# SPEECH

• Bonjour messieurs les membres du jury ;

• En vue de l’obtention du diplôme de master, nous avons l’honneur de vous présenter notre travail qui porte sur la réalisation d’une application pour la représentation graphique des structures chimiques

• Nous nous présentons je suis M.Y Khaoua et mon camarade M.Bennaceur

Ce travail nous allons le présenter comme suit :

* Nous commencerons par une petite introduction dans le monde de la chimie après nous verrons le cadre général du projet
* Puis nous entamons une petite discussion sur le dessin assisté par ordinateur
* Ensuite nous présenterons le logiciel chemdraw
* Puis nous aborderons brièvement la phase de la conception et de l’implémentation de notre application avant de vous présenter les résultats obtenus de notre application.
* Et au finale nous clôturons cette présentation par une conclusion générale.

1. Introduction

La chimie joue un rôle central dans notre vie quotidienne, tant par sa place au sein des sciences de la nature et de la connaissance, que par son importance économique et son omniprésence.

Elle contribue de façon déterminante aux besoins de l’humanité en nourriture et médicaments, énergie et matières premières. Elle fournit des matériaux à l’industrie, et à la pharmacologie, et bien d’autre domaine.

Un monde privé de chimie serait un monde sans matériaux synthétiques, donc sans téléphone, sans ordinateur. Ce serait aussi un monde sans médicaments, et sans papier donc sans journaux ni livres.

Par définition, la chimie est l'étude des éléments chimiques appelés molécule et des composés qu'ils forment.

D'un point de vue plus général, une molécule est un ensemble d'atomes, unis les uns aux autres par le biais de liaisons chimiques. Ces dernières sont les résultats de la mise en commun d'un certain nombre d'électrons gravitant sur la couche externe des atomes.

Afin de décrire la nature de ces molécules, on a tendance à utiliser différentes terminologies de représentation graphique.

# Cadre général du projet

Notre projet est basé sur l’une de ces méthodes de représentations graphiques.

Tout d’abord, faut savoir qu’il existe 3 types de représentation moléculaire : les formules, les projections de molécule, mais ce qui nous intéresse le plus aujourd’hui c’est la représentation de Cram, et c’est la méthode qu’on a intégré au sein de notre application.

* 1. La représentation de Cram

La représentation de Cram, permet de décrire directement la structure [tridimensionnelle](https://fr.wikipedia.org/wiki/Trois_dimensions) d'une molécule, par un schéma bidimensionnel qui permet de visualiser la molécule telle qu'elle existe dans l'espace.

On représente de manière plus précise l'orientation des liaisons chimique en faisant varier les angles entre les liaisons pour coller au plus près à la réalité. Cette représentation permet notamment de visualiser les atomes de carbone asymétriques et de déterminer si une molécule est chirale.

* 1. L’importance de la représentation graphique

Afin de comprendre l’importance de représenter graphiquement les molécules, il faut d’abord savoir qu’une structure moléculaire peut faire la différence entre la vie et la mort, littéralement.

Les chimistes sont toujours très conscients de la structure exacte et de certains énantiomères et de leurs effets biologiques spécifiques, bons et mauvais !

Tout d'abord, commençons par expliquer ce que sont les énantiomères, Les énantiomères sont des composés avec des structures chimiques disposées de manière opposée.

Maintenant que nous avons les connaissances de base nécessaires, nous pouvons discuter des raisons pour lesquelles la représentation graphique des structures chimiques est importante. Commençons cette discussion par un jeu de devinettes. Cette image illustre deux composés différents avec des structures légèrement différentes, mais l'un est prescrit par des médecins professionnels et l'autre est un médicament illégal. Pouvez-vous les distinguer ?

Alors le composé de gauche est appelé morphine, et le composé de droite est appelé diamorphine, plus communément appelée héroïne. Parce que ces deux composés ont fondamentalement la même structure, ils fonctionnent de manière très similaire ;

Ce cas illustre clairement pourquoi il est très important de représenter graphiquement les composés chimiques afin de bien comprendre les structures et les énantiomères des composés.

La représentation graphique des molécules, contribue non seulement à l’avancement des recherches pharmaceutiques, mais aussi à l’mélioration de l’enseignement de la chimie dans les universités.

En effet, car les étudiants qui se spécialisent en chimie sont censés penser au niveau microscopique et expliquer les changements aux niveaux macroscopiques.

Les étudiants trouvent difficile de relier correctement les différents niveaux de la compréhension du macroscopique/microscopique. Ces difficultés, ainsi que les difficultés à comprendre les structures 3D des molécules, entravent la capacité des étudiants à résoudre des problèmes en chimie.

Les chercheurs ont constaté que l’intégration des outils graphiques informatisé pour représenter les composés chimiques dans l’enseignement peut promouvoir la compréhension par les étudiants des phénomènes scientifiques inobservables.

Ces outils graphiques tel que ChemDraw sont avant tout des logiciels de dessin assisté par ordinateur.

# Le DAO

Alors c’est quoi le dessin assisté par ordinateur ?

Le dessin assisté par ordinateur (DAO) est une discipline permettant de produire des dessins techniques avec un logiciel informatique.

Les dessins produits sont le plus souvent réalisés en mode vectoriel. En d'autres termes, les logiciels de DAO attribuent des coordonnées (X,Y pour les plans 2D et X,Y,Z pour les modèles 3D).

* 1. L’IA et le DAO

L'objectif principal de l'IA en DAO est actuellement l'optimisation du dessin obtenue grâce à la création des designs plus intelligents, plus légès, plus solides et plus économiques.

* 1. L'IA améliore et complimente l’inspiration du design

L'intelligence artificielle, lorsqu'elle est utilisée comme moyen d'augmenter le dessin, peut aider les designers à réaliser des designs qu'ils n'auraient peut-être pas imaginés autrement.

À bien des égards, il peut être utilisé comme un outil d'inspiration, ainsi que d'efficacité.

De nombreuses grandes marques intègrent désormais des designs imaginés par l'IA.

N'avez-vous jamais vu un produit qui semblait attirant, juste à cause de son emballage ?

Pour montrer à quel point cette tactique peut être efficace, Nutella a utilisé l'intelligence artificielle pour générer 7 millions d'étiquettes uniques pour leur marché italien.

Elle les a vendus en moins de 30 jours. En plus de cela, les consommateurs qui ont acheté le produit ont fini par publier plus de 10 000 vidéos sur les réseaux sociaux montrant leurs pots uniques.

C'était une initiative brillante de Nutella et c'est un exemple concret de la façon dont l'IA peut aider les designers à créer des graphismes plus attirants.

* 1. Les logiciels de DAO

A noter aussi qu’il existe autant de logiciels de DAO que de métiers utilisant le dessin, comme par exemple :

* Adobe illustrator pour le graphisme vectoriel
* Autocad pour l’architecture et autre domaine
* Et surtout ChemDraw pour la chimie, le logiciel dont en s’en ai inspiré pour réaliser notre application

# ChemDraw

ChemDraw s’est imposé depuis longtemps comme la référence des logiciels de dessin de structures moléculaires.

Développé en 1985 par 3 étudiants, de l'Université Harvard, Cambridge. Leur société a été vendue à Perkin Elmer en 2011.

ChemDraw est l'outil de dessin de choix pour les chercheurs et les enseignants pour dessiner des structures chimiques.

Les résultats de son intégration au sein des université ont été très positifs. En effet, car l'intégration des outils de modélisation dans l’enseignement de la chimie offre de nouvelles possibilités d'utilisation en classe. ChemDraw a aussi un impact très positif dans les capacités d’assimilation et imaginatives des étudiants qui ont appris à le manipuler.

Aujourd’hui ChemDraw est connu comme le logiciel de chimie le plus utilisé dans les universités au monde, et l’université Algérienne en fait partie. Mais le fait qu’il soit payant et très couteux, l’université Algérienne a décidé de créer son propre logiciel de représentation moléculaire.

C’est dans ce cadre que s’inscrit notre projet de fin d’étude, qui se définit comme un premier pas dans le DAO et qui a pour but de reproduire quelques fonctionnalités de base du logiciel ChemDraw.

1. Conception et implémentation de l’app
   1. Conception

Après une analyse profonde des besoins de l’université on est sorti avec une liste des besoins fonctionnels qu’on a illustré dans ce diagramme de cas d’utilisation.

Comme vous pouvez le voir, l’application possède une multitude de fonctionnalités mises à disposition de l’utilisateur ou bien le chimiste.

* 1. Implémentation

Pour la réalisation de ce projet nous avons opté pour une application web à base de :HTML5, CSS3 et de Javascript, pour le coté graphique on a utilisé FABRIC.JS, une puissante bibliothèque Javascript qui facilite la création des graphismes absolument incroyables.

Passons sans plus tardé à la présentation de notre application.

# Conclusion

Pour conclure nous aimerions dire que ce projet a été un vrai challenge pour nous, en effet car le combo : chimie + dessin assisté par ordinateur n’était pas une tâche facile à maitriser, mais hmd nous avons su surmonter tout ça. D’autre part le projet a été très bénéfique pour nous et nous a permis d’acquérir de nouvelles connaissances et de nouvelles compétences.

Aux finales nous voudrions vous dire que ce projet ne s’arrêtera pas là et ne cessera de grandir, plusieurs perspectives s’offrent à ce projet tel que l’intégration de la modélisation 3D, mais surtout, nous souhaitons monter notre startup spécialisée dans le dessin assisté par ordinateur, qui se chargera à bien, de développé ce projet.