

<b>Nazwa i akronim projektu:</b> <i>R2D2@top (R2D2)</i>	<b>Zleceniodawca:</b> <i>Uniwersytet Gdański, Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG-GUMed, Pracownia Symulacji Układów Biomolekularnych</i>	<b>Zleceńbiorca:</b> PG, WFTiMS, zespół projektowy IO nr R2
<b>Numer zlecenia:</b> PG-WFTiMS-IO-2020-R2	<b>Kierownik projektu:</b> <i>Łukasz Radziński</i>	<b>Opiekun projektu:</b> <i>prof. PG dr hab. inż. Marta Łabuda</i>

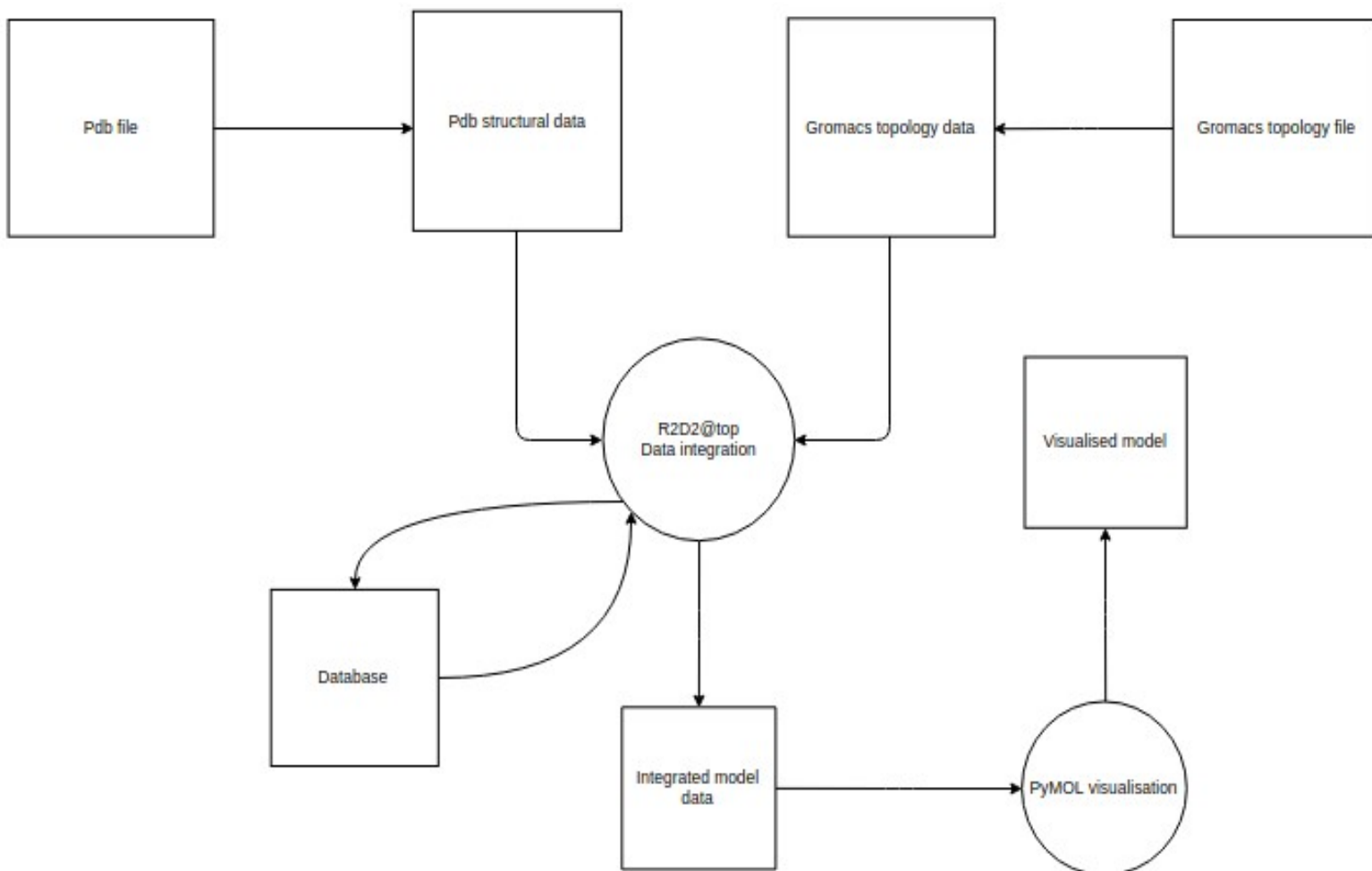
<b>Projekt Systemu (PS)</b>	<b>Nr wersji:</b> 2
<b>Odpowiedzialny za dokument:</b> <i>Łukasz Radziński Justyna Replin</i>	<b>Data pierwszego sporządzenia:</b> 08.06.20
	<b>Data ostatniej aktualizacji:</b> 12.06.20

#### Historia dokumentu

Wersja	Opis modyfikacji	Rozdział	Autor modyfikacji	Data
1	Wersja pierwotna	1, 2, 3	Łukasz Radziński	08.06.20
2	Uzupełnienie treści	4, 5	Justyna Replin	12.06.20

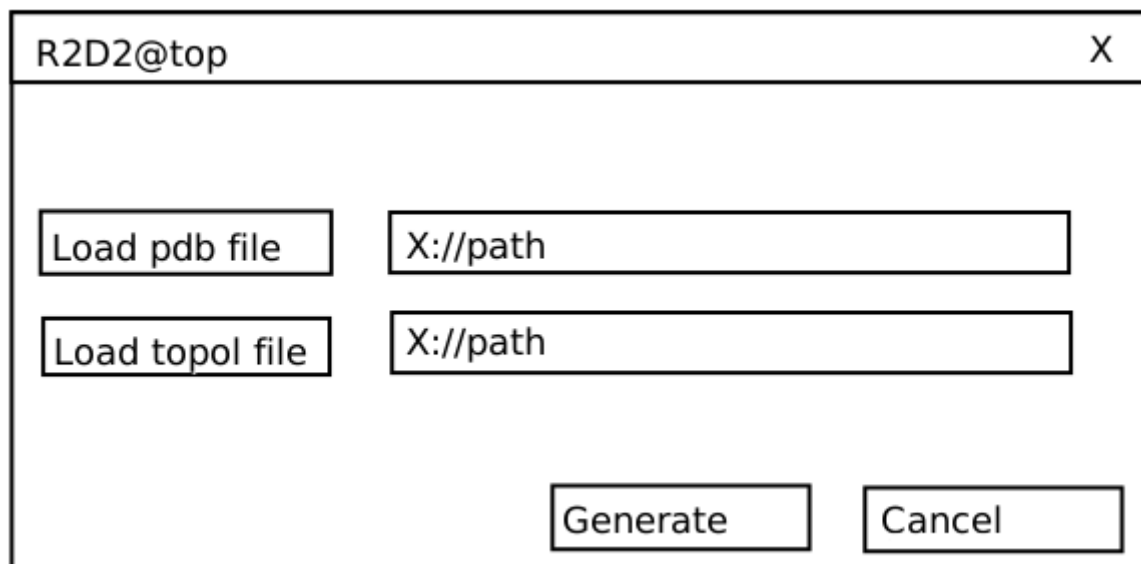
## 1. Podział systemu na podsystemy i moduły

R2D2@top

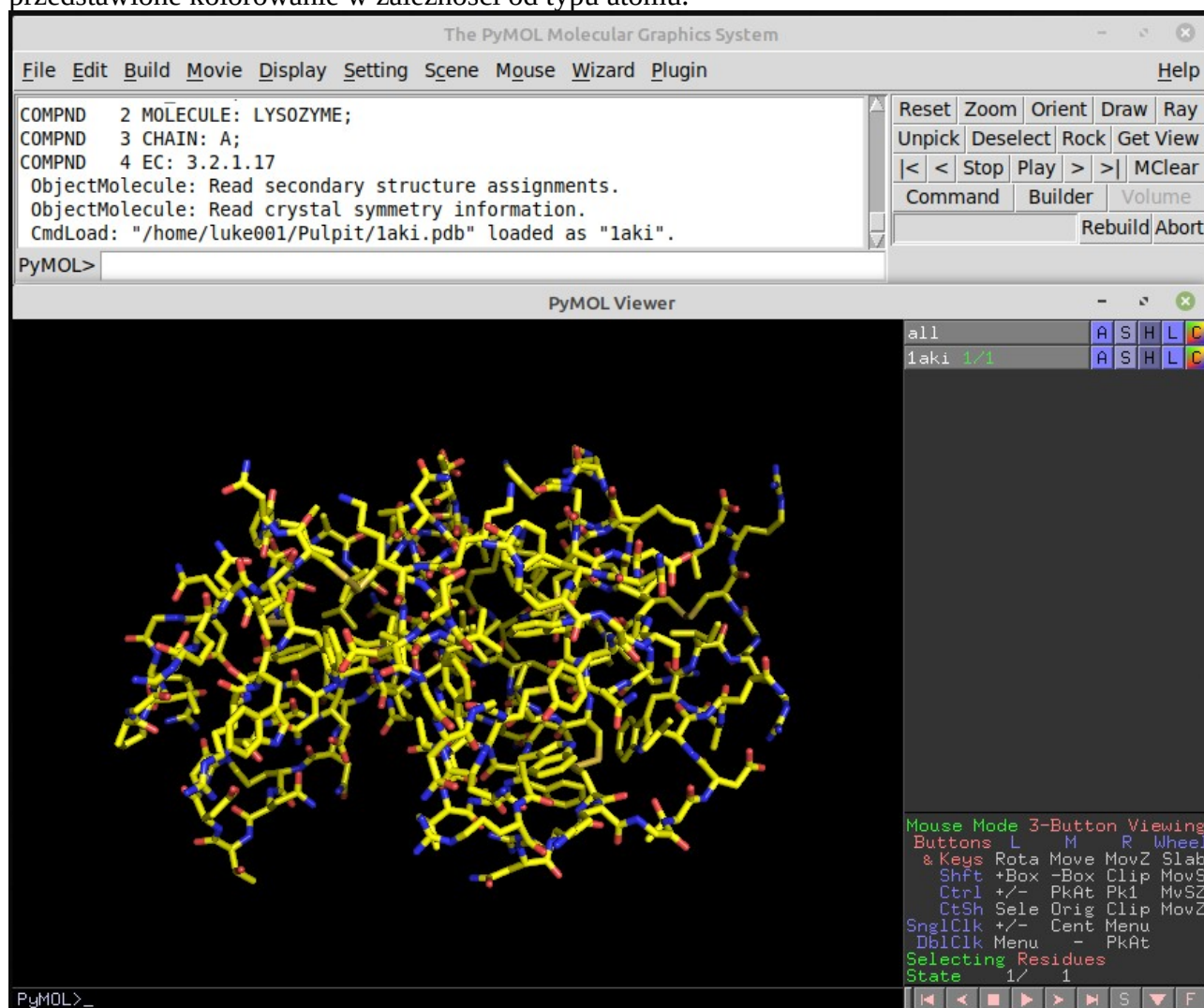


## 2. Projekt interfejsu użytkownika

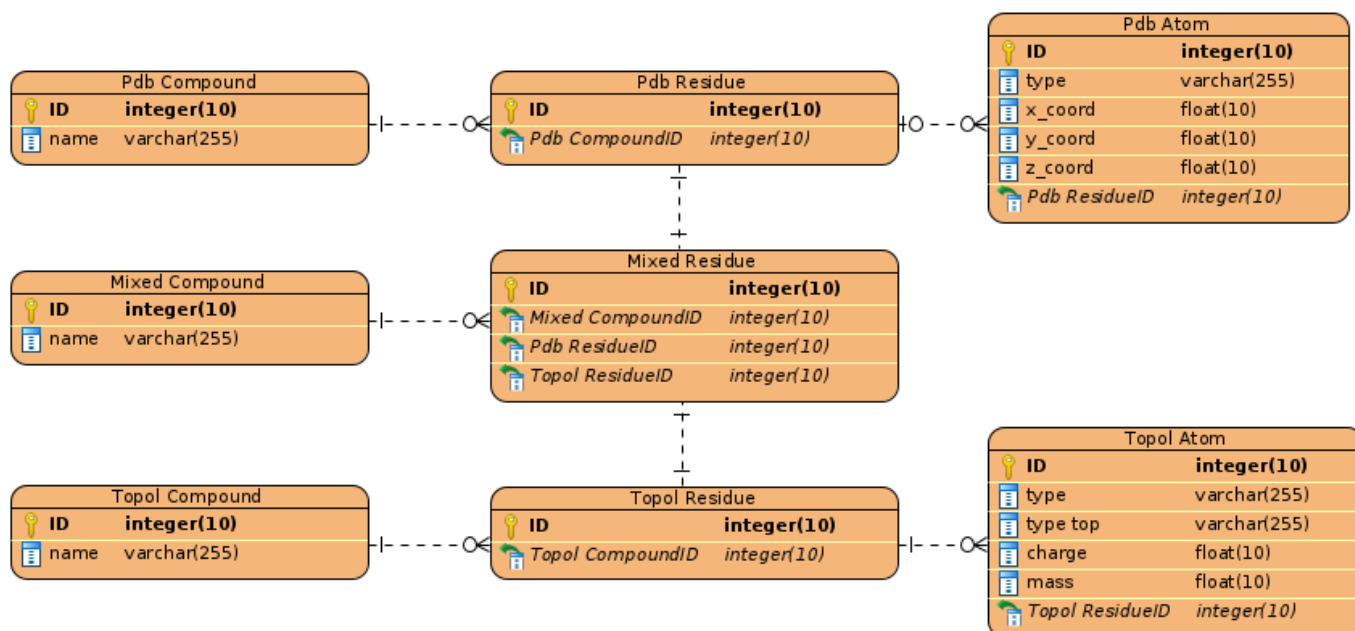
### 2.1 Wczytywanie plików wejściowych za pomocą wtyczki R2D2@top



2.2 Wizualizacja modelu w programie PyMOL. Wtyczka R2D2@top będzie umożliwiała kolorowanie atomów w zależności od ich ładunku cząstkowego. Obecnie na ilustracji jest przedstawione kolorowanie w zależności od typu atomu.



### 3. Projekt bazy danych



### 4. Projekt użytych algorytmów

W programie będzie użyty algorytm integrujący dane strukturalne z pliku pdb oraz dane o ładunku i masie z pliku topologii. Następnie będzie tworzony i wizualizowany model – atomy będą kolorowane gradientem w zależności od posiadanego ładunku (kolor niebieski – ładunek ujemny, kolor czerwony – ładunek dodatni). Będą musiały zostać spełnione następujące zależności:

$$Q = \sum_{i=1}^n q_i$$

Q – ładunek cząsteczki  
(0 dla obojętnych cząsteczek,  
-1, -2, ... dla anionów,  
+1, +2, ... dla kationów)

$q_i$  – ładunek atomu

$$M = \sum_{i=1}^n m_i$$

M – masa cząsteczki

$m_i$  – masa atomu

## 5. Ogólny kosztorys oparty na modelu COCOMO

Zgodnie z kalkulatorem COCOMO ze strony <https://strs.grc.nasa.gov/repository/forms/cocomo-calculation/> projekt powinien trwać przez pół roku i powinny pracować przy nim 2 osoby.

COCOMO RESULTS for R2D2@top								
MODE	"A" variable	"B" variable	"C" variable	"D" variable	KLOC	EFFORT, (in person-months)	DURATION, (in months)	STAFFING, (recommended)
semi-detached	5.502029929240245	1.12	2.5	0.35	2.000	11.958	5.958	2.007
<p>Explanation: The coefficients are set according to the project mode selected on the previous page, (as per Boehm). The final estimates are determined in the following manner:</p> <p><b>effort</b> = <math>a \cdot KLOC^b</math>, in person-months, with KLOC = lines of code, (in thousands), and:</p> <p><b>staffing</b> = effort/duration</p> <p>where a has been adjusted by the factors:</p>								

### Product Attributes

Required Reliability	1.15 (H )
Database Size	1.00 (N )
Product Complexity	1.00 (N )

### Computer Attributes

Execution Time Constraint	1.00 (N )
Main Storage Constraint	1.00 (N )
Platform Volatility	1.00 (N )
Computer Turnaround Time	1.00 (N )

### Personnel Attributes

Analyst Capability	1.19 (L )
Applications Experience	1.13 (L )
Programmer Capability	1.17 (L )
Platform Experience	1.10 (L )
Programming Language and Tool Experience	1.07 (L )

### Project Attributes

Modern Programming Practices	0.91 (H )
Use of Software Tools	0.91 (H )
Required Development Schedule	1.04 (H )

### New (Values are probably wrong)

Required reusability	1.00 (N )
Documentation match to life-cycle needs	1.00 (N )
Personnel continuity	1.00 (N )
Multisite development	1.00 (N )