
République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de L'enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Seddik Ben Yahia
Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie
Département de la biologie



Spécialité : Toxicologie fondamentale et appliquée
Année : Première Année Master Toxicologie
Module : Logiciels Libres et Open Source

Rapport TP

CellDesigner – Outil de Modélisation et Simulation en Biologie des Systèmes

Préparé par: Djamaa Hana
Djamaa Dyna
Bensaci Fatma Ward Ghali

Proposé par: Dr Bensalem

Rapport de TP

1. Présentation générale de l'outil

CellDesigner est un logiciel de modélisation, visualisation et simulation de réseaux biologiques complexes utilisé principalement en biologie des systèmes : il permet de représenter graphiquement des réseaux biochimiques, des voies de signalisation et des réseaux de régulation génétique. Conçu à l'origine par Akira Funahashi et ses collaborateurs au Systems Biology Institute au Japon, il repose sur une approche dite process diagram qui tient compte des états des molécules et des transitions entre ces états, offrant ainsi une représentation plus détaillée que les diagrammes classiques.

CellDesigner permet à la fois la création de modèles biologiques à partir d'une interface graphique et leur simulation dynamique en intégrant des solveurs numériques et des outils d'analyse externes. L'outil se conforme aux standards importants de la communauté, notamment le Systems Biology Markup Language (SBML) et le Systems Biology Graphical Notation (SBGN), favorisant l'échange de modèles et la collaboration entre applications.

2. Fonctionnalités principales:

• Modélisation graphique de réseaux biologiques

CellDesigner propose une interface graphique intuitive pour dessiner des réseaux biochimiques, incluant réactions, espèces moléculaires, enzymes et régulations. Les diagrammes utilisent la notation SBGN, ce qui standardise la représentation et facilite la compréhension des interactions complexes.

• Compliance SBML

CellDesigner lit et écrit des fichiers au format SBML, un standard ouvert pour les modèles de réseaux biologiques. Cela permet l'échange facile de modèles avec plus de 85 autres logiciels compatibles SBML.

• Simulation intégrée

L'outil intègre des solveurs d'équations différentielles ordinaires (ODE) tels que SBML ODE Solver et peut se connecter à des logiciels de simulation comme COPASI pour effectuer des analyses temporelles et des recherches de paramètres.

• Intégration avec des bases de données

CellDesigner peut se connecter à des bases de données biologiques (ex. PubMed, SGD, iHOP) pour enrichir les modèles et faciliter l'accès à des données biologiques pertinentes.

• Exportation et documentation visuelle

L'outil permet d'exporter les schémas en formats image (PNG, SVG, PDF), facilitant l'intégration dans des publications ou des présentations.

3. Aspects techniques

- Langage et Standards**

CellDesigner est implémenté en Java, ce qui lui assure portabilité sur plusieurs plateformes telles que Windows, macOS et Linux.

Il est pleinement conforme au SBML, un langage XML standard pour encoder des modèles de processus biologiques, ce qui permet l'expansion du modèle dans d'autres outils et plateformes.

La notation SBGN utilisée par CellDesigner assure une représentation unifiée et compréhensible des mécanismes biologiques.

- Architecture logicielle**

CellDesigner fonctionne comme éditeur graphique avec des modules internes pouvant appeler des simulateurs externes via la Systems Biology Workbench (SBW), une plateforme d'intégration logicielle permettant la communication entre applications de biologie des systèmes.

4. Points forts

- Standardisation et compatibilité**

Le support SBML et SBGN confère à CellDesigner une forte interopérabilité avec d'autres outils dans la communauté de la biologie des systèmes, ce qui est essentiel pour le partage et la réutilisation des modèles.

- Visualisation intuitive**

L'interface graphique structurée rend la modélisation biologique plus accessible, même pour des utilisateurs non experts, tout en offrant une représentation précise et sémantiquement riche des états moléculaires.

- Simulation et analyses intégrées**

La possibilité d'effectuer des simulations directement à partir de l'outil sans avoir besoin d'autres logiciels rend le flux de travail plus fluide.

5. Limites et points faibles

- Fonctionnalités avancées limitées**

Bien que puissant pour la construction et la simulation de modèles de réseaux biologiques, CellDesigner ne propose pas nativement des fonctionnalités avancées telles que la conception modulaire de circuits de biologie synthétique ou l'analyse multi-échelle des systèmes, qui nécessitent souvent des plug-ins ou des outils externes.

- **Problèmes d'ergonomie dans certaines configurations**

Des limitations dans les fonctions Undo/Redo, ou des bugs liés à l'export d'images pour de très grands modèles, ont été rapportés.

- **Compatibilité linguistique et plate-forme**

Des problèmes d'affichage linguistique dans des environnements non-anglais sur macOS et Linux ont été signalés, ainsi que des limites d'édition de certains objets complexes comme les hétéromultimères. CellDes

6. Conclusion

CellDesigner demeure un outil essentiel pour les chercheurs et étudiants en biologie des systèmes grâce à sa combinaison de modélisation visuelle, de simulation intégrée et de conformité aux standards reconnus comme SBML et SBGN. Il favorise l'expression claire de réseaux biologiques complexes et la collaboration inter-outils. Même si certaines fonctionnalités avancées sont limitées ou requièrent des extensions, son architecture modulaire et son intégration avec des simulateurs externes en font un logiciel puissant et utile dans les workflows de modélisation biologique.

Partie 02

1. Présentation de Zenodo

Zenodo est une plateforme de dépôt et de partage de productions scientifiques développée par le CERN dans le cadre du programme OpenAIRE. Elle permet aux chercheurs, enseignants et étudiants de déposer gratuitement leurs données scientifiques et de les rendre accessibles à la communauté scientifique mondiale.

La particularité principale de Zenodo est l'attribution automatique d'un DOI (Digital Object Identifier) à chaque dépôt publié, ce qui garantit la traçabilité, la citation académique et la conservation à long terme des données.

- Objectifs de la plateforme Zenodo

- Favoriser la science ouverte (Open Science)
- Assurer l'archivage durable des données scientifiques
- Faciliter la réutilisation et la reproductibilité des recherches
- Améliorer la visibilité des travaux scientifiques

- Les types de contenus hébergés sur Zenodo

Zenodo héberge une grande variété de productions scientifiques, ce qui en fait une plateforme polyvalente adaptée à plusieurs domaines de recherche.

Les principaux types de contenus disponibles sur Zenodo sont :

- Datasets : données expérimentales, observations, résultats de mesures et données issues d'expériences scientifiques.
- Publications scientifiques : articles, rapports techniques et prépublications.
- Logiciels et codes sources : programmes informatiques, scripts et outils développés dans le cadre de projets de recherche.
- Présentations et posters scientifiques : supports de communication utilisés lors de conférences et séminaires.
- Images et vidéos scientifiques : données visuelles issues d'observations ou d'analyses expérimentales.

Cette diversité de contenus permet une large diffusion des résultats scientifiques et favorise leur réutilisation par la communauté académique.

Intérêt de Zenodo pour la science ouverte et la recherche en sciences de la nature et de la vie

Zenodo joue un rôle majeur dans la promotion de la science ouverte (Open Science) en offrant un accès libre et gratuit aux données scientifiques. La plateforme contribue à la transparence et à la reproductibilité des travaux de recherche, éléments essentiels en sciences de la nature et de la vie.

Pour les sciences biologiques, Zenodo permet :

- Le partage ouvert des datasets en biologie cellulaire, génomique et écologie
- La conservation durable des données expérimentales
- La citation fiable des données grâce à l'attribution de DOI
- La collaboration entre chercheurs et institutions

Ainsi, Zenodo constitue un outil stratégique pour le développement et la valorisation de la recherche en sciences de la nature et de la vie.

2. Description des étapes réalisées

2.1. Recherche effectuée (requête utilisée)

Une recherche a été effectuée sur la plateforme Zenodo en utilisant le mot-clé « cell » dans la barre de recherche. Afin d'obtenir uniquement des données scientifiques, un filtre « Dataset » a été appliqué pour exclure les publications et les logiciels.

1- Visiter de la plateForme de zenodo (<http://zenodo.org>)

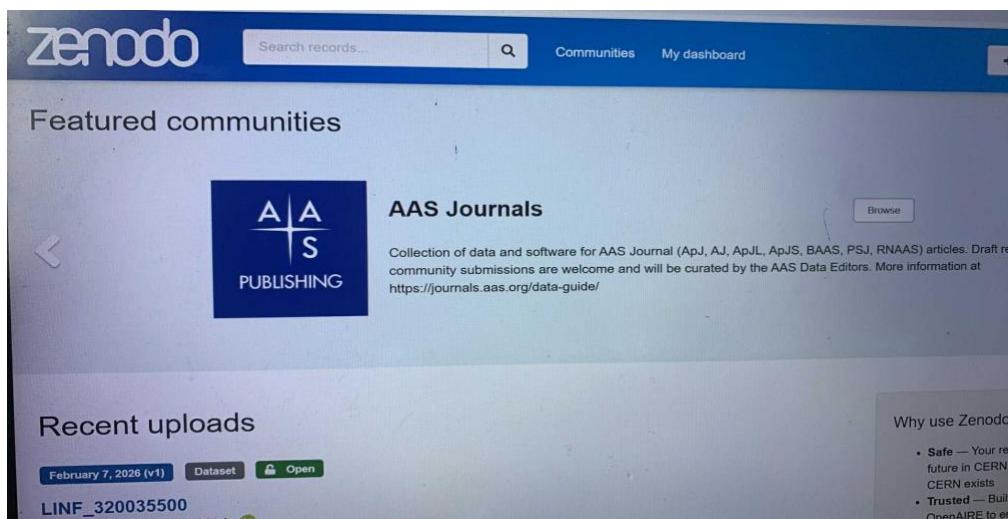


Figure 1 : Page d'accueil de Zenodo

2- Effectuer une recherche de dataset a l'aide au moins dun mots clés (on rechercher sue cell designer)

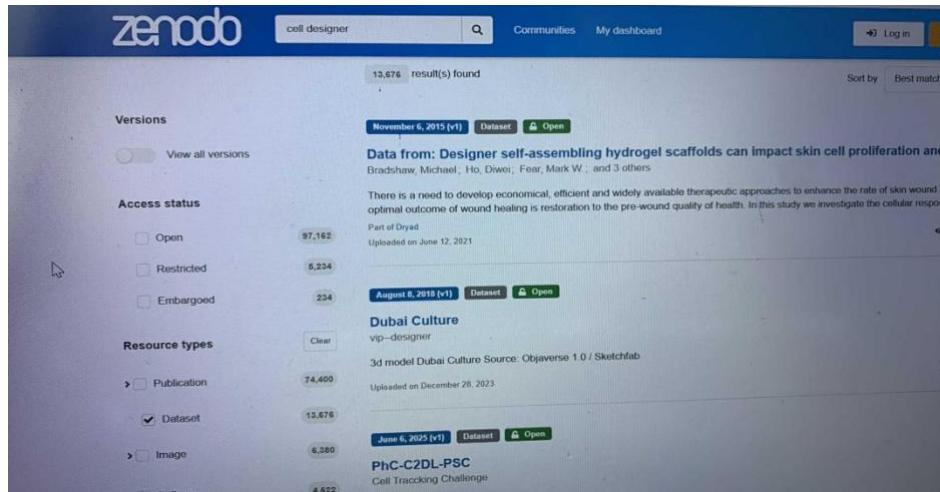


Figure 2 : Résultats de la recherche avec le mot-clé « cell »

3- Sélectionner du dataset partant :

Parmi les résultats obtenus, le dataset intitulé “ PhC-C2DL-PSC ”

Figure 3 : Page du dataset sélectionné PhC-C2DL-PSC.

4- télécharger de dataset partie :

Le téléchargement a été effectué via le bouton Download disponible sur la page du dataset.

Le fichier fournis sous format ZIP contenant des données structurées relatives à la modélisation cellulaire.

Formats disponibles :

- CSV
- TXT
- ZIP

| Nom | Type |
|------------|---------------------|
| 01 | Dossier de fichiers |
| 01_ERR_SEG | Dossier de fichiers |
| 01_GT | Dossier de fichiers |
| 01_ST | Dossier de fichiers |
| 02 | Dossier de fichiers |
| 02_ERR_SEG | Dossier de fichiers |
| 02_GT | Dossier de fichiers |
| 02_ST | Dossier de fichiers |

Figure 4 : Téléchargement du dataset PhC-C2DL-PSC depuis la plateforme Zenodo via le bouton Download.

5 - récupérer les métadonnées associés au dataset en utilisant une de de norme: Ena utiliser la norme : Dublin core

The screenshot shows two side-by-side views of a Zenodo dataset page. The left view displays the main dataset details: 29 views, 13 downloads, and a DOI link. Below this are sections for Versions, External resources (Indexed in OpenAIRE), and Details (including DOI, Resource type: Dataset, and Publisher: Zenodo). The right view is a detailed metadata editor for the dataset, showing sections for Rights (Creative Commons Attribution 4.0 International), Citation (with a link to the dataset), Export (in JSON format), and Technical metadata (last updated June 8, 2025).

Figure 5 : Métadonnées du dataset PhC-C2DL-PSC affichées sur Zenodo selon la norme Dublin Core

6 - extraire et présenter le maximum d'information disponibles :

À partir des métadonnées et des fichiers téléchargés, les informations suivantes ont été extraites :

- Domaine scientifique : biologies cellulaire
- Type d'approche : modélisation et design cellulaire
- Utilisation potentielle : recherche, simulation, enseignement
- Données structurées et exploitables

2.2. Critères de sélection du Dataset

- Le dataset sélectionné répond aux critères suivants :

- Domaine : biologie cellulaire
- Accès libre (Open Access)
- Présence de métadonnées complètes
- Attribution d'un DOI
- Utilisation dans la recherche scientifique

Ces critères garantissent la qualité et la crédibilité scientifique du dataset.

- Navigation sur la plateforme Zenodo

La navigation sur la plateforme Zenodo a été effectuée via le moteur de recherche intégré. Une requête contenant des mots-clés liés aux sciences de la vie, notamment cell, a permis d'identifier plusieurs datasets pertinents.

Le dataset PhC-C2DL-PSC a été sélectionné sur la base de sa pertinence scientifique, de la clarté de sa description et de la disponibilité des métadonnées. La plateforme offre une interface claire facilitant l'accès aux informations et le téléchargement des fichiers.

3. Métadonnés du dataset :

Les métadonnées associées au dataset ont été consultées et organisées selon la norme Dublin Core, permettant une description structurée et standardisée des données scientifiques.

Tableau : Métadonnées (Dublin Core) du Dataset PhC-C2DL-PSC

| Elément (Dublincore) | Information |
|----------------------|--|
| Title | PhC-C2DL-PSC |
| Creator | Cell design , cell tracking , stemcelles |
| Description | Datasets contenant des images de cellule souche pluripotentes acquises par microscopie à contraste de phase , utilisé pour la métallisation et la suivi cellulaire |
| Publisher | Zenodo |
| Contributor | Communauté scientifique -cell tracking challenge |
| Date | June 9,2025 |
| Style | APA |
| Language | English |
| Rights | Creative commons attribution 4.0 International |

Les Références

- Funahashi, A., Matsuoka, Y., Jouraku, A., Morohashi, M., Kikuchi, N. et Kitano, H., CellDesigner 3.5: A Versatile Modeling Tool for Biochemical Networks, Proceedings of the IEEE 96(8):1254-1265 (2008). Keio université.
- CellDesigner Official Documentation – Features and Startup Guides CellDesigner.Org +1.
- CellDesigner Known Issues and Limitations (StartupGuide).
- Systems Biology Markup Language Limitations (StartupGuide).
- Systems Biology Markup Language (SBML) Wikipedia article.
- Zenodo – Open Research Repository CERN & OpenAIRE (<https://zenodo.org>).
- Cell Tracking Challenge – Official Project (<http://celltrackingchallenge.net>).
- Dublin Core Metadata Initiative (DCMI) (<https://www.dublincore.org>).
- Meijering, E., et al. (2012). Tracking in cell and developmental biology. Nature Methods, 9(12), 1157–1166.
- European Commission (2016). Open Innovation, Open Science, Open to the World. (<https://op.europa.eu>)
- OECD (2021). Open Science and Data Sharing. (<https://www.oecd.org>).
- Zenodo – Open Research Repository (<https://zenodo.org>).