

**ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»
Факультет компьютерных наук
Департамент программной инженерии**

СОГЛАСОВАНО
Профессор департамента
программной инженерии факультета
компьютерных наук
_____ В.В. Подбельский
«__» _____ 2020 г.

УТВЕРЖДАЮ
Академический руководитель
образовательной программы
«Программная инженерия»
_____ В.В. Шилов
«__» _____ 2020 г.

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

**Программа для расчета и визуализации бинарных фазовых диаграмм в
системе изоструктурных компонентов**

Руководство оператора

**ЛИСТ УТВЕРЖДЕНИЯ
RU.17701729.04.15-01 34 01-1-ЛУ**

Исполнитель
Студент группы БПИ173
_____/К.Г. Кожакин/
«__» _____ 2020 г.

Москва 2020

УТВЕРЖДЕН
RU.17701729.04.15-01 34 01-1-ЛУ

**Программа для расчета и визуализации бинарных фазовых диаграмм в системе
изоструктурных компонентов**

Руководство оператора

RU.17701729.04.15-01 34 01-1

Листов 14

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

Москва 2020

Оглавление

1. НАЗНАЧЕНИЕ И ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ.....	3
1.1 Функциональное назначение	3
1.2 Эксплуатационное назначение	3
1.3 Состав функций	3
2. УСЛОВИЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРОГРАММЫ.....	4
1.1 Климатические условия эксплуатации	4
1.2 Минимальный состав технических средств	4
1.3 Минимальный состав программных средств	4
1.4 Требования к оператору	4
3. ВЫПОЛНЕНИЕ ПРОГРАММЫ	5
1.1 Загрузка программы	5
1.2 Запуск программы	5
1.3 Выполнение программы.....	5
1.4 Завершение работы программы	11
4. СООБЩЕНИЯ ОПЕРАТОРУ	12
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	13
ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ.....	14

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

1. НАЗНАЧЕНИЕ И ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ

1.1 Функциональное назначение

Функциональным назначением программы является построение купола распада и термодинамической функции смешения на основе теоретических данных, а также приближение данной функции к экспериментальным данным путем изменения некоторых её коэффициентов.

1.2 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.

1.3 Состав функций

- Просмотр и редактирование таблиц свойств элементов/соединений/систем соединений;
- Возможность добавления новых соединений/систем соединений;
- Возможность добавления формул, с использованием данных из таблиц элементов/соединений, в таблицы свойств соединений/систем соединений;
- Построение купола распада на основе данных из интерактивной таблицы Менделеева;
- Построение термодинамической функции смешения на основе данных из интерактивной таблицы Менделеева;
- Приближение функции смешения к эксперименту путём изменения некоторых коэффициентов формулы.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

2. УСЛОВИЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРОГРАММЫ

1.1 Климатические условия эксплуатации

Климатические условия эксплуатации, при которых должны обеспечиваться заданные характеристики, должны удовлетворять требованиям, предъявляемым к техническим средствам в части условий их эксплуатации.

1.2 Минимальный состав 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.

1.3 Минимальный состав программных средств

- ОС Windows 10 или новее.
- Установленная среда .NET Framework 4.6.1 или выше.

1.4 Требования к оператору

Для работы 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 IT-технологии – обычный пользователь (Normal User).

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

3. ВЫПОЛНЕНИЕ ПРОГРАММЫ

1.1 Загрузка программы

Для загрузки и установки программы достаточно скопировать файлы Activision_Mendeleev_table.exe и Xceed.Wpf.Toolkit.dll в любую директорию на жестком диске компьютера оператора, в которой разрешена операция создания новых файлов. Все данные по свойствам элементов/соединений/систем соединений хранятся соответственно в файлах Elems.xml/Compositions.xml/BinarySistems.xml. При их отсутствии программа создаст необходимые файлы при сохранении новых данных.

1.2 Запуск программы

При правильной установке программы после запуска откроется окно с таблицей Менделеева:

Рис. 1 – Окно с таблицей Менделеева

1.3 Выполнение программы

- **Выполнение функции просмотра и редактирование таблиц свойств элементов**

Выполнение указанной функции производится при двойном нажатии на соответствующий элемент таблицы Менделеева (Рис. 1). Для редактирования открывшейся таблицы необходимо нажать кнопку «Редактировать таблицу», после чего таблица примет вид:

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

Свойства элемента Ti

Радиус атома, R(a)	Радиус металла, R(m)	Формальный заряд, ФЗ	Координационное число	Радиус иона, R(i)	Электроотрицательность
		4	4	0,41	1,6
		4	6	0,61	1,6

Добавить столбец Добавить строку Удалить столбец Удалить выделенные строки Сохранить изменения

Рис. 2 – Окно редактирования таблицы свойств элемента

- Выполнение функции добавления нового столбца**

Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Добавить столбец» (Рис. 2). В открывшемся окне необходимо ввести уникальное название столбца для текущей таблицы и (необязательно) уникальное обозначение. Если столбец с данным названием или обозначением(если есть) уже существует в текущей таблице, то выводит соответствующее сообщение об ошибке.

- Выполнение функции добавления новых соединений/систем соединений**

Выполнение указанной функции производится при нажатии на пункты меню «Работа с соединением»/«Работа системой соединений» (Рис. 1). В открывшемся окне можно выбрать соединение/систему соединений из выпадающего списка или ввести новое(ую). При создании все числовые символы, круглые скобки, символы «+», «-», «=», «.», «,» записанные в конструкции $_ \{ \langle \text{определенные символы} \rangle \}$ преобразуются в подстрочные, а в конструкции $\wedge \{ \langle \text{определенные символы} \rangle \}$ – в надстрочные, остальные символы останутся без изменений.

- Выполнение функции просмотра и редактирование таблиц свойств соединений/систем соединений**

Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Готово» окна создания(выбора) соединения/системы соединений. Редактирование таблицы свойств происходит также, как и редактирование таблицы элементов, но с возможностью добавления формул и их расчета.

- Выполнение функции добавления формул в таблицы свойств соединений/систем соединений**

Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Добавить формулу» окна редактирования таблицы свойств соединения/системы соединений(аналог кнопки «Добавить столбец» (Рис. 2). В левом текстовом поле

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

открывшегося окна необходимо ввести обозначение формулы, а в правом саму формулу, соответствующую следующим правилам:

- В формулу могут входить:
 - Вещественные числа, в виде десятичных дробей;
 - Конструкции, по которым ищется значение в таблицах отделять с двух сторон символом пробел, а сами конструкции писать без каких - либо разделений($\langle \text{обозначение искомого свойства} \rangle \{ \langle \text{элемент/соединение} \rangle \}$ – получает значение искомого свойства элемента/соединения находящегося в первой строке таблицы свойств; $\langle \text{обозначение искомого свойства} \rangle \{ \langle \text{вспомогательное свойство, по которому ищем искомое} \rangle \{ \langle \text{значение вспомогательного свойства} \rangle \} \langle \text{элемент/соединение} \rangle \}$ - получает значение искомого свойства элемента/соединения соответствующего значению вспомогательного свойства из таблицы свойств);
 - Скобки, обозначающие приоритет математических действий или аргументы функций, отделенные символом пробел с ВНУТРЕННЕЙ стороны("(_или_)");
 - Функции, описанные ниже (если аргументов больше одного - следует их разделять символом ";". Пример: $\min(32; \sin(4))$).
 - $\sin(a)$ - вычисляет синус a ;
 - $\cos(a)$ - вычисляет косинус a ;
 - $\tan(a)$ - вычисляет тангенс a ;
 - $\text{ctan}(a)$ - вычисляет котангенс a ;
 - $\text{abs}(a)$ - вычисляет модуль a ;
 - $\ln(a)$ - вычисляет натуральный логарифм a ;
 - $\exp(a)$ - вычисляет экспоненту степени a ;
 - $\min(a; b)$ - находит минимум из a и b ;
 - $\max(a; b)$ - находит максимум из a и b ;
 - $\text{pow}(a; b)$ - возводит a в степень b ;
- Необходимо наличие свойств и элементов/соединений, которые используются в формуле, в таблицах.

Также, при нажатии на кнопку «Список формул» можно увидеть уже записанные формулы и их обозначения(для облегчения работы пользователя).

- **Выполнение функции построения купола распада системы соединений**

Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Купол распада» окна редактирования таблицы свойств системы соединений.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата



Настройка данных



	Символ химического элемента	Номер строки
Первый химический элемент:	<input type="text" value="Na"/>	<input type="text" value="0"/>
Второй химический элемент:	<input type="text" value="Ag"/>	<input type="text" value="0"/>
Общий химический элемент:	<input type="text" value="Cl"/>	<input type="text" value="0"/>
Обозначение радиуса иона элемента в таблице данных:	<input type="text" value="R(i)"/>	
Обозначение электроотрицательности элемента в таблице данных:	<input type="text" value="x"/>	
Обозначение формального заряда элемента в таблице данных:	<input type="text" value="ФЗ"/>	
c = <input type="text" value="-1"/>	A = <input type="text" value="-1"/>	m = <input type="text" value="-1"/>
n = <input type="text" value="-1"/>		z = <input type="text" value="-1"/>
<input type="button" value="Сохранить изменения и закрыть окно"/>		

Рис. 3 – Окно настройки параметров системы соединений

В открывшемся окне (Рис. 3), необходимо указать некоторые числовые параметры, а также обозначения (если отличаются от обозначений по умолчанию). После нажатия кнопки «Сохранить изменения и закрыть окно», если введенные данные корректны, откроется окно построения купола распада данной системы (Рис. 4).

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

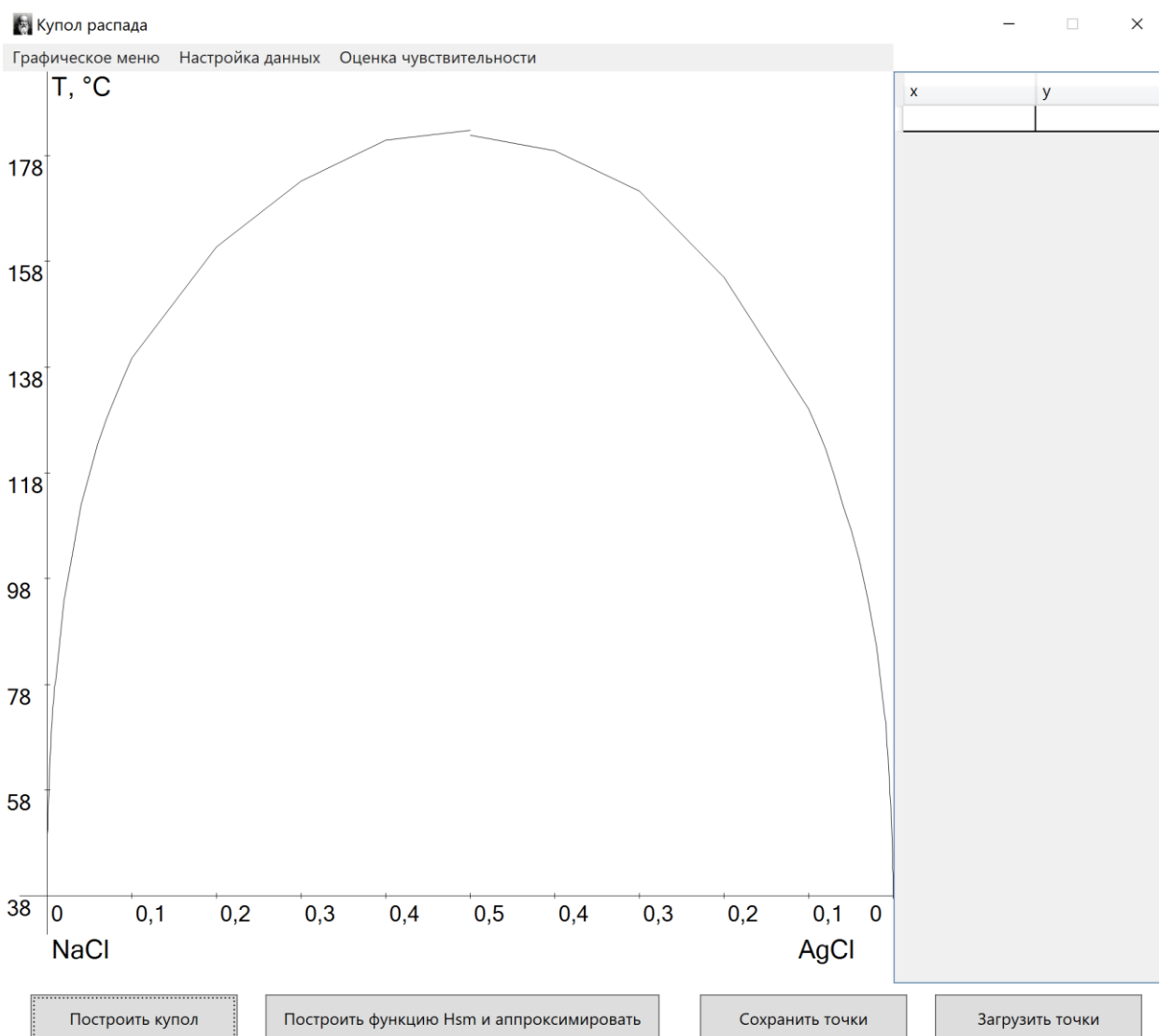


Рис. 4 – Окно построения купола распада

Купол строится автоматически при создании этого окна и при нажатии на кнопку «Построить купол» после изменения параметров системы соединений. Вызвать окно настройки этих параметров (Рис. 3) можно при помощи пункта меню «Настройка данных». В правой части программы можно задавать точки. Для удаления точек необходимо выделить нужные строки таблицы и нажать клавишу Delete. Также имеется возможность загрузить их из текстового файла или сохранить в текстовый файл. Пункт «Графическое меню» позволяет настроить цвета графиков и точек, выбрать форму отображения точек(соединять или нет) а также выставить различные границы параметров(температура(купол распада), межатомное расстояние(оценка чувствительности), разница степеней ионности(оценка чувствительности) и параметр c (оценка чувствительности)).

- **Выполнение построения термодинамической функции смещения ΔH_{sm} и её аппроксимация**

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Построить функцию H_{sm} и аппроксимировать» окна построения купола распада (Рис. 4). Аппроксимация происходит только в том случае если указаны точки, в противном случае показывается предупреждение и строится только сама функция. После аппроксимации выводятся новые значения параметров. При нажатии на кнопку «Построить купол» после аппроксимации имеется возможность использовать новые значения параметров для его построения.

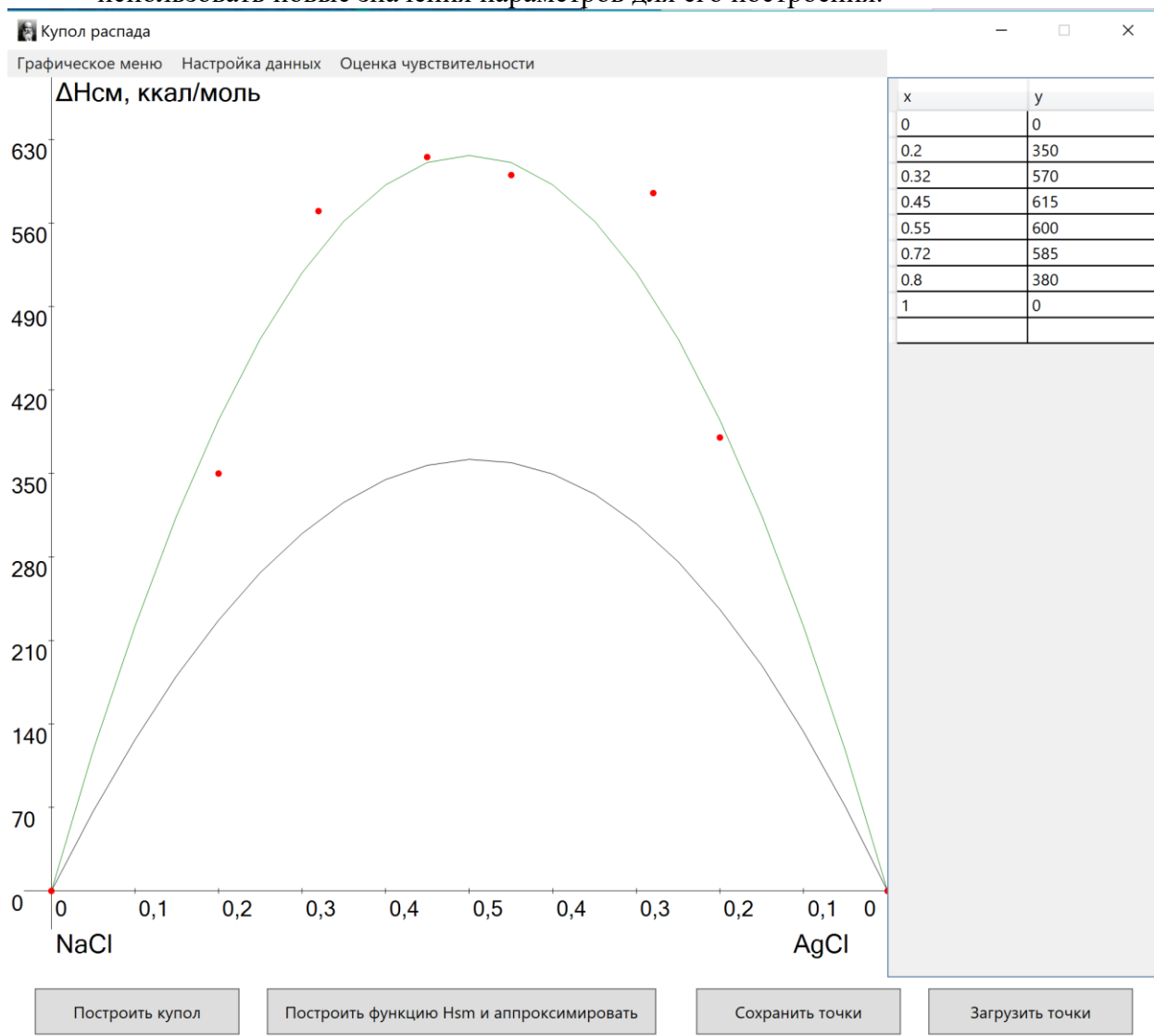


Рис. 5 – Окно построения и аппроксимации функции ΔH_{sm}

- **Выполнение функции оценки чувствительности параметров термодинамической функции смещения ΔH_{sm}**

Выполнение указанной функции производится при нажатии на пункт меню «Оценка чувствительности» окна построения купола распада (Рис. 4).

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

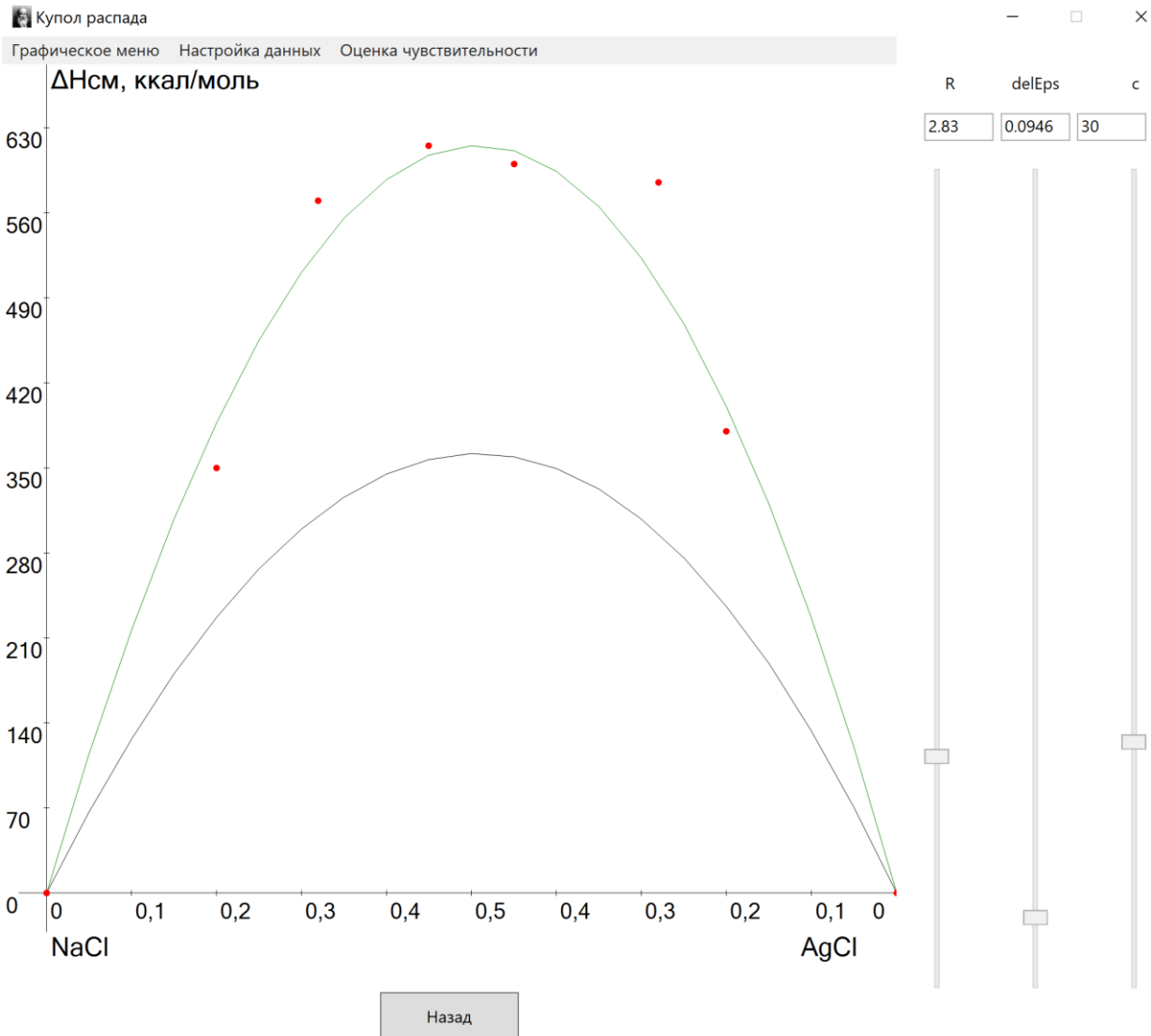



Рис. 6 – Окно оценки чувствительности

Повторно нажав на пункт меню «Оценка чувствительности» (Рис. 6) значения параметров станут равными изначальным значениям. Если ранее были загружены(введены) точки они будут отображаться. Также всегда отображается функция с изначальными значениями параметров. При помощи слайдеров можно изменять параметры R, delEps и c(из значения отображаются над соответствующими слайдерами). Граничные значения этих параметров можно указать в пункте «Графическое меню/Настройка границ». Кнопка «Назад» возвращает к окну построения купола.

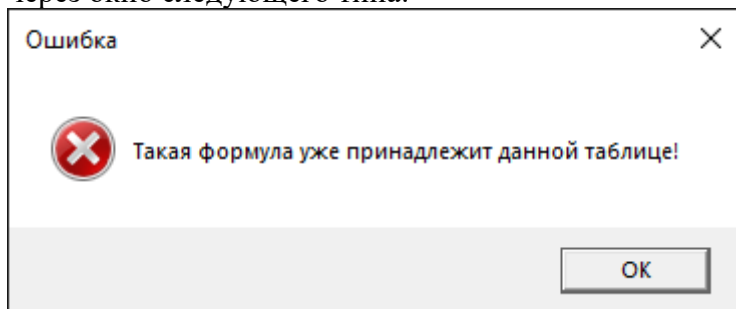
1.4 Завершение работы программы:

Завершение программы производится при нажатии на кнопку  в правом верхнем углу главного окна программы.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

4. СООБЩЕНИЯ ОПЕРАТОРУ

В случае возникновения ошибок программа показывает сообщения об ошибках через окно следующего типа:



Возможные сообщения об ошибках:

- «Столбец с данным именем(обозначением) уже принадлежит данной таблице!»;
- «Такая формула уже принадлежит данной таблице!»;
- «Неверный формат формулы!»;
- «Неверная входная строка <строка>!»;
- «Отсутствует значение параметра <параметр> равного <значение> у данного соединения или элемента.»;
- «Отсутствует параметр <параметр> у данного соединения или элемента.»;
- «Отсутствует свойство <свойство> у данного соединения или элемента.»;
- «Неверные данные для построения купола! Измените их в таблицах или в меню настроек!»
- и т.д.

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ГОСТ 19.201-78. Техническое задание. Требование к содержанию и оформлению. // Единая система программной документации. – Москва: Издательство стандартов, 2005.
2. ГОСТ 19.404-79. Пояснительная записка. // Единая система программной документации. – Москва: Издательство стандартов, 2005.
3. ГОСТ 19.301-78. Программа и методика испытаний. // Единая система программной документации. – Москва: Издательство стандартов, 2005.
4. ГОСТ 19.505-79. Руководство оператора. // Единая система программной документации. – Москва: Издательство стандартов, 2005.
5. ГОСТ 19.401-78. Текст программы. // Единая система программной документации. – Москва: Издательство стандартов, 2005.
6. ГОСТ 19.106-78. Требования к программным документам, выполненным печатным способом. // Единая система программной документации. – Москва: Издательство стандартов, 2005.
7. 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 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата

[illegible]

Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата
RU.17701729.04.15-01 34 01-1				
Инв. № подл.	Подп. и дата	Взам. Инв. №	Инв. № дубл.	Подп. и дата