

# Hyperstructure et modélisation de chimie artificielle dans le langage MGS

Olivier MICHEL, Jean-Louis GIAVITTO

LaMI<sup>1</sup>, Équipe SPÉCIF, UMR 8042 CNRS, Université d'Évry val d'Essonne, GENOPOLE  
Tour Évry-2, 523 Place des terrasses de l'agora, 91000 Évry Cedex

2 décembre 2003

**Nombre d'étudiants :** 1 binôme

**Mots-clés :** bio-informatique, simulation, modélisation des réseaux biochimiques d'interactions, réseaux auto-catalytiques, automate cellulaire, algèbre combinatoire, lambda-calcul, chimie artificielle, hyperstructure.

**Public visé :** DEA Informatique, DEA Bio-Informatique, stage ENS, stage IIE, TER de maîtrise, stage Polytechnique.

## Contexte de l'étude

Le projet MGS développe un langage de programmation original dédié à la modélisation et la simulation de processus biologiques à structure dynamique. Pour ce faire, MGS permet la représentation d'organisations complexes entre des entités variables et hétérogènes, ainsi que leur transformation par des règles locales. Ces travaux trouvent leurs inspirations dans les travaux de J. Von Neuman sur les automates cellulaires, A. Lindenmayer sur les L systèmes, G. Paun sur les P systèmes, G. Berry *et al.* sur la CHAM et la réécriture de multi-ensembles.

La structure de données fondamentale en MGS est la *collection topologique*. Une collection topologique est un ensemble d'éléments organisés par une relation de voisinage. Une *transformation* permet de spécifier de nouvelles fonctions sur les collections par des cas filtrant des *sous-collections*. Ces notions permettent d'unifier dans le même cadre formel les différents modèles de calculs cités plus haut. Pour chacun des modèles il suffit de choisir le bon voisinage pour la collection utilisée. Un point remarquable est l'existence d'un langage de filtres, utilisé pour écrire les règles d'une transformation, qui est commun à tous les types de collection. Ce langage de filtres se fonde sur la notion de voisinage et de chemin.

## Sujet du stage

Plusieurs auteurs ont proposé d'abstraire un ensemble de composants chimiques en interaction par un multi-ensemble de lambda-termes s'appliquant les uns aux autres. L'étude des cycles catalytiques stables revient alors à étudier une sous-algèbre combinatoire stable.

Cette approche doit cependant être sérieusement aménagée si on veut tenir compte de l'organisation spatiale des interactions, de la non-symétrie des interactions, du typage des entités biochimiques, de la consommation des ressources, etc.

## Travaux à effectuer

L'objectif du stage est de développer en MGS plusieurs modèles issus de la chimie artificielle. Une attention particulière sera portée aux variantes faisant apparaître une organisation spatiale. Ainsi, certains biochimistes ont proposé de localiser les réactions en utilisant un automate cellulaire. Ce type de simulation devrait s'exprimer particulièrement simplement en MGS puisqu'il est possible de manipuler uniformément des tableaux et des multi-ensembles.

Si la durée du stage le permet, on étudiera comment certaines techniques informatiques peuvent être utilisées pour tenir compte des contraintes supplémentaires à imposer aux entités biochimiques (le typage des lambda-termes peut-il asymétriser les interactions, des notions de logiques linéaires peuvent-elles être utilisées pour rendre compte de la consommation des ressources, peut-on utiliser des techniques d'analyse statique pour prédire la structure des cycles et des hyperstructures, etc.).

---

<sup>1</sup>Contacts : par courrier électronique : michel, giavitto@ReMoVeMeFIRST.lami.univ-evry.fr. Des informations supplémentaires sont disponibles à partir de la page : <http://mgs.lami.univ-evry.fr>