



République Algérienne démocratique populaire

Ministère de l'enseignement Supérieur et de la recherche  
scientifique

Mohammed Sadik ben Yahia université de Jijel .

Faculté de Science Nature et de la vie .

Département Biologie Moléculaire et Cellulaire .

Spécialité pharmacologie expérimentale

## Thème

# Le devoir de tp logiciels libres et open source

Réaliser par :

- Amira sara
- Kennaf rim

# PARTIE 1 : Étude théorique – COPASI

## 1. Présentation générale de l'outil

COPASI (COmplex PAthway Simulator) est un logiciel libre et open source de modélisation, simulation et analyse des voies biochimiques et des systèmes biologiques. Développé par une équipe de recherche internationale dirigée par l'Université Virginia Tech et d'autres partenaires, il est largement utilisé en biologie computationnelle, biologie des systèmes et biochimie.

COPASI est une application logicielle destinée à la simulation et à l'analyse des réseaux biochimiques et de leur dynamique.

COPASI est un programme autonome qui prend en charge les modèles au standard SBML et peut simuler leur comportement à l'aide d'équations différentielles ordinaires (EDO), d'équations différentielles stochastiques (EDS) ou de l'algorithme de simulation stochastique de Gillespie. Des événements discrets arbitraires peuvent être inclus dans ces simulations.

COPASI fournit un ensemble de méthodes d'analyse ainsi que des fonctions d'estimation de paramètres.

## 2. Fonctionnalités principales : Fonctions fondamentales du logiciel :

1. Modélisation cinétique : Simulation de la dynamique des voies métaboliques
2. Analyse des états stationnaires : Calcul des flux métaboliques (Metabolic Flux Analysis)
3. Théorie du contrôle métabolique : (Metabolic Control Analysis)
4. Modélisation des systèmes stochastiques : Utilisation de la

simulation de Gillespie

5. Optimisation et calibrage des modèles : Utilisation d'algorithmes évolutifs et de recherche
6. Analyse de sensibilité : Identification des facteurs les plus influents dans le système
7. Modélisation des événements discrets : Pour les changements de concentration dans le temps
8. Prise en charge des standards SBML : (Systems Biology Markup Language)

### 3. Aspects techniques:

- Langage de programmation : C++ (noyau principal)
- Interface utilisateur : Interface graphique (GUI) + ligne de commande
- Systèmes d'exploitation : Windows, Linux, macOS
- Licence : Artistic License 2.0 (open source)
- Configuration requise : Processeur 1GHz, 512MB RAM (minimum)
- Installation : Paquets autonomes, ne nécessite pas de logiciels supplémentaires
- Support technique : Forum communautaire, listes de diffusion, documentation
- Architecture et infrastructure :

COPASI est construit sur une architecture modulaire organisée autour d'un noyau de calcul performant développé en C++. Cette approche garantit une exécution rapide des simulations même

avec des modèles biologiques complexes.

- Le logiciel adopte une double interface d'accès : une interface graphique (GUI) conviviale pour les utilisateurs non-programmeurs et une interface en ligne de commande pour l'automatisation et l'intégration dans des pipelines de traitement
- Environnement d'exécution et compatibilité :
  - ✓ Distribution et installation : COPASI est disponible sous forme de paquets natifs précompilés pour Windows (installateur .exe), macOS (paquet .dmg) et Linux (paquets .deb et .rpm). Une version portable existe également.
  - ✓ Indépendance logicielle : Il s'agit d'une application autonome qui ne nécessite ni framework supplémentaire ni modules tiers pour fonctionner correctement.
  - ✓ Systèmes d'exploitation : Compatible avec Windows 7/10/11, macOS 10.12+, et les principales distributions Linux (Ubuntu, Fedora, CentOS).
- Standards et interopérabilité :

COPASI adhère strictement aux standards scientifiques établis :

- ✓ SBML (Systems Biology Markup Language) : Support complet des niveaux 2 et 3, incluant les extensions Flux Balance Constraints (FBC) et Qualitative Models (Qual).
- ✓ Format d'échange : Import/export vers COPASI ML (format XML natif), ainsi que conversion bidirectionnelle avec d'autres formats comme XPPAUT.

- ✓ Intégration externe : Possibilité de connexion avec R via le package CoRC, et avec Python via des scripts utilisant l'interface ligne de commande.
- Performance et évolutivité :
  - ✓ Moteur de calcul : Intègre plusieurs solveurs numériques (LSODA, Runge-Kutta, Gillespie) optimisés pour différents types de problèmes.
  - ✓ Parallélisation : Supporte l'exécution parallèle sur plusieurs cœurs pour les analyses de sensibilité et les scans de paramètres.
  - ✓ Gestion mémoire : Architecture 64-bit permettant de traiter des modèles de grande taille (>1000 espèces).
  - ✓ Stabilité numérique : Implémentation d'algorithmes robustes avec gestion des systèmes raides (stiff systems).
- Maintenance et développement :
  - ✓ Cycle de publication : Versions majeures annuelles avec mises à jour correctives trimestrielles.
  - ✓ Gestion du code : Hébergé sur GitHub avec suivi public des issues et des demandes de fonctionnalités.
  - ✓ Tests qualité : Suite de tests unitaires étendue (>2000 tests) et validation continue par intégration (CI/CD).
  - ✓ Support des versions : Maintenance des deux dernières versions majeures avec corrections de sécurité.
- Configuration requise recommandée :
  - ✓ Matériel minimal : Processeur double cœur 1.5 GHz, 2 GB RAM, 200 MB d'espace disque

- ✓ Configuration optimale : Processeur quadricœur 2.5+ GHz, 8+ GB RAM, carte graphique avec accélération OpenGL
- ✓ Connectivité : Accès internet requis uniquement pour la vérification des mises à jour et l'accès aux services en ligne optionnels

#### 4. Points forts:

1. Totalement gratuit : Aucun coût de licence, adapté aux laboratoires à budget limité
2. Facilité d'utilisation : Interface graphique intuitive ne nécessitant pas de compétences avancées en programmation
3. Multi-plateforme : Fonctionne sur tous les systèmes d'exploitation majeurs
4. Standard SBML : Haute compatibilité avec d'autres logiciels du domaine
5. Ensemble complet d'outils : Couvre la plupart des besoins en modélisation des systèmes biologiques
6. Modélisation stochastique : Ajoute de la valeur pour les systèmes avec un faible nombre de molécules
7. Communauté active : Mises à jour régulières et bon support technique
8. Documentation exhaustive : Guides d'utilisation détaillés avec des exemples pratiques

#### 5. Limites et points faibles :

Contraintes et défis :

1. Courbe d'apprentissage : Peut être complexe pour les débutants

en modélisation biologique

2. Interface utilisateur : Peut paraître dépassée par rapport aux logiciels commerciaux
3. Performance avec les grands modèles : Peut être lent avec des modèles très complexes
4. Analyse statistique avancée : Limité par rapport aux packages spécialisés de R ou Python
5. Flexibilité : Moins flexible que les solutions basées sur des langages de programmation
6. Visualisation graphique : Options limitées pour les graphiques et rapports visuels
7. Intégration avec les bases de données : Nécessite des étapes supplémentaires pour lier les données expérimentales
8. Support pour la programmation : Interfaces API relativement limitées

## Références :

### 1. Présentation générale de l'outil

- Site officiel de COPASI : [copasi.org](http://copasi.org)
- Hoops, S., et al. (2006). COPASI - a COmplex PAthway Simulator. *Bioinformatics*, 22(24), 3067–3074. Lien PubMed

### 2. Fonctionnalités principales

- Guide utilisateur officiel de COPASI : [COPASI User Guide](#)
- Bergmann, F. T., et al. (2017). COPASI and its applications in biotechnology. *Journal of Biotechnology*, 261, 215–220.

### 3.Aspects techniques

- COPASI Technical Reference Manual, Version 4.40
- Mendes, P. (2013). "Computational Modeling of Biochemical Networks Using COPASI". *Methods in Molecular Biology*, 1021: 17-59.
- Site officiel : [copasi.org/Technical\\_Specifications](http://copasi.org/Technical_Specifications)
- Dépôt GitHub : [github.com/copasi/copasi/wiki/System-Requirements](https://github.com/copasi/copasi/wiki/System-Requirements)

### 4. Points forts

- Évaluations des utilisateurs sur : [sourceforge.net/projects/copasi/](http://sourceforge.net/projects/copasi/)

Études de cas publiées sur : [copasi.org/Publications/](http://copasi.org/Publications/)

### 5. Limites et points faibles

- Évaluation comparative dans : Zi, Z. (2011). Towards kinetic modeling of genome-scale metabolic networks without sacrificing stoichiometric and thermodynamic consistency. *Molecular BioSystems*.

Remarques du forum de support : [groups.google.com/g/copasi-users](http://groups.google.com/g/copasi-users)

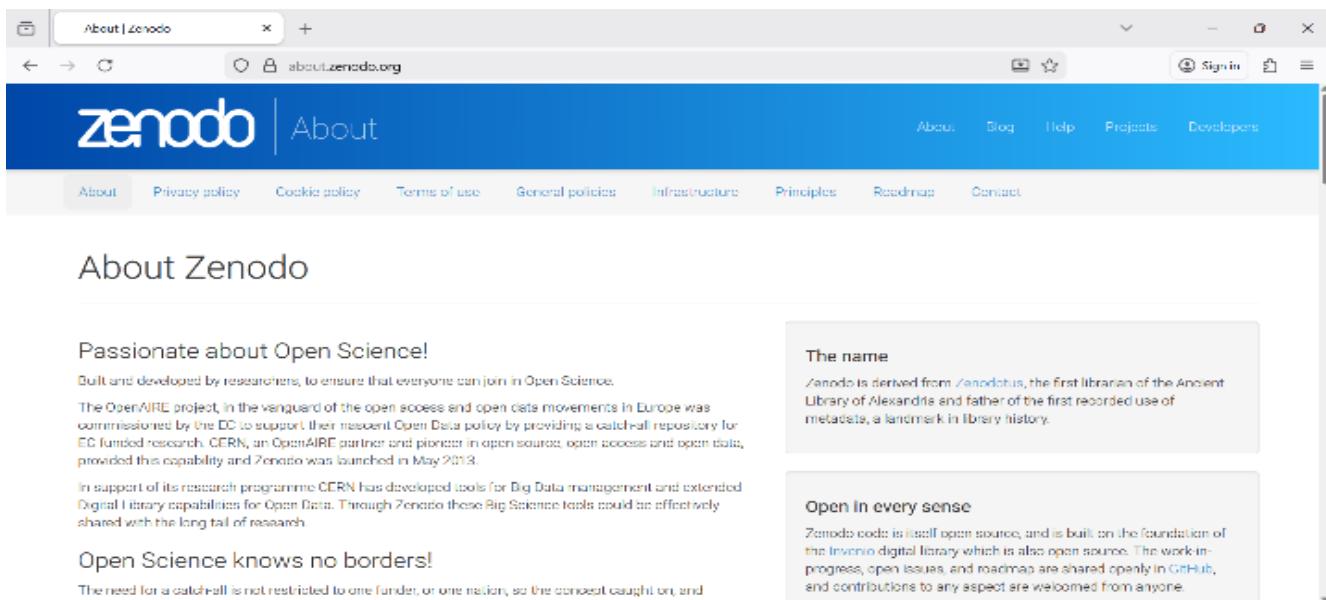
- PARTIE 2 : Étude pratique  
( Exploration de Zenodo)

### 1. Présentation de la plateforme Zenodo

Zenodo est une plateforme de dépôt scientifique en libre accès développée par le CERN dans le cadre du programme européen OpenAIRE. Elle permet aux chercheurs de partager, préserver et diffuser différents types de productions scientifiques.

L'objectif principal de Zenodo est de promouvoir la science ouverte en garantissant un accès libre, durable et gratuit aux données de recherche. Chaque dépôt sur la plateforme se voit attribuer un identifiant numérique permanent (DOI), ce qui facilite la citation, la traçabilité et la réutilisation des travaux scientifiques.

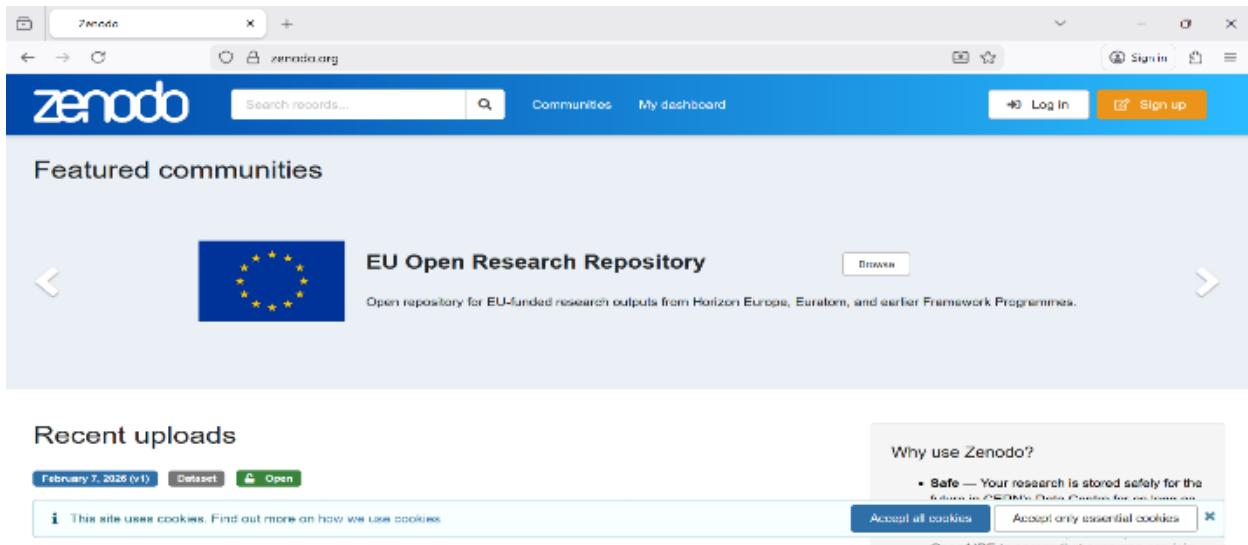
Zenodo héberge plusieurs types de contenus scientifiques tels que les jeux de données (datasets), les publications, les logiciels, les rapports, ainsi que d'autres résultats de recherche. La plateforme présente un grand intérêt pour les sciences de la nature et de la vie, car elle offre un accès à des données biologiques fiables favorisant la reproductibilité, la transparence et la collaboration scientifique. Les informations présentées dans cette partie ont été extraites du site officiel de la plateforme Zenodo.

A screenshot of a web browser displaying the 'About' page of the Zenodo website. The URL in the address bar is 'about.zenodo.org'. The page has a blue header with the Zenodo logo and the word 'About'. Below the header, there's a navigation menu with links to 'About', 'Privacy policy', 'Cookie policy', 'Terms of use', 'General policies', 'Infrastructure', 'Principles', 'Readmap', and 'Contact'. The main content area features several sections: 'Passionate about Open Science!', 'Open Science knows no borders!', 'The name', and 'Open in every sense'. Each section contains descriptive text and small images.

## 2. Description des étapes réalisées

- Étape 1 : Accès à la plateforme

Nous avons commencé par visiter la plateforme Zenodo via son site officiel :



(Figure 1 : Page d'accueil de la plateforme Zenodo)

- Étape 2 : Recherche d'un dataset

Une recherche a été effectuée en utilisant le mot-clé « cell » dans la barre de recherche de la plateforme. Cette requête a permis d'obtenir plusieurs jeux de données liés aux sciences biologiques et cellulaires.

The screenshot shows the search results for the query "cell". The search bar at the top contains the word "cell". Below the search bar, it says "100,509 results found". On the left, there are filters for "Versions", "Access status", and "Resource types". Under "Versions", there is a "View all versions" button. Under "Access status", there are options for "Open" (95,114), "Restricted" (5,187), and "Embargoed" (208). Under "Resource types", there are options for "Publication" (72,877) and "Dataset" (13,385). The main results list shows two entries:

- Anna-cell/MO\_GEMs\_Score: MO\_GEMs\_Score**  
Anna-cell  
Creation of a doi for publication.  
Unlocked on June 5, 2024  
June 5, 2024 (v1.0) Software Open
- AndersonChaos/NEOTIDE\_scRNA: Final version for submission**  
Purkinje-cell  
scRNA/scTCR data of phase 2 prospective single-arm study  
Unlocked on May 21, 2024  
May 21, 2024 (final) Software Open

On the right side of the results, there are download and citation statistics for each entry.

(Figure 2 : Résultats de recherche sur Zenodo avec le mot-clé « cell »)

- Étape 3 : Sélection du dataset

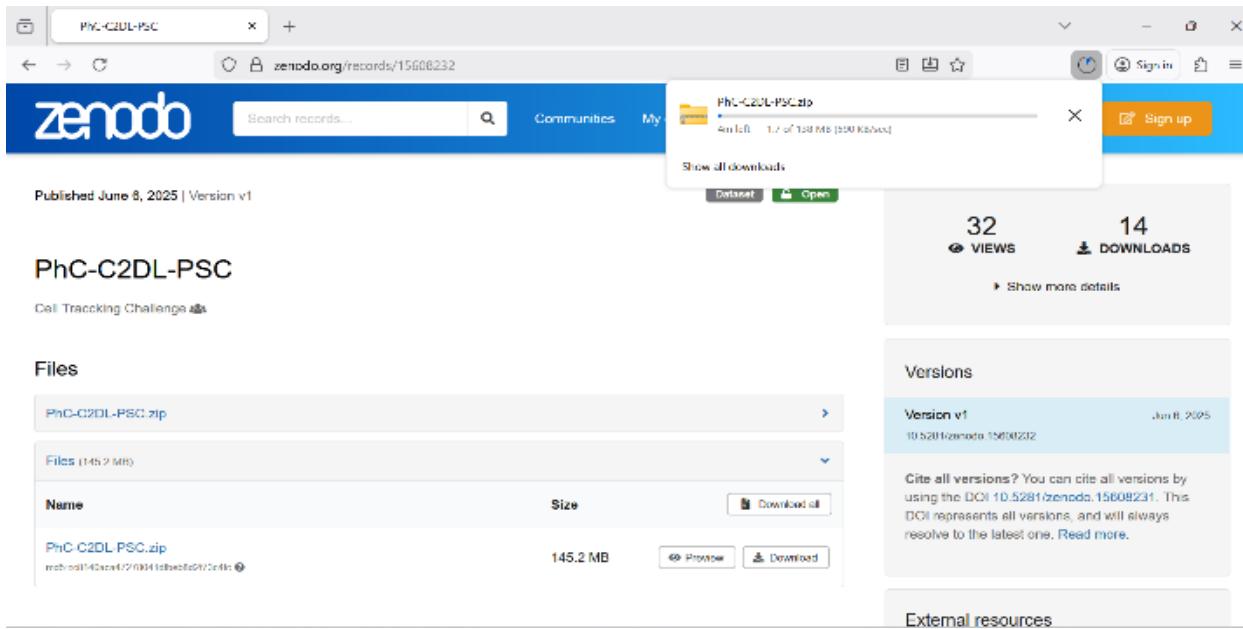
Parmi les résultats obtenus, le dataset intitulé PhC-C2DL-PSC a été sélectionné. Ce choix a été motivé par sa pertinence pour l'étude des images cellulaires et son lien avec le Cell Tracking Challenge, ainsi que par la disponibilité de métadonnées complètes.

The screenshot shows a web browser displaying the Zenodo dataset page for "PhC-C2DL-PSC". The URL in the address bar is zenodo.org/records/15608232. The page has a blue header with the Zenodo logo, a search bar, and links for "Communities" and "My dashboard". On the right, there are "Log in" and "Sign up" buttons. Below the header, it says "Published June 6, 2025 | Version v1". There are two buttons: "Deleted" (disabled) and "Open". To the right, there are statistics: 32 views and 14 downloads, with a link to "Show more details". A "Versions" section shows "Version v1" (June 6, 2025, DOI: 10.5281/zenodo.15608232) with a note about citing all versions. At the bottom, there is an "External resources" section. The main content area is titled "Files" and lists a single file: "PhC-C2DL-PSC.zip" (145.2 MB), with "Download" and "Preview" buttons.

(Figure 3 : Page du dataset PhC-C2DL-PSC sur Zenodo)

- Étape 4 : Téléchargement du dataset

Les fichiers associés au dataset ont été téléchargés depuis la section Files de la page Zenodo, sous forme d'un fichier compressé (ZIP).



(Figure 4 : Section de téléchargement des fichiers du dataset)

### 3. Métadonnées du dataset (Norme Dublin Core)

Les métadonnées du dataset PhC-C2DL-PSC ont été extraites directement depuis la page correspondante sur la plateforme Zenodo et organisées selon la norme Dublin Core

Élément (Dublin Core)	Information
Title	PhC-C2DL-PSC
Creator	Cell Tracking Challenge
Description	Dataset d'images utilisé pour le suivi et l'analyse de cellules
Date	2025
Publisher	Zenodo
Type	Dataset

Subject Cell images, cell tracking

License Creative Commons

Language English

Ces métadonnées permettent de comprendre l'origine du dataset, son contenu scientifique ainsi que les conditions de son utilisation et de sa réutilisation.

### ● PARTIE 3 :

Un compte GitHub a été créé afin d'héberger le devoir . Un dépôt public a été mis en place et le devoir (Partie théorique et Partie pratique) y a été ajouté.

Lien du dépôt GitHub :

<https://github.com/a73278060-blip/Devoir-Logiciels-Libres-et-Open-Source>