

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.

Программный продукт использует интерфейс командной строки. Входные данные в программу можно передавать через командную строку или в виде тестового файла. Входные данные состоят из набора параметров, которые определяют поведение программы: имя CML-файла, удовлетворяющего стандартам и схемам стандарта[1], вывод количественной формулы[2](ключ -f), степеней окисления атомов (ключ -p), запуск Jmol для отображения построенной 2D-модели (ключ -v), имя файла для которого текущие разрешения ОС позволяют производить запись для сохранения построенной модели.

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 приемно-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

9. Ресурсы

[1] - cml.sourceforge.net

[2] – en.m.wikipedia.org/wiki/Chemical_formula