

KVANTOVO-CHEMICKÉ VÝPOČTY

Katalóg požiadaviek

Jaroslav Ištók
Katarína Fabianová
Dušan Suja
Jerguš Adamec

October 9, 2016

Contents

1	Úvod	2
1.1	Účel tohto dokumentu	2
1.2	Rozsah projektu	2
1.3	Definície, akronymy a skratky	2
1.4	Odkazy	2
1.5	Prehľad zostávajúcej časti dokumentu	2
2	Všeobecný popis	2
2.1	Perspektíva projektu	2
2.2	Funkcionalita výslednej aplikácie	3
2.3	Charakteristika používateľov	3
2.4	Všeobecné obmedzenia	3
3	Predpoklady a závislosti	4
4	Zoznam špecifických požiadaviek na systém	4
5	Dodatky	5

1 Úvod

1.1 Účel tohto dokumentu

Dokument obsahuje všetky požiadavky, ktoré bude aplikácia implementovať. Je určený pre všetkých, ktorí sa budú podieľať na jej vývoji. Patrí sem zadávateľ, developeri, TODO dokončiť strana 26(23) v prezentácii

1.2 Rozsah projektu

Projekt sa radí medzi stredne veľké projekty a jeho vývoj bude prebiehať v časovom horizonte približne pol roka. Aplikácia bude obsahovať crawler, lexer, parser a orm na prácu s databázou a jednoduché intuitívne GUI. Bonusová funkcionality: grafické zobrazenie jednotlivých analyzovaných molekúl.

1.3 Definície, akronymy a skratky

- Crawler - nástroj, ktorý prelieza adresáre na serveroch a hľadá súbory
- Lexer - nástroj, ktorý analyzuje štruktúru súboru (dokumentu)
- Parser - Nástroj na spracovanie údajov zo súborov
- ORM - nástroj na prácu s databázou z programovacieho jazyka

1.4 Odkazy

- item

1.5 Prehľad zostávajúcej časti dokumentu

V nasledujúcich kapitolách nájdete rozširujúce informácie o projekte. Všeobecný popis projektu, perspektívu projektu, podrobný popis funkcionality, účel projektu, charakteristiku cieľových používateľov projektu a iné.

2 Všeobecný popis

2.1 Perspektíva projektu

- item

2.2 Funkcionalita výslednej aplikácie

Výsledná aplikácia bude pracovať nasledujúcim spôsobom: Vyhľadá súbory s dátami z meracích prístrojov na konkrétnych serveroch. Dáta zo súborov najskôr analyzuje, potom spracuje a uloží ich do databázy. V pravidelných časových intervaloch, alebo na vyžiadanie používateľa, bude rozširovať databázu o dáta z novopridaných súborov. Aplikácia poskytne používateľovi jednoduché a intuitívne webové rozhranie, v ktorom bude možné vykonávať požadované operácie nad dátami z databázy, ako je napríklad pokročilé vyhľadávanie na základe rôznych kritérií či možnosť jednoduchého vykreslenia molekuly na základe údajov z databázy. Webové rozhranie bude vedieť poskytnúť informácie o určitej molekule, či bola niekedy analyzovaná, akými metódami bola analyzovaná a podobne. Na prácu s aplikáciou postačí pripojenie na internet a webový prehliadač. Aplikácia bude chránená heslom a každý používateľ bude mať svoje prihlasovacie údaje, ktoré bude možné zmeniť. Nových používateľov bude môcť pridávať iba administrátor.

2.3 Charakteristika používateľov

Aplikácia je určená pre chemikov a fyzikov, ktorí pracujú s veľkým množstvom dát z meracích prístrojov a potrebujú v nich mať poriadok. Zákazníci sú profesionálni chemici a fyzici, ktorí potrebujú nástroj, ktorý by im zjednodušil prácu s dátami analyzovaných molekúl.

2.4 Všeobecné obmedzenia

Aplikácia je robená na mieru, takže nemôže si hocikto vytvoriť účet a používať ju. Používateľské kontá môže vytvárať iba administrátor. Na využívanie aplikácie je potrebné mať prístup k internetu a webový prehliadač. Webové rozhranie zobrazuje molekuly, ktoré má uložené v databáze. Ak je výpočet pre nejakú molekulu neúplný alebo chybný, potom danú molekulu nebude možné zobraziť. Objaví sa iba upozornenie, že dáta z výpočtu nie sú validné. Ak hľadaná molekula neexistuje v databáze, používateľ má možnosť nahrať súbor s výpočtom pre danú molekulu a v nasledujúcom vyhľadávaní, údaje o molekule budú zobrazené.

3 Predpoklady a závislosti

4 Zoznam špecifických požiadaviek na systém

[1] Vyhľadávanie súborov na serveroch

Aplikácie bude vyhľadávať súbory na serveroch, ktoré obsahujú dáta o molekulách, z meracích zariadení.

[2] Analýza nájdených súborov

Aplikácia bude analyzovať nájdené súbory, resp. bude zisťovať či majú požadovanú štruktúru na ďalšie spracovanie.

[3] Spracovanie údajov z nájdených súborov

Aplikácia bude vedieť spracovať dáta z nájdených súborov

[4] Uloženie údajov do databázy

Aplikácia bude vedieť uložiť spracované dáta prehľadne do databázy

[5] Aktualizovanie databázy o novopridané súbory

Aplikácia bude v pravidelných časových intervaloch, alebo na vyžiadanie používateľa, zisťovať prítomnosť novopridaných súborov, ktorých údaje ešte nie sú uložené v databáze a aktualizovať databázu o nové údaje.

[6] Webové používateľské rozhranie

Aplikácia bude ovládaná pomocou jednoduchého webového používateľského rozhrania.

[7] Možnosť vykonávania operácii nad dátami v databáze

Aplikácia bude poskytovať nástroje na prácu s údajmi uloženými v databáze. Bude medzi nimi vedieť vyhľadávať podľa rôznych kritérií, zisťovať informácie o tom, či bola konkrétna molekula analyzovaná, resp. či sa nachádza v databáze. Keď nájde požadovanú molekulu, vypíše, akými metódami bola analyzovaná, koľko krát bola analyzovaná a podobne.

[8] Zabezpečenie aplikácie

Na prístup do aplikácie bude nutné prihlásenie svojim používateľským menom a heslom. Používateľov bude môcť pridávať iba administrátor.

5 Dodatky

- item