GEI299 Planification de projet : Application d'algorithmes de préparation d'état fondamental en chimie quantique pour la conception d'agents de contraste IRM de nouvelle génération

Maëlle Fromont

August 2025

1 Enoncé

Vous êtes actuellement employé par l'Institut Quantique (IQ) de l'UdeS et vous êtes spécialisé en informatique quantique, et notamment en algorithme quantique pour la préparation d'état fondamental. Un client, M. Scanner de la compagnie GE HealthCare, a récemment contacté l'IQ pour un tout nouveau projet.

Actuellement, lors d'un examen d'imagerie par résonnance magnétique (IRM), on utilise des agents de contraste. Ces agents permettent de mettre en évidence les structures internes du corps en modifiant localement les propriétés magnétiques de l'eau et ainsi mettre en évidence des anomalies. Ces agents sont basés sur le métal gadolinium, et pose plusieurs défis :

- risque d'accumulation de gadolinium dans l'organisme,
- limite de performance en terme de relaxivité et sélectivité tissulaire,
- besoin croissant de formulations plus sûres, biodégradables et efficaces à faible dose.

L'IRM détecte le signal des protons (principalement ceux de l'eau) qui reviennent à leur état fondamental après avoir été excités par une onde radio. Les ions métalliques paramagnétiques perturbent localement le champ magnétique et accélèrent la relaxation des protons voisins. Le gadolinium est toxique, il est donc enfermé dans une molécule organique, souvent des complexes métal-ligand.

M. Scanner souhaite savoir s'il existe d'autres métaux que le gadolinium pour l'utilisation d'agent de contraste et en connaître les propriétés, optimisé leur efficacité et leur sécurité. Il souhaite donc acquérir un logiciel qui permet de déterminer les interactions des métaux avec leur environnement chimique. Un prototype du logiciel doit être livré au bout de 2 mois. Pour pouvoir utiliser le code, il souhaite un rapport technique, un cahier jupiter, et une présentation haut-niveau pour des gens d'affaire. Le logiciel doit comprendre une interface utilisateur accessible et compréhensible au couleur de GE HealthCare. Le logiciel

doit permettre l'ajout, la modification et la suppression de métaux candidats dans la base de données interne. Il doit intégrer un module de simulation quantique (via la plateforme IBM) pour calculer l'état fondamental et les propriétés électroniques des complexes métal-ligand. Il doit fournir un comparateur multi-critères (relaxivité, toxicité, biodégradabilité, coût) avec classement automatique. Les résultats doivent pouvoir être exportés en formats PDF, CSV et images haute résolution. Un mode "scientifique" (détails complets) et un mode "affaires" (résumé visuel et indicateurs clés) doivent être disponibles. Le logiciel doit être compatible avec les systèmes d'exploitation Windows et macOS. Il souhaite que vous utilisez un langage et un framework maintenables (ex. Python + interface web ou desktop), avec une connexion sécurisée à la plateforme IBM Quantum pour l'exécution des calculs. Il souhaite aussi un temps de calcul pour une simulation standard inférieur à 2 minutes pour un taux d'erreur inférieur à 2% par rapport à une référence classique, avec une journalisation automatique des calculs pour traçabilité. Avec l'évolution des technologies quantiques, il souhaite également que le code soit modulaire pour l'ajout de nouveaux algorithmes, avec un plan de maintenance sur 12 mois.

Le client veut que le coût du logiciel soit le plus bas possible, il doit être d'au maximum 200000 \$CAD pour l'accès au matériel quantique, les ressources humaines et matériels, la gestion de projet, ceci ne prend pas en compte le temps de maintenance sur 12 mois.

Pour réaliser ce projet, vous avez accès à la plateforme d'IBM, un chimiste et autant de stagiaire, personnel de recherche et technicien nécessaire. Pour l'évaluation du coût du projet, un stagiaire coûte 9000 \$CAD pour 4 mois, un personnel de recherche ou chimiste 1000 \$CAD / jour, un technicien 800 \$CAD / jour. Enfin l'accès à la plateforme IBM, l'IQ possède le plan premium qui permet l'accès à la plateforme pour 48 \$CAD par minute d'utilisation.

2 Consignes pour les devoirs

- Les devoirs sont à remettre pour la date indiquée à 23h59.
- Les devoirs doivent être remis individuellement selon la procédure établie.
- Chaque devoir doit être un fichier pdf nommé comme suit

```
CIP_Nom_Prénom_Devoir_#numéro.pdf,
exemple : from2901_Fromont_Maëlle_Devoir_1.pdf
```

- Ils doivent être rédigés en Latex.
- Il est interdit d'utiliser les IA génératives pour la réalisation des devoirs.
- Cet énoncé peut être utilisé dans le cadre du cours BSQ201.

Le livre **Design for Electrical and Computer Engineers** de J. Eric Salt et Robert Rothery sert de base à la réalisation des devoirs.

La notation pour chacun des devoirs est 70% respect des consignes et contenus et 30% sur l'évaluation des qualités, v. Annexe A.

3 Devoir 1 : Cahier de spécification des exigences 25 Septembre

Fournir le document de spécification des exigences (ou cahier des charges c'est la même chose). Votre spécification des exigences doit comporter un maximum d'environ 5 pages. Concernant la structure de votre spécification des exigences, utiliser le contenu typique d'une spécification des exigences données dans les diapos DiapoSeance1.pdf (ce contenu typique est semblable à celui apparaissant au tableau 3.5 du livre de Salt).

3.1 Afin de structurer votre document vous pouvez vous aider des questions suivantes (facultatif mais fortement recommandé)

Cette question et ses sous-parties ci-bas suivent, ont pour but de parvenir à un énoncé du problème qui doit présenter les caractéristiques indiquées dans l'introduction de la section 3.3 du livre (non technique, non quantifié, complet, spécifiable). Pour ce faire, suivez les étapes des sous-parties suivantes (les étapes suivent les sous-sections de la section 3.3 ; la section A.2 (à partir de la page 116) de l'annexe A peut également être consultée à titre d'exemple). Le fait de suivre toutes ces sous-parties avant de rédiger un énoncé du problème fournit une approche structurée qui vous permettra d'obtenir un meilleur énoncé que si vous essayez simplement de rédiger un énoncé sur la base de ce que vous pensez qu'il devrait être ; cela vous permettra également d'obtenir la spécification des exigences.

- i. Utilisez le tableau 3.2 pour vous guider dans l'identification des éléments à inclure dans l'énoncé du problème. Vous devez identifier ces éléments dans le texte de la problématique (dans la vie réelle, on en discute avec le client) et les écrire sous forme de puces. Pour les besoins du présent exercice, demandez-vous également ce qui devrait être clarifié avec le client et qui n'est pas dit dans le texte écrit de la problématique (donnez 3 éléments pour lesquels une clarification supplémentaire serait nécessaire, il y en a d'autres, mais 3 seulement sont demandées ici). Dans votre réponse à cette question, indiquez, sous forme de puces, quelles pourraient être ces clarifications supplémentaires ainsi que les réponses potentielles, mais ne les incluez pas, ni leurs réponses potentielles, dans votre énoncé du problème. Séparez les éléments à inclure dans l'énoncé du problème comme suit : Eléments de contexte (Quel est le problème? Pourquoi v a-t-il un problème, d'où vient le problème? Quel est le contexte du projet?), exigences/spécifications de la conception, budget et calendrier, produits livrables, fiabilité et maintenance, contrat, et éléments à clarifier davantage avec le client. La liste précédente d'éléments à inclure dans l'énoncé du problème est un peu différente et plus exhaustive que ce qui apparaît dans le tableau 3.2 du livre, notamment en ce qui concerne les exigences/spécifications de conception qui apparaissent ici et qui ne sont pas dans le tableau 3.2. La raison est que beaucoup d'infos techniques sont mentionnées dans le texte du problème.
 - ii. Donnez un diagramme entrées/sorties du dispositif.
- iii. Fournir un aperçu de l'interface utilisateur du logiciel. Faites un dessin de l'interface elle-même, c'est-à-dire de ce à quoi elle ressemblerait dans la réalité. Vous pouvez le faire à la main. Identifiez les éléments de l'interface utilisateur (par exemple, les commandes, boutons, volets) et fournissez un court texte expliquant chaque élément, comme vous le feriez dans un

manuel d'utilisation.

- iv. Identifier les attributs fonctionnels et non-fonctionnels.
- v. Identifier les besoins conflictuels (pour les besoins de l'exercice, il vous est demandé d'identifier 3 besoins conflictuels, mais il peut y en avoir plus). Construisez une matrice de corrélation à cette fin (v. figure 3.10 et description associée dans le texte du livre de Salt). Fournissez la légende des symboles que vous utilisez dans la matrice de corrélation. En outre, expliquez brièvement sous la matrice pourquoi vous considérez que les différents besoins sont en conflit.
- vi. Rédiger une ébauche du manuel d'utilisation. Décrivez simplement le fonctionnement du logiciel (environ 10 à 15 lignes de texte).
- vii. Après avoir effectué les étapes précédentes, vous avez acquis une meilleure compréhension de ce que devrait être la conception. Il vous faut maintenant rédiger ce que Salt & Roithery appellent l'" énoncé du problème " (" problem statement "), mais qui dans les diapos DiapoSeance1.pdf correspond à la section Contexte/opportunité/valeur du projet/problème de la spécification des exigences. Un exemple d'énoncé du problème est donné à la section A.2.5, pages 123-124. Comme le montre cet exemple, votre énoncé du problème doit contenir 3 parties : 1) contexte, 2) ce que doit être la conception avec la durée du projet, budget du projet s'il est mentionné, coût de l'appareil, caractéristiques de l'appareil..., et 3) livrables. Note : Votre énoncé du problème ne sera peut-être pas aussi long que celui de l'exemple de la section A.2.5 du livre, mais cet exemple devrait être utile pour voir l'essentiel. N'oubliez pas, comme indiqué au début de la section 3.3, que l'énoncé du problème doit être non technique, non quantifié (il doit donc être qualitatif), complet et spécifiable en termes de besoins.

4 Devoir 2 : Cahier de conception 9 Octobre

- 1. Développer un diagramme conceptuel (diagramme qui illustre le concept d'appareil de mesure de température) et un schéma bloc (schéma des blocs internes et de leurs liens; il s'agit principalement de blocs électroniques ici, qui vont faire qu'on aura un appareil fonctionnel) du système de mesure de la température.
- 2. Rédiger un document de spécification du système. Votre document doit comporter un maximum d'environ 10 pages. Utiliser le contenu typique d'un document de spécification système donné dans les diapositives de DiapoSeance4.pdf pour définir les sections de votre document (l'exemple du chargeur de batterie d'automobile et le tableau 4.1 du livre peuvent être utiles; la Sect. 4.5 du livre peut également être utile pour savoir comment ce document doit être structuré et ce qui est nécessaire. Notes : Les titres de section donnés dans le tableau 1 du livre sont un peu différents de ceux donnés dans les diapositives; utilisez ceux des diapositives.

5 Devoir 3 : Planification du projet 13 Novembre

Les questions qui suivent sont pour le Devoir 3 qui consiste à élaborer un plan de projet pour le dispositif de mesure de la température.

Notes:

- Les questions 1 à 4 qui suivent sont en préparation de la question 5 qui consiste à rédiger un plan de projet complet. Le seul document à remettre pour ce devoir est le plan de projet, voir la question 5 pour les détails.
- 1. Pour la problématique, développer une structure organisationnelle (organization chart) semblable à celle de la fig. 5.1 du livre. De quels services (informatiques, électriques, mécaniques, autres ?) auriez-vous besoin pour mettre au point un tel algorithme/logiciel ? Décrivez brièvement le rôle de chaque service.
- 2. Pour la problématique, définissez les tâches. Tel qu'expliqué dans le livre, le schéma bloc du système doit être utilisé à cette fin.
- 3. Une fois les tâches définies, planifier le travail sous la forme d'un diagramme réseau de type AON, en tenant compte de l'ordre de priorité. Indiquez également le chemin critique sur l'AON. Supposez que vous n'avez pas de contraintes en matière de ressources humaines (c'est-à-dire que vous disposez de tout le personnel nécessaire; cela vous obligera à établir un calendrier comportant le plus grand nombre possible de tâches en parallèle). En outre, pour chaque tâche, fournir les informations pertinentes : titre de la tâche, numéro de la tâche, temps écoulé, durée estimée (temps écoulé), semaines de début et de fin et temps mort. Utiliser la notation fournie dans les diapositives DiapoSeance5.pdf que nous avons utilisées tout au long du cours. Enfin, à partir du AON, générer un calendrier de type diagramme à barres (diagramme de Gantt que vous pouvez réaliser à l'aide de Gantt project qui est gratuit en ligne (https://www.ganttproject.biz/), ou vous pouvez utiliser Microsoft Project, ou simplement une feuille de calcul, par exemple Excel). Comme unité de temps, utilisez des jours ou semaine.
 - 4. Evaluer les coûts.
- 5. Pour la problématique, rédiger un plan de projet (les questions précédentes étaient une préparation à la présente question, et vous pouvez bien sûr copier le matériel développé dans les questions précédentes dans votre plan de projet si cela est pertinent). Suivre la structure donnée dans le livre de Salt sur la Fig. 5.10 à la p.90 et expliquée à la p.91. Le plan de projet est normalement un plan qui couvre la phase de conception détaillée, pour commencer, jusqu'à la fin du projet. Cet exercice intégrera le travail que vous avez fait dans les questions 1 à 4 ci-dessus. Votre plan de projet doit comporter au maximum environ 10 pages. Note : Le plan de projet est un document que vous fournirez au client ; il doit être complet et contenir une table des matières.

6 Devoir 4 : Plan de test, analyse de risque et réflexion sur la planification possible pour le cours BSQ201 9 Décembre

6.1 Plan de test : maximum 2 pages

1. Rédigez un plan de tests pour le logiciel. Décrivez brièvement en mots, mais aussi précisément que possible, comment chaque test sera effectué en pratique, c'est-à-dire avec ou sans de M. Scanner. Le plan d'essai doit être une réponse à la spécification des exigences. Utilisez les lignes directrices décrites aux pages 111-112 du livre et l'exemple fourni aux pages

112-113 (adaptez cet exemple, utilisez les sections de cet exemple qui sont pertinentes).

6.2 Analyse de risque : maximum 2 pages

- 1. Donner une liste de 5 risques liés au projet.
- 2. Pour chacun des risques énumérés en 1., donner sa catégorie : risque technique, risque de gestion de projet, risque organisationnel, risque externe (un risque peut être dans plus d'une catégorie; dans ce cas, donner toutes les catégories que vous pensez qui s'appliquent). Utiliser une feuille de travail d'évaluation des risques tel qu'apparaissant dans le fichier AnalyseRisques-02_FeuilleTravail_Fig3-2_Wys_7.. Pour évaluer chacun des risques, utiliser la probabilité multipliée par la perte, ou si vous préférez une évaluation plus grossière et moins numérique tel qu'expliqué dans le document AnalyseRisques-01.pdf, utilisez la matrice de risque de la figure Fig. 5-2 (si vous choisissez d'utiliser une matrice de risque 5x5, alors utiliser les indicateurs suivants pour évaluer les risques et pertes : très bas (TB), bas (B), moyen (M), haut (H), ou très haut (TH). En vous basant sur votre évaluation, déterminez si le risque doit être ignoré, considéré/suivi, ou si une action doit être prise. Indiquez la méthode que vous avez choisi pour évaluer les risques (probabilité multipliée par le risque ou matrice de risque).

6.3 Pour voir plus loin : 15 points bonus pour des réponses correctement formulées

- 1. En reprenant votre énoncé du cours BSQ201, quelle est la meilleure planification à votre projet (traditionnelle, eXtreme, Agile...)? Pourquoi ?
- 2. Quelles difficultés organisationnelles avez-vous rencontré lors de la réalisation du projet BSQ201 ?
 - 3. Comment pouvez-vous améliorer votre planification/gestion de projet?
 - 4. Avez-vous rencontré des conflits lors du projet et avez-vous su les réglés?
- 5. Qu'est-ce que vous avez aimé dans le cours GEI299 et qu'est-ce qui serait à changer ou à améliorer?

A Grille des qualités

Qualité	A. Pertinence du con-	B. Clarté et structure	C. Présentation visuelle	D. Communication
	tenu			
1. Insuffisant	L'étudiante ou	L'étudiante ou	La communication n'est	L'étudiante ou
	l'étudiant éprouve	l'étudiant n'est pas	pas lisible ou il manque	l'étudiant présente
	de la difficulté à sélec-	en mesure d'organiser	des éléments visuels.	des communications
	tionner de l'information	l'information pour en		graphiques sans lien
	pertinente à présenter	permettre la com-		avec le texte.
	au regard des objectifs	préhension. Il n'y a		
	de la communication.	aucune transition entre		
		les sections.		
2. A améliorer	L'étudiante ou	L'étudiante ou	La communication est	L'étudiante ou
	l'étudiant présente	l'étudiant organise	classique et peu soignée.	l'étudiant lit le texte et
	des éléments pertinents	minimalement la com-		les graphiques mais elles
	dans la communication	munication avec des		ne sont pas présentées
	mais les éléments im-	transitions abruptes		selon l'état de l'art.
	portant sont soit mal	entre les sections.		
	présentés soit absents.			
3. Satisfaisant	L'étudiante ou	L'étudiante ou	La présentation est	L'étudiante ou
	l'étudiant présente	l'étudiant organise	claire avec des visuels	l'étudiant lit le texte et
	des éléments pertinents	adéquatement la com-	utiles et agréables.	les graphiques et sont
	dans la communication	munication avec des		généralement présentées
	au regard des objectifs	transitions entre les		selon l'état de l'art.
	de la communication.	sections.		
4. Excellent	L'étudiante ou	L'étudiante ou	la présentation est	L'étudiante ou
	l'étudiant présente	l'étudiant organise	soignée et profession-	l'étudiant lit le texte
	des éléments pertinents	efficacement la commu-	nelle ; visuels esthé-	et les graphiques et
	dans la communication	nication et facilite la	tiques et parfaitement	sont présentées selon
	au regard des objectifs	compréhension chez son	intégrés.	l'état de l'art, avec un
	de la communication.	auditoire.		titre évocateur ajoutant
	Le sujet est bien délim-			une plus-value à la
	ité et est présenté de			communication.
	façon concise.			

Qualité	E. Respect des consignes	F. Rédigé dans une langue de	G. Référence
		qualité	
1. Insuffisant	L'étudiante ou l'étudiant	L'étudiante ou l'étudiant	L'étudiante ou l'étudiant re-
	remet une communication	éprouve de la difficulté à	court à trop peu de référence
	écrite respectant trop peu	rédiger des phrases com-	et/ou abuse de paraphrase
	les consignes données, tant	plètes et bien structurées,	ou de citation.
	pour la forme que pour le	de même qu'à respecter	
	fond.	les règles grammaticales	
		élémentaires ce qui nuit à la	
		compréhension du texte. De	
		même le vocabulaire utilisé	
		n'est pas correct.	
2. A améliorer	L'étudiante ou l'étudiant	L'étudiante ou l'étudiant	L'étudiante ou l'étudiant
	remet une communication	écrit une communication	recourt à peu de référence
	écrite respectant un peu	avec quelques erreurs de	et/ou trop similaire, avec
	les consignes données, tant	grammaire, d'orthographe	des citations/paraphrases
	pour la forme que pour le	ou de syntaxe ne nuisant pas	trop longues.
	fond.	à la compréhension.	
3. Satisfaisant	L'étudiante ou l'étudiant	L'étudiante ou l'étudiant	L'étudiante ou l'étudiant a
	remet une communication	écrit une communication	recourt à des citations et
	écrite respectant en majorité	avec des phrases complètes	références pertinentes pour
	les consignes données, tant	et bien structuré avec du	appuyer son propos.
	pour la forme que pour le	vocabulaire généralement	
	fond.	approprié.	
4. Excellent	L'étudiante ou l'étudiant	La communication est	L'étudiante ou l'étudiant a
	remet une communication	rédigée dans une langue	recourt à des citations et
	écrite respectant toutes les	de qualité avec des phrases	références toutes pertinentes
	consignes données, tant pour	structurées avec du vocabu-	et variées pour appuyer son
	la forme que pour le fond.	laire parfaitement approprié.	propos.