

Manuel d'utilisation du logiciel

1. Introduction	3
1. Présentation du logiciel	3
2. Objectifs et fonctionnalités principales	3
3. Exigences système	4
2. Installation et configuration	4
1. Instructions d'installation	4
3. Guide de démarrage rapide	5
1. Compiler le programme	5
2. Exécuter le programme avec des arguments	6
2. Examiner les résultats	6
4. Utilisation du logiciel	7
1. Importation de fichiers de réactions (.ssa)	7
2. Format du fichier de réactions	7
3. Comprendre les résultats	7

1. Introduction

1. Présentation du logiciel

Le logiciel est un outil de modélisation et d'analyse des réactions enzymatiques conçu pour aider les chercheurs et les scientifiques à étudier les réactions biochimiques dans les systèmes biologiques. Ce logiciel permet aux utilisateurs de simuler et d'examiner les réactions enzymatiques, d'identifier les intermédiaires clés et de mieux comprendre les mécanismes qui régissent ces processus.

2. Objectifs et fonctionnalités principales

Le logiciel a pour objectif principal de faciliter l'analyse des réactions enzymatiques et de fournir un aperçu précieux des mécanismes biochimiques qui sous-tendent ces processus. Les principales fonctionnalités du logiciel incluent :

1. Analyseur syntaxique : Interprétation et validation des fichiers de réactions au format .ssa, permettant une description précise des réactions biochimiques.

2. Algorithme d'extraction : Recherche et identification des réactions enzymatiques reliant les substrats et les produits donnés, en tenant compte de la distance (nombre de réactions intermédiaires) spécifiée.

3. Module de sortie : Présentation des résultats d'analyse sous divers formats, facilitant l'interprétation et l'exploitation des informations obtenues.

4. Interface utilisateur conviviale : Facilité d'utilisation pour les chercheurs de tous niveaux, avec un manuel d'utilisation détaillé pour guider les utilisateurs à travers les différentes étapes du processus d'analyse.

3. Exigences système

Les exigences système minimales pour le logiciel sont les suivantes :

Système d'exploitation : Compatible avec les systèmes d'exploitation Windows, macOS et Linux.

Processeur : Processeur dual-core 2 GHz ou supérieur.

Mémoire vive (RAM) : 2 Go de RAM ou plus.

Espace disque : 200 Mo d'espace disque disponible pour l'installation et le stockage des fichiers de réactions et des résultats d'analyse.

Environnement de développement C++ : Un environnement de développement C++ compatible avec le compilateur C++11 ou ultérieur. Et MakeFile, compile le code source et génère le fichier exécutable.

2. Installation et configuration

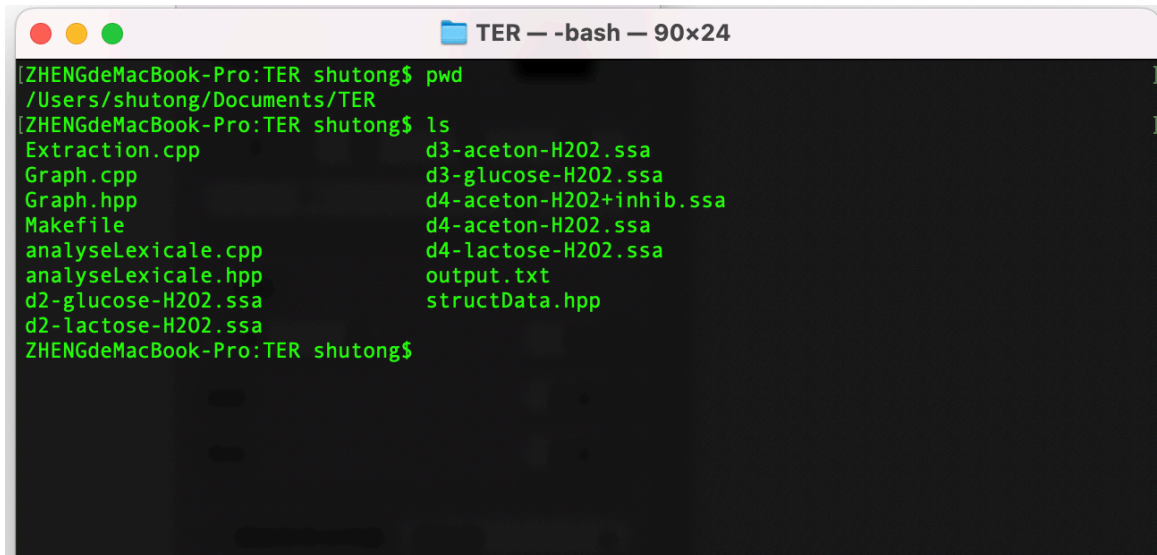
1. Instructions d'installation

1. Téléchargez l'archive du logiciel depuis le github(<https://github.com/ShutongZHENG/TER-BRENDA.git>).
2. Extrayez l'archive dans un répertoire de votre choix.
3. Ouvrez un terminal ou une invite de commandes et naviguez jusqu'au répertoire extrait.
4. Suivez les instructions spécifiques à votre système d'exploitation et à votre environnement de développement C++ pour compiler le programme (voir la section "Compiler le programme").

3. Guide de démarrage rapide

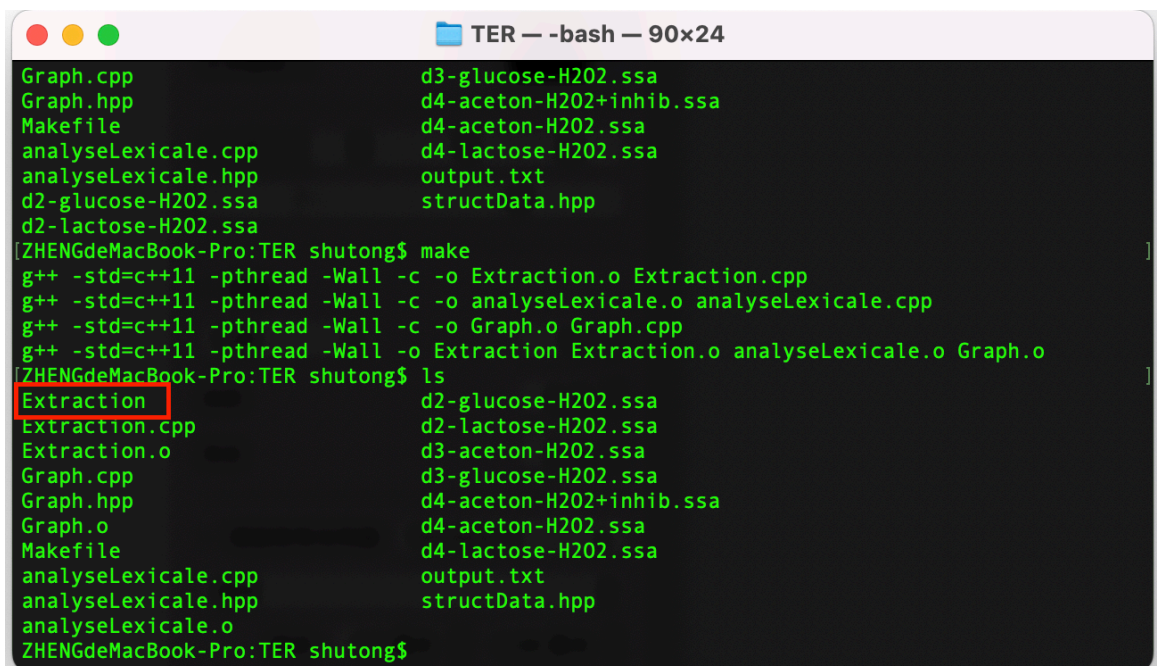
1. Compiler le programme

1. Ouvrez un terminal ou une invite de commandes et naviguez jusqu'au répertoire contenant le code source du logiciel.



```
TER — -bash — 90x24
[ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ pwd
/Users/shutong/Documents/TER
[ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ ls
Extraction.cpp          d3-aceton-H202.ssa
Graph.cpp               d3-glucose-H202.ssa
Graph.hpp               d4-aceton-H202+inhib.ssa
Makefile                d4-aceton-H202.ssa
analyseLexicale.cpp     d4-lactose-H202.ssa
analyseLexicale.hpp     output.txt
d2-glucose-H202.ssa     structData.hpp
d2-lactose-H202.ssa
ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$
```

2. Utilisez la commande make pour compiler le programme à l'aide du Makefile fourni. Le fichier exécutable sera créé dans le répertoire courant.



```
TER — -bash — 90x24
Graph.cpp               d3-glucose-H202.ssa
Graph.hpp               d4-aceton-H202+inhib.ssa
Makefile                d4-aceton-H202.ssa
analyseLexicale.cpp     d4-lactose-H202.ssa
analyseLexicale.hpp     output.txt
d2-glucose-H202.ssa     structData.hpp
d2-lactose-H202.ssa
[ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ make
g++ -std=c++11 -pthread -Wall -c -o Extraction.o Extraction.cpp
g++ -std=c++11 -pthread -Wall -c -o analyseLexicale.o analyseLexicale.cpp
g++ -std=c++11 -pthread -Wall -c -o Graph.o Graph.cpp
g++ -std=c++11 -pthread -Wall -o Extraction Extraction.o analyseLexicale.o Graph.o
[ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ ls
Extraction              d2-glucose-H202.ssa
Extraction.cpp          d2-lactose-H202.ssa
Extraction.o            d3-aceton-H202.ssa
Graph.cpp               d3-glucose-H202.ssa
Graph.hpp               d4-aceton-H202+inhib.ssa
Graph.o                 d4-aceton-H202.ssa
Makefile                d4-lactose-H202.ssa
analyseLexicale.cpp     output.txt
analyseLexicale.hpp     structData.hpp
analyseLexicale.o
ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$
```

2. Exécuter le programme avec des arguments

1. Dans le terminal ou l'invite de commandes, exécutez le fichier exécutable avec les arguments appropriés : fichier de réactions (.ssa), substrat, produit et distance.

```
Makefile          d4-lactose-H2O2.ssa
analyseLexicale.cpp  output.txt
analyseLexicale.hpp  structData.hpp
analyseLexicale.o
[ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ ./Extraction d4-aceton-H2O2.ssa aceton H2O2 4]
```

2. Examiner les résultats

1. Les résultats de l'analyse seront enregistrés dans un fichier output.txt dans le répertoire courant.
2. Ouvrez le fichier output.txt pour examiner les réactions enzymatiques identifiées.

```
graph TD
  Makefile          d4-lactose-H2O2.ssa
  analyseLexicale.cpp  output.txt
  analyseLexicale.hpp  structData.hpp
  analyseLexicale.o
[ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ cat output.txt]
```

4. Utilisation du logiciel

1. Importation de fichiers de réactions (.ssa)

Placez les fichiers de réactions (.ssa) dans le répertoire contenant le fichier exécutable du programme.

2. Format du fichier de réactions

Les fichiers de réactions doivent être au format .ssa, avec une syntaxe spécifique pour décrire les réactions biochimiques, les enzymes, les substrats et les produits.

Pour les Réactions:

Utilisez //Réactions au début, et le contenu en dessous de l'étiquette est la formule de réaction réactions

```
// Reactions
"glucose oxidase" : "a sugar" -> "glucarolactone" + "H2O2" | 67 mM - 0.3; // 5.5-9
```

Pour les inhibitions:

Utilisez //Inhibitions au début

```
// Inhibitions
"mannitol 2-dehydrogenase" : "NAD+" | 70 uM;
"(S)-2-hydroxy-acid oxidase" : "NAD+" | 30 uM;
```

3. Comprendre les résultats

Le fichier output.txt contiendra les réactions enzymatiques identifiées par le programme, présentées sous un format facilement lisible. Les réactions enzymatiques seront listées avec les enzymes, substrats et produits impliqués.

```
ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$ cat output.txt
Entree: glucose
Sortie: H2O2
Distance: 2
Nombre de traces: 1
"cellobiose phosphorylase" : "alpha-D-glucose 1 phosphate" + "glucose" -> "cellobiose" + "
phosphate"
"cellobiose dehydrogenase (acceptor)" : "cellobiose" -> "cellobionolactone" + "H2O2"
-----
ZHENGdeMacBook-Pro:TER shutong$
```

Dans les résultats de sortie, il contient les informations d'entre, sortie, distance et le nombre total de traces. Après cela vient la collection de réaction. Chaque groupe sera séparé par -----