**ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»**

Факультет компьютерных наук

Образовательная программа бакалавриата «Программная инженерия»

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| СОГЛАСОВАНО  Научный руководитель,  профессор департамента  программной инженерии  факультета компьютерных наук  док. техн. наук    \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ В.В. Подбельский  «26» апреля 2021 г. |  | УТВЕРЖДАЮ  Академический руководитель образовательной программы «Программная инженерия»  профессор департамента программной инженерии, канд. техн. наук  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ В.В. Шилов  «\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2021 г. |

**Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры**

**Проект технического задания**

**ЛИСТ УТВЕРЖДЕНИЯ**

**RU.17701729.04.15-01 ТЗ 01-1-ЛУ**

**Исполнитель**

Студент группы БПИ173

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/К.Г. Кожакин/

«26» апреля 2021 г.

**Москва 2021**

**УТВЕРЖДЕН**

**RU.17701729.04.15-01 ТЗ 01-1-ЛУ**



**Программа определения границ растворимости твердых растворов в зависимости от температуры**

**Техническое задание**

**RU.17701729.04.15-01 ТЗ 01-1**

**Листов 13**

**Москва 2021**

Оглавление

[1. ВВЕДЕНИЕ 3](#_Toc36666772)

[1.1 Наименование программы 3](#_Toc36666773)

[1.2 Краткая характеристика области применения программы 3](#_Toc36666774)

[2. ОСНОВАНИЕ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ 4](#_Toc36666775)

[3. НАЗНАЧЕНИЕ РАЗРАБОТИ 5](#_Toc36666776)

[3.3 Функциональное назначение 5](#_Toc36666777)

[3.2 Эксплуатационное назначение 5](#_Toc36666778)

[4. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММЕ 6](#_Toc36666779)

[4.1 Требования к функциональным характеристикам 6](#_Toc36666780)

[4.1.1 Требования к составу выполняемых функций 6](#_Toc36666781)

[4.1.2 Требования к организации входных данных 6](#_Toc36666782)

[4.1.3 Требования к организации выходных данных 6](#_Toc36666783)

[4.2 Требования к интерфейсу 6](#_Toc36666784)

[4.3 Требования к надёжности 6](#_Toc36666785)

[4.4 Условия эксплуатации 7](#_Toc36666786)

[4.5 Требования к составу и параметрам технических средств 7](#_Toc36666787)

[4.6 Требования к информационной и программной совместимости 7](#_Toc36666788)

[5. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММНОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ 8](#_Toc36666789)

[5.1 Состав программной документации 8](#_Toc36666790)

[5.2 Специальные требования к программной документации 8](#_Toc36666791)

[6. ТЕХНИКО-ЭКОНОМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ 9](#_Toc36666792)

[6.1 Предполагаемая потребность 9](#_Toc36666793)

[6.2 Ориентировочная экономическая эффективность 9](#_Toc36666794)

[6.3 Экономические преимущества разработки по сравнению с аналогами 9](#_Toc36666795)

[7. СТАДИИ И ЭТАПЫ РАЗРАБОТКИ 10](#_Toc36666796)

[7.1 Стадии разработки 10](#_Toc36666797)

[7.2 Сроки разработки и исполнители 10](#_Toc36666798)

[8. ПОРЯДОК КОНТРОЛЯ И ПРИЁМКИ 11](#_Toc36666799)

[СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ 12](#_Toc36666800)

[ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ 13](#_Toc36666801)

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.

1. **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»

1. **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.

1. **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 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 IT-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 1920х1080;
* Клавиатура и мышь.

**4.6 Требования к информационной и программной совместимости**

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

1. **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.

\*[*x*] – ссылка на пункт *х* в списке литературы.

# **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;

- 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.

1. **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
  + Передача программы и программной документации в архив НИУ ВШЭ

## **7.2** **Сроки разработки и исполнители**

Разработка должна закончиться к 15 мая 2021 года. Исполнитель: Кожакин Кирилл Геннадьевич.

# **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».

**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.

**ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Изм. | Номер листов (страниц) | | | | Всего листов (страниц) в документе | № документа | Входящий № сопроводительного документа и дата | Подпись | Дата |
|  | Изменённых | заменённых | новых | аннулированных |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |