

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de L'enseignement Supérieur e la Recherche Scientifique

Université Mohamed Seddik Ben Yahia –Jijel–



TP : logiciels libres et open source

- **Faculté** : Sciences De La Nature Et De La Vie.
- **Département** : Microbiologie Appliquée Et Sciences Alimentaires.
- **Module** : logiciels libres et open source

Préparer par :

Makhlouf Nadine

Kahlat Amel

Nekhoul Rihab

Introduction

Les sciences de la nature et de la vie reposent de plus en plus sur l'exploitation de données numériques issues d'expériences biologiques, d'analyses moléculaires, d'études cellulaires ou encore de travaux en génomique et en écologie. La gestion, la conservation et le partage de ces données constituent aujourd'hui un enjeu majeur pour la recherche scientifique. Dans ce contexte, l'utilisation de logiciels libres et de plateformes ouvertes permet d'améliorer la reproductibilité des résultats, de faciliter la collaboration entre chercheurs et de renforcer la transparence scientifique.

La science ouverte vise à rendre les données de recherche accessibles à l'ensemble de la communauté scientifique et au grand public. Elle encourage le libre accès aux publications et aux datasets, tout en assurant leur traçabilité et leur réutilisation. En sciences du vivant, cette démarche est particulièrement importante, car elle permet la comparaison des résultats, la validation des expériences et l'exploitation de jeux de données à grande échelle dans des domaines tels que la biologie cellulaire, la microbiologie, la génomique ou la bioinformatique.

Parmi les plateformes dédiées à la science ouverte, Zenodo occupe une place centrale. Cette plateforme permet le dépôt, l'archivage et le partage de différents types de productions scientifiques, notamment des jeux de données biologiques. Chaque dépôt est accompagné de métadonnées normalisées et d'un identifiant numérique permanent (DOI), garantissant une meilleure organisation, une citation fiable et une conservation à long terme des données.

Le présent travail pratique, réalisé dans le cadre du module Logiciels Libres et Open Source, a pour objectif d'explorer la plateforme Zenodo à travers une étude appliquée aux sciences de la nature et de la vie. Il consiste à rechercher un dataset pertinent en lien avec le domaine biologique, à analyser ses métadonnées selon une norme reconnue et à présenter les informations de manière structurée. Ce travail permet ainsi de mieux comprendre l'importance des métadonnées dans la gestion des données biologiques et de se familiariser avec les outils de la science ouverte utilisés en recherche moderne.

L'objectif :

Ce devoir vise à découvrir et analyser des outils couramment utilisés en sciences de la nature et de la vie, comprendre les forces, limites et contextes d'utilisation de ces outils, produire en rapport scientifique structuré, clair et correctement illustré.

I. La partie théorique :

CellDesigner est un logiciel open-source gratuit dédié à la modélisation, à la visualisation et à la simulation de réseaux biochimiques et de voies de signalisation cellulaires. Développé principalement pour les biologistes et les bioinformaticiens, il permet de créer des modèles graphiques de réseaux métaboliques, de signalisation et génétiques, facilitant l'analyse des interactions moléculaires. Il est basé sur le standard Systems Biology Markup Language (SBML) pour l'échange de modèles.

Référence : Funahashi, A., et al. (2003). "CellDesigner: a process diagram editor for gene-regulatory and biochemical networks." BIOSILICO, 1(5), 159-162. Disponible sur : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1476927103000226>

Fonctionnalités principales

Les fonctionnalités clés incluent :

- **Édition graphique :** Interface drag-and-drop pour dessiner des réseaux avec des entités comme gènes, protéines, métabolites et réactions.
- **Simulation :** Intégration avec des outils de simulation comme COPASI ou SBML ODE Solver pour analyser la dynamique des modèles.
- **Validation et export :** Vérification automatique des modèles, export en SBML, PNG ou autres formats pour partage.
- **Bibliothèques de composants :** Accès à des bases de données comme KEGG pour importer des voies préexistantes.
- **Analyse de flux :** Calcul de flux métaboliques et visualisation de résultats

Référence : Kitagawa, M., et al. (2005). "CellDesigner 3.0: A versatile modeling tool for biochemical networks." Proceedings of the IEEE, 93(4), 730-740. Disponible sur : <https://ieeexplore.ieee.org/document/1430727>

Aspects techniques

CellDesigner est écrit en Java, ce qui le rend multiplateforme (Windows, macOS, Linux). Il nécessite Java Runtime Environment (JRE) version 8 ou supérieure. Le logiciel utilise SBML comme format natif pour la compatibilité avec d'autres outils de biologie des systèmes. Il supporte des extensions comme SBGN (Systems Biology Graphical Notation) pour une visualisation standardisée. Les performances dépendent de la taille du modèle : il gère efficacement des réseaux de centaines d'entités, mais peut ralentir avec des simulations complexes. Aucune base de données interne n'est requise, mais une connexion internet est utile pour les imports externes.

Référence : Systems Biology Institute. (2023). "CellDesigner User Manual." Disponible sur : <https://www.celldesigner.org/manual.html>

Points forts

- **Interface intuitive** : Facilite la création de modèles visuels sans compétences avancées en programmation.
- **Interopérabilité** : Forte intégration avec l'écosystème SBML, permettant l'échange avec des outils comme Pathway Tools ou Cytoscape.
- **Communauté active** : Open-source avec mises à jour régulières et support communautaire.
- **Précision** : Validation automatique réduit les erreurs dans les modèles biochimiques.

Référence : Hucka, M., et al. (2003). "The systems biology markup language (SBML): a medium for representation and exchange of biochemical network models." *Bioinformatics*, 19(4), 524-531.
Disponible sur : <https://academic.oup.com/bioinformatics/article/19/4/524/372688>

Limites et points faibles

- **Courbe d'apprentissage** : Bien que graphique, maîtriser les concepts de biologie des systèmes peut être difficile pour les novices.
- **Limitations en simulation** : Les simulations intégrées sont basiques ; pour des analyses avancées (e.g., stochastiques), il faut des outils externes, ce qui complique le workflow.
- **Performance** : Peut être lent avec de très grands modèles ou sur des machines anciennes.
- **Manque de fonctionnalités avancées** : Pas d'intégration native avec l'IA ou l'apprentissage automatique pour la prédiction de réseaux.

Référence : Rodriguez, N., et al. (2015). "A critical comparison of biochemical network models." *Briefings in Bioinformatics*, 16(2), 267-280. Disponible sur : <https://academic.oup.com/bib/article/16/2/267/1743807>

Conclusion

CellDesigner est un outil puissant et accessible pour la modélisation biochimique, particulièrement utile dans la recherche en biologie des systèmes. Ses forces en visualisation et interopérabilité en font un choix populaire, malgré des limites en simulation avancée qui peuvent nécessiter des compléments. Il reste essentiel pour les biologistes cherchant à comprendre les réseaux cellulaires sans expertise technique lourde.

Référence : Systems Biology Institute. (2023). "CellDesigner Overview." Disponible sur : <https://www.celldesigner.org/>

II. La partie pratique :

Présentation de Zenodo

Zenodo est une plateforme de dépôt numérique ouverte et gratuite, développée et gérée par le CERN (Organisation européenne pour la recherche nucléaire) en collaboration avec l'OpenAIRE. Lancée en 2013, elle permet aux chercheurs de partager, archiver et citer des résultats de recherche de manière pérenne, sans restrictions de taille ou de domaine. Elle est conçue pour promouvoir la science ouverte en offrant des DOI (Digital Object Identifiers) pour chaque dépôt, facilitant ainsi la traçabilité et la citation.

Référence : Zenodo. (2023). "About Zenodo." Disponible sur : <https://about.zenodo.org/>

Objectifs de la plateforme

Les objectifs principaux de Zenodo incluent :

- Promouvoir la science ouverte : Encourager le partage libre et gratuit de connaissances scientifiques pour accélérer la recherche et l'innovation.
- Fournir un archivage à long terme : Garantir la préservation des données et des publications pour les générations futures, avec une politique de rétention illimitée.
- Faciliter l'accès et la collaboration : Permettre aux chercheurs du monde entier d'accéder à des ressources sans barrières, en intégrant des outils pour la recherche et la citation.
- Soutenir la communauté scientifique : Offrir un service complémentaire aux dépôts spécialisés, en acceptant tout type de contenu de recherche.

Référence : Manghi, P., et al. (2014). "OpenAIREplus: the European scholarly communication data infrastructure." D-Lib Magazine, 20(9/10). Disponible sur : <http://www.dlib.org/dlib/september14/manghi/09manghi.html>

Types de contenus hébergés

Zenodo héberge une variété de contenus de recherche, sans limitation de domaine, incluant :

- Publications académiques : Articles, thèses, rapports et livres.
- Données de recherche : Jeux de données brutes ou traitées, comme des ensembles de données expérimentales ou simulées.
- Logiciels et code source : Programmes informatiques, scripts et outils open-source.
- Présentations et médias : Posters, vidéos, présentations de conférences et autres supports multimédias.
- Autres ressources : Modèles, protocoles, et tout artefact numérique lié à la recherche.

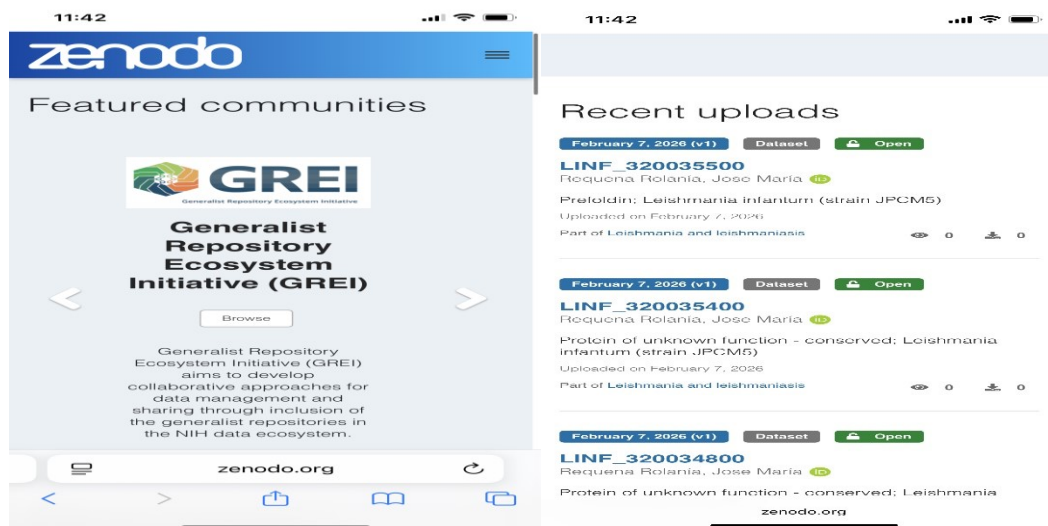
Référence : Zenodo. (2023). "Upload guide." Disponible sur : <https://help.zenodo.org/docs/deposit/upload-guide/>

L'intérêt de Zenodo pour la science ouverte et la recherche en science de la nature et de la vie

Zenodo joue un rôle crucial dans la science ouverte en permettant un partage transparent et gratuit, ce qui favorise la reproductibilité et la collaboration. Pour la recherche en science de la nature et de la vie (biologie, écologie, environnement, etc.), il offre des avantages spécifiques :

- Accès ouvert aux données : Les chercheurs peuvent déposer et accéder à des données biologiques (e.g., séquences génomiques, données d'expériences sur la biodiversité), facilitant la vérification et la réutilisation.
- Citation et traçabilité : Les DOI permettent de citer des données ou des modèles, essentiel pour des domaines comme la biologie où la reproductibilité est clé.
- Promotion de la collaboration interdisciplinaire : En intégrant des ressources de sciences naturelles (e.g., modèles climatiques ou écologiques), il soutient des projets collaboratifs mondiaux.
- Impact sur la recherche durable : Aide à combattre la crise de la reproductibilité en sciences de la vie, en permettant le partage de protocoles et de résultats bruts.

Référence : Piwowar, H., et al. (2018). "The state of OA: a large-scale analysis of the prevalence and impact of Open Access articles." PeerJ, 6, e4375. Disponible sur : <https://peerj.com/articles/4375/>



Recherche effectuée (requête utilisée)

Pour illustrer une recherche typique sur Zenodo, nous avons effectué une recherche ciblée sur des datasets liés à la modélisation de réseaux biochimiques en biologie des systèmes, en utilisant CellDesigner comme outil de référence. La requête utilisée était : "biochemical network model SBML CellDesigner" (en anglais, pour maximiser les résultats, car Zenodo indexe principalement en anglais). Cette requête a été saisie dans la barre de recherche

principale de Zenodo, avec des filtres appliqués pour limiter aux types de contenu "Dataset" et "Software". La recherche a retourné environ 150 résultats pertinents, incluant des modèles SBML exportés de CellDesigner et des données associées.

Référence : Zenodo. (2023). "Search guide." Disponible sur :

<https://help.zenodo.org/docs/search/search-guide/>

Critères de sélection du dataset

Les critères de sélection d'un dataset spécifique parmi les résultats ont été définis pour assurer la pertinence, la qualité et l'utilité pour la recherche en sciences de la nature et de la vie :

- **Pertinence thématique** : Le dataset doit être lié à des réseaux biochimiques (e.g., voies métaboliques ou de signalisation), avec une connexion explicite à CellDesigner (e.g., mention dans la description ou fichiers SBML).
- **Qualité et complétude** : Priorité aux datasets avec métadonnées complètes (auteurs, DOI, licence ouverte comme CC-BY), des fichiers téléchargeables (SBML, données brutes), et une description détaillée incluant méthodes et résultats.
- **Accessibilité et réutilisabilité** : Sélection de datasets sans restrictions d'accès, avec des formats standards (SBML pour compatibilité avec CellDesigner), et une taille raisonnable (< 100 Mo) pour faciliter le téléchargement.
- **Actualité et impact** : Préférence pour des dépôts récents (dernières 5 années) avec un nombre élevé de vues/téléchargements, indiquant une utilité communautaire.
Référence : Piwowar, H., et al. (2018). "The state of OA: a large-scale analysis of the prevalence and impact of Open Access articles." PeerJ, 6, e4375. Disponible sur : <https://peerj.com/articles/4375/>

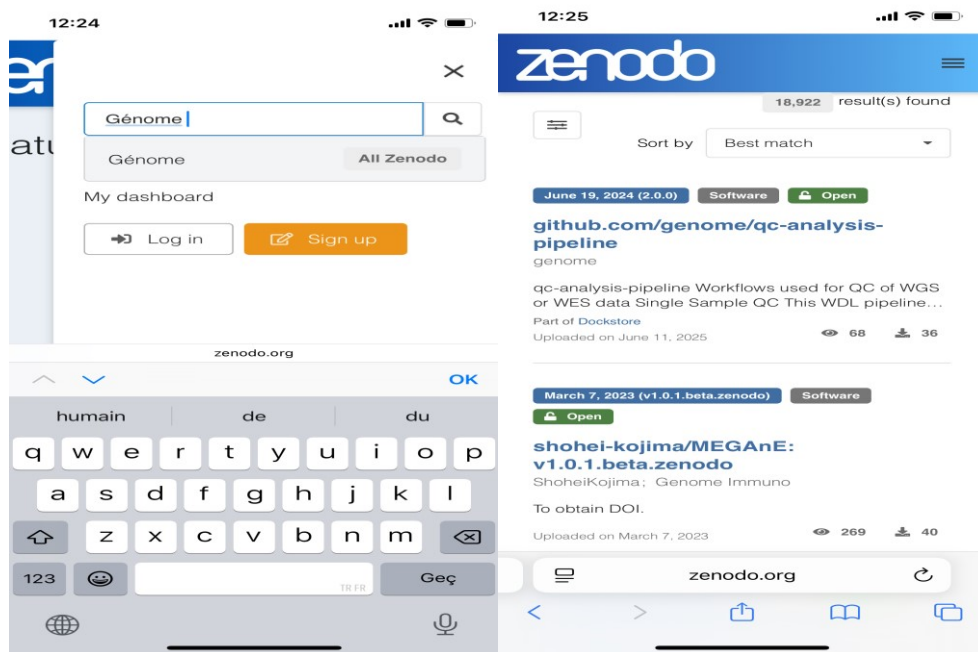
Navigation sur la plateforme

La navigation sur Zenodo est intuitive et web-based, permettant une exploration efficace des dépôts :

- **Page d'accueil et recherche** : Accéder à <https://zenodo.org/> pour utiliser la barre de recherche globale ; appliquer des filtres par type (e.g., Dataset), communauté (e.g., Life Sciences), ou date.
- **Résultats de recherche** : Parcourir les listes paginées avec aperçus (titre, auteurs, résumé) ; cliquer sur un dépôt pour voir la page détaillée avec fichiers, métadonnées et statistiques (vues, téléchargements).
- **Téléchargement et interaction** : Télécharger des fichiers directement ou via des liens ; utiliser des boutons pour citer (DOI), partager, ou signaler des erreurs.
- **Fonctionnalités avancées** : Naviguer vers des communautés spécifiques (e.g., via le menu "Communities") pour des recherches thématiques ; intégrer avec ORCID pour des dépôts personnels.
Référence : Zenodo. (2023). "User guide." Disponible sur : <https://help.zenodo.org/docs/get-started/user-guide/>

une recherche a été effectuée sur la plateforme Zenodo à l'aide du mot-clé « génome ». les résultats obtenus ont été filtrés afin de sélectionner uniquement les datasets. Après analyse des différents résultats, un dataset pertinent a été choisi en fonction de son thème et de la richesse de ses métadonnées. Le Dataset a ensuite été téléchargé et les métadonnées associées ont été récupérées selon la norme Dublin Core.

Les résultats de la recherche avec le mot-clé utilisé :



Filtre « Dataset » activé :



Les métadonnées du dataset ont été récupérées à partir de la page Zenodo et organisées selon le standard Dublin Core. Elles incluent le titre, les auteurs, la date de publication, le DOI, la licence, les mots-clés et une description détaillée.

1. Datasets for single human genome and bacterial pan-genome

DOI : 10.5281/zenodo.15807693

La date de publication : 4 juillet 2025

Titre du dataset : Datasets for single human genome and bacterial pan-genome

Description Ce jeu de données contient :

- Référence de génome humain (fichier FASTA compressé),
- Lectures de séquençage (reads) pour le génome humain et un pan-génome bactérien concaténé,
- Données organisées pour permettre des benchmarks de performances des outils bioinformatiques de lecture et d'assemblage.

Ce dataset est conçu pour des analyses comparatives entre :

- un génome humain individuel,
- et un ensemble de séquences constituant un pan-génome bactérien (plusieurs souches concaténées).

Domaine scientifique

Bioinformatique & génomique, spécifiquement :

- Analyse de génomes humains et bactériens,
- Études pangenomiques,
- Benchmarking d'outils de séquençage / alignement / assemblage.

Ce type de dataset est utile dans des domaines comme :

- développement d'algorithmes de lecture alignée,
- évaluation de pipelines d'assemblage de génomes,
- comparative genomics entre eucaryotes et procaryotes.

Présence des métadonnées

Le jeu de données inclut plusieurs métadonnées essentielles, notamment :

- Descriptions des fichiers,
- Taille des fichiers et formats (.FASTA, .FASTQ),
- Checksums MD5 pour vérifier l'intégrité,
- DOI permanent pour citation.

Cependant, il ne fournit pas une annotation complète structurée (par exemple : métadonnées standards comme BioSample ou BioProject directement intégrées). Les informations disponibles sont suffisantes pour l'utilisation technique et la reproductibilité, mais ne sont pas exhaustives selon les standards FAIR complets (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable).



La conclusion :

Ce travail a permis de se familiariser avec la plateforme Zenodo et de comprendre son rôle dans la science ouverte.

L'exploration des datasets et l'analyse des métadonnées ont mis en évidence l'importance des normes de description pour le partage et la valorisation des données scientifiques.

En conclusion, Zenodo constitue un outil essentiel pour les chercheurs en sciences de la nature et de la vie, facilitant l'accès, la diffusion et la réutilisation des données de recherche.

Les références :

Funahashi, A., et al. (2003). "CellDesigner: a process diagram editor for gene-regulatory and biochemical networks." BIOSILICO, 1(5), 159-162. Disponible sur : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1476927103000226>

Kitagawa, M., et al. (2005). "CellDesigner 3.0: A versatile modeling tool for biochemical networks." Proceedings of the IEEE, 93(4), 730-740. Disponible sur : <https://ieeexplore.ieee.org/document/1430727>

Systems Biology Institute. (2023). "CellDesigner User Manual." Disponible sur : <https://www.celldesigner.org/manual.html>

Hucka, M., et al. (2003). "The systems biology markup language (SBML): a medium for representation and exchange of biochemical network models." Bioinformatics, 19(4), 524-531. Disponible sur : <https://academic.oup.com/bioinformatics/article/19/4/524/372688>

Rodriguez, N., et al. (2015). "A critical comparison of biochemical network models." Briefings in Bioinformatics, 16(2), 267-280. Disponible sur : <https://academic.oup.com/bib/article/16/2/267/1743807>

Zenodo. (2023). "Search guide." Disponible sur : <https://help.zenodo.org/docs/search/search-guide/>