



Molecul'Art

«Projet de modélisation moléculaire 3D »



REALISE PAR

**BRODUSCH Thomas, LAVERGNE Kévin,
KOZAK Damien, COQUERELLE Grégory
& BELHASEN Isame**

*Etudiants à L'Institut Universitaire Technologique
Paris XIII - Villetaneuse
DUT Informatique - Semestre 4*



Projet Tutoré - semestre 4
Responsable de matière: H. ZARGAYOUNA
Client: G.SANTINI

TABLE DES MATIERES

<u>REMERCIEMENTS</u>	P.3
<u>CAHIER DES CHARGES</u>	I
INTRODUCTION - PRESENTATION DU PROJET	P.4-5
DIAGRAMME DE GANTT (GLOBAL)	P.6
OUTIL DE VALIDATION DU BESOIN	P.7
CRITERES QUALITEE	P.8
LISTE FONCTIONNALITES	P.9
<u>PLANNIFICATION</u>	II
ORGANIGRAMME - WBS	P.10
ORGANIGRAMME - OBS	P.11
MESURES D'AVANCEMENT	P.12-16
<u>MODELISATION</u>	III
DIAGRAMME DE COMPOSANTS LOGICIEL	P.17-19
DIAGRAMME DE CLASSES	P.20
MAQUETTES IHM	P.21-23
<u>TESTS</u>	IV
MATRICE DE TESTS	P.24
BUG TROUVES	P.24
BILAN DES TESTS	P.25

DIFFICULTEES	V
---------------------	----------

DIFFICULTEES RENCONTREES	P.26
SOLUTIONS ENVISAGEES	P.27

CONCLUSION	VI
-------------------	-----------

CONCLUSION DU RAPPORT - SYNTHESE	P.28
---	-------------

ANNEXES	VII
----------------	------------

MANUEL D'UTILISATION	1
-----------------------------	----------

COMPTES RENDUS RENDEZ-VOUS CLIENT	2
--	----------

CD CONTENANT :	4
-----------------------	----------

- JAVADOC (FORMAT HTML)
- FICHIERS SOURCES (.JAVA + .CLASS)
- LIBRAIRIES UTILISEES (.JAR)
- L'APPLICATION (.JAR)

Dans le cadre de la réalisation de ce projet d'étude, nous tenons tout particulièrement à remercier les personnes suivantes:

Madame **Haïfa ZARGAYOUNA**, en qualité de responsable de matière de Génie Logiciel, qui a su nous apporter toute l'aide et l'attention dont nous avons eu besoin lors de ses cours de travaux dirigés ainsi que toutes ses connaissances et son regard critique lors des séances de projet.

Monsieur **Guillaume SANTINI**, en qualité d'enseignant-chercheur qui nous a apporté toutes ses connaissances et son regard de biophysicien lors des rendez-vous client, afin de répondre à nos questions sur le sujet.

L'ensemble des enseignants de l'Institut Universitaire Paris XIII qui nous ont suivit tout au long de notre formation et qui nous ont inculqués toutes les connaissances dont nous avons eu besoin pour réaliser ce projet.

Nous remercions aussi **l'Institut Universitaire Technologique de Paris XIII – Villetaneuse**.

Bien entendu, nous n'oublions pas nos familles respectives ainsi que toute personne impliquée de près ou de loin à la bonne réalisation de ce projet d'étude.

ACTEURS :

Mr. SANTINI, biophysicien, enseignant chercheur et chargé de TD en UML/Java est le **client**.

Les étudiants du groupe de projet sont les **MOE**.

Mme. ZARGAYOUNA, enseignante référente et chargée de TD Génie Logiciel est la **MOA**.

Le groupe de projet aura un chef de projet, **BRODUSCH Thomas**, qui aura pour rôle de coordonner les efforts de chacun de ses collaborateurs, superviser les recherches et les différentes tâches du projet, et rédiger le rapport final.

La MOE qui travaillera ensemble sur le projet sera composée de:

- **BRODUSCH Thomas** Chef de Projet / Développeur.
- **LAVERGNE Kévin** Développeur.
- **COQUERELLE Grégory** Développeur.
- **KOZAK Damien** Développeur.
- **BELHASEN Isame** Développeur.

Tous les membres de l'équipe se chargeront ensemble de la réalisation des divers diagrammes composant le **cahier des charges** ainsi que du développement (code) de l'application.

CONTEXTE :

Axé sur la **portabilité**, le client nous propose d'utiliser le langage de programmation **Java** car l'API de la Protein Data Bank est codée en Java.

Le Client désire quelque chose de bien structuré de base, **modulaire**, car ce projet est la pierre fondatrice d'un plus grand projet futur (intégration de retour haptique ...). Il souhaite une **applet Java**, qui fonctionnerait à la fois en ligne (intégrer à une page web) et en stand-alone (en tant qu'application Java desktop).

BUT :

L'application devra **chercher une molécule** dans la Protein Data Bank, **pouvoir lire les formats .PDB** et **visualiser en 3D** une molécule (représentation de ses atomes).

On devra alors faire appel à un parseur (développé par la MOE).

Etant donné que la banque de donnée des molécules de la Protein Data Bank évolue, le client veut que l'application s'appuie sur une base de donnée qui soit mise à jour.

la MOE a proposé au client d'utiliser directement l'API de la Protein Data Bank et donc, se passer de base de donnée locale:

- **gain de temps de développement**
- **gain de temps d'installation**
- **économie des frais d'installation et de maintenance** d'une base de données pour le client.

OBJECTIFS :

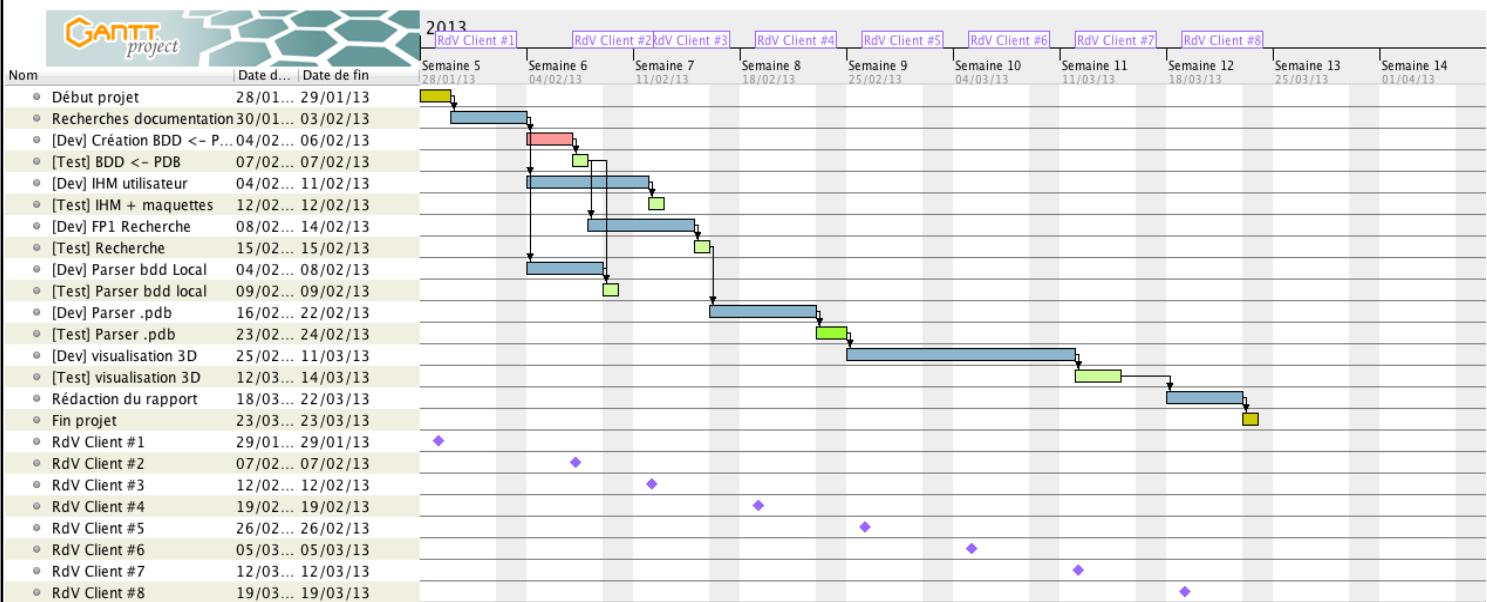
L'objectif principal est de réaliser une application suivant le besoin du client, ce projet posant les bases d'un futur projet du client plus complexe, il est indispensable de fournir au client du code lisible, commenter, un manuel d'utilisation ainsi que des fonctionnalités opérationnelles sur lesquelles il pourra, par la suite, s'appuyer.

DIAGRAMME DE GANTT | 2.

Ressources :

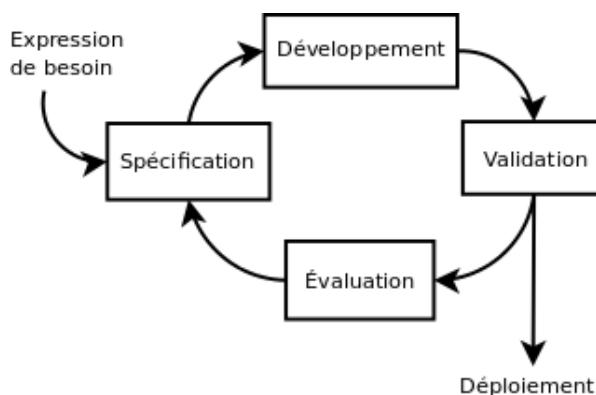
Nom	Rôle par défaut
Damien	développeur
Thomas	Chef de projet
Isame	développeur
Kévin	développeur
Grégory	développeur

Diagramme de Gantt (disponible en plus grand format en annexe) :



Ce diagramme nous a permis de **structurer** et d'**organiser** nos différentes tâches en fonction du temps qui nous a été accordé pour réaliser ce projet.

On peut remarquer que les **3 grandes fonctions principales** suivent un modèle de type « **itératif** » (schéma d'un cycle itératif ci-dessous) on observe sur le diagramme de Gantt 2 phases principales (Dev, Test). Schéma d'un cycle itératif.



Une « **semaine vide** » (semaine 11), située entre la tâche « [Dev] visualisation 3D » et « rédaction du rapport », à volontairement été intégré à ce diagramme et par la même occasion à notre projet. Cette décision du chef de projet, nous a permis d'avoir une semaine de battement **en cas de retard sur une ou plusieurs tâches** ou en cas de problème majeur non résolu **au sein du projet**.

OUTIL DE VALIDATION DU BESOIN | 4.

	Validation du besoin
Service rendu	Le produit est destiné à Mr. SANTINI., il lui simplifie la recherche de molécule au sein du serveur de la Protein Data Bank et affiche une molécule en fonction de son fichier .PDB
Action	Recherche, téléchargement puis traitement d'un fichier d'infos, affichage d'une molécule en 3 dimensions, génération de rapports d'informations sur la molécule visualisée.
But	Le produit va servir de “ base ” pour son futur projet d'application de modélisation moléculaire (ex: rajout de retour haptique, visualisation multi-molécules, ...).
Raisons	Mr SANTINI à besoin de cet outil pour simplifier sa vie de biophysicien en possédant son propre outil de modélisation moléculaire 3D afin de l'adapter à ses besoins et de le faire évoluer à sa guise.

Suivant les Facteurs (McCall, 1977), notés sur une échelle de 0 à 3 :

ADAPTABILITE : 3 (aptitude du logiciel à faciliter l'ajout de nouvelles fonctionnalités ou la modification de fonctionnalités existantes) – **le logiciel a été conçu de façon à être modifié (méthodes commentées, Javadoc, utilisation de librairies open-source) et donc amélioré.**

SECURITE : 2 (aptitude d'un logiciel à être protégé contre tout accès non autorisé) - **Coté sécurité, Java propose une bonne protection. Il n'y a pas de protection contre les utilisateurs non autorisé mais cela n'a pas été demandé par le client (malgré les récentes failles de Java découvertes).**

COUPLABILITE : 3 (aptitude d'un logiciel à être intégré dans un ensemble plus vaste) – **fonctions principales divisées en plusieurs classes qui peuvent facilement être modifiés.**

CONFORMITE : 3 (aptitude d'un logiciel à minimiser la consommation des ressources qu'il utilise)

ERGONOMIE : 3 (utilisation agréable et facilité pour l'utilisateur à qui il est destiné) - **La navigation sur le logiciel reste simple, intuitive et fluide (tout le monde peut comprendre son utilisation, de plus un manuel d'utilisation détaillé est fourni avec l'application).**

MAINTENABILITE : 3 (minimiser l'effort pour localiser et corriger les fautes.) **Un mode « debug » peut aussi être activé en dé-commentant certaines parties du code volontairement commentées (sorties console de type « System.out.println »).**

PORTEBILITE : 3 (aptitude du logiciel à minimiser les conséquences d'un changement d'environnement technique) – **L'utilisation du langage Java offre une portabilité sur tout type de support (windows, linux, mac).**

REUTILISABILITE : 3 (aptitude du logiciel à une réutilisation de tout ou partie de ses composants dans le cadre d'un autre projet) - **Le code est clair, compréhensible et commenté. Une Javadoc est aussi fournie, donc il peut être réutilisé par une tierce personne ou être intégré dans un autre projet aisément.**

ROBUSTESSE : 3 (aptitude du logiciel à conserver un comportement conforme aux besoins dans le cas d'événements imprévus) – ex : **En cas d'incapacité de se connecter au serveur RCSB, le logiciel ne plante pas (changement de server source, gestion de Threads différents), il nous avertit d'une non-possibilité de récupération d'informations, requise pour faire fonctionner le logiciel.**

FP1: RECHERCHE - effectuer une recherche d'une molécule (de son fichier .PDB) dans la ProteinDataBank (grâce à l'API) ou sur le disque dur de l'utilisateur

2 fonctions de recherché en ligne:

- **recherche simple:** permettant de chercher une molécule en fonction de son PDB-ID (identifiant de la molécule dans la Protein Data Bank). De la forme suivante: "XXXX".
- **recherche avancée:** grâce au nom des auteurs de la molécule, à l'année (intervalle d'année: entre 2001 et 2013 par exemple), organisme d'origine, un ou plusieurs mots contenus dans l'article de la molécule.

Fonction de recherche locale (fichier):

- laisse le choix à l'utilisateur de charger un fichier .PDB disponible sur son disque dur.

FP2: TRAITEMENT .PDB – Parser et traiter les informations de la molécule contenu dans le fichier .PDB

- fonction qui permet de parser les informations contenue dans un fichier .PDB tel que les coordonnées de chaque atome. Anté-Visualisation.

FP3: VISUALISATION 3D - Représenter la molécule

- *représentation* des atomes sous forme de sphères -> 1 couleur par type d'atome (ex: carbone=noir, hydrogène=bleu, ...) nous avons suivi le code couleur conventionnel utilise.
- *réglage couleur:* il faut que l'utilisateur puisse décider lui-même et modifier la couleur des atomes, et le background.

3 modes principaux :

- couleur par atome
- couleur par résidu
- couleur par chaîne

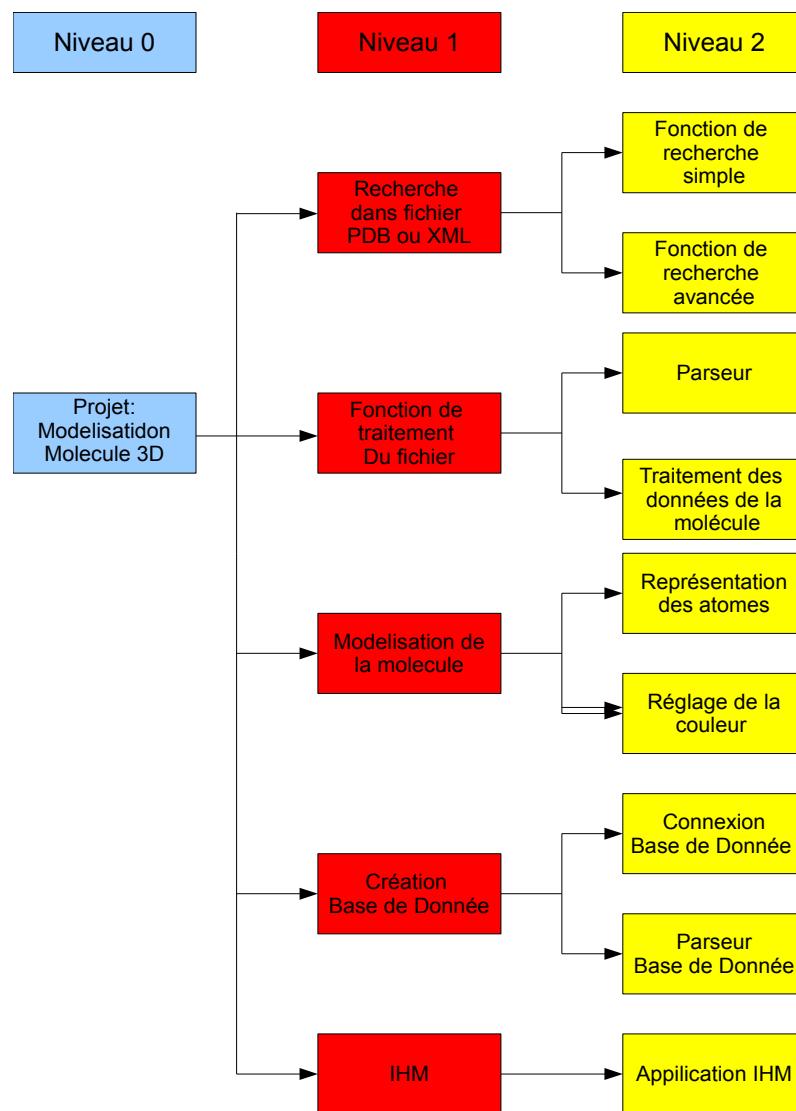
DIAGRAMME - WBS | II.1

Le WBS a pour but **d'aider à organiser le projet**, à établir la planification de référence et le budget prévisionnel. Il permet également de **déléguer et de contractualiser la mission confiée à chaque acteur**.

Le Work Breakdown Structure (WBS) est un arbre représentant la **liste structurée de tous les travaux du projet**. Les travaux sont à ce stade uniquement identifiés. C'est une **vision maîtrise d'œuvre** des tâches afin de déterminer les niveaux de visibilité du projet.

Une codification des tâches a été mise en place pour faciliter la lecture et l'identification de chaque tâche du projet. Ceci s'avère très utile lors de gros projet. Nous avons construit le WBS selon la manière de regrouper les travaux tâches.

On peut voir le WBS de notre projet informatique, notre projet a été découpé en lots. L'objectif est de simplifier la structure de suivi du projet, car il s'agit d'un projet de développement d'une applet en JAVA 3D.



L'OBS est un **tableau qui prend sa source dans le WBS** et donnant des **informations supplémentaires très utiles aux développeurs**.

La donnée importante à prendre en compte lors de la création du WBS, est **la durée qui est représentée par chaque tâche**. Il faut donc estimer cette durée, et ensuite y affecter des ressources, cette étape est nécessaire pour la phase de réalisation du PERT.

Voici l'OBS de ce projet, on peut y apercevoir les tâches, leurs codifications, la durée et les ressources affectés à chaque tâche spécifique.

codification	tâches	durées	ressources
100	Developper un logiciel de modelisation de molecule	50	K I T D G
110	Rechercher un fichier PDB ou XML sur des fichier ou sur disque dur	15	
111	Création:fonction de recherche simple	5	
112	Création:fonction de recherche avancée	10	
120	Création d'une fonction de traitement du fichier PDB ou XML	7	
121	Création d'un parseur	3	
122	Traitemet des données de la molécule	4	
130	Modélisation de la molécule	15	
131	Représentation des atomes	10	
132	Réglage de la couleur	5	
140	Création Base de Donnée	7	
141	Connexion Base de Donnée	2	
142	Parseur Base de Donnée	5	
150	IHM	6	
151	Application IHM	6	

INDICATEURS D'AVANCEMENT AU 12/02/13

Taches	Ct estimés	Ct réel	Date fin prévu	Date fin effective
A:Recherche Doc	14	10	03-févr	29-janv
B:Création BDD	14	6	06-févr	05-févr
C:Test BDD	1	1	07-févr	10-févr
D:Dev IHM	14	15	11-févr	
E:Utilisation Recherche API	30	6	14-févr	02-févr
F:Test Recherche API	5	2	15-févr	
G:Dev Parseur BDD Local	5	3	08-févr	06-févr
H:Test Parseur BDD Local	1	1	09-févr	06-févr
I:Dev Parseur PDB	10	0	22-févr	
J:Test Parseur PDB	1	0	24-févr	

CBA=CBT (A) +CBT (B) +...+ CBT (J) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1=95 heures-hommes

CBTE=CBT (A) +CBT (B) +CBT(C) + CBT (E) + CBT (G) +CBT (H) = 14+14+1+30+5+1=65 heures-hommes

CBTP=CBT (A) +CBT (B) +CBT(C) +CBT (D) + CBT (G) +CBT (H) = 14+14+1+14+5+1=49 heures-hommes

CRTE=CRT (A) +CRT (B) +CRT(C) +CRT(E) + CRT (G) +CRT(H) = 10+6+1+6+3+1=27 heures-hommes

VA=CBTE/CBA=65/95=0,68=68%

La MOE a réalisé 68% du projet.

VE=CBTE-CBTP=65-49=16

IPT=CBTE/CBTP=65/49=1,33

La MOE est en avance sur les délais prévu.

VC=CBTE-CRTE=65-27=38

IC=CBTE/CRTE=65/27=2,41

La MOE a dépensé moins que prévu.

INDICATEURS D'AVANCEMENT AU 18/02/13

Taches	Ct estimés	Ct réel	Date fin prévu	Date fin effective
A:Recherche Doc	14	10	03-févr	29-janv
B:Création BDD	14	6	06-févr	05-févr
C:Test BDD	1	1	07-févr	10-févr
D:Dev IHM	14	15	11-févr	14-févr
E:Utilisation Recherche API	30	6	14-févr	02-févr
F:Test Recherche API	5	2	15-févr	13-févr
G:Dev Parseur BDD Local	5	3	08-févr	06-févr
H:Test Parseur BDD Local	1	1	09-févr	06-févr
I:Dev Parseur PDB	10	0	22-févr	
J:Test Parseur PDB	1	0	24-févr	

CBA= CBT (A) +CBT (B) +...+ CBT (J) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1= 95 heures-hommes

CBTE=CBT (A) +CBT (B) +... +CBT (H) = 14+14+1+14+30+5+5+1= 84 heures-hommes

CBTP=CBT (A) +CBT (B) +... +CBT (H) = 14+14+1+14+30+5+5+1= 84 heures-hommes

CRTE=CRT (A) +CRT (B) +... +CRT(H) = 10+6+1+15+6+2+3+1= 44 heures-hommes

VA = CBTE/CBA = 84/95 = 0,88 = 88%

La MOE a réalisé 88% du projet.

VE = CBTE-CBTP=84-84= 0

IPT = CBTE/CBTP=84/84= 1

La MOE n'est ni en avance ni en retard sur les délais prévu.

VC = CBTE-CRTE=84-44= 40

IC = CBTE/CRTE=84/44= 1,91

La MOE a dépensé moins que prévu.

INDICATEURS D'AVANCEMENT AU 26/02/13

Taches	Ct estimés	Ct réel	Date fin prévu	Date fin effective
A:Recherche Doc	14	10	03-févr	29-janv
B:Création BDD	14	6	06-févr	05-févr
C:Test BDD	1	1	07-févr	10-févr
D:Dev IHM	14	15	11-févr	12-févr
E:Utilisation Recherche API	30	6	14-févr	02-févr
F:Test Recherche API	5	2	15-févr	
G:Dev Parseur BDD Local	5	3	08-févr	06-févr
H:Test Parseur BDD Local	1	1	09-févr	06-févr
I:Dev Parseur PDB	10	5	22-févr	
J:Test Parseur PDB	1	0	24-févr	
K:Modelisation molecule 3D	15	0	11-mars	

CBA=CBT (A) +CBT (B) +...+ CBT (K) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1+15= 110 heures-hommes

**CBTE=CBT (A) +CBT (B) + CBT (C) + CBT (D) +CBT (E) + CBT (G) +CBT (H)=14+14+1+14+30+5+1
= 79 heures-hommes**

CBTP=CBT (A) +CBT (B) +... +CBT (J) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1= 95 heures-hommes

CRTE= CRT (A) +CRT (B) + CRT (C) + CRT (D) +CRT (E) + CRT (G) +CRT (H) = 10+6+1+15+6+3+1= 42 heures-hommes

VA=CBTE/CBA=79/110=0,72=72%

La MOE a réalisé 72% du projet.

VE=CBTE-CBTP=79-95=-16

IPT=CBTE/CBTP=79/95=0.83

La MOE est en retard sur les délais prévu.

VC=CBTE-CRTE=79-42=37

IC=CBTE/CRTE=79/42=1.88

La MOE a dépensé moins que prévu.

NB : La MOE a rajouté une tâche « modélisation molécule 3D » et n'a pas complètement terminé la tâche « test recherche API ».

INDICATEURS D'AVANCEMENT AU 11/03/13

Taches	Ct estimés	Ct réel	Date fin prévu	Date fin effective
A:Recherche Doc	14	10	03-févr	29-janv
B:Création BDD	14	6	06-févr	05-févr
C:Test BDD	1	1	07-févr	10-févr
D:Dev IHM	14	15	11-févr	12-févr
E:Utilisation Recherche API	30	6	14-févr	02-févr
F:Test Recherche API	5	8	15-févr	07-mars
G:Dev Parseur BDD Local	5	3	08-févr	06-févr
H:Test Parseur BDD Local	1	1	09-févr	06-févr
I:Dev Parseur PDB	10	10	22-févr	06-mars
J:Test Parseur PDB	1	1	24-févr	06-mars
K:Modelisation molecule 3D	15	3	11-mars	

CBA=CBT (A) +CBT (B) +...+ CBT (K) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1+15= 110 heures-hommes

CBTE=CBT (A) +CBT (B) +...+CBT (J) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1= 95 heures-hommes

CBTP=CBT (A) +CBT (B) +... +CBT (K) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1+15= 110 heures-hommes

CRTE= CRT (A) +CRT (B) +...+ CRT (J) = 10+6+1+15+6+8+3+1+10+1= 61 heures-hommes

VA=CBTE/CBA=95/110=0,86=86%

La MOE a réalisé 86% du projet.

VE=CBTE-CBTP=95-110=-15

IPT=CBTE/CBTP=95/110=0.86

La MOE est en retard sur les délais prévu.

VC=CBTE-CRTE=95-61=34

IC=CBTE/CRTE=95/61=1.55

La MOE a dépensé moins que prévu.

INDICATEURS D'AVANCEMENT AU 19/03/13

Taches	Ct estimés	Ct réel	Date fin prévu	Date fin effective
A:Recherche Doc	14	10	03-févr	29-janv
B:Création BDD	14	6	06-févr	05-févr
C:Test BDD	1	1	07-févr	10-févr
D:Dev IHM	14	15	11-févr	12-févr
E:Utilisation Recherche API	30	6	14-févr	02-févr
F:Test Recherche API	5	8	15-févr	07-mars
G:Dev Parseur BDD Local	5	3	08-févr	06-févr
H:Test Parseur BDD Local	1	1	09-févr	06-févr
I:Dev Parseur PDB	10	10	22-févr	06-mars
J:Test Parseur PDB	1	1	24-févr	06-mars
K:Modelisation molecule 3D	15	10	11-mars	19-mars

CBA=CBT (A) +CBT (B) +...+ CBT (K) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1+15= 110 heures-hommes

CBTE=CBT (A) +CBT (B) +...+CBT (K) = 14+14+1+14+30+5+5+1+10+1+15= 110 heures-hommes

CRTE= CRT (A) +CRT (B) +...+ CRT (J) = 10+6+1+15+6+8+3+1+10+1+10= 71 heures-hommes

VA=CBTE/CBA=110/110=1=100%

La MOE a réalisé 100% du projet.

VC=CBTE-CRTE=110-71=39

IC=CBTE/CRTE=110/71=1.55

La MOE a dépensé moins que prévu.

DIAGRAMME DE COMPOSANTS LOGICIEL | III.1

Le diagramme de composants logiciel **représente les différents modules de l'applet Molecul'Art**. Ici, nous pouvons le décomposer en **4 grandes parties** :

- I – Recherche
- II – Visualisation et manipulation de la molécule
- III – Données PDB pour la visualisation
- IV – Affichage d'informations (rapports générés automatiquement)

LEGENDE : LES COULEURS LIEES AUX ANALYSES REPRESENTENT LES COULEURS QUI SONT SUR LE DIAGRAMME COMPOSANT LOGICIEL, C'EST UNE SORTE DE LEGENDE POUR BIEN DIFFERENCIER LES DIFFERENTS GRAND POINTS.

Analyse du I - RECHERCHE :

On peut la décomposer en 2 points :

- ❖ **Recherche en ligne** qui utilise les services fournis par le « RESTfull service » : informations de la molécule que l'on récupère et que l'on transmet à la partie affiche d'informations.
- ❖ **Recherche hors ligne** qui va parcourir une base de données interne dans laquelle se trouvent les informations sur les différentes molécules. Ces informations sont générées à partir d'un script qui parse les infos disponible sur la PDB (banque des molécules).

(Ce point a été au cours du projet, modifié avec le client, la MOE ayant présenté une meilleure solution que l'intégration et l'utilisation d'une base de données en interne)

Analyse du II – VISUALISATION ET MANIPULATION DE LA MOLECULE :

La visualisation permettra de **modéliser** et de **manipuler une molécule** via les données récupérées de la partie III.

Analyse du III – DONNEES PDB POUR LA VISUALISATION :

Toutes les données concernant une molécule sont stockées dans un fichier texte mais avec une forme standardisée (.PDB).

Pour pouvoir prélever ces informations nous utilisons **un parseur qui crée la structure d'une molécule à travers un fichier .PDB**.

De plus, ce fichier est **lu en local** mais s'il n'existe pas, il sera chargé sur le serveur FTP de la Protein Data Bank.

Analyse du IV – AFFICHAGE D'INFORMATIONS (RAPPORTS GENERES):

Ceci comprend **2 types de rapport** qui sont **générés automatiquement** par notre applet.

- ❖ Un rapport concernant la **structure d'une molécule** en cours de modélisation et manipulation.
- ❖ Un rapport concernant le **résultat de la recherche d'une molécule** par l'utilisateur. (sauvegarde de la recherche)

Le diagramme de composants logiciel se situe à la page suivante ...

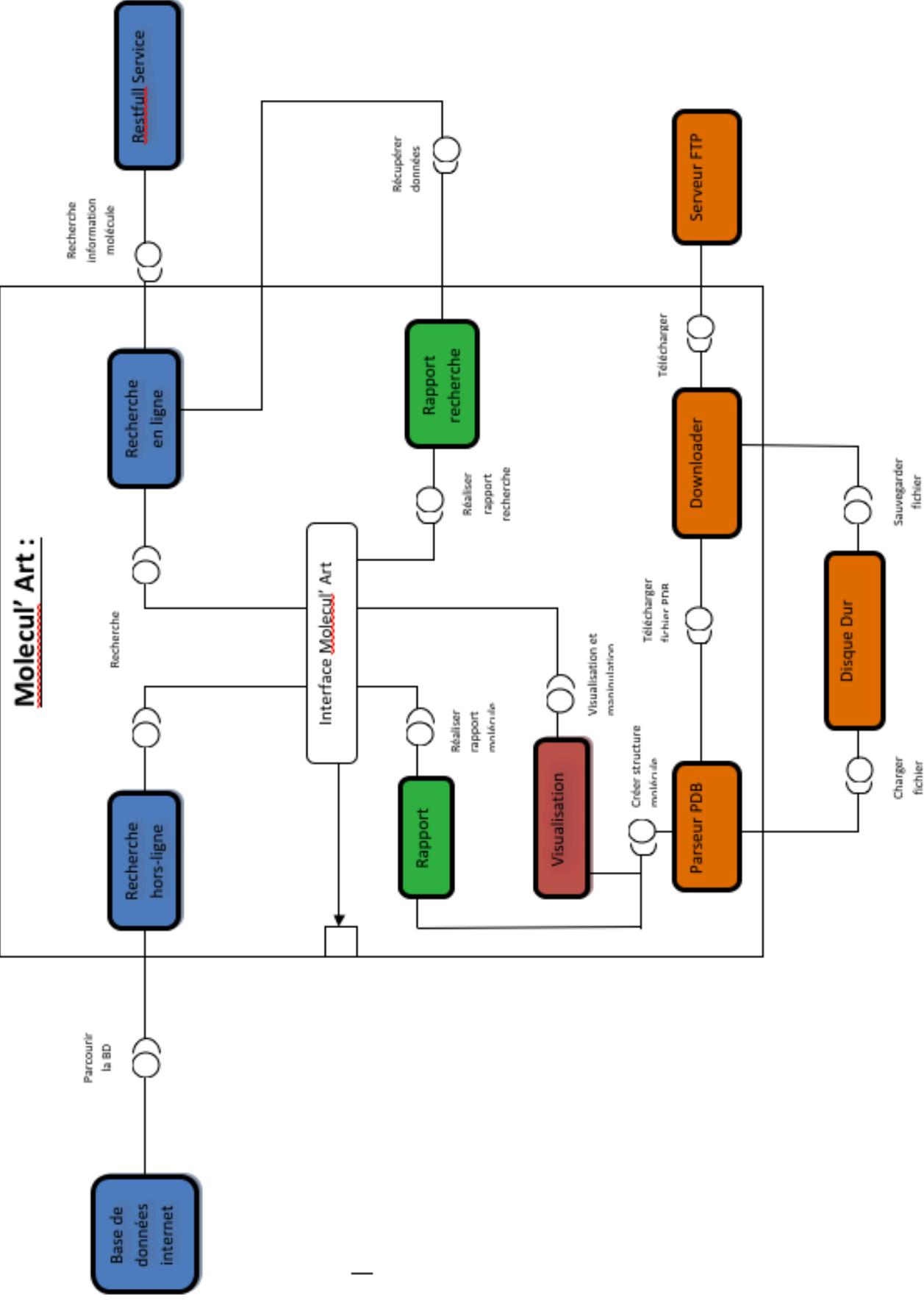
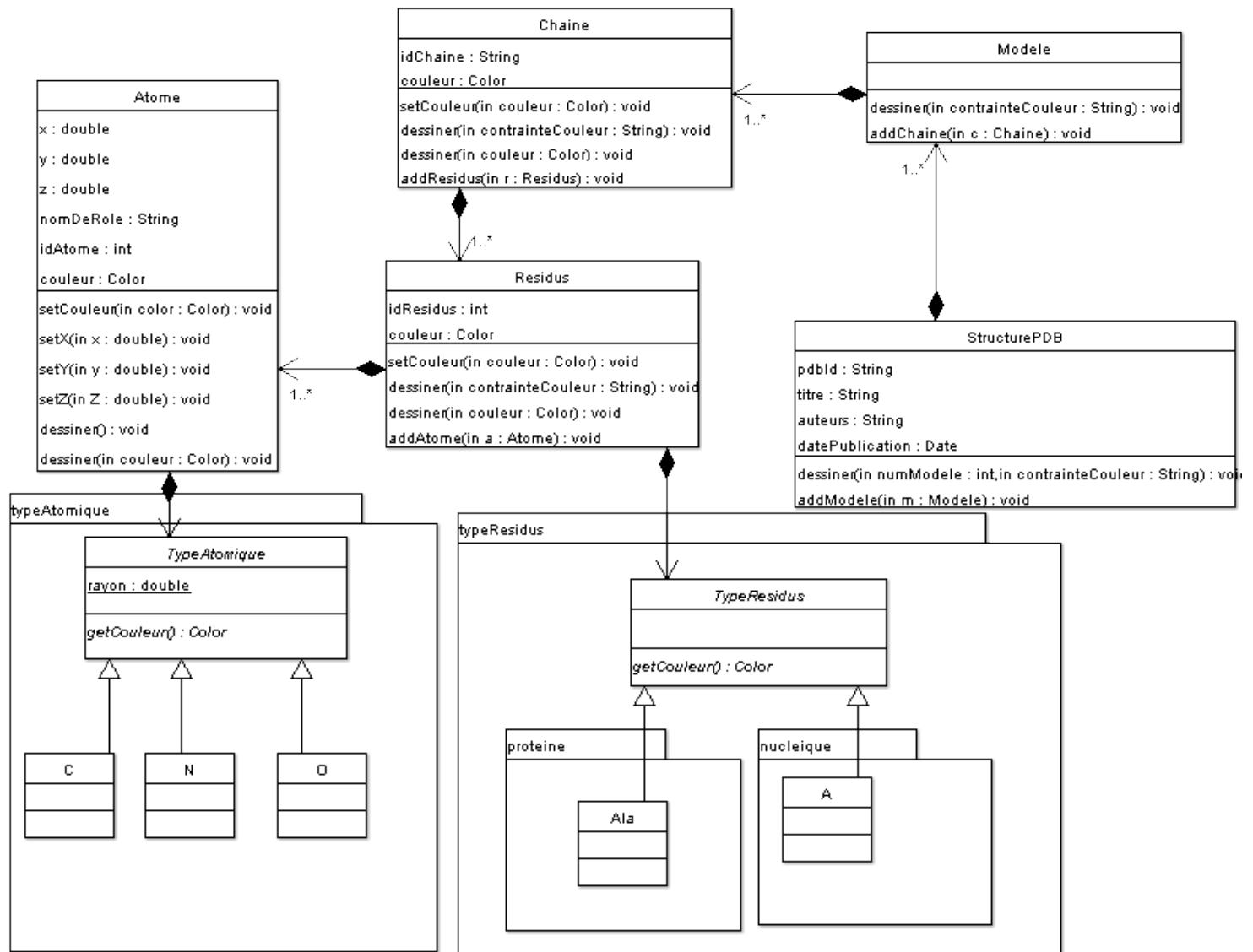


DIAGRAMME DE CLASSES | III.2

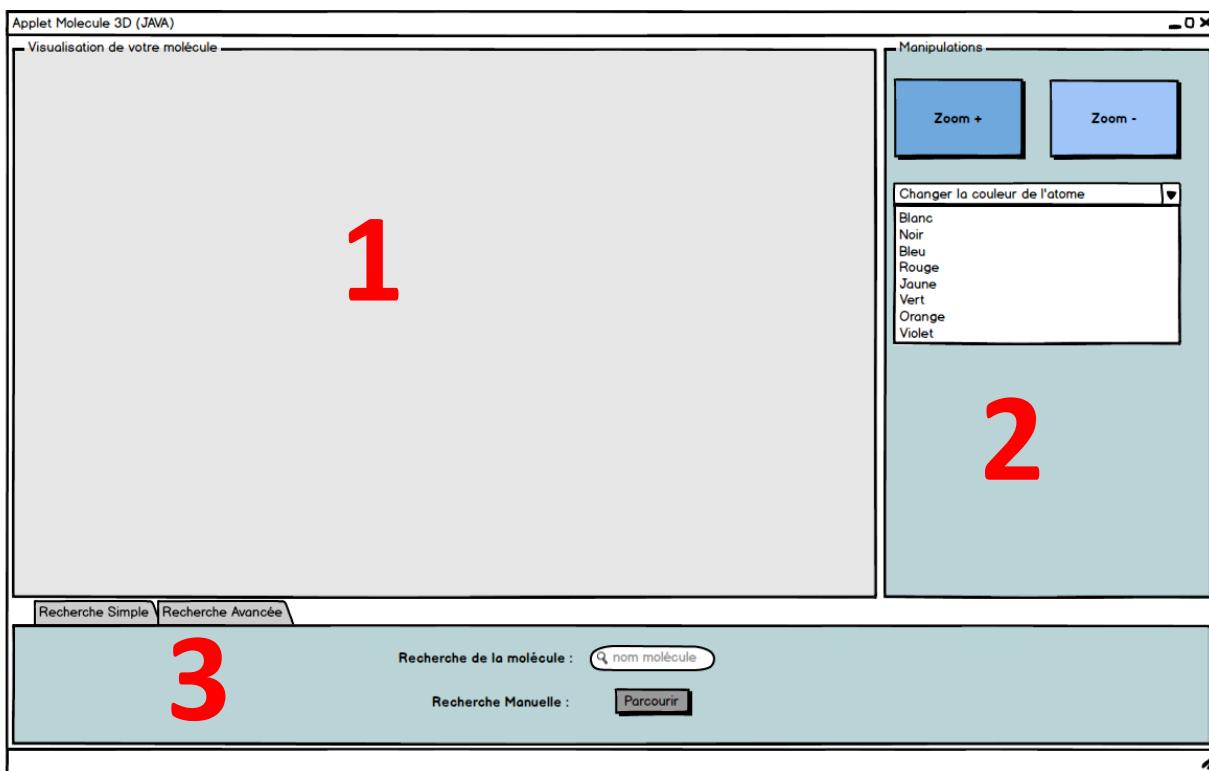
Voici le diagramme de classes **spécifique à l'affichage d'une molécule en 3D**, une molécule étant composée d'atomes, formants des chaînes et des résidus en fonction d'une structure PDB issus du fichier .PDB de la molécule.



La modélisation sous forme de maquettes IHM est réellement un **élément majeur** de notre projet, **ergonomie, intuitivité, interface épuré**, 3 critères essentiels pour notre client que nous avons **mis en œuvre et articulés au sein de notre IHM**.

Première maquette (schéma) :

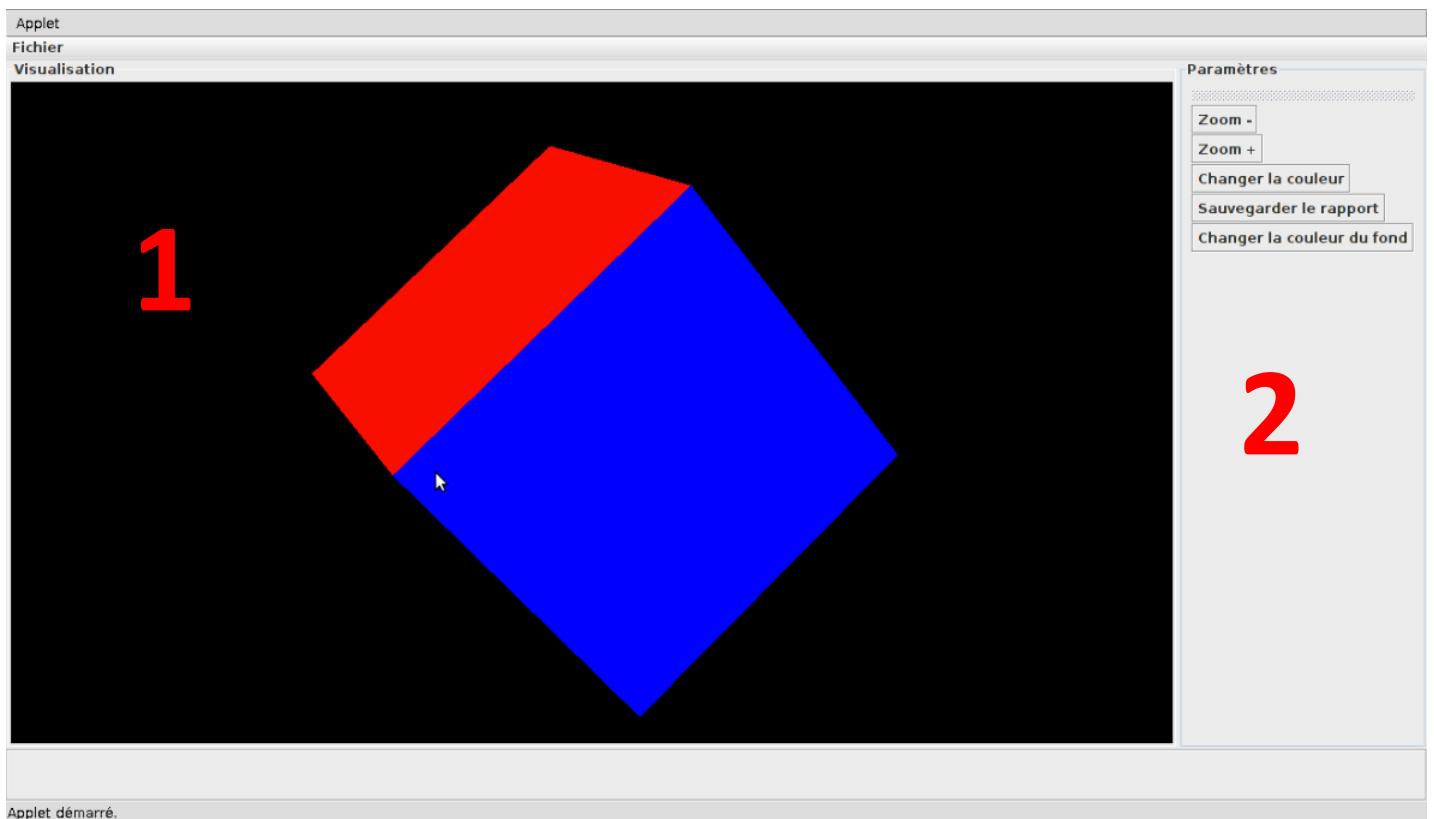
Ps : Nous avons utilisé le logiciel « BalsamiQ Mockups » pour la modélisation schématique de notre maquette IHM.



A ce stade de modélisation, l'interface se divise en **3 parties majeures (visibles)**, maquette approuvée par le client :

- (1) Visualisation 3d
- (2) Paramètres de modification
- (3) Recherche

Seconde maquette (IHM Java Graphique) :

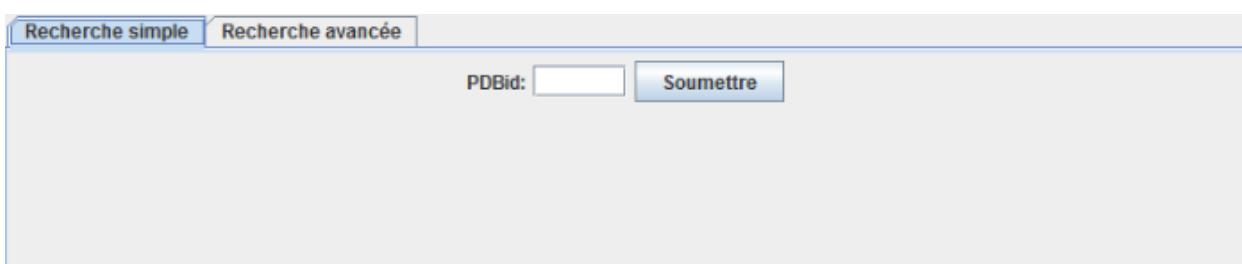


A ce stade de modélisation, l'interface ne se divise plus qu'en **2 parties majeures (visibles)**. Le client ayant fait une demande de changement d'IHM afin d'avoir le formulaire de « recherche de molécules » dans une fenêtre à part de l'application :

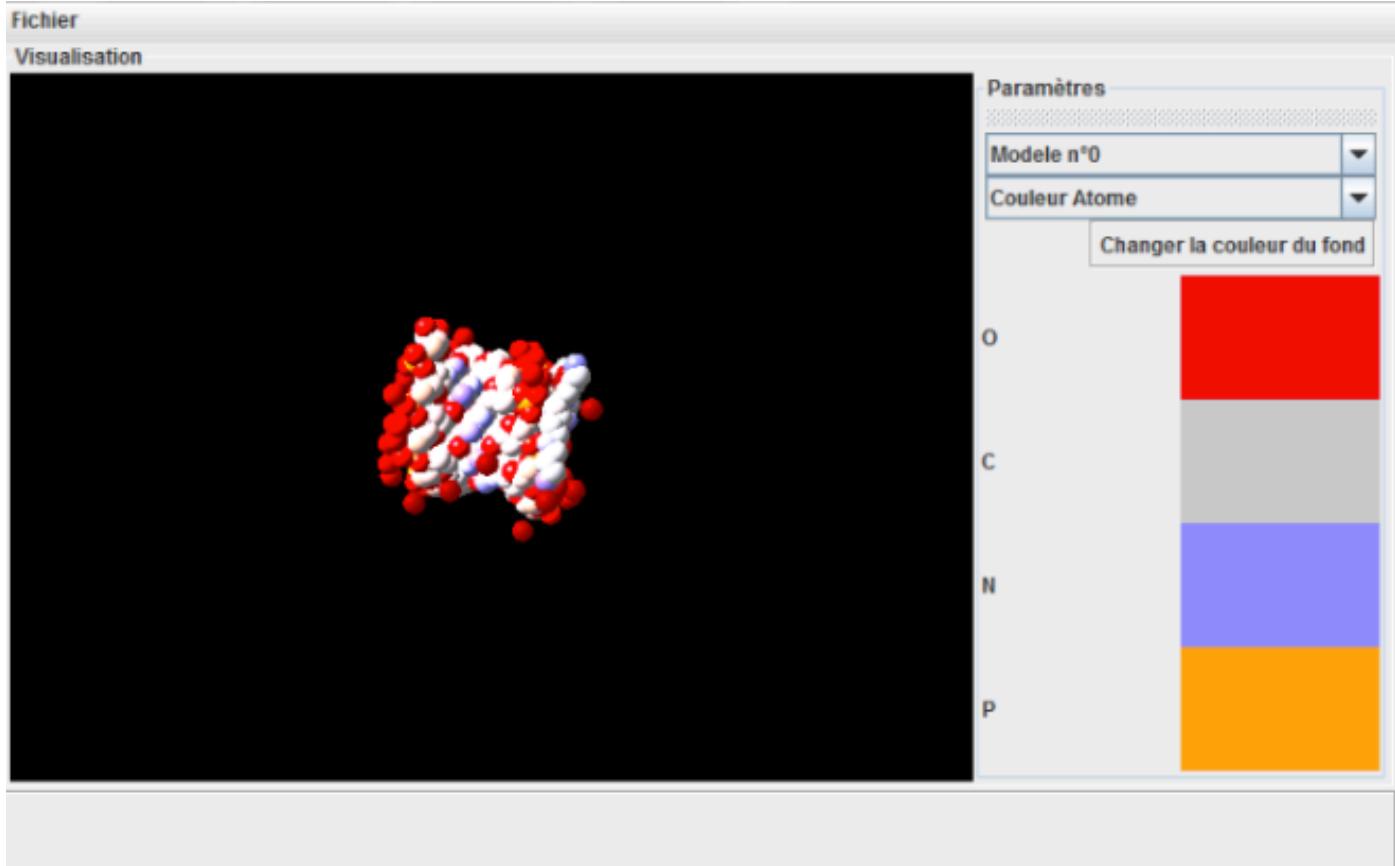
(1) Visualisation 3d

(2) Paramètres de modification

Recherche, accès par le menu « Fichier » -> « Recherche », une nouvelle fenêtre s'ouvre :



IHM final (Fenêtre visualisation + Fenêtre Recherche) :



Recherche simple | Recherche avancée | ResultatRecherche

Recherche terminé: 53 résultats

PDBid	Titre Structure	Auteur(s)	Date de publication
1C4O	CRYSTAL STRUCTURE OF THE DNA NUCLEOTIDE ...	Machius, M., Henry, L., Palnitkar, M., Deisenhofer, J.	2000-07-26
1DKE	NI BETA HEME HUMAN HEMOGLOBIN	Bruno, S., Bettati, S., Mozzarelli, A., Bolognesi, M., Der...	2000-05-23
1G31	GP31 CO-CHAPERONIN FROM BACTERIOPHAGE T4	Hunt, J.F., Van Der Vies, S.M., Henry, L., Deisenhofer, J.	1998-08-26
1G84	THE SOLUTION STRUCTURE OF THE C EPSILON2 ...	McDonnell, J.M., Cowburn, D., Gould, H.J., Sutton, B.J....	2001-05-16
1KNB	CRYSTAL STRUCTURE OF THE RECEPTOR-BINDI...	Xia, D., Henry, L.J., Gerard, R.D., Deisenhofer, J.	1995-03-31
1M6N	Crystal structure of the SecA translocation ATPase fro...	Hunt, J.F., Weinkauf, S., Henry, L., Fak, J.J., McNichola...	2002-09-20
1M74	Crystal structure of Mg-ADP-bound SecA from Bacillu...	Hunt, J.F., Weinkauf, S., Henry, L., Fak, J.J., McNichola...	2002-09-20
1MWP	N-TERMINAL DOMAIN OF THE AMYLOID PRECURS...	Rossjohn, J., Cappai, R., Feil, S.C., Henry, A., McKinstry...	2000-03-15
1N7D	Extracellular domain of the LDL receptor	Rudenko, G., Henry, L., Henderson, K., Ichtchenko, K., ...	2003-01-21
1O0V	The crystal structure of IgE Fc reveals an asymmetric...	Wan, T., Beavil, R.L., Fabiane, S.M., Beavil, A.J., Sohi, ...	2002-09-18
1RD4	An allosteric inhibitor of LFA-1 bound to its I-domain	Crump, M.P., Ceska, T.A., Spyropoulos, L., Henry, A., ...	2004-03-30
1X32	Three Dimensional Solution Structure of the Chromo...	Sivaraja, V., Kumar, T.K., Henry, R., Yu, C.	2005-09-20
1X3P	3D solution structure of the Chromo-3 domain of cpS...	Leena, P.S.T., Kumar, T.K.S., Sivaraja, V., Henry, R., Y...	2005-09-20
1X3Q	3D Solution Structure of the Chromo-2 Domain of cpS...	Sivaraja, V., Kumar, T.K.S., Henry, R., Yu, C.	2005-09-20
2H0B	Crystal Structure of the second LNS/LG domain from ...	Scheckler, L.R., Henry, L., Sugita, S., Sudhof, T.C., Rud...	2006-06-20
2HUG	3D Solution Structure of the Chromo-2 Domain of cpS...	Kathir, K.M., Vaithiyalingam, S., Henry, R., Thallapuram...	2007-09-18
2K6S	Structure of Rab11-FIP2 C-terminal Coiled-coil Domain	Wei, J., Liu, Y., Baleja, J.D.	2009-06-16
2K8P	Characterisation of the structural features and interac...	Veverka, V., Henry, A.J., Slocombe, P.M., Ventom, A., M...	2009-02-17
2KH2	Solution structure of a scFv-IL-1B complex	Wilkinson, I.C., Hall, C.J., Veverka, V., Muskett, F.W., S...	2009-09-08
2KZT	Structure of the Tandem MA-3 Region of Pdcd4	Waters, L.C., Strong, S.L., Oka, O., Muskett, F.W., Veve...	2011-03-16
2L3Y	Solution structure of mouse IL-6	Veverka, V., Redpath, N.T., Carrington, B., Muskett, F...	2011-09-28
2LM7	NMR structure of the C terminal domain of ILR7 in me...	Elaidi, S., Libereau, S., Ouidelli, M., Morallat, N., Lanoul...	2012-10-24

Visualisation | Rapport Molécule | Rapport Recherche | Fermer l'onglet

TESTS | IV.

MATRICE DE TESTS | IV.1

Ci-dessous la matrice de tests de la fonction « Rechercher molécule ».

C'est la seule fonction qui, pour la MOE, nécessitait d'une telle matrice, les autres fonctions étant testés par les développeurs lors des phases de développement (tests rapides).

	id=100D	auteur=henry	auteur=henry,datemin=2013-02-27,datemax=2013-02-27	organisme=Escherichia coli
id=100D	X			
auteur=henry		X		X
auteur=henry,datemin=2013-02-27,datemax=2013-02-27			X	
auteur=""	X			
datemin=""	X	X		X
datemax=""	X	X		X
organisme=""	X	X	X	
id=""		X	X	X
resultat attendu	1 résultat	52 résultats	1 résultat	54027 résultats
resultat obtenu	1 résultat	52 résultats	1 résultat	54027 résultats

BUGS TROUVES | IV.2

La MOE à rencontré certains bugs et problèmes divers, lors des phases de développement.

- **Lors du développement de la fonction recherche**, la récupération d'information grâce au parseur XML s'est avérée complexe. La MOE à due faire face à des bugs lors du « parage » des informations. En effet le choix d'un caractère séparateur pour récupérer uniquement les informations nous indispensables à été déterminant -> **le choix d'un caractère unique**, qui n'apparaîtrait pas dans le résultat de recherche et qui fausserait la bonne séparation des informations. Le choix de la MOE s'est donc porté sur le caractère de tabulation : \t.
- **Lors de l'implémentation de la fonction recherche avec l'IHM**, la récupération des saisies utilisateur dans les champs de recherches ne fonctionnait pas, problème résolu plus tard grâce à une meilleure organisation de la class de la fenêtre principal et des écouteurs.
- **Lors d'une recherche multiple par un utilisateur**, l'utilisateur été obligé de renseigner tous les champs pour que la recherche fonctionne. La MOE à donc modifié le code concernant la création de la requête XML et ses paramètres envoyés vers le serveur de recherche afin de palier à ce problème majeur.
- **Lors de la visualisation 3D**, la MOE a tout d'abord appliqué la réflectance sur chacun des atomes composant une molécule (coût important en calcul et donc en utilisation de la mémoire). La MOE a corrigé ce problème en appliquant la réflectance non pas à chaque atome mais à la scène de visualisation 3D entière.

Les tests effectués tout au long de ce projet sont conformes à la demande et l'analyse des besoins du client.

1) La Base de données interne :

On peut parler ici surtout de problème de décisions : Nous avons eu un problème au niveau de la base de données. En effet selon le diagramme de composants logiciel, nous avions deux possibilités de recherches : soit hors ligne ou en ligne. Le problème de la base de données en interne, était qu'il fallait installer un SGBD pour que celle-ci puisse marcher correctement. Nous avions également à configurer le SGBD. De plus, cette installation réduit la bonne portabilité du logiciel.

2) Le diagramme de composant logiciel :

Beaucoup de difficultés concernant la construction de ce diagramme. En effet, nous ne connaissions pas les différentes choses que ce diagramme devait représenter et également à quoi il servait.

3) Gestion des nombreux rajouts de fonctionnalités de notre client :

Cette difficulté a été assez difficile à gérer au début du projet. En effet, quelques fois, le client voulait rajouter de plus en plus de fonctionnalités à son futur logiciel. Donc cela a été un peu difficile à gérer du fait que cela impliquait la modification des plannings par rapport à ce qui était prévu.

4) Problème de visualisation 3D des sphères (atomes) apparaissant plutôt en 2D :

La première apparition des sphères en 3D mais apparaissait comme si elles étaient en 2D. On voulait donc qu'il y est encore plus une sensation de réel en intégrant la gestion des ombres. Cela a été un problème car ceci a été difficile à implémenter mais avec beaucoup de persévérance on a réussi à trouver la solution.

5) Problème de certification pour l'applet, et également de sockets :

Pour que notre applet soit intégré et fonctionne sur une page html, il aurait fallu la faire certifier par Microsoft. Un problème de connexion au niveau des sockets nous empêche de réaliser une connexion entre l'applet intégré dans une page web et le serveur de la Protein Data Bank.

1) Solution à propos du problème 1 :

La solution qui a été envisagée est la suivante : effectuer la recherche de données en ligne en laissant de côté celle hors-ligne. A l'aide d'une connexion internet il est en effet plus facile de faire la recherche des données qui nous intéresse le plus par l'intermédiaire d'un parseur qui parcours la PDB et les récupères directement pour pouvoir ensuite les utiliser. Gain de temps et de coût d'utilisation.

2) Solution à propos du problème 2 :

Pour résoudre le problème 2, nous avons demandé conseils à notre client monsieur G.SANTINI et également à notre responsable de projet GL, madame H.ZARGAYOUNA. Ils ont su très bien nous expliqués l'utilité ce de diagramme et également confiés des livres de modélisations UML pour pouvoir nous en inspirer. C'est grâce à cela que nous avons pu confectionner le diagramme de composants logiciel présent dans ce rapport. Ce rapport nous permet d'avoir effectivement une superbe vision de l'intégralité du logiciel. Il présente bien toutes les « briques » nécessaires à la construction du logiciel.

3) Solution à propos du problème 3 :

Pour résoudre cette troisième difficulté, nous avons débattu ensemble pour savoir comment faire pour convaincre notre client comme quoi, d'après notre planification, nous ne pouvions pas développer certaines fonctionnalités rajoutées par le client. Nous avons également demandés à madame H.ZARGAYOUNA quelques conseils pour savoir comment ne pas décevoir notre client du fait que nous ne pouvions pas aboutir à certaines fonctionnalités. Pour conclure, nous avons donc expliqué à monsieur Santini que nous privilégierions d'abord certaines fonctionnalités par rapport à d'autres. Et notre client l'a très bien compris.

4) Solution à propos du problème 4 :

Pour résoudre le quatrième problème, nous avons intégré le rendu 3D des ombres et de la lumière.

5) Solution à propos du problème 5 :

Pas de solution apporté à ce point d'autant plus que ce point n'était pas une priorité pour le client (point à traiter dans la mesure du possible).

CONCLUSION DU RAPPORT - SYNTHESE | VI.1

Nous voici à la fin de ce rapport. Nous espérons avoir été clair et concis.

Nous avons pu voir ici les différentes étapes de développement de notre projet en partant de l'étude de l'analyse du besoin client en passant par la modélisation pour finir par le développement et la conception finale du projet en Java.

Tout au long de ce projet nous avons pu observer, analyser et élaborer des solutions afin de mener à bien et créer, de toute pièce, ensemble, une application.

Nous avons énormément appris de notre travail en équipe, notamment en nous répartissant les différentes tâches de travail, en optimisant notre gestion du temps et des délais et surtout en confrontant nos idées communes et nos points de vue divergents pour arriver à surmonter les difficultés rencontrées et réaliser ce projet et un rapport unifié.

Dans le cadre de la réalisation d'un projet, ce n'est pas le tout de savoir développer. S'intéresser à ce que fait le client (son domaine d'activité, sa profession) et être à son écoute a une part toute aussi importante, si ce n'est essentielle, à la bonne conduite et réalisation d'un projet.

