

KVANTOVO-CHEMICKÉ VÝPOČTY

Katalóg požiadaviek

Jaroslav Ištók

Katarína Fabianová

Dušan Suja

Jerguš Adamec

October 18, 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 | 3 |
| 1.5 | Prehľad zostávajúcej časti dokumentu | 3 |
| 2 | Všeobecný popis projektu | 3 |
| 2.1 | Perspektívny pohľad na projekt | 3 |
| 2.2 | Funkcionalita výslednej aplikácie | 4 |
| 2.3 | Charakteristika používateľov | 4 |
| 2.4 | Všeobecné obmedzenia | 4 |
| 2.5 | Predpoklady a závislosti | 4 |
| 3 | Zoznam špecifických požiadaviek | 5 |

1 Úvod

1.1 Účel tohto dokumentu

Dokument obsahuje všetky požiadavky, ktoré bude aplikácia implementovať. Je určený všetkým, ktorí sa budú podieľať na jej vývoji, zahŕňajúc zadávateľa, ktorý kontroluje, či spísané požiadavky spĺňajú všetky potreby, ktoré na systém má, manažérov vývojového tímu, ktorí ho využívajú pri plánovaní a riadení procesu vývoja, dizajnérov, ktorí podľa neho vytvárajú návrh aplikácie, vývojárov, ktorí postupujú podľa návrhu, ktorý sa na neho odkazuje a pomáha im pochopiť aplikáciu, ktorú vyvíjajú, tvorcov testov, ktorí podľa neho vytvárajú validačné testy, správcov výslednej aplikácie, ktorí podľa neho vykonávajú údržbu systému po jeho dodaní. Výsledný dokument je pre všetkých zúčastnených čitateľný a zrozumiteľný.

1.2 Rozsah projektu

Projekt sa radí medzi stredne veľké projekty. Jeho vývoj bude prebiehať v časovom horizonte približne pol roka, pričom jeho samotná implementácia bude prebiehať v rozsahu jedného mesiaca. Obsah aplikácie bude pozostávať z častí ako sú crawler, lexer, parser, ORM a jednoduchého, no súčasne intuitívneho grafického užívateľského rozhrania. Bonusovou funkcionalitou bude grafické zobrazenie jednotlivých analyzovaných molekúl zvolených konkrétnym používateľom, pre podrobnejšie preskúmanie dát, získaných z výpočtov a následne uložených v databáze.

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

- Příklad zobrazenia spracovaných dát: http://neon.dpp.fmph.uniba.sk/qch_calcs/index.php

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 ďalšie.

2 Všeobecný popis

Výsledná aplikácia bude spravovať a prehľadávať databázu, obsahujúcu výsledky kvantovo-chemických výpočtov a bude pravidelne aktualizovaná automaticky alebo manuálne na vyžiadanie samotného používateľa. Aplikácia bude prístupná len vybraným používateľom, ktorým bude pridelené ich vlastné prihlasovacie meno a heslo. Každému z používateľov bude zároveň prístupný celý obsah databázy, teda obsah spravovaný každým z jednotlivých používateľov. Samotná aplikácia sa bude vyznačovať vysokou prenosnosťou vzhľadom na nulovú veľkosť a z toho vyplývajúce nulové požiadavky na dostupnú kapacitu pamäte, s dôrazom na vysokú dostupnosť vyplývajúcu z prístupu cez príslušnú webstránku.

2.1 Perspektívny pohľad na projekt

Projekt bude mať otvorený zdrojový kód. Bude bežať na linuxovom serveri a bude poskytovať webové rozhranie.

2.2 Funkcionalita výslednej aplikácie

Výsledná aplikácia bude pracovať nasledujúcim spôsobom: Vyhľadá súbory s výsledkami výpočtov z meracích prístrojov, ktoré sú uložené 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.

2.5 Predpoklady a závislosti

Grafické užívateľské prostredie bude po otvorení webstránky s aplikáciou v úvode pozostávať z prihlasovacieho formuláru tvoreného textovými poľami, určenými pre zadanie používateľského mena a používateľského hesla, slúžiacimi na identifikáciu jednotlivých vybraných používateľov a udelenie im prislúchajúcich právomocí. Po prihlásení bude používateľovi zobrazený aktuálny výpis údajov obsiahnutých v databáze, ako aj prvky ovládačov, slúžiacich na prácu s vybranými dátami, podľa bližšie špecifikovaných požiadaviek zadávateľa, zahŕňajúc jednoduchú správu jednotlivých používateľov alebo vybraného používateľa.

3 Zoznam špecifických požiadaviek na systém

[1] Vyhľadávanie súborov na serveroch

Aplikácie bude vyhľadávať súbory na serveroch, ktoré obsahujú výsledky výpočtov z meracích zariadení. Tieto súbory bude ďalej spracovávať. Konkrétne miesta vyhľadávania budú špecifikované v konfiguračných súboroch.

[2] **Analýza nájdených súborov**

Aplikácia bude analyzovať nájdené súbory, resp. bude zisťovať či majú validnú štruktúru, vhodnú k ďalšiemu spracovaniu.

[3] **Spracovanie údajov z nájdených súborov**

Aplikácia bude vedieť spracovať dáta z nájdených súborov do vhodného formátu, aby ich bolo možné ľahko uložiť do databázy.

[4] **Uloženie údajov do databázy**

Aplikácia bude vedieť uložiť spracované dáta prehľadne do databázy. S dátami v databáze sa bude dať ďalej pracovať.

[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 operácií 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 naanalyzovaná, 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.

4 Dodatky

- zatiaľ žiadne