**ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»**

Факультет компьютерных наук

Департамент программной инженерии

СОГЛАСОВАНО УТВЕРЖДАЮ  
 Профессор департамента Академический руководитель

программной инженерии факультета образовательной программы

компьютерных наук «Программная инженерия»

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ В.В. Подбельский \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ В.В. Шилов

«\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2020 г. «\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2020 г.



**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**

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

**Москва 2020**

Оглавление

[1. НАЗНАЧЕНИЕ И ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ 3](#_Toc36717726)

[1.1 Функциональное назначение 3](#_Toc36717727)

[1.2 Эксплуатационное назначение 3](#_Toc36717728)

[1.3 Состав функций 3](#_Toc36717729)

[2. УСЛОВИЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРОГРАММЫ 4](#_Toc36717730)

[1.1 Климатические условия эксплуатации 4](#_Toc36717731)

[1.2 Минимальный состав технических средств 4](#_Toc36717732)

[1.3 Минимальный состав программных средств 4](#_Toc36717733)

[1.4 Требования к оператору 4](#_Toc36717734)

[3. ВЫПОЛНЕНИЕ ПРОГРАММЫ 5](#_Toc36717735)

[1.1 Загрузка программы 5](#_Toc36717736)

[1.2 Запуск программы 5](#_Toc36717737)

[1.3 Выполнение программы 5](#_Toc36717738)

[1.4 Завершение работы программы 11](#_Toc36717739)

[4. СООБЩЕНИЯ ОПЕРАТОРУ 12](#_Toc36717740)

[СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ 13](#_Toc36717741)

[ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ 14](#_Toc36717742)

1. **НАЗНАЧЕНИЕ И ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ**
   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. **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. **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.

1. **УСЛОВИЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ПРОГРАММЫ**
   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. **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 1920х1080;
* Клавиатура и мышь.
  1. **Минимальный состав программных средств**
     + - ОС Windows 10 или новее.
       - Установленная среда .NET Framework 4.6.1 или выше.
  2. **Требования к оператору**

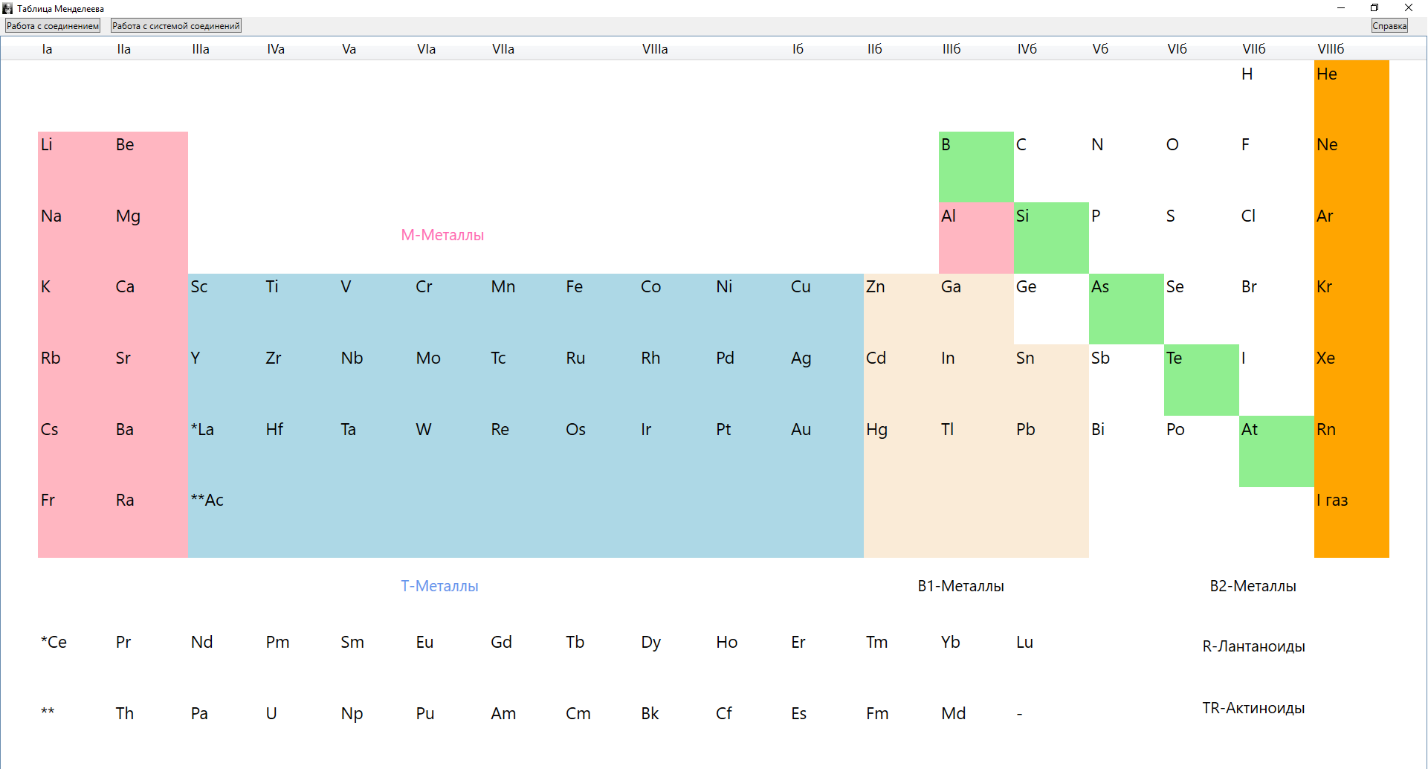
Для работы требуется один человек, имеющий специальные знания о бинарных фазовых диаграммах. Необходимы навыки работы с графическим пользовательским интерфейсом. Прочих специальных знаний не требуется. Минимальная требуемая классификация пользователя в области IT-технологии – обычный пользователь (Normal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

1. **ВЫПОЛНЕНИЕ ПРОГРАММЫ**
   1. **Загрузка программы**

Для загрузки и установки программы достаточно скопировать файлы Activision\_Mendeleyev\_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. **Запуск программы**

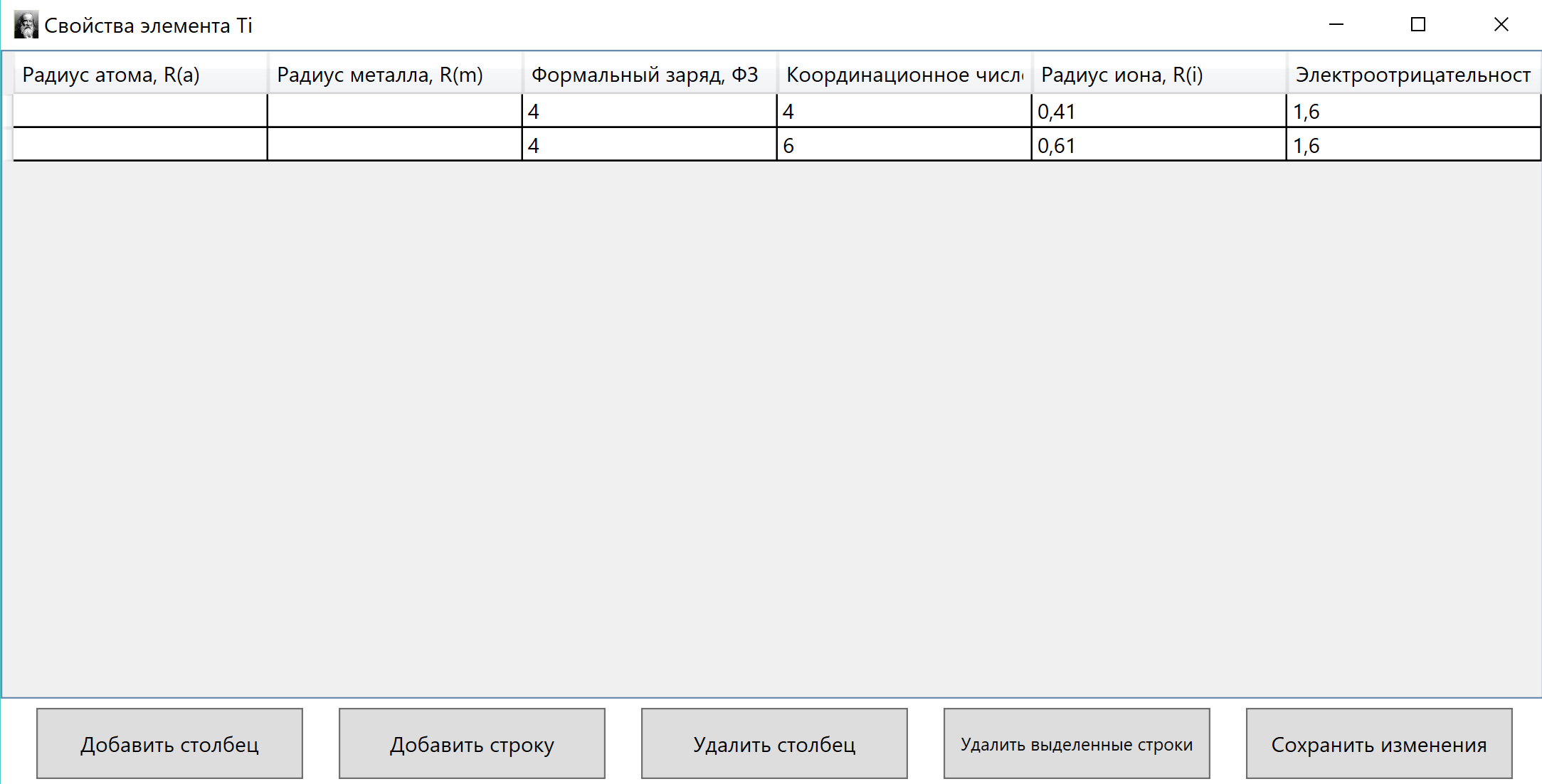
При правильной установке программы после запуска откроется окно с таблицей Менделеева:



*Рис. 1 – Окно с таблицей Менделеева*

* 1. **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:



*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 \_{<определенные символы>} преобразуются в подстрочные, а в конструкции ^{< определенные символы>} – 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**

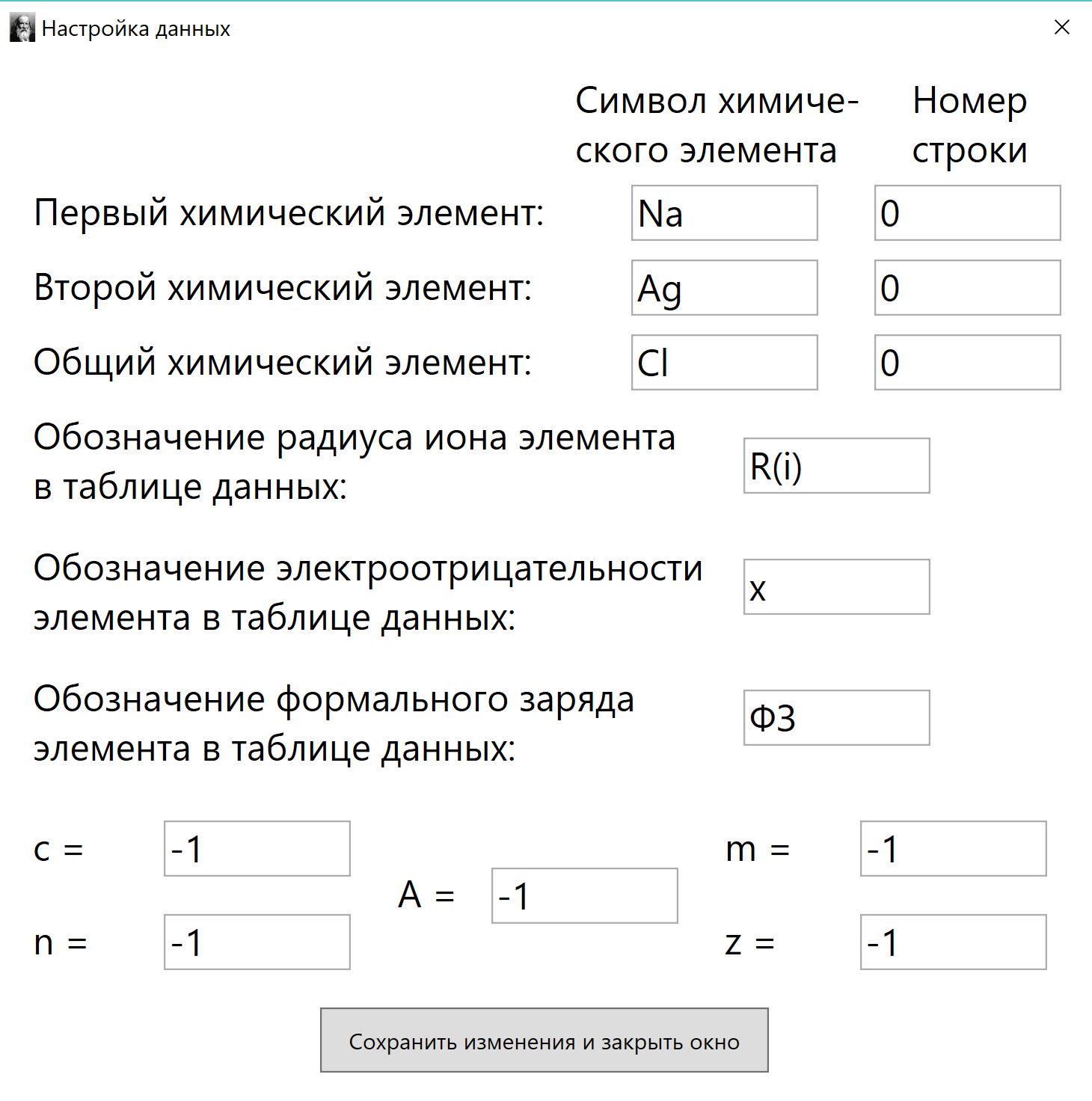
Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Добавить формулу» окна редактирования таблицы свойств соединения/системы соединений(аналог кнопки «Добавить столбец» (Рис. 2). В левом текстовом поле открывшегося окна необходимо ввести обозначение формулы, а в правом саму формулу, соответствующую 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( <обозначение искомого свойства>{<элемент/соединение>} – получает значение искомого свойства элемента/соединения находящегося в первой строке таблицы свойств; <обозначение искомого свойства>{<вспомогательное свойство, по которому ищем искомое>{<значение вспомогательного свойства>}<элемент/соединение>} - 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 большо одного - следует их разделять символом ";". Пример: min( 32; sin( 4 ) ).
      * sin(a) - вычисляет синус а;
      * cos(a) - вычисляет косинус а;
      * tan(a) - вычисляет тангенс а;
      * ctan(a) - вычисляет котангенс а;
      * abs(a) - вычисляет модуль а;
      * ln(a) - вычисляет натуральный логарифм а;
      * exp(a) - вычисляет экспоненту степени а;
      * min(a; b) - находит минимум из a и b;
      * max(a; b) - находит максимум из a и b;
      * 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).

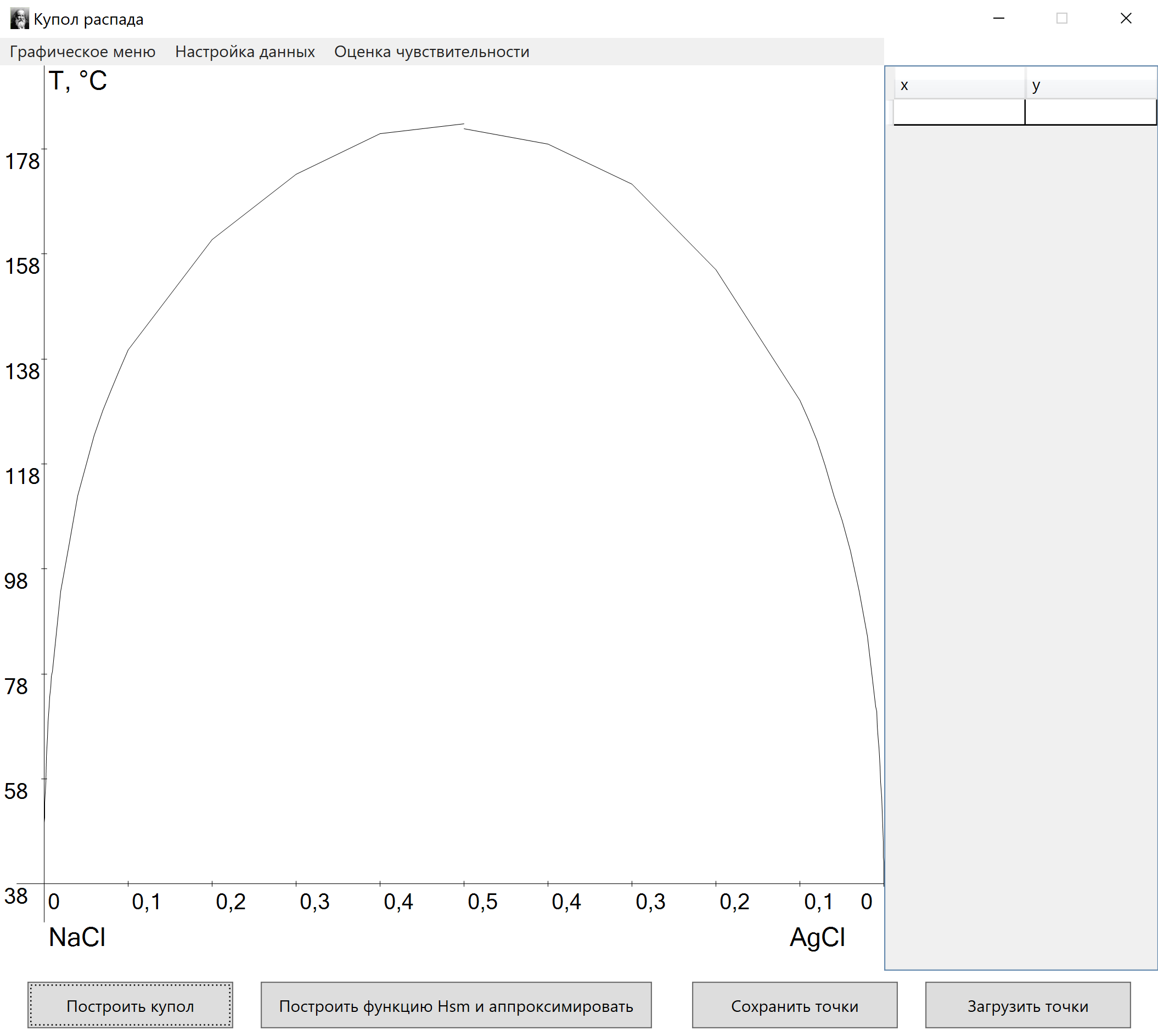
* **Выполнение функции построения купола распада системы соединений**

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



*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).

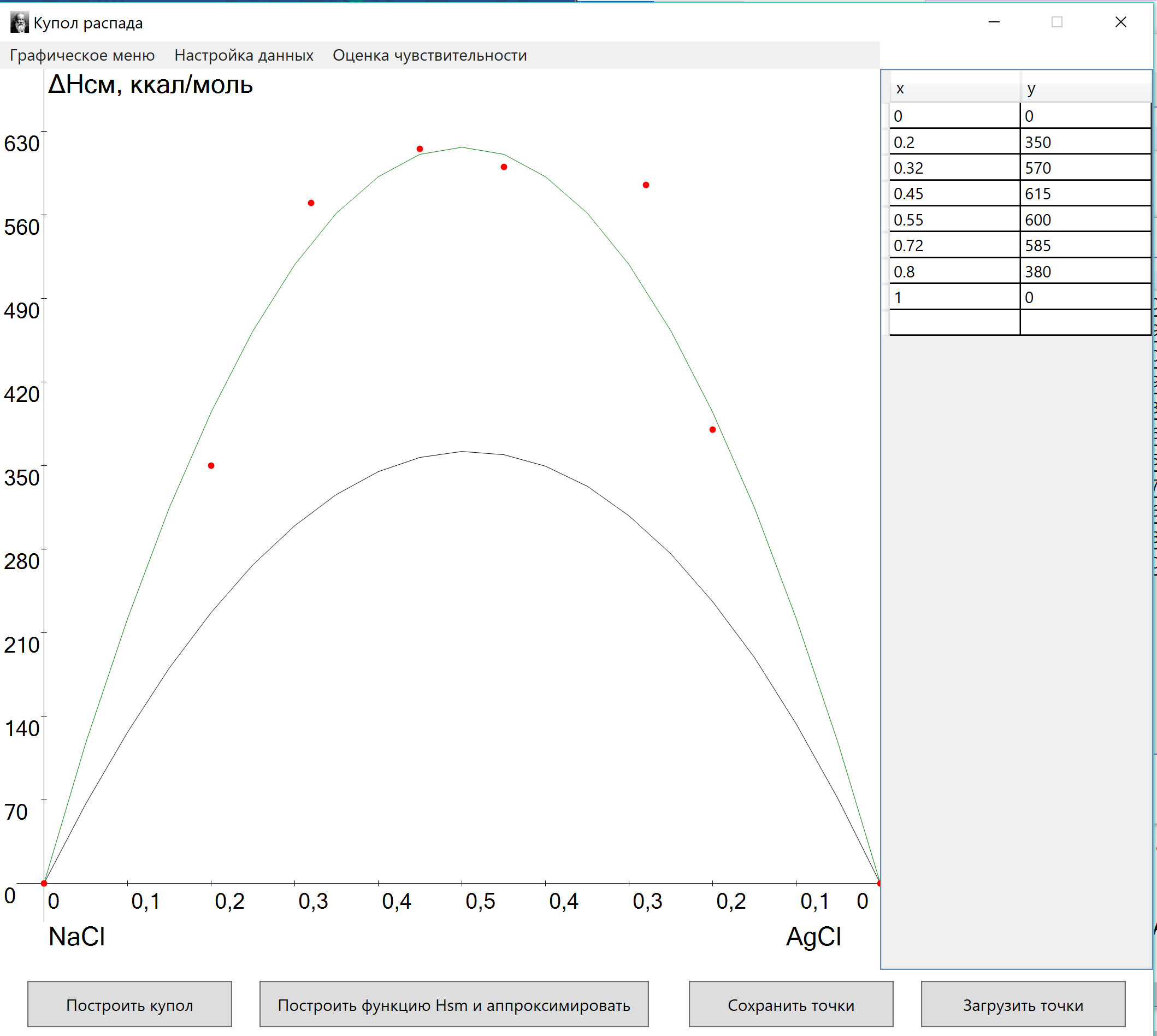


*Рис. 4 – Окно построения купола распада*

Купол строится автоматически при создании этого окта 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 с(оценка чувствительности)).

* **Выполнение построения термодинамической функции смешения ∆Hsm и её аппроксимация**

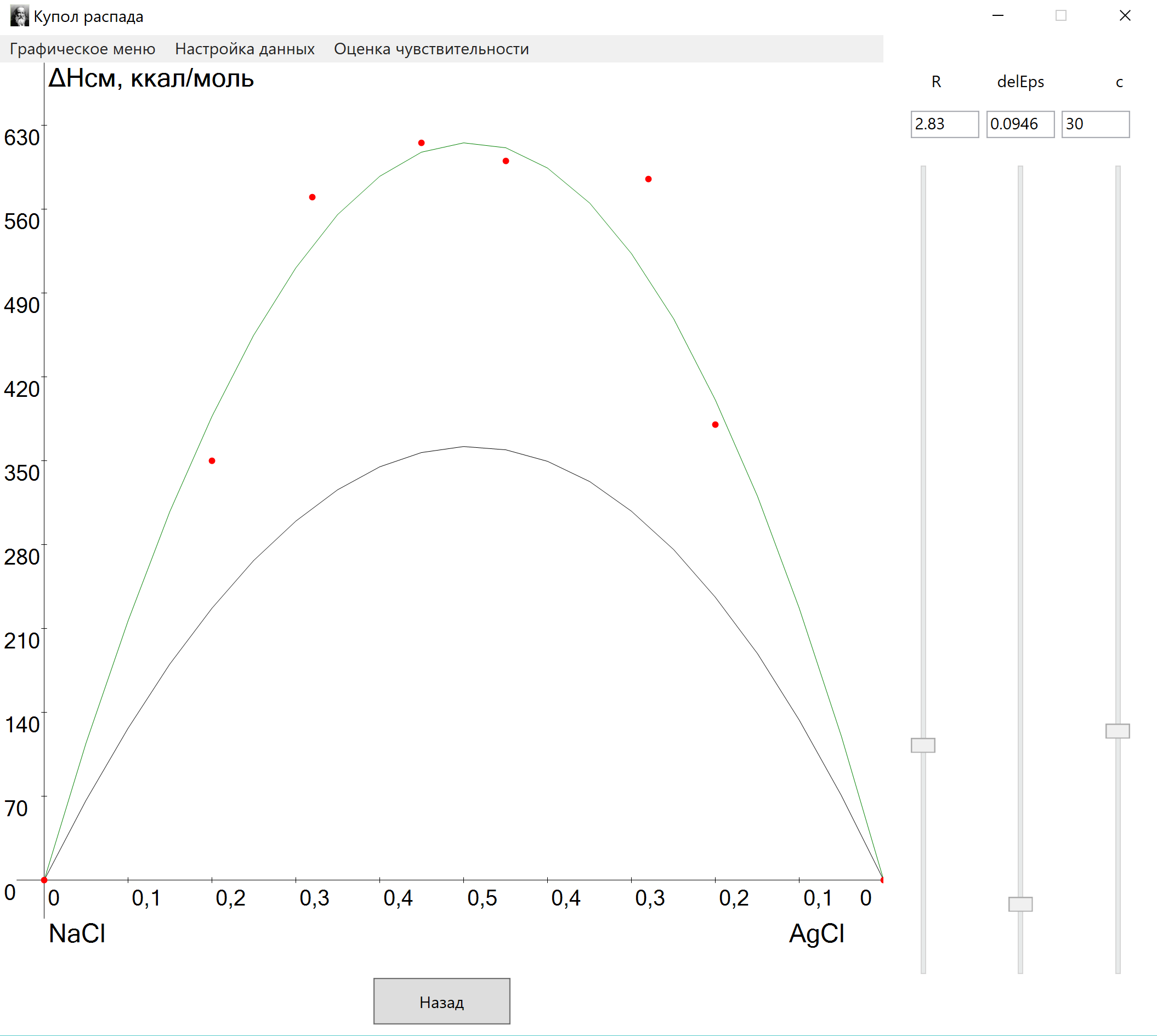
Выполнение указанной функции производится при нажатии на кнопку «Построить функцию Hsm и аппроксимировать» окна построения купола распада (Рис. 4). Аппроксимация происходит только в том случае если указаны точки, в противном случае показывается предупреждение и строится только сама функция. После аппроксимации 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 ∆Hsm*

* **Выполнение функции оценки чувствительности параметров термодинамической функции смешения ∆Hsm**

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

****

*Рис. 6 – Окно оценки чувствительности*

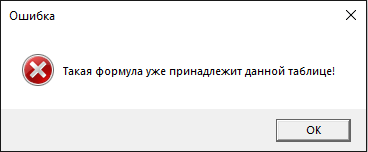
Повторно нажав на пункт меню «Оценка чувствительности» (Рис. 6) значения параметров станут равными изначальным значениям. Если ранее были загружены(введены) точки они будут отображаться. Также всегда отображается функция с изначальными значениями параметров. При помощи слайдеров можно изменять параметры 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.

## **Завершение работы программы:**

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

1. **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.

# **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.

# **ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Изм. | Номера листов (страниц) | | | | Всего листов (страниц) в документе | № документа | Входящий № сопроводительного документа и дата | Подпись | Дата |
| измененных | замененных | новых | аннулированных |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |