



Partenaires

- ◆ INRA UR BIA, Nantes (Kamal Kansou et Estelle Bonnin)
- ◆ INRA UMR FARE, Reims (Caroline Rémond, Gabriel Paës, Jean Tayeb)
- ◆ Informatics Institute of University of Amsterdam (Bert Bredeweg)

Références biblio.

Testing scientific models using Qualitative Reasoning: Application to cellulose hydrolysis

(2017) Scientific reports

Kansou K, Rémond C, Paës G, Bonnin A, Tayeb J, Bredeweg B

CONTACT

Kamal Kansou
kamal.kansou@inra.fr

Biopolymères, Interactions,
Assemblages (BIA)

Tester les explications scientifiques par la modélisation : l'exemple de la dégradation enzymatique

L'analyse bibliographique, fondamentale en recherche, est affectée par la surinformation due à l'accumulation inexorable des publications scientifiques. Afin de faciliter le traitement informatique de l'information scientifique, nous avons proposé une méthode pour évaluer et intégrer les modèles scientifiques issus de la bibliographie. Elle a été appliquée à la compréhension des mécanismes limitant l'hydrolyse enzymatique de la cellulose au cœur, notamment, de la fabrication de biocarburants.

► RESULTATS

Notre méthode consiste à comparer plusieurs modèles scientifiques concurrents à un ensemble d'observations extraites de la bibliographie. Ces observations décrivent des comportements cibles du système que l'on va chercher à reproduire par la simulation et donc à expliquer. Ces comportements peuvent par exemple être le taux d'hydrolyse de la cellulose qui augmente puis décroît au cours de la réaction ou l'ajout d'une enzyme en cours de réaction qui entraînera une accélération du processus d'hydrolyse. Pour s'affranchir de l'effet contexte qui va se refléter surtout dans les valeurs numériques, notre méthode suppose une abstraction du domaine de valeurs dans un espace qualitatif ainsi que la traduction des modèles cinétiques numériques en modèles qualitatifs. Les simulations générées avec les modèles qualitatifs sont confrontées aux comportements cibles, si elles sont cohérentes alors le modèle incarnera une interprétation scientifique plausible du comportement.

Nous avons appliqué la méthode au test de deux modèles cinétiques publiés pouvant expliquer la limitation de l'hydrolyse de la cellulose, l'un impliquant une saturation de la surface hydrolysable de la cellulose par les enzymes, et l'autre la présence d'obstacles à la surface de la cellulose perturbant l'action des enzymes. Nous avons montré que, pris séparément, aucun des deux modèles ne pouvait expliquer complètement les comportements cibles. Un troisième modèle intégrant les deux premiers pouvait en revanche expliquer tous les comportements.

► PERSPECTIVES

Cette recherche fait appel à des techniques et des outils d'Intelligence Artificielle pour modéliser la connaissance et des aspects du raisonnement scientifique. Le travail sur la méthode se poursuit afin d'automatiser la procédure, par exemple pour cribler des modèles qualitatifs par rapport à des comportements cibles, ou pour faciliter l'extraction d'informations d'un ensemble de publications.