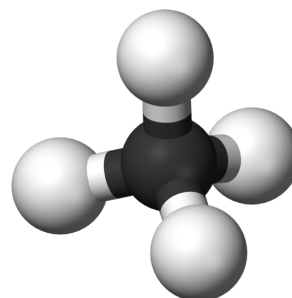


UNIVERSITÉ D'ANGERS



FACULTÉ  
DES SCIENCES  
*Unité de formation  
et de recherche*  
DÉPARTEMENT  
INFORMATIQUE



FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT INFORMATIQUE

ANNÉE 2020/2021

---

# Présentation du projet QuChemPedIA

---

*Chefs de projet :*  
BOUDET Alexandre  
PÉRICHET Thomas  
RAFIKI Younes

*Professeurs référents :*  
DA MOTA BENOÎT  
GENEST DAVID

*Client :*  
CAUCHY THOMAS

16 Septembre 2020



# 1 Introduction au projet d'origine

Le projet QuChemPedIA est un projet de grande envergure regroupant plusieurs acteurs de différents axes qui, durant ces deux dernières années, ont eu pour but de répondre à une demande bien précise qui était de proposer une alternative plus performante, polyvalente et collaborative aux rares solutions existantes de consultation de calcul sur des molécules scientifiques.

L'objectif étant de répondre à des problématiques complexes de calcul et apporter des fonctionnalités intuitives pour faciliter la navigation aux utilisateurs non informaticiens, tout en préservant la qualité des informations contenues sur le site.

En effet, les plateformes de consultations en ligne de molécules existes, néanmoins, aucune ne correspondait entièrement aux besoins des chimistes, d'où l'idée de QuChemPedIA, une plateforme collaborative, permettant aux chimistes de contribuer, de rechercher et de comparer leurs travaux avec d'autres sur le site.

Le site web présente plusieurs fonctionnalités qui sont les suivantes :

- Import de nouvelles molécules dans la base de données
- Recherche de molécules dans la base de données
- Calcul de molécules
- Visualisation détaillée d'une molécule

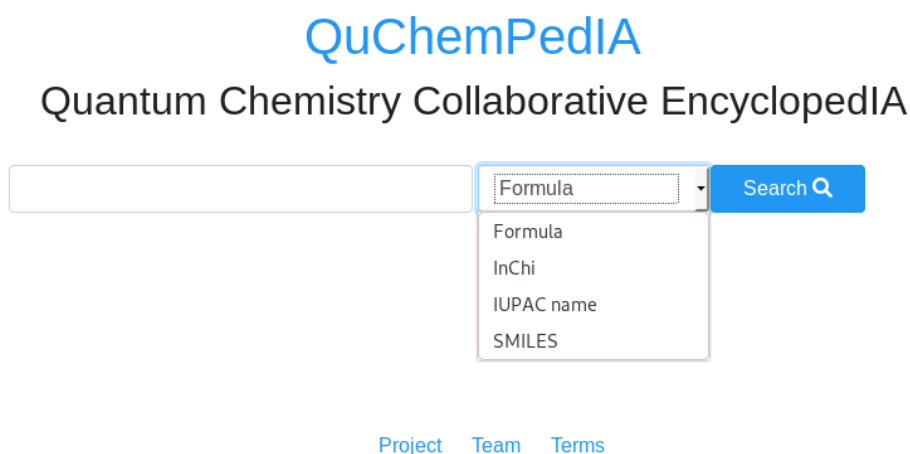


FIGURE 1 – La page d'accueil du site QuChemPedIA

L'année dernière, nous avons eu ce projet à réaliser en collaboration avec les Master 2 qui représentaient les chefs de projet. Mais durant nos phases de développement, il y a eu des problèmes comme :

- Un problème de complexité au niveau du *front-end* du site ;

- Des bugs sur les machines virtuelles de test ;
- Un manque de communication avec les chefs de projet ;
- Etc...

La réalisation de ce projet avait commencé il y a quelques années et chaque personne reprenant QuChemPedIA comme sujet de stage ou de gestion de projet rajoutaient des nouvelles technologies sans que le projet d'origine soit terminé. Cela à mener à des co-habitations de plusieurs frameworks qui ont rendues le projet très compliqué à reprendre pour de futurs étudiants.

## 2 Objectif cette année

Le client, Thomas Cauchy, ainsi que Benoit Da Mota ont optés pour une refonte intégrale du projet et des technologies ainsi qu'une baisse des fonctionnalités (Plus de création et de gestion d'utilisateurs etc...).

Notre objectif cette année sera donc d'avoir **un site testé et fonctionnel afin que les futurs étudiants puissent continuer à développer ce projet.**

Voici une pré-visualisation des tâches qu'on devra réaliser cette année :

- Une refonte totale du *front-end* (tout en gardant la structure graphique du site)
- Mettre en place la recherche partielle afin d'obtenir une prévisualisation des résultats lors d'une recherche ;
- Réaliser les tests fonctionnels et unitaires sur les cas d'utilisation les plus classiques afin de s'assurer du bon fonctionnement du site ;
- Mise en place d'un environnement (serveur) de test ;

Tout en utilisant des technologies assez rapides à appréhender, simples et qui durent dans le temps.

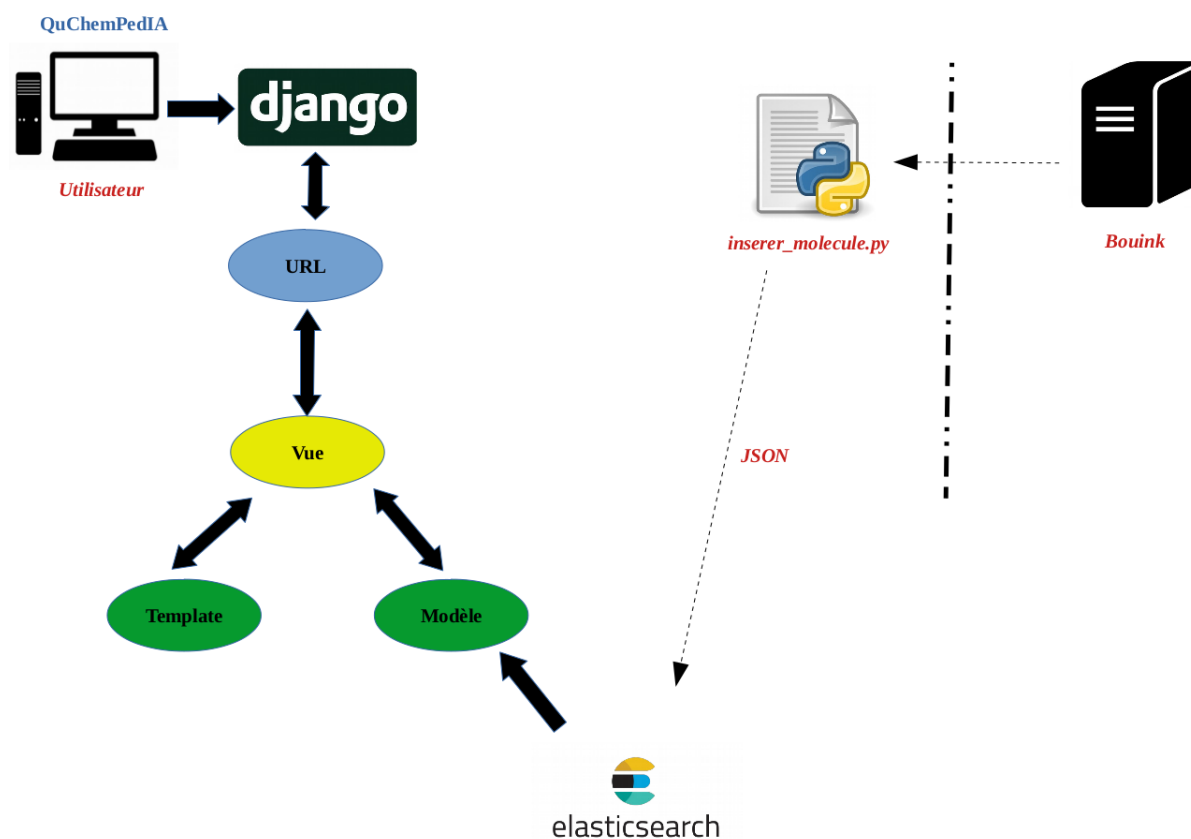


FIGURE 2 – La structure de QuChemPedIA après la refonte

Lien du site actuel : QuChemPedIA