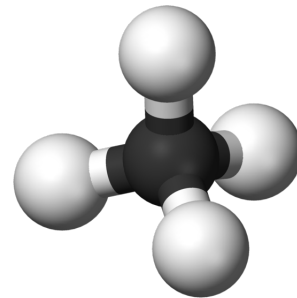


UNIVERSITÉ D'ANGERS



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



FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT INFORMATIQUE

ANNÉE 2020/2021

Cahier des spécifications fonctionnelles QuChemPedIA

Chefs de projet :
BOUDET Alexandre
PÉRICHET Thomas
RAFIKI Younes

Professeurs référents :
DA MOTA BENOÎT
GENEST DAVID

Client :
CAUCHY THOMAS

17 Novembre 2020

Table des matières

1	Introduction au projet d'origine	3
1.1	Site web existant s'appuyant sur les mêmes besoins	4
1.2	Représentation schématique fonctionnelle	6
2	Détail du besoin	7
3	User eXperience	8
3.1	Chemins utilisateur	8
3.2	Adaptabilité	12
3.2.1	Ajouter un bouton pour modifier le thème de l'interface web	12
3.2.2	Compatibilité de QuChemPedIA sur tous les navigateurs web . . .	13
3.2.3	Possibilité de traduire l'interface graphique sous différentes langues	13
3.2.4	Possibilité de changer l'affichage du détail d'une molécule	14
3.3	Guidage	16
3.3.1	La légende de la recherche avancée	16
3.4	Gestion des erreurs	17
3.4.1	Sur l'interface graphique	17
3.4.2	Sur l'API d'administration	17
3.4.3	Sur l'API de consultation	17
3.5	Compatibilité	18
3.5.1	Le lexique utilisé pour le nommage des labels	18
3.6	Charge de travail	18

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 existent, 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 étaient nos chefs de projet. Mais durant le développement, il y a eu des problèmes comme :

- Un problème de complexité au niveau du *front-end* du site ;
- Une architecture de projet non conventionnelle qui porte préjudice à la maintenabilité du site web ;
- Des soucis de configuration d'environnement sur la machine virtuelle de test ;
- Un manque de communication avec les chefs de projet ;

- Un manque de compétences des chefs de projet sur les technologies utilisées

La réalisation de ce projet avait commencé il y a quelques années et chaque contributeur de QuChemPedIA rajoutaient des nouvelles technologies sans que le projet d'origine ne soit terminé. Cela a mené à des cohabitations de plusieurs frameworks qui ont rendues le projet très compliqué à reprendre pour de futurs étudiants.

1.1 Site web existant s'appuyant sur les mêmes besoins

Sur le marché il existe plusieurs sites web qui traitent du sujet de la consultation de molécules chimiques suivant différents calculs.

Le plus populaire est PubChem, une banque de données, qui a été créé par le **Centre américain pour les informations biotechnologiques** qui est sous l'autorité de **Instituts américains de la santé**.

Ce site web est beaucoup plus conséquent que le projet QuChemPedIA car il enveloppe de plus grande fonctionnalité.

- Blog
- Formulaire de contact
- Possibilité de déposer ses travaux de recherches
- Recherche de molécules avancée
- etc...

Ce qui peut être intéressant pour QuChemPedIA c'est de s'inspirer de ce site web qui a été créé par des professionnels pour un besoin de santé général.

Nous nous sommes essentiellement appuyer sur l'UX de PubChem d'un point de vue graphique. Pour ce qui est des fonctionnalités coté métier, les idées ont été proposées par Thomas CAUCHY et Benoit DA MOTA.

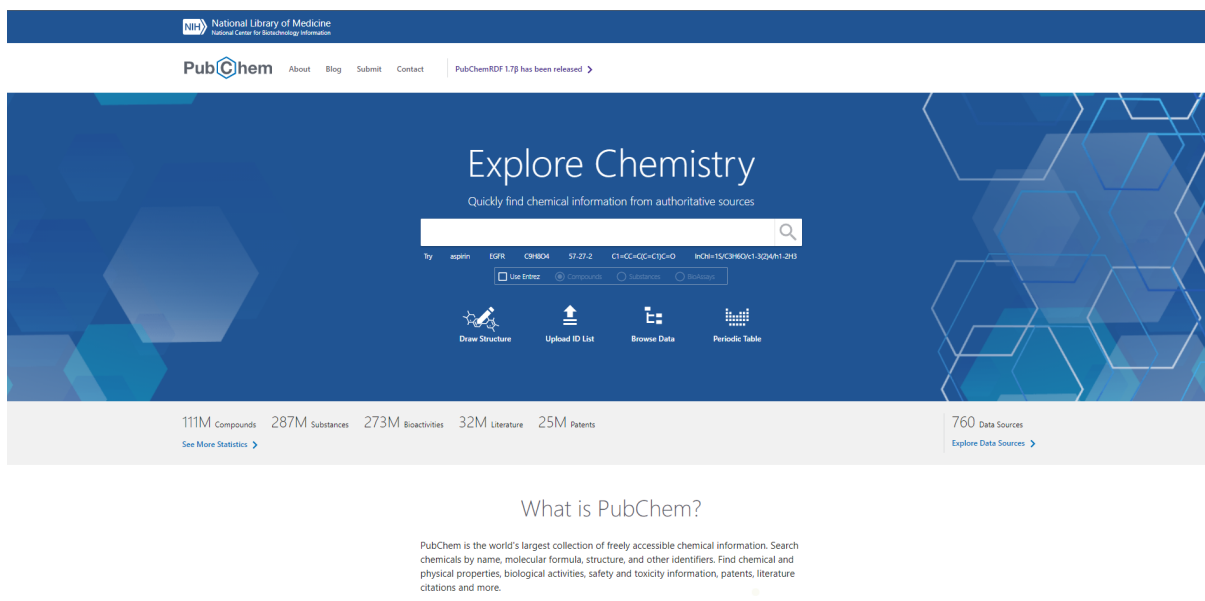


FIGURE 2 – Page d'accueil PubChem

Voici la page d'accueil du site web PubChem, on y retrouve l'incontournable barre de recherche qui est le point d'entrée de QuChemPedIA. Celle-ci permet de rechercher une molécule suivant une formule particulière.

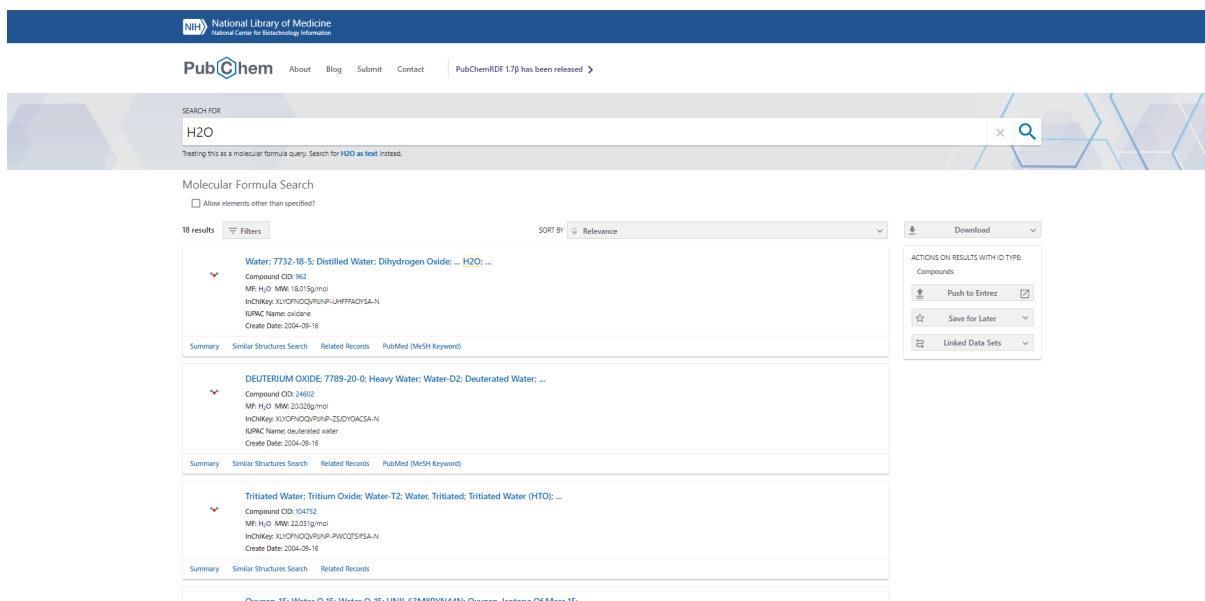


FIGURE 3 – Affichage résultat de recherche molécule PubChem

Pour l'affichage des résultats lors d'une recherche on peut voir que chaque molécule est disposée dans une liste verticalement. En dessous du nom de la molécule, on y affiche les informations générales de cette dernière. Si l'utilisateur veut une version détaillée il faut qu'il clique sur une item de la liste. Rien de plus intuitif.

1.2 Représentation schématique fonctionnelle

Bête à cornes

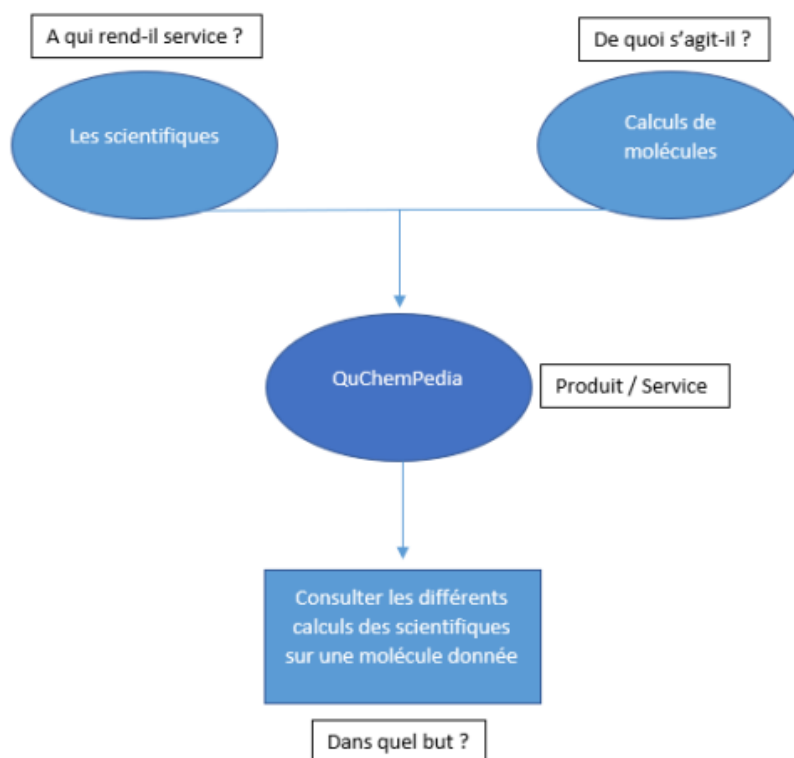


FIGURE 4 – Schéma bête à cornes QuChemPedIA

A qui rend-il service ?

Le projet QuChemPedIA a émergé suite à un besoin scientifique porté dans un premier temps par le chimiste Thomas CAUCHY. Comme énoncé précédemment, actuellement aucun site web ne remplit entièrement le besoin métier évoqué par les chimistes.

De quoi s'agit-il ?

Les éléments qui vont être traités par QuChemPedIA ne sont autres que des calculs de molécules. Ces derniers sont obtenus de manière collaborative par des scientifiques du monde entier et sont stockés sur une seule et même base de données. Le projet QuChemPedIA porte donc sur le domaine du Big Data.

Dans quel but ?

QuChemPedIA va mettre en lien "Les scientifiques" et "Le calcul de molécules" pour créer une plateforme de consultation des différentes données collectées et soumis par des scientifiques du monde entier.

2 Détail du besoin

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

Notre objectif cette année sera donc d'avoir **un site testé et fonctionnel. Permettant ainsi aux futurs étudiants de pouvoir continuer à développer ce projet sans difficultés**, tout en utilisant des technologies faciles à appréhender et pérennes.

Un premier cahier des charges a donc été réalisé :

- La refonte du *front-end* : On doit garder la même charte graphique que l'ancien site avec comme contrainte le choix d'une technologie plus intuitive ;
- Créer un système de "recherche partielle" : Lorsqu'un utilisateur saisit une recherche
- Réaliser une API REST pour la consultation des données : Cette API doit être accessible pour tout le monde (et donc publique) ;
- Réaliser une API REST afin d'insérer ou supprimer des molécules dans la base de données : Cette API doit être accessible uniquement par certaines personnes (et donc privée). Cette fonction n'est pas obligatoire mais on a décidé de la développer ;
- Mettre en place l'intégration continue : Il faut utiliser un outil fiable ;
- Et enfin documenter : Pour guider les personnes qui vont reprendre le projet Qu-ChemPedIA ;

3 User eXperience

3.1 Chemins utilisateur

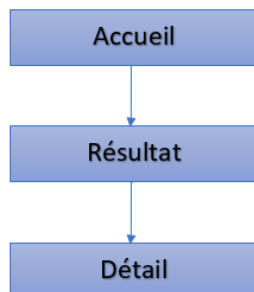


FIGURE 5 – Architecture du site web

Liste des fonctionnalités de QuChemPedIA :

- Accueil
 - Rechercher une molécule suivant différent format
 - * Formula
 - * Inchi
 - * Smile
- Résultat
 - Possibilité pour l'utilisateur de naviguer entre les pages s'il y a beaucoup de résultats
 - Possibilité pour l'utilisateur de filtrer le nombre de résultat
 - Possibilité pour l'utilisateur de cliquer sur une molécule pour naviguer vers la page détail
- Détail
 - Description
 - * Bouton copié la formule Inchi
 - * Bouton copié la formule Smiles
 - * Bouton télécharger le "log files"
 - Results
 - * Wavefunction
 - * Geometry
 - Bouton télécharger le schéma "Cartesian atomic coordinates"
 - Visualisation
 - * Bouton affichage d'un graphique représentant la molécule en 3D

L'utilisateur (un chimiste ou étudiant chimiste dans la plupart des cas) va tout d'abord se rendre sur le site QuChemPedIA et accédera à la page d'accueil suivante :

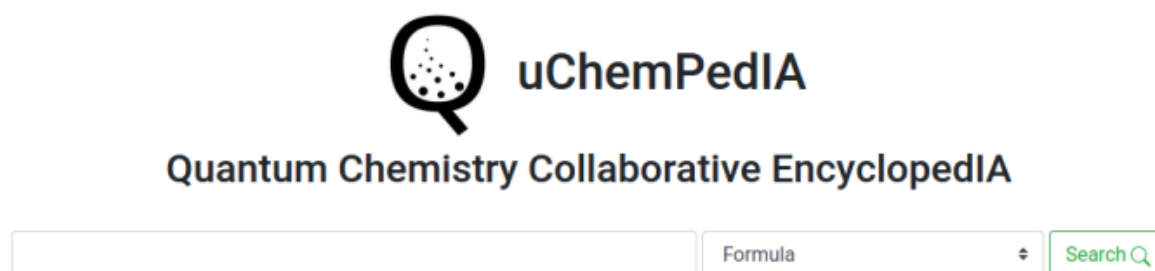


FIGURE 6 – Page d'accueil Quchempedia

Cette page est très intuitive, elle ne se compose que d'une barre de recherche où entrer la molécule recherchée, et de choisir sur quel filtre rechercher cette molécule parmi les trois suivants :

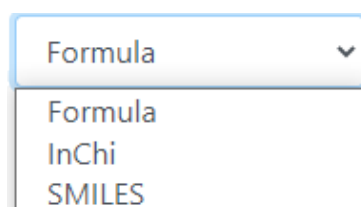


FIGURE 7 – Filtres de recherche

Une fois que l'utilisateur clique sur le bouton "Search" ou appuie sur la touche "Entrée" il y a deux possibilités :

Premièrement, la recherche ne trouve aucun résultat, dans ce cas nous retournons la page suivante :

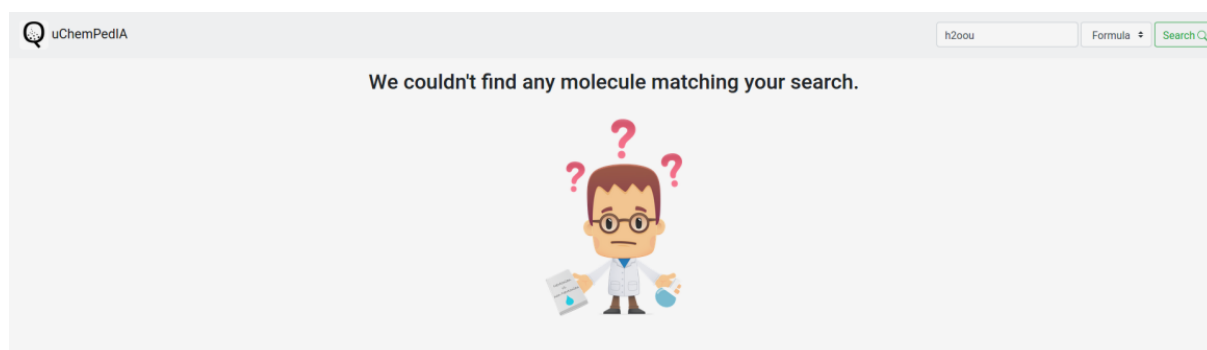


FIGURE 8 – Aucun résultat trouvé

Dans ce cas, l'utilisateur peut faire une nouvelle recherche grâce à la barre de recherche en haut à droite de l'écran ou revenir sur l'écran d'accueil en cliquant sur "QuChemPedIA" en haut à gauche de l'écran.

En revanche, si la recherche obtient des résultats, on obtient une page comme celle-ci :

uChemPedIA

h2o

Formula + Search Q

Nombre de résultats

Found 8 for h2o (formula)

25 entries/page

OH ₂	Formula : H2O Job Type : FREQ, OPT Charge : 0 Multiplicity : 1 Solvent : Gas	Number heavy atoms : 1 Basis set name : No basis set name List Theory : DFT Ending energy : No ending energy
OH ₂	Formula : H2O Job Type : OPT_ES Charge : 0 Multiplicity : 1 Solvent : Gas	Number heavy atoms : 1 Basis set name : No basis set name List Theory : DFT Ending energy : No ending energy
OH ₂	Formula : H2O Job Type : OPT_ES Charge : 0 Multiplicity : 1 Solvent : Gas	Number heavy atoms : 1 Basis set name : No basis set name List Theory : DFT Ending energy : No ending energy
OH ₂	Formula : H2O Job Type : OPT Charge : 0 Multiplicity : 1 Solvent : Gas	Number heavy atoms : 1 Basis set name : 0 List Theory : DFT Ending energy : No ending energy
OH ₂	Formula : H2O Job Type : TD Charge : 0 Multiplicity : 1 Solvent : Gas	Number heavy atoms : 1 Basis set name : No basis set name List Theory : DFT Ending energy : No ending energy

Quelques informations sur la molécule

FIGURE 9 – Page de recherche avec divers résultats

L'utilisateur a ensuite plusieurs choix :

- Effectuer de nouveau une recherche avec la barre de recherche en haut à droite
- Retourner à la page d'accueil en haut à gauche
- Changer de page
- Changer le nombre de résultats par page
- Cliquer sur la molécule de son choix (en cliquant sur la ligne de la molécule concernée) dans les résultats afin d'accéder à ses détails

Si l'utilisateur choisit le dernier choix, il accédera donc à la page détails de la molécule suivante :

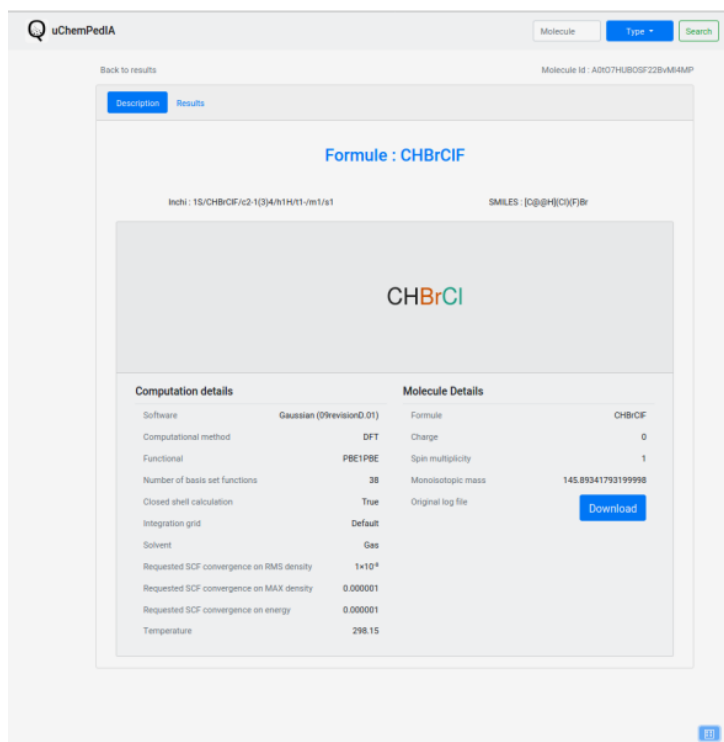


FIGURE 10 – Page de détails concernant une molécule - Partie 1

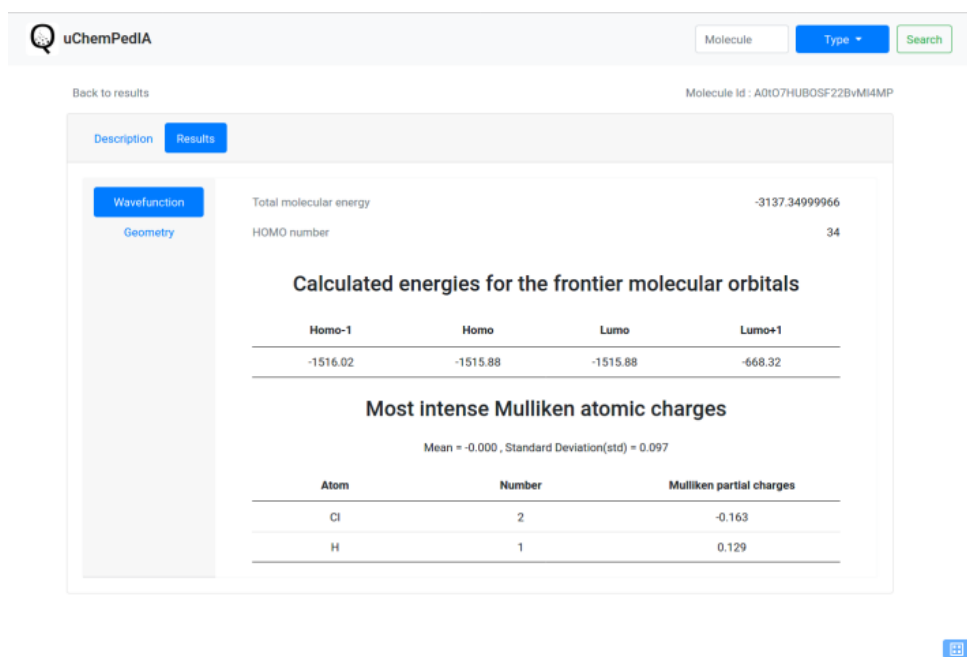


FIGURE 11 – Page de détails concernant une molécule - Partie 2

Grâce à cette page, l'utilisateur retrouve toutes les informations nécessaires grâce aux différents onglets concernant la molécule sélectionnée très rapidement. Une fois que l'utilisateur a récupéré les informations qu'il voulait, il peut toujours refaire une recherche ou retourner à la page d'accueil grâce à la barre située en haut de l'écran.

Concernant l'UX (User eXperience), bien que l'interface actuelle reste très primaire et relativement simple nous avons réfléchi à plusieurs améliorations que nous pouvons apporter à QuChemPedIA.

3.2 Adaptabilité

L'adaptabilité d'un système concerne sa capacité à réagir selon le contexte, et selon les besoins et préférences des utilisateurs.

UX/UI design - Cours de Management de Projet

3.2.1 Ajouter un bouton pour modifier le thème de l'interface web

Il serait intéressant d'ajouter une fonctionnalité permettant à l'utilisateur de changer le thème de l'interface web selon ses envies. Des fonctionnalités similaires sont déjà implémentées dans certains sites web.

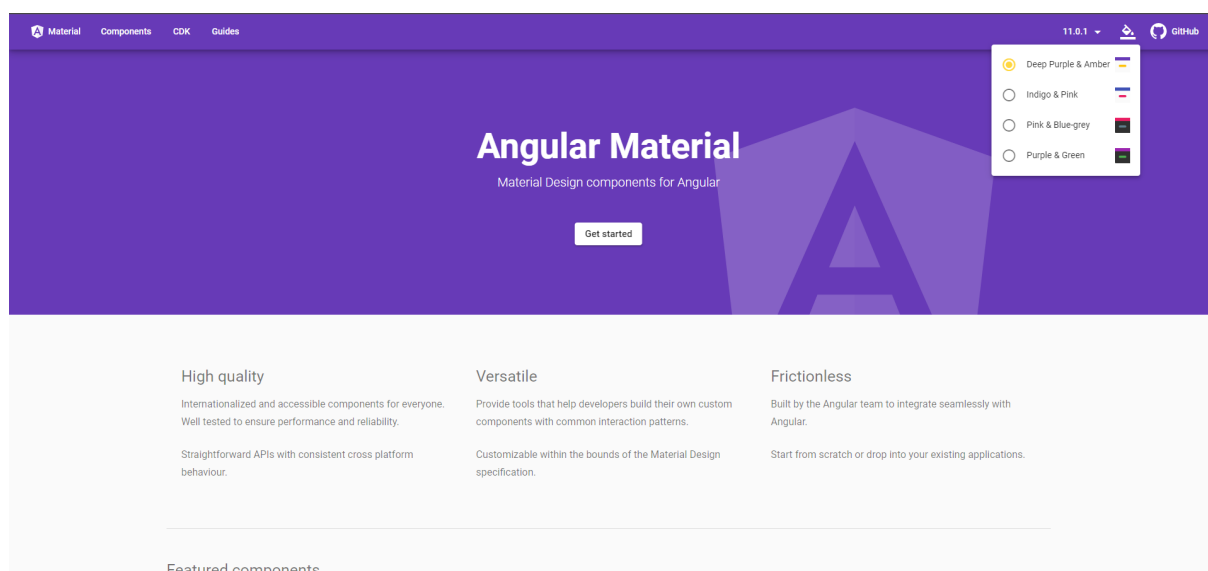


FIGURE 12 – Site web Angular Material avec le thème *Deep Purple & Amber*

Nous avons pris pour exemple le site web Angular Material. C'est un site web qui contient la documentation du framework **Angular Material**.

Ici l'utilisateur va pouvoir choisir, via la liste située en haut à droite de la *Figure 12*, entre 4 thèmes différents :

- Deep Purple & Amber
- Indigo & Pink
- Pink & Blue-grey
- Purple & Green

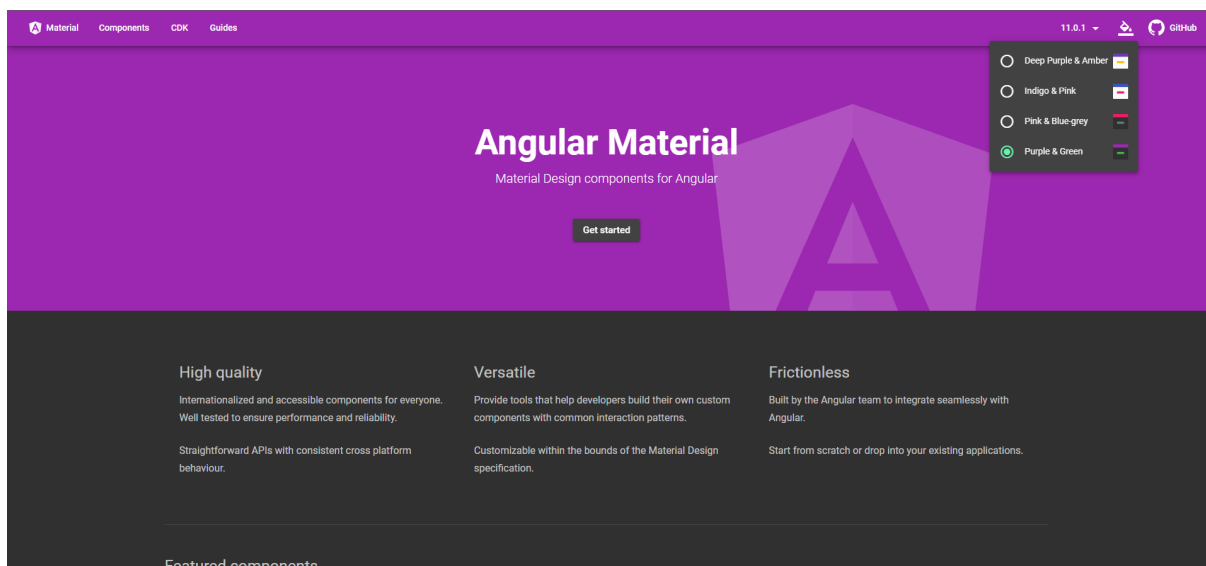


FIGURE 13 – Site web Angular Material avec le thème *Purple & Green*

3.2.2 Compatibilité de QuChemPedIA sur tous les navigateurs web

Il est vrai que chaque utilisateur est unique et possède par conséquent des préférences personnalisées issues de certaines prises d'habitudes.

L'exemple le plus parlant est celui du choix du navigateur web. De nos jours on retrouve une multitude de navigateur.

En voici une liste non-exhaustive :

- Mozilla Firefox
- Google Chrome
- Opera
- Microsoft Edge
- Internet Explorer

L'idée serait de réaliser des tests automatisés au niveau de l'interface utilisateur. Ces tests seront effectués sur tous les navigateurs de cette liste. Il faudra donc vérifier et assurer la même UX peu importe le choix du navigateur par l'utilisateur.

3.2.3 Possibilité de traduire l'interface graphique sous différentes langues

On peut aussi imaginer d'implémenter la fonctionnalité de traduction de QuChemPedIA pour satisfaire au mieux les attentes de l'utilisateur.

A savoir que présentement l'application est uniquement disponible en anglais. Cependant si pour X raison l'anglais est une barrière à la lecture des données affichées il serait pertinent de se pencher sur un affichage multilingue.

3.2.4 Possibilité de changer l’affichage du détail d’une molécule

Une demande du client était de pouvoir modifier l’affichage du détail d’une molécule en cliquant simplement sur un bouton situé en bas à droite de l’écran.

Le mode numéro 1 correspond à un affichage des données sous différent onglet et contraint l’utilisateur à naviguer dans chacun de ces onglets pour voir les données. Ce mode permet d’améliorer l’affichage en groupe de données stocké dans chaque onglet.

The screenshot displays the uChemPedia web interface. At the top, there is a search bar with the text "Molecule", a dropdown menu for "Type", and a "Search" button. Below the search bar, there is a "Back to results" link and a "Molecule Id : A0107HUB0SF22BvM4MP" label. The main content area is divided into two tabs: "Description" (selected) and "Results". Under the "Description" tab, the molecule's formula is shown as "Formule : CHBrCl". Below this, the InChI string is "Inchi : 1S/CHBrCl/c2-1(3)4/h1H/t1-m/s1" and the SMILES string is "SMILES : [C@H](Cl)(F)Br". A large, stylized chemical structure of CHBrCl is displayed in the center. Below the structure, there are two tables: "Computation details" and "Molecule Details".

Computation details		Molecule Details	
Software	Gaussian (09revisionD.01)	Formule	CHBrCl
Computational method	DFT	Charge	0
Functional	PBE1PBE	Spin multiplicity	1
Number of basis set functions	38	Monoisotopic mass	145.89341793199998
Closed shell calculation	True	Original log file	Download
Integration grid	Default		
Solvent	Gas		
Requested SCF convergence on RMS density	1×10 ⁻⁸		
Requested SCF convergence on MAX density	0.000001		
Requested SCF convergence on energy	0.000001		
Temperature	298.15		

FIGURE 14 – Mode d’affichage numéro 1 page détail

Voici un aperçu de cette page où on voit bien que l’affichage est bien adapté afin d’effectuer une impression :



15

3.3 Guidage

Le Guidage est l'ensemble des moyens mis en oeuvre pour conseiller, orienter, informer, et conduire l'utilisateur lors de ses interactions avec l'ordinateur (messages, alarmes, labels, etc.), y compris dans ses aspects lexicaux.

UX/UI design - Cours de Management de Projet

Dans cette partie nous pouvons citer plusieurs exemple du site QuChemPedIA.

3.3.1 La légende de la recherche avancée

Tout d'abord il y a l'encart situé juste en dessous de la barre de recherche de l'accueil. Il permet de décrire tous les types de recherches possibles dont la recherche partielle qui est une fonctionnalité phare de l'application.

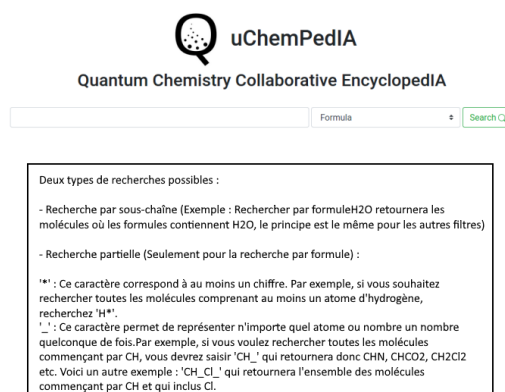


FIGURE 16 – Description de la recherche partielle pour l'utilisateur

On peut voir que l'utilisateur peut rechercher une molécule de plusieurs façons différentes : La recherche basique est une recherche sous forme de chaîne, c'est à dire que l'on récupère la recherche de l'utilisateur afin de vérifier dans les molécules présentes dans la base de données si cette chaîne apparaît dans la molécule en affichant en priorité la chaîne exacte, puis les sous chaînes.

Concernant la recherche par formule, nous avons aussi mis en place la recherche partielle qui fonctionne de la manière suivante :

Si on veut toutes les molécules possédant 4 atomes d'hydrogène et 2 atomes d'azote, alors la recherche sera la suivante : `_H4_N2`. L'utilisateur doit séparer tous les atomes par le caractère `'_'` (underscore), dans ce cas nous retournerons toutes les molécules possédant ces atomes en commençant par les moins denses (ayant le moins d'atomes total).

De plus, nous pouvons ne pas préciser le nombre d'un atome spécifique grâce au caractère `'*'`, par exemple si l'utilisateur recherche toutes les molécules possédant 4 d'hydrogène et un nombre quelconque d'azote, il recherchera `"_H4_N*"`.

3.4 Gestion des erreurs

La gestion des erreurs à pour but d'éviter les erreurs tout en les corrigeant. En utilisant des messages d'erreurs explicites

UX/UI design - Cours de Management de Projet

3.4.1 Sur l'interface graphique

QuChemPedia ne contient qu'une unique barre de recherche qui correspond à un champ de formulaire.

La gestion des erreurs est donc relativement facile à couvrir.

L'unique règle implémentée sur le Front-End est : lorsque l'entrée de l'utilisateur existe en base on retourne la liste des résultats sinon on retourne une page 404 indiquant que la molécule recherchée est introuvable (*Voir Figure 8*).

3.4.2 Sur l'API d'administration

Pour ce qui est de l'API d'administration (API privée) la gestion des erreurs est différente mais tout aussi indispensable car elle ne possède pas d'interface graphique. Le consommateur de l'API doit donc être explicitement averti de ce que renvoie sa demande

Le type de données traité est sous un format JSON humainement lisible. Le format JSON est une représentation des données basée sur un système de **clé/valeur**.

Voici la liste des codes erreurs gérées :

- 200 - La molécule a été ajoutée avec succès
- 400 - La requête n'est pas correctement paramétrée
- 404 - La molécule n'existe pas
- 500 - Erreur interne serveur

3.4.3 Sur l'API de consultation

Concernant l'API de consultation (API publique), celle qui est utilisée par le Front-End, de la même manière un système de gestion d'erreurs a été implémenté.

Voici la liste des codes erreurs gérées :

- 200 - La molécule a été ajoutée avec succès
- 400 - La requête n'est pas correctement paramétrée
- 404 - La molécule n'existe pas
- 500 - Erreur interne serveur

3.5 Compatibilité

Accord entre les caractéristiques des utilisateurs (mémoire, perceptions, habitudes, compétences, âge, attentes, etc.), les tâches et l'organisation des sorties, des entrées et du dialogue d'une application donnée

UX/UI design - Cours de Management de Projet

3.5.1 Le lexique utilisé pour le nommage des labels

On peut aussi souligner le fait que chaque label utilisé pour décrire une molécule est tiré du jargon scientifique. Ce qui est une force étant donné que ces derniers sont les principaux utilisateurs de QuChemPedIA. Cela ne devient plus qu'une formalité concernant la compréhension de l'affichage.

3.6 Charge de travail

La Charge de Travail concerne l'ensemble des éléments de l'interface qui ont un rôle dans la réduction de la charge perceptive ou mnésique des utilisateurs et dans l'augmentation de l'efficacité du dialogue.

UX/UI design - Cours de Management de Projet

Nous arrivons à l'un des critères le plus important qui relève de minimiser la charge de travail de l'utilisateur. QuChemPedIA est l'essence même de la simplicité c'est d'ailleurs l'aspect indispensable que partage la majorité des moteurs de recherches. Car oui n'oublions pas que QuChemPedIA est un moteur de recherche de molécules.

Pour illustrer cette simplicité nous pouvons compter le nombre de clique nécessaire pour parvenir à une demande lambda qui est celle de la consultation du détail d'une molécule.

En supposant que l'utilisateur ait tapé l'adresse du site dans l'URL. Voici le déroulement du scénario :

1. Premier clique sur la barre de recherche pour ensuite ajouter la molécule à rechercher (*Figure 6*)
2. **[Facultatif]** Sélection du filtre de recherche (*Figure 7*)
3. Sélection de sa molécule dans la liste des résultats (*Figure 9*)
4. **[Facultatif]** Changement de pages et nombre de résultat à afficher

Nous observons donc qu'au minimum nous avons réalisé notre tâche en seulement 2 cliques en moins de 5 secondes de navigation. La durée de rendu de la page web dépend du nombre de molécules dans la base de données.