**Introduction générale**

La chimie nous permet d'acquérir une riche compréhension du monde qui nous entoure et devient encore plus puissante lorsqu'elle est combinée avec la technologie informatique moderne et la science des données.

Les recherches menées au cours des dernières années ont abouti à une hypothèse qui stipule que l'intégration d'outils de dessin chimique et de modélisation dans l'enseignement pourrait favoriser l'enseignement de la chimie au niveau universitaire, et donc améliorer la capacité des étudiants des universités à mieux comprendre la chimie.

Sur la base de cette hypothèse, l’université Algérienne a décidé d’adopter le logiciel ChemDraw, un logiciel de dessin et modélisation chimique par excellence, comme l’outil principal destiné à l’enseignement de la chimie au sein de ses établissements. Ce dernier étant payant avec un abonnement annuel qui peut aller jusqu’à 1150 Dollars par utilisateur (PerkinElmer, 2021), l’université Algérienne s’est retrouvée avec des factures colossales à payer qui s’ajoutent aux autres lourdes dépenses.

Afin de mettre un terme à ces dépenses exagérées pour un seul produit, l’université Algérienne a décidé de développer son propre logiciel de dessin et de modélisation chimiques, c’est de là qu’est née l’idée d’un projet ambitieux mené par des compétences locales.

C’est dans ce contexte que s'intègre notre projet de fin d'étude, qui a pour objectif de mettre en place une application de représentation graphique des structures chimiques, comme une première tentative pour reproduire les fonctionnalités basiques du logiciel ChemDraw.

Ce rapport se définit sur quatre chapitres, le premier chapitre exposera les notions de base en chimie qui sont en relation direct avec notre projet afin de lui attribuer un contexte général.

Le deuxième chapitre sera consacré à la présentation du Dessin Assisté par Ordinateur (DAO) et sa contribution à pousser le domaine du dessin à un niveau supérieur. Dans ce même chapitre nous discuterons de manière brève des logiciels de DAO en général, et de manière approfondie des logiciels de DAO destiné au dessin chimique.

Au troisième chapitre nous montrerons l'analyse et la conception du système qui contiendra différents diagrammes ainsi que les spécifications des besoins systèmes et cela avant d’entamer la partie applicative dans le but de bien définir, clarifier les fonctionnalités importantes de l’application. Nous aurons pour aspect de définir des besoins fonctionnels et non fonctionnels qui sont considérés comme des fonctionnalités de notre application.

Le quatrième et dernier chapitre illustre nos choix technologiques utilisées dans l’implémentation de notre application, et expose les résultats obtenus à partir de quelques interfaces homme-machine.

Nous clôturons ce rapport par une conclusion générale qui présente une récapitulation du travail réalisé et expose un nombre de perspective dans le but de rendre notre travail meilleur.

**Conclusion générale et perspectives**

La chimie tourne autour des structures. Il existe une myriade de représentations structurelles avec lesquelles les étudiants doivent se familiariser lors de l'apprentissage de la chimie.

Afin d'acquérir les connaissances nécessaires pour comprendre et manipuler les structures chimiques, les étudiants doivent résoudre de manière approfondie des problèmes avec des illustrations structurelles et s'entraîner à dessiner eux-mêmes des structures chimiques. C’est là qu’interviennent les logiciels de dessin chimique développés à base de DAO (Dessin Assisté par Ordinateur) et en particulier le logiciel ChemDraw qui fait l’unanimité chez les enseignants de chimie comme étant une solution pour améliorer la qualité de l'enseignement de la chimie au niveau universitaire et rendre l'expérience d'apprentissage des étudiants plus intéressante et stimulante.

C’est dans ce cadre que s’inscrit notre projet lancé à la base par l’université Algérienne et s’incarne dans la réalisation d’une application pour le dessin et la modélisation des structures chimiques. Ce projet ambitieux une fois achevé, permettra de minimiser les dépenses destinées à la procuration des logiciels de chimies.

Dans le présent rapport, nous avons détaillé les étapes par lesquelles nous sommes passés pour concevoir et développer notre solution. Pour aboutir à ce résultat, nous avons tout d'abord commencé par présenter quelques notions en chimie et l’évolution de la représentation graphique afin de donner un cadre général au projet. Puis, nous avons présenté les différents besoins et les exigences relevées. Ensuite, nous avons abordé la phase de conception qui nous a expliqué l'architecture de l'application. Finalement, l'étape de réalisation, au cours de laquelle nous avons présenté notre application.

Durant ce projet, nous avons été confrontés à plusieurs obstacles et défis au niveau du développement. En effet on pourrait décrire notre première démarche en ce qui concerne le choix technologique comme ratée, après avoir surmonté ce premier obstacle une série de défis nous attendaient tels que : la maitrise de la bibliothèque « fabric.js » en un peu de temps, l’acquisition des notions en chimie, ainsi que l’intégration des équations de géométrie spatiale au sein de notre code.

Notre réalisation est encore d’actualité et ne s’arrête pas à ce niveau. En effet plusieurs perspectives s’offrent à ce projet, nous envisageons dans un futur proche d’ajouter les fonctionnalités suivantes :

* Le calcul des données stœchiométriques
* Intégrer une base de données chimique
* La détection automatique des incompatibilités entre composants chimiques
* Une modélisation 3D des structures chimiques

Nos ambitions ne s’arrêtent pas là, en effet nous souhaitons monter une « Startup » spécialisée dans le dessin assisté par ordinateur.