ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

Факультет компьютерных наук Образовательная программа бакалавриата «Программная инженерия»

СОГЛАСОВАНО Научный руководитель,

профессор департамента программной инженерии

УТВЕРЖДАЮ

Академический руководитель образовательной программы

«Программная инженерия»

	факультета компьютерных наук док. техн. наук	профессор департамента программной инженерии, канд. техн. наук
	Яму В.В. Подбельский «26» апреля 2021 г.	В.В. Шилов »2021 г.
та		растворимости твердых растворов в от температуры
Подп. и дата	лист ут	ское задание ВЕРЖДЕНИЯ 4.15-01 ТЗ 01-1-ЛУ
Инв.Nº дубл.		
Взам. инв. №		
Подп. и дата		Исполнитель Студент группы БПИ173 /К.Г. Кожакин/ «26» апреля 2021 г.
Инв. № подл.		

Москва 2021

Инв. Nº подл.	Подп. и дата	Взам. инв. №	Инв.Nº дубл.	Подп. и дата

Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры

Техническое задание

RU.17701729.04.15-01 T3 01-1

Листов 16

Оглавление

г. введение	•••••	•••••		62
1.1 Наименован	ие программы			62
1.2 Краткая хар	актеристика облас	ти применения пр	ограммы	62
2. ОСНОВАНИЕ	ДЛЯ РАЗРАБОТК	И		63
3. НАЗНАЧЕНИЕ	РАЗРАБОТИ			64
3.3 Функционал	ьное назначение			64
3.2 Эксплуатаці	ионное назначение			64
4. ТРЕБОВАНИЯ	К ПРОГРАММЕ .			65
4.1 Требования	к функциональны	м характеристикам	1	65
4.1.1 Требова	ания к составу вып	олняемых функци	й	65
4.1.2 Требова	ания к организациі	и входных данных		65
4.1.3 Требова	ания к организациі	и выходных данны	(X	65
4.2 Требования	к интерфейсу			66
4.3 Требования	к надёжности			66
4.4 Условия экс	плуатации			66
4.5 Требования	к составу и парам	етрам технических	с средств	66
4.6 Требования	к информационно	й и программной с	совместимости	66
5. ТРЕБОВАНИЯ	К ПРОГРАММНО	ОЙ ДОКУМЕНТА	ЦИИ	68
5.1 Состав прог	раммной документ	гации		68
5.2 Специальны	ие требования к пр	ограммной докуме	ентации	68
6. ТЕХНИКО-ЭКО	ОНОМИЧЕСКИЕ	ПОКАЗАТЕЛИ		69
6.1 Предполага	емая потребность.			69
6.2 Ориентиров	очная экономичес	кая эффективності	·	69
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата
	ı	i .	i -	i e

	6.3 Экономические преимущества разработки по сравнению с отечественными и	
	зарубежными аналогами	69
7.	СТАДИИ И ЭТАПЫ РАЗРАБОТКИ	71
	7.1 Стадии разработки	71
	7.2 Сроки разработки и исполнители	72
8.	ПОРЯДОК КОНТРОЛЯ И ПРИЁМКИ	73
C	ПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ	74

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1 Наименование программы

«Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры» («Application for Determining the Solubility Limits of Solid Solutions Depending on Temperature»).

1.2 Краткая характеристика области применения программы

Данная программа предназначена для определения границ твердых растворов замещения с изовалентными компонентами на основе экспериментальных данных и информации из интерактивной таблицы Менделеева, доступной для работы с ней широкого круга исследователей.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

2. ОСНОВАНИЕ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ

Основанием для разработки является приказ Национального исследовательского университета "Высшая школа экономики" № 2.3-02/1412-06 от 14.12.20 «Об утверждении тем, руководителей выпускных квалификационных работ студентов образовательной программы Программная инженерия факультета компьютерных наук»

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

3. НАЗНАЧЕНИЕ РАЗРАБОТИ

3.3 Функциональное назначение

Функциональным назначением программы является предоставление справочного материала по элементам таблицы Менделеева и химическим соединениям, а также определение границ твердых растворов замещения с изовалентными компонентами на основе этих материалов.

3.2 Эксплуатационное назначение

Возможности программы предполагают её использование преимущественно в научных целях по анализу взаимосвязи химических веществами в бинарной системе соединений. Программа выполняется на персональном компьютере.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

4. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММЕ

4.1 Требования к функциональным характеристикам 4.1.1 Требования к составу выполняемых функций

- Программа должна обеспечить пользователя информацией об атомах, химических соединениях и бинарной системе соединений;
- Изменение (добавление) данных об элементах и веществах, а также добавление новых химических соединений/систем соединений;
- Построение и визуализация купола распада на основе информации из интерактивной таблицы Менделеева, экспериментальных точек и коэффициентах, вычисляемых с использованием заданных аналитических зависимостей;
- Проведение оптимизации параметров функции купола распада по заданным экспериментальным точкам и критической температуре;
- Проведение оценки чувствительности (влияния) параметров функции смешения на конечный результат;
- Решение задачи аппроксимации табличной зависимости (полученной при экспериментальной оценке границы фаз бинарной системы) функциональной зависимостью, теоретически определяющей термодинамическую функцию смешения;
- Построение и визуализация графика свободной энергии Гиббса в заданном температурном интервале на основе результатов вычисления предыдущих функций.

4.1.2 Требования к организации входных данных

Входными данными являются сведения из интерактивной таблицы Менделеева, экспериментальные данные, аналитические зависимости и некоторые формульные коэффициенты.

4.1.3 Требования к организации выходных данных

Выходными данными программы являются: справочные материалы, результаты расчетов, построенный купол распада, термодинамическая функция

	= = = = = = = = = = = = = = = = = = = =		=	= -
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

смешения, экспериментальные точки, уточненные значения коэффициентов в формуле, определяющих функции и график свободной энергии Гиббса.

4.2 Требования к интерфейсу

Элементы интерфейса должны реализовывать возможности ввода/вывода входных/выходных данных согласно пунктам 4.1.2 и 4.1.3 в соответствующие части программы, а также реализовывать функциональные возможности, представленные в пункте 4.1.1, либо сообщать о возникших ошибках.

4.3 Требования к надёжности

- Программы не должна допускать возможность работы с некорректными входными данными;
- Программа не должна аварийно завершаться без уведомления пользователя о причине ошибки.

4.4 Условия эксплуатации

Для работы с программой требуется один человек, имеющий специальные знания о бинарных фазовых диаграммах. Необходимы навыки работы с графическим пользовательским интерфейсом. Прочих специальных знаний не требуется. Минимальная требуемая классификация пользователя в области ІТ-технологии – обычный пользователь (Normal User).

4.5 Требования к составу и параметрам технических средств

- Минимальная тактовая частота процессора 1 Ггц;
- Минимальный объём ОЗУ 1 Гб;
- Минимальное свободное место на жёстком диске 500 Мб;
- Монитор с минимальным разрешением 1920x1080;
- Клавиатура и мышь.

4.6 Требования к информационной и программной совместимости

• OC Windows 10 или новее;

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

• Установленная среда .NET Framework 4.6.1 или выше.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

5. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММНОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ

5.1 Состав программной документации

- «Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры». Техническое задание [1];
- «Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры». Текст ВКР;
- «Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры». Программа и методика испытаний [2];
- «Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры». Руководство оператора [3];
- «Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры». Текст программы [4];

5.2 Специальные требования к программной документации

- Все документы к программе должны быть выполнены в соответствии с [5]
 и ГОСТ к этому виду документа [1];
- Рецензия и лист отчета должны быть загружены в систему Антиплагиат через ЛМС НИУ ВШЭ.
- Вся документация (в формате .pdf или .doc/.docx), программа и её исходный код (в архиве формата .zip или .rar) сдаются в электронном виде;
- Все документы перед защитой ВКР должны быть загружены в информационно-образовательную среду НИУ ВШЭ LMS в личном кабинете, дисциплина – «Защита выпускной квалификационной работы», одним архивом.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

6. ТЕХНИКО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ

6.1 Предполагаемая потребность

Программа может использоваться в учебных заведениях и научных организациях, в которых выполняется анализ взаимосвязи химических веществами в бинарной системе соединений.

6.2 Ориентировочная экономическая эффективность

Данный продукт позволяет получит информацию об элементах таблицы Менделеева и химических соединениях для проведения научных экспериментов, а также упростить их выполнение и определить границы твердых растворов замещения с изовалентными компонентами.

6.3 Экономические преимущества разработки по сравнению с отечественными и зарубежными аналогами

На данный момент существует только одно программное решение, которое выполняет некоторые функции, необходимые для достижения цели данной работы: «Программа для расчета областей смесимости неорганических соединений в бинарной системе» В. А. Миллера.

Программа производит расчет энтропии смешения, теплоты смешения и константы Маделунга, строит купола распада и диаграммы состояния, позволяет работать с экспериментальными данными.

Функции программы:

- вычисление различных параметров бинарной системы (значение энтропии и энтальпии смешения, теплоты смешения и константы Маделунга для различных значений замещения);
- построение таблиц по рассчитанным параметрам;
- построение таблицы энергии Гиббса;
- построение купола распада и нанесение на него экспериментальных данных;
- построение диаграммы состояния;

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата	
RU.17701729.04.15-01 T3 01-					
1					
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата	

сохранение таблиц (формат csv) и изображения купола распада (формат bmp).

По итогам анализа возможностей программы стало понятно, что программа для расчета областей смесимости неорганических соединений в бинарной системе имеет недостаточный функционал для определения границ растворимости твердых растворов. В первую очередь, это происходит из-за несовпадения теоретических и экспериментальных расчётов. Разрабатываемое приложение должно будет изменять формульные коэффициенты для приближения результата к эксперименту. Также данное приложение может предоставлять справочные материалы по химическим элементам, соединениям и системам соединений.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата	
RU.17701729.04.15-01 T3 01-					
1					
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата	

7. СТАДИИ И ЭТАПЫ РАЗРАБОТКИ

7.1 Стадии разработки

7.1.1 Техническое задание:

- Обоснование необходимости разработки
 - Постановка задачи;
 - Сбор технического материала;
- Разработка и утверждение технического задания
 - Определение требований к программе
 - Определение стадий, этапов и сроков разработки программы и документации на неё;
 - Согласование и утверждение технического задания.

7.1.2 Рабочий проект:

- Разработка программного продукта:
 - Разработка и отладка программы;
- Разработка программной документации:
 - Разработка программной документации в соответствии с требованиями [6];
- Испытание программного продукта:
 - Разработка, согласование и утверждение программы и методики испытаний;
 - Проведение предварительных испытаний;
 - Корректировка программы и программной документации по результатам испытаний.

7.1.3 Внедрение:

- Подготовка и защита программного продукта:
 - Подготовка программы и программной документации для презентации и защиты;
 - Утверждение дня защиты программы;
 - Презентация разработанного программного продукта

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата	
RU.17701729.04.15-01 T3 01-					
1					
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата	

Передача программы и программной документации в архив
 НИУ ВШЭ

7.2 Сроки разработки и исполнители

Разработка должна закончиться к 31 мая 2021 года. Исполнитель: Кожакин Кирилл Геннадьевич.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

8. ПОРЯДОК КОНТРОЛЯ И ПРИЁМКИ

Проверка программы, в том числе и на соответствие техническому заданию, осуществляется заказчиком совместно с исполнителем согласно программному документу «Программа и методика испытаний».

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1. ГОСТ 19.201-78. Техническое задание. Требование к содержанию и оформлению. // Единая система программной документации. Москва: Издательство стандартов, 2005.
- 2. ГОСТ 19.301-78. Программа и методика испытаний. // Единая система программной документации. Москва: Издательство стандартов, 2005.
- 3. ГОСТ 19.505-79. Руководство оператора. // Единая система программной документации. Москва: Издательство стандартов, 2005.
- 4. ГОСТ 19.401-78. Текст программы. // Единая система программной документации. Москва: Издательство стандартов, 2005.
- 5. ГОСТ 19.106-78. Требования к программным документам, выполненным печатным способом. // Единая система программной документации. Москва: Издательство стандартов, 2005.
- 6. ГОСТ 19.101-77. Виды программ и программных документов. // Единая система программной документации. Москва: Издательство стандартов, 2005.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 T3 01-				
1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

КИ	Но	мер листо	в (стра	аниц)	Всего	$N_{\underline{0}}$	Входящий	Подп	Да
М.	Изменё	заменё	НОВ	аннулиров	листов	докум	$\mathcal{N}_{\underline{o}}$	ись	та
	нных	нных	ЫХ	анных	(стран	ента	сопроводите		
					иц) в		льного		
					докум		документа и		
					енте		дата		