, b, c, d) \\ db/dt = \beta(t, a, b, c, d) \\ dc/dt = \gamma(t, a, b, c, d) \\ dd/dt = \delta(t, a, b, c, d) \end{cases}$$

$$G(X, F); F = \begin{cases} x_a(t+1) = f_a(X(t)) \\ x_b(t+1) = f_b(X(t)) \\ x_c(t+1) = f_c(X(t)) \\ x_d(t+1) = f_d(X(t)) \end{cases}$$



# Towards an automatic conversion from SBML core to SBML qual

Athénaïs Vaginay<sup>(1, 2)</sup>, Malika Smail-Tabbone<sup>(1)</sup>, Taha Boukhobza<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup>LORIA (Université de Lorraine, CNRS, Inria); <sup>(2)</sup>CRAN (Université de Lorraine, CNRS)



Venir voir ce poster (n°178) à JOBIM ? **OUI !**  
 Jeudi 04 juillet @ Nantes ! ;-)

$$\begin{aligned} \frac{d[Cdc13_7]}{dt} &= k_1 M - (k_2^+ + k_2^-[Ste9] + k_2^+[Slp1])[Cdc13_7], \\ \frac{d[preMPF]}{dt} &= k_{wee}[Cdc13_7] - [preMPF] - k_{25}[preMPF] - (k_2^+ \\ &\quad + k_2^-[Ste9] + k_2^+[Slp1])[preMPF], \\ \frac{d[Ste9]}{dt} &= (k_3^+ + k_3^-[Slp1]) \frac{1 - [Ste9]}{J_3 + 1 - [Ste9]} - (k_4^+ [SK] \\ &\quad + k_4^-[MPF]) \frac{[Ste9]}{J_4 + [Ste9]}, \\ \frac{d[Slp1_7]}{dt} &= k_5^+ + k_5^-[MPF]^2 - k_6^-[Slp1_7], \\ \frac{d[Slp1]}{dt} &= k_7^+ [IEP] \frac{[Slp1_7] - [Slp1]}{J_7 + [Slp1_7] - [Slp1]} \\ &\quad - k_8^-[Slp1] - k_8^+[Slp1], \\ \frac{d[IEP]}{dt} &= k_9^+ [MPF] \frac{1 - [IEP]}{J_9 + 1 - [IEP]} - k_{10}^-[IEP], \\ \frac{d[Rum1_7]}{dt} &= k_{11} - (k_{12} + k_{12}^-[SK] + k_{12}^+[MPF])[Rum1_7], \\ \frac{d[SK]}{dt} &= k_{13} [TF] - k_{14} [SK], \\ \frac{dM}{dt} &= \mu M, \\ [Trimer] &= \frac{2[Cdc13_7][Rum1_7]}{\Sigma + \sqrt{\Sigma^2 - 4[Cdc13_7][Rum1_7]}}, \\ [MPF] &= \frac{([Cdc13_7] - [preMPF])[Cdc13_7] - [Trimer]}{[Cdc13_7]}, \\ [TF] &= G(k_{13} M, k_{13}^+[MPF], J_{13}, J_{14}), \end{aligned}$$

Cdc13 synthesis and degradation:  
 $k_1 = 0.03, k_2^+ = 0.03, k_2^- = 1, k_2^* = 0.1$ .  
 Ste9 activation and inactivation:  
 $k_3^+ = 1, k_3^* = 10, J_3 = 0.01, k_4^+ = 2, k_4^- = 35, J_4 = 0.01$ .  
 Slp1 synthesis, degradation, activation and inactivation:  
 $k_5^+ = 0.005, k_5^* = 0.3, k_6^- = 0.1, J_6 = 0.3$   
 $k_7^+ = 1, k_8^- = 0.25, J_7 = 0.001, J_8 = 0.001$ .  
 IE activation and inactivation:  
 $k_9^- = 0.1, k_{10} = 0.04, J_9 = 0.01, J_{10} = 0.01$ .  
 Rum1 synthesis, degradation and inhibition:  
 $k_{11} = 0.1, k_{12} = 0.01, k_{12}^+ = 1, k_{12}^- = 3, K_{diss} = 0.001$ .  
 SK synthesis and degradation:  
 $k_{13} = 0.1, k_{14} = 0.1$ .  
 TF activation and inactivation:  
 $k_{15} = 1.5, k_{16}^- = 1, k_{16}^* = 2, J_{15} = 0.01$ .  
 Wee1 activation and inactivation:  
 $V_{wee} = 0.25, V_{wee}^- = 1, J_{wee} = 0.01$ .  
 Cdc25 activation and inactivation:  
 $V_{25} = 1, V_{25}^- = 0.25, J_{25} = 0.01, J_{25}^-$   
 Rate of typhosphorylation and dephosphorylation:  
 $k_{wee}^- = 0.15, k_{wee}^* = 1.3, k_{25}^- = 0.05, k_{25}^*$   
 Growth rate:  
 $\mu = 0.005$ .

$$\begin{cases} da/dt = \alpha(t, a, b, c, d) \\ db/dt = \beta(t, a, b, c, d) \\ dc/dt = \gamma(t, a, b, c, d) \\ dd/dt = \delta(t, a, b, c, d) \end{cases}$$

$$G(X, F); F = \begin{cases} x_a(t+1) = f_a(X(t)) \\ x_b(t+1) = f_b(X(t)) \\ x_c(t+1) = f_c(X(t)) \\ x_d(t+1) = f_d(X(t)) \end{cases}$$

