

Санкт-Петербургский государственный Политехнический университет имени Петра
Великого

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ
на разработку программного продукта

Заказчик: СПбПУ

Исполнитель: Туник М., Куроптев И.

1. Введение

1.1. Наименование программного продукта

CML 2D

1.2. Назначение и область применения

Данный продукт предназначен для построения и визуализации двухмерных моделей молекул по общим структурным данным в формате CML. Может быть использован в учебных целях (в качестве наглядного пособия) в рамках курсов по химии и биологии.

1.3. Общее описание и интерфейс

Программный продукт представляет собой консольное приложение. Подробное описание ключей и команд можно найти в руководстве пользователя.

2. Требования к программе

2.1. Требования к функциональным характеристикам

Программа должна обеспечивать следующие функции:

1. Корректное считывание молекулы из файла CML
2. Вычисление степеней окисления всех атомов в молекуле
3. Построение 2D модели
4. Сохранение молекулы в исходном формате CML с 2D координатами
5. Отображение 2D-молекулы с помощью Jmol аналогичное получаемому через интерфейс пользователя
6. Вывод дополнительной информации (количественная формула, степени окисления)
7. Сохранение 2D-молекулы
8. Вывод справочной информации

2.2. Требования к надежности

2.2.1. Требования к обеспечению надежного функционирования программы

Надежное (устойчивое) функционирование программы должно быть обеспечено выполнением пользователем совокупности организационно-технических мероприятий, перечень которых приведен ниже:

2.2.1.1. Организация бесперебойного питания технических средств.

2.2.1.2. Использование лицензионного программного обеспечения.

2.2.1.3. Регулярное выполнение требований ГОСТ 51188-98. Защита информации. Испытания программных средств на наличие компьютерных вирусов.

2.2.2. Время восстановления после отказа

Восстановление после отказа определяется временем восстановления операционной системы.

2.2.3. Отказы из-за некорректных действий пользователей системы

Отказы программы вследствие некорректных действий пользователя при взаимодействии с программой недопустимы.

3. Условия эксплуатации

3.1. Климатические условия

Климатические условия эксплуатации, при которых должны обеспечиваться заданные характеристики, должны удовлетворять требованиям, предъявляемым к техническим средствам в части условий их эксплуатации.

3.2. Требования к составу и параметрам технических средств

В состав технических средств должен входить ПК с архитектурой x86 и ОС Windows 7 service pack 1 или выше.

3.3. Требования к информационной и программной совместимости

3.3.1. Требования к информационным структурам и методам решения

С помощью библиотеки boost производится разбор исходного файла CML, по шаблону XML, затем дополнительными средствами происходит окончательное распознавание данных. В программе используется представление молекулы в виде неориентированного графа. Производится расчет координат, далее визуализация полученной модели производится с помощью Jmol.

3.3.2. Требования к исходным кодам и языкам программирования

Языки реализации: C++(ISO/IEC 14882:2003), компилятор Visual C++ 2010

3.3.3. Требования к программным средствам, используемым программой

Jmol(13.0.4), Boost(1.60.0)

3.3.4. Требования к используемой VCS

В качестве VCS может использоваться Git с репозиторием на GitHub.

4. Требования к комплекту поставки

4.1. Требование к составу программной документации

Состав программной документации должен включать в себя:

4.1.1. Техническое задание в формате pdf на русском языке

4.1.2. Исходный код программы и модульные тесты на C++

4.1.3. Руководство пользователя

4.1.4. Лицензия MIT

4.2. Язык

Русский

5. Требования к комплекту поставки

Архив с исполняемым модулем, руководством пользователя и лицензией.

6. Технико-экономические показатели

6.1. Экономические преимущества разработки

Существующие аналоги являются коммерческими продуктами. Данный программный продукт распространяется по лицензии MIT, поэтому в улучшении продукта будет задействовано множество сторонних разработчиков, что позволит повысить его качество.

7. Этапы

7.1. Этапы

разработки

- 7.1.1.**Техническое задание (23.03.16)
- 7.1.2.**Тесты для ТЗ (28.03.16)
- 7.1.3.**Проектирование интерфейса (04.04.16)
- 7.1.4.** Кодирование (18.04.16)
- 7.1.5.** Приемно-сдаточные испытания (9.05.16)
- 7.1.6.** Документация (16.06.16)
- 7.1.7.** Релиз (23.06.16)

7.2. Содержание работ по этапам

На этапе разработки технического задания должны быть выполнены перечисленные ниже работы:

1. Постановка задачи.
2. Определение и уточнение требований к техническим средствам.
3. Определение требований к программе.
4. Определение стадий, этапов и сроков разработки программы и документации на неё.
5. Согласование и утверждение технического задания.

На этапе разработки программы должна быть выполнена работа по кодированию и отладке программы.

На этапе разработки программной документации должна быть выполнена разработка программных документов в соответствии с требованиями к составу документации. На этапе тестирования программы должны быть выполнены следующие виды работ:

1. Разработка, согласование и утверждение программы и модульных тестов.
2. Проведение приемо-сдаточных испытаний.
3. Корректировка программы и программной документации по результатам испытаний.

8. Список модульных тестов

- 8.1.** Тестирование модуля для распознавания молекулы из cml файла
- 8.2.** Тестирование обработки приложением заведомо некорректных данных
- 8.3.** Тестирование модуля для построения 2D модели и ее сохранения
- 8.4.** Тестирование модуля для вычисления степеней окисления всех атомов в молекуле и построения формулы
- 8.5.** Тестирование модуля для визуализации