

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт – Физико-технический

Направление – Ядерные физика и технологии

Кафедра – Электроника и автоматика физических установок

Специальность – Электроника и автоматика физических установок

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА

Тема работы	
РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ	

УДК 004.415:53.05

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0711	Кузнецов С.Г.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Обходский А.В.	канд. техн. наук		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	канд. филос. наук, доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Акимов Д.В.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ЭАФУ	Горюнов А.Г.	д-р техн. наук, доцент		

Томск – 2017 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Универсальные компетенции</i>	
Р1	Представлять современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, а также культурных ценностей; понимать социальную значимость своей будущей профессии, обладать высокой мотивацией к выполнению профессиональной деятельности, защите интересов личности, общества и государства; быть готовым к анализу социально-значимых процессов и явлений, применять основные положения и методы гуманитарных, социальных и экономических наук при организации работы в организации, к осуществлению воспитательной и образовательной деятельности в сфере публичной и частной жизни.
Р2	Обладать способностями: действовать в соответствии с Конституцией РФ, исполнять свой гражданский и профессиональный долг, руководствуясь принципами законности и патриотизма, правилами и положениями, установленные законами и другими нормативными правовыми актами; к логическому мышлению, обобщению, анализу, прогнозированию, постановке исследовательских задач и выбору путей их достижения; понимать основы национальной и военной безопасности РФ; работать в многонациональном коллективе; формировать цели команды, применять методы конструктивного разрешения конфликтных ситуаций; использовать на практике навыки и умения в организации научно-исследовательских и научно-производственных работ.

P3	Самостоятельно, методически правильно применять методы самостоятельного физического воспитания для повышения адаптационных резервов организма и укрепления здоровья, готовностью к достижению и поддержанию должного уровня физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
P4	Свободно владеть литературной и деловой письменной и устной речью на русском языке, навыками публичной и научной речи. Уметь создавать и редактировать тексты профессионального назначения, владеть одним из иностранных языков как средством делового общения.
P5	Находить организационно-управленческие решения в нестандартных ситуациях и нести за них ответственность; быть готовым к принятию ответственности за свои решения в рамках профессиональной компетенции, принимать решения в нестандартных условиях обстановки и организовывать его выполнение, самостоятельно действовать в пределах предоставленных прав; самостоятельно применять методы и средства познания, обучения и самоконтроля для приобретения новых знаний и умений, в том числе в новых областях, непосредственно не связанных со сферой деятельности, развития социальных и профессиональных компетенций.
P6	Применять основные законы естественнонаучных дисциплин, математический аппарат, вычислительную технику, современные методы исследований процессов и объектов для формализации, анализа и выработки решения профессиональных задач.
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P7	Уметь самостоятельно повышать уровень знаний в области профессиональной деятельности, приобретать с помощью

	информационных технологий и использовать в практической деятельности новые знания и умения; использовать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт, методы научно-исследовательской и практической деятельности, современные компьютерные технологии и базы данных в своей предметной области; работать с информацией в глобальных компьютерных сетях; оценивать перспективы развития АСУ и АСНИ физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики), использовать современные достижения в научно-исследовательских работах.
P8	Применять знания о процессах в ядерных энергетических и физических установках, и о технологических процессах ядерного топливного цикла используя методы математического моделирования отдельных стадий и всего процесса для разработки АСУ ТП и АСНИ с применением пакетов автоматизированного проектирования и исследований.
P9	Использовать знания о протекающих процессах в ядерных энергетических установках, аппаратах производств ядерного топливного цикла, теории и практики АСУ ТП, при проектировании, настройке, наладке, испытаниях и эксплуатации современного оборудования, информационного, организационного, математического и программного обеспечения, специальных технических средств, сооружений, объектов и их систем; организовать эксплуатацию физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики), современного оборудования и приборов с учетом требований руководящих и нормативных документов; быть готовым к освоению новых

	образцов физических установок, составлению инструкций по эксплуатации оборудования и программ испытаний.
P10	Использовать технические средства и информационные технологии, проводить предварительное технико-экономического обоснования проектных расчетов устройств и узлов приборов и установок, расчет, концептуальную и проектную проработку программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ, применять методы оптимизации, анализа вариантов, поиска решения многокритериальных задач с учетом неопределенностей объекта управления, разрабатывать способы применения программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ, решать инженерно-физические и экономические задачи, применяя знания теории и практики АСУ, включающее математическое, информационное и техническое обеспечения, для проектирования, испытания, внедрения и эксплуатации АСУ ТП и АСНИ.
P11	Понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, соблюдать основные требования безопасности и защиты государственной тайны; выполнять мероприятия по восстановлению работоспособности физических установок (вооружения и техники, процессов и аппаратов атомной промышленности и энергетики) при возникновении аварийных ситуаций, разрабатывать методы уменьшения риска их возникновения; проводить анализ и оценку обстановки для принятия решения в случае возникновения аварийных ситуаций, экологическую безопасность, нормы и правила производственной санитарии, пожарной, радиационной и ядерной безопасности.
P12	Разрабатывать проекты нормативных и методических материалов, технических условий, стандартов и технических

	описаний средств АСУ ТП и АСНИ, регламентирующих работу в сфере профессиональной деятельности; осуществлять разработку технического задания, расчет, проектную проработку современных устройств и узлов приборов, установок (образцов вооружения, программно-технических средств АСУ ТП и АСНИ), использовать знания методов анализа эколого-экономической эффективности при проектировании и реализации проектов.
P13	Использовать в профессиональной деятельности нормативные правовые акты в области защиты государственной тайны, интеллектуальной собственности, авторского права и в других областях; осуществлять поиск, изучение, обобщение и систематизацию научно-технической информации, нормативных и методических материалов в сфере своей профессиональной деятельности.
P14	Проявлять и активно применять способность к организации и управлению работой коллектива, в том числе: находить и принять управленческие решения в сфере профессиональной деятельности; разрабатывать планы работы коллективов; контролировать соблюдение технологической дисциплины, обслуживания, технического оснащения, размещения технологического оборудования; организовывать учет и сохранность физических установок (вооружения и техники), соблюдение требований безопасности при эксплуатации; использовать основные методы защиты персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий.
P15	Демонстрировать способность к осуществлению и анализу научно-исследовательских, технологических и пуско-наладочных работ, разработке планов и программ их

	проведения, включая ядерно-физические эксперименты, выбору методов и средств решения новых задач с применением современных электронных устройств, представлению результатов исследований и формулированию практических рекомендаций их использования в формах научно-технических отчетов, обзоров, публикаций по результатам выполненных работ; выполнять полный объем работ, связанных с техническим обслуживанием физических установок с учетом требований руководящих и нормативных документов.
--	---

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт – Физико-технический
Направление – Ядерные физика и технологии
Кафедра – Электроника и автоматика физических установок
Специальность – Электроника и автоматика физических установок

УТВЕРЖДАЮ
Зав. кафедрой ЭАФУ ФТИ
_____ А.Г. Горюнов
«03» октября 2016 г.

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Дипломной работы

Студенту:

Группа	ФИО
0711	Кузнецов С.Г.

Тема работы:

Тема ВКР в соответствии с приказом

Утверждена приказом директора ФТИ	от 31.10.2016 № 9286/с
--	------------------------

Дата сдачи студентом выполненной работы	23 января 2016 г.
--	-------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объектом исследования является программа визуализации экспериментальных данных, функционирующая в составе программного пакета моделирования материалов. Программа визуализации должна обеспечивать: 1. Формирование метаданных эксперимента для программного пакета моделирования материалов. 2. Формирование транспортного файла с метаданными и результатами эксперимента. 3. Последовательный запуск компонентов программного пакета моделирования материалов в ходе эксперимента. 4. Функционирование на базе ЭВМ x86/x64 с минимальными техническими характеристиками:
---------------------------------	---

	– частота процессора, ГГц – 1,5; – объем ОЗУ, Гб – 2; – объем ПЗУ Гб – 20; – видеоконтроллер, поддерживающий разрешение выводимого изображения, пикс. – не ниже 1280×720 и поддержкой OpenGL 2.0 и выше – ОС Windows/Linux. 5. Обработку массивов данных, содержащих информацию о положении атомов и их связях. 6. Визуализацию экспериментальных данных о структуре кристаллической решетки или молекул материала. 7. Визуализацию экспериментальных данных в формате отдельных массивов и зависимостей массивов. 8. Графическую настройку всех форм визуализации. 9. Кроссплатформенность – ОС Windows, Linux.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1. Анализ существующих программных продуктов, применяемых для визуализации экспериментальных данных. 2. Разработка структуры программы визуализации. 3. Разработка алгоритмов функционирования программы визуализации. 4. Реализация разработанных алгоритмов программы визуализации на языке программирования C++ в среде программирования QT. 5. Проведение экспериментальных исследований функций и оценка характеристик программы визуализации экспериментальных данных автономно и в составе программного пакета моделирования материалов. В результате выполнения дипломной работы разработана программа визуализации, позволяющая формировать метаданные экспериментов в программном пакете моделирования материалов и обеспечивающая визуализацию результатов численных экспериментов.

Перечень графического материала	Схема структуры программного пакета моделирования свойств материалов, схема структуры программного обеспечения визуализации экспериментальных данных, схемы алгоритмов компонентов программного обеспечения визуализации экспериментальных данных, формы графического интерфейса пользователя.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	доцент, канд. филос. наук Меньшикова Е.В.
Социальная ответственность	ассистент Акимов Д.В.

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	03 октября 2016 г.
---	--------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Обходский А.В.	канд. тех. наук		03.10.16

Задание принял к исполнению студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0711	Кузнецов С.Г.		03.10.16

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 159 с., 25 рис., 15 табл., 43 источника, 6 прил.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ, РАСЧЕТ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛА, ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ, АТОМНАЯ СТРУКТУРА, ПРОГРАММА ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДАННЫХ

Целью работы является обеспечение визуализации экспериментальных данных получаемых в ходе компьютерного моделирования материалов.

В работе был проведен обзор существующих решений в области визуализации экспериментальных данных, а также данных, полученных в результате моделирования структуры материала. В результате выполнения работы разработана структура программного обеспечения, а также алгоритмы функционирования каждого отдельного компонента программы. На основании этого, на языке программирования C++ была разработана программа визуализации, работающая на платформе Windows/Linux, а также проведен эксперимент, проверяющий работоспособность программы автономно и в составе программного пакета моделирования свойств материалов.

Результатом выполнения выпускной квалификационной работы является программное обеспечение визуализации экспериментальных данных, полученных при компьютерном моделировании свойств материалов.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ, СОКРАЩЕНИЯ, НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В данной работе использованы ссылки на следующие стандарты:

ГОСТ 2.105–95 Единая система конструкторской документации. Общие требования к текстовым документам

ГОСТ 19.101–77 Единая система программной документации. Виды программ и программных документов

ГОСТ 19.106–78 Единая система программной документации. Требования к программным документам, выполненным печатным способом

ГОСТ 19.701–90 Единая система программной документации. Схемы алгоритмов, программ, данных и систем. Обозначения условные и правила выполнения

СНиП 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы

СНиП 23–05–95 Естественное и искусственное освещение

СП 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки.

В данной работе применены следующие сокращения:

программное обеспечение; ПО.

операционная система; ОС.

extensible markup language — расширяемый язык разметки; XML.

uniform transport file – универсальный транспортный файл; UTF.

персональная электронно-вычислительная машина; ПЭВМ.

программный комплекс; ПК.

strengths, weaknesses, opportunities, threats; SWOT.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	17
1 Актуальность работы	20
1.1 Анализ существующих решений в области визуализации экспериментальных данных	20
1.2 Формирование требований к функциям и характеристикам программного обеспечения визуализации экспериментальных данных	24
1.3 Выводы по разделу	26
2 Разработка программы визуализации экспериментальных данных	28
2.1 Описание структуры программного пакета компьютерного моделирования материалов	28
2.2 Разработка структуры программного обеспечения визуализации экспериментальных данных	30
2.3 Описание структуры входных и выходных файлов, содержащих экспериментальные данные	31
2.4 Разработка алгоритмов работы модулей программного комплекса визуализации	38
2.4.1 Алгоритм работы модуля интерфейса пользователя	38
2.4.2 Алгоритм работы модуля обработки файлов с данными	45
2.4.3 Алгоритм работы модуля записи/чтения UTF-файла	46
2.4.4 Алгоритм работы модуля 3D визуализации	48
2.4.5 Алгоритм работы модуля построения графиков	51
2.5 Выводы по разделу	54
3 Проведение экспериментальных исследований программного обеспечения визуализации экспериментальных данных	56
3.1 Постановка эксперимента	56
3.2 Методика исследования	57
3.3 Выводы по разделу	69

4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	71
4.1	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	71
4.2	SWOT-анализ.....	73
4.3	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	76
4.4	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	77
4.5	Инициация проекта	77
4.6	План проекта.....	80
4.7	Бюджет научного исследования	81
4.7.1	Основная заработная плата	83
4.7.2	Расчет потребляемого сырья.....	86
4.8	Реестр рисков проекта	87
4.9	Оценка сравнительной эффективности исследования	88
5	Социальная ответственность.....	93
5.1	Введение.....	93
5.2	Характеристика вредных и опасных факторов, имеющих место в лаборатории	93
5.3	Организационно-технические мероприятия по охране труда и технике безопасности.....	93
5.4	Организация мероприятий по электробезопасности.....	95
5.5	Общие требования безопасности при работе видеотерминалов и ПЭВМ	97
5.6	Мероприятия по обеспечению нормальных метеоусловий и санитарных норм на освещенность	101
5.7	Мероприятия по борьбе с производственным шумом	103
5.8	Мероприятия по пожарной безопасности.....	104
5.9	Выводы по разделу.....	105
	Заключение.....	106

Список использованных источников	108
Приложение А. Программный код модуля пользовательского интерфейса.....	114
Приложение Б. Программный код модуля обработки файлов с данными	127
Приложение В. Программный код модуля записи/чтения UTF-файла	132
Приложение Г. Программный код модуля 3D визуализации.....	136
Приложение Д. Программный код модуля построения графиков	146
Приложение Е. Презентация	на отдельных листах
Титульный лист	
Актуальность работы	
Цели и задачи	
Сравнительные характеристики существующих решений для обработки и визуализации данных	
Требования к функциям ПО	
Объект исследования	
Структура разработанного ПО	
Алгоритм работы ПО	
Алгоритм работы ПО	
Алгоритм работы ПО	
Алгоритм работы ПО	
Алгоритм работы ПО	
Графический интерфейс пользователя	
Графический интерфейс пользователя	
Графический интерфейс пользователя	
Графический интерфейс пользователя	
Проведение экспериментальных исследований	
Алгоритм эксперимента	
Результаты экспериментальных исследований	

Затраты на разработку
Результаты работы
Список публикаций
Диск CD-R..... в конверте на обороте обложки
643.ФЮРА.00004-01 81 01 Пояснительная записка ВКР. Файл
Кузнецов_ВКР.doc
643.ФЮРА.00004-01 81 01. Текст программы визуализации
экспериментальных данных. Файл REM_Viewer.docx
643.ФЮРА.00004-01 81 01. Текст содержимого UTF. Файл UTF.xml
Презентация к ВКР. Файл Кузнецов СГ_ВКР_ЭАФУ.pptx

ВВЕДЕНИЕ

Визуализация данных – процесс представления текстовой и числовой информации с помощью компьютерной программы в наглядном виде, которое представляется возможным благодаря использованию компьютерной графики [1].

Целью выпускной квалификационной работы является обеспечение визуализации экспериментальных данных получаемых в процессе компьютерного моделирования материалов.

Современные отрасли промышленности постоянно нуждаются в деталях, к которым предъявляются высокие требования по качеству, связанные с физико-механическими свойствами, геометрической точностью изготовления, шероховатостью поверхности и рядом других параметров. Все приведенные свойства, как известно, в определенной степени зависят от структуры материалов. Поэтому при исследовании процессов тепломассопереноса, процесса деформации и разрушения необходимо более адекватно учитывать структуру.

Компьютерное моделирование структуры материалов в настоящее время обладает высокой предсказательной способностью и большим потенциалом для дальнейшей разработки новых материалов с заданными свойствами и характеристиками [2, 3]. В основе такого моделирования лежат адекватные многоуровневые физические модели структуры и свойств материала и многомасштабный вычислительный подход с использованием методов квантовой химии и классических методов молекулярного моделирования [4, 5, 6].

					<i>643.ФЮРА.00004-01 81 01</i>		
Изм.	Лист	№ докум.	Подп.	Дата			
Разраб.	Кузнецов				<i>Введение</i>		
Пров.	Обходский						
Консульт.							
Н. контр	Ефремов						
Утв.	Горюнов						
						<i>Лит.</i>	<i>Лист</i>
							<i>Листов</i>
						<i>ТПУ ФТИ</i>	
						<i>группа 0711</i>	
						<i>17</i>	

Современные графические системы обладают достаточной производительностью для создания сложных анимационных и динамических изображений [7]. Компьютерная графика позволяет показать протекающие физические процессы наглядно, а численные методы позволяют менять различные физические параметры, помогая исследовать данные явления более широко [8]. Компьютерные технологии помогают акцентировать внимание на главном, что способствует более глубокому пониманию протекающего процесса. Известно, что информация, представленная в нескольких видах, воспринимается более эффективно [9, 10]. Анимационные модели позволяют в наглядном виде показать, как именно протекает моделируемый процесс. Также, следует отметить, что моделирование физических процессов с помощью компьютерной графики дает возможность более подробно изучить физический процесс, меняя его параметры и наблюдая, как изменится процесс. В свою очередь, кристаллическую структуру и пространственное распределение различных физических величин, полученных с помощью методов компьютерного моделирования, более удобно понимать в трехмерной интерпретации [11].

В последние годы происходит увеличение интереса исследователей к способам моделирования и методам предсказания кристаллических структур. Это объясняется тем, что алгоритмы предсказания могут быть использованы в решении ряда фундаментальных и прикладных проблем. Например, существование кристаллического полиморфизма [12] и твердофазных фазовых переходов [13] зависит от возможности существования различных кристаллических структур одного и того же химического соединения.

Визуализация структур на атомном уровне при анализе результатов теоретических исследований материала является необходимым инструментом, позволяющим как соединять разные уровни моделирования, так и сравнивать полученные результаты этих исследований с известными экспериментальными свойствами материалов [14, 15, 16]. Кроме того, графическое отображение атомно-молекулярной структуры материала, в первую очередь, взаимного расположения ядер атомов в пространстве, а также характеристик электронного

строения системы позволяет визуализировать области наиболее значительных изменений структуры в ходе тех или иных физических или химических процессов.

В современных научных и технических приложениях для сложной графической визуализации используется графическая библиотека OpenGL [17], которая на сегодняшний день является стандартом в области трёхмерной визуализации. Библиотека OpenGL представляет собой высокоэффективный программный интерфейс к графическому аппаратному обеспечению[18].

В данной выпускной квалификационной работе были поставлены задачи разработка структуры программы визуализации и алгоритмов ее функционирования, реализация разработанных алгоритмов программы визуализации на языке программирования C++ в среде программирования QT, проведение экспериментальных исследований функций и оценка характеристик программы визуализации экспериментальных данных автономно и в составе программного пакета моделирования материалов.

Работа выполнена в рамках проекта прикладных научных исследований и экспериментальных разработок на кафедре ЭАФУ при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации

1 Актуальность работы

1.1 Анализ существующих решений в области визуализации экспериментальных данных

В разделе предоставлено краткое описание проведенных при выполнении ВКР аналитических исследований. Представленные сведения необходимы для формирования общего предоставления об актуальности проведенной работы и используемых в проекте решениях.

Описанное в ВКР программное обеспечение визуализации экспериментальных данных, разработано в рамках проекта по созданию программного пакета компьютерного моделирования свойств материалов, который реализуется на кафедре №24 ТПУ. В процессе работы с программным пакетом моделирования материалов формируются гетерогенные данные, такие как: результаты экспериментов, данные о расчетных методах моделирования, расчетных параметрах, времени и месте проведения эксперимента, а также исследователях [19, 20]. Для более удобного восприятия и анализа указанной совокупности данных, необходимо их графическое представление, т. е. визуализация.

Одной из главных задач в области визуализации является предоставление пользователям средства для эффективного изучения данных и исследования новых значимых свойств и особенностей моделей и данных, которые нельзя понять с помощью классических методов анализа. На текущий момент создано большое количество программных пакетов трехмерной визуализации строения молекул как коммерческих, так и свободно распространяемых. Основной целью разработки подобных программ является понимание результатов экспериментальных и теоретических исследований.

					<i>643.ФЮРА.00004-01 81 01</i>			
<i>Изм.</i>	<i>Лист</i>	<i>№ докум.</i>	<i>Подп.</i>	<i>Дата</i>	<i>Актуальность работы</i>	<i>Лит.</i>	<i>Лист</i>	<i>Листов</i>
<i>Разраб.</i>	<i>Кузнецов</i>							
<i>Пров.</i>	<i>Обходский</i>							
<i>Консульт.</i>								
<i>Н. контр</i>	<i>Ефремов</i>							
<i>Утв.</i>	<i>Горюнов</i>							
						<i>ТПУ ФТИ группа 0711</i>		

Ключевым моментом исследования является анализ полученных в расчете свойств материала экспериментальных данных. Эта информация содержится в выходных файлах квантово-химических программ и представляет собой структурированные блоки определенного формата, которые очень проблематично воспринять просто в цифровом виде, поэтому их визуализация критически важна.

На сегодняшний день существует множество различных визуализаторов структуры молекул, а также кристаллических структур. Как правило, данные программы отличаются своим интерфейсом и инструментами для анализа результатов визуализации. При этом набор функциональных возможностей каждой из них развит для специфических задач, например, некоторые из них имеют в своем составе расчетные модули, позволяющие проводить оптимизацию геометрии молекул или кристаллов, а также проводить моделирование их структуры в зависимости от температуры.

Для сравнения различных видов программного обеспечения для обработки и визуализации экспериментальных данных необходимо рассмотреть каждое ПО в отдельности с точки зрения особенностей, достоинств и недостатков.

Сравнительные характеристики наиболее конкурентного ПО для обработки и визуализации данных, рассмотренных в данной главе приведены в таблице 1.1.

Пакет Accelrys Materials Studio (AMS) [21] разработан для специалистов в области вычислительных исследований в химии, материаловедении, нанофизике. Пакет AMS предоставляет различные инструменты для визуализации кристаллических структур и процессов кристаллизации, для исследования свойств полимеров, катализа и т. д. Materials Studio помимо визуализации включает множество расчетных модулей, с помощью которых можно проводить расчет атомной структуры кристалла или молекулы, молекулярную динамику, оптические и упругие свойства и другие. Программа позволяет быстро создавать сложные объекты и структуры, поверхности,

кристаллические массивы и редактировать их. Из основных недостатков можно выделить высокую стоимость программы, ограниченный набор импортируемых форматов, отсутствие конвертации данных в другие расчетные программы, выходящие за пределы Material Studio. Для визуализации структуры, полученной в результате квантово-химического расчета с помощью других расчетных программ, необходимо осуществлять преобразование выходной информации для ее восприятия, что также является препятствием для использования данного ПО в программном пакете моделирования свойств материалов.

Программный продукт Origin [22] является одним из наиболее мощных средств графического представления результатов. Этот пакет позволяет создавать двумерную и трёхмерную научную графику, а также оформлять их в соответствии с желанием автора. С помощью Origin можно проводить численный анализ данных, включая различные статистические операции, обработку сигналов и т. п., а также проводить математическую обработку результатов: искать зависимости в данных, проводить численное дифференцирование и интегрирование, осуществлять интерполяцию и экстраполяцию, проводить необходимые преобразования данных непосредственно в самой программе. Еще одним положительным моментом Origin является экспорт готовых графиков в различные форматы. Origin предлагает возможность сохранения в 17 форматах: Adobe Illustrator (AI), Bitmap (BMP), AutoCAD Drawing Interchange (DXF), Encapsulated Postscript (EPS), Graphics Interchange Format (GIF) и т. д. [23]. Для каждого из указанных форматов существует свой набор поддерживаемых опций. Но данный программный пакет не подходит для трехмерной визуализации структуры материала, т. к. не имеет данного функционала. Также данный пакет не позволяет проводить визуализацию распределений, зависящих от времени. Из этого следует, что, несмотря на все преимущества, данный продукт не может быть включен в состав программного комплекса моделирования материалов.

Таблица 1.1 – Сравнительные характеристики существующих решений ПО для обработки и визуализации экспериментальных данных

Название	Accelrys Materials Studio	Matlab	OriginLab	ChemCraft
Цена, р.	170 745	172 250	55 250	10 400
Кроссплатформенность	нет	есть	нет	есть
Возможности для интеграции	Связь с БД, Текстовые файлы	VB, Java, Mathcad, Maple V, Mathematica, .NET, MS Excel, текстовые файлы	LabView, DasyLab, LabWindows, MathLab, MathCad, текстовые файлы	GAMESS, текстовые файлы
Типы визуализируемых данных	x $x[]$ $x[][]$ $x[][][]$ $x[][][](x[])$	x $x[]$ $x[](x[])$ $x[][]$ $x[][](x[])$ $x[][][]$ $x[][][](x[])$	x $x[]$ $x[][]$ $x[][][]$	x $x[][][]$ $x[][][](x[])$

где x – отдельные числовые значения;

$x[]$ – одномерные массивы;

$x[][]$ – двумерные массивы;

$x[][](x[])$ – двумерные массивы, зависящие от одномерного массива;

$x[][][]$ – трехмерные массивы;

$x[][][](x[])$ – трехмерные массивы, зависящие от одномерного массива.

Более гибким инструментом для визуализации и обработки данных является программа MATLAB [24]. Достоинствами данного ПО являются универсальность, кроссплатформенность, расширенные возможности благодаря собственному языку программирования, наличие большого количества встроенных функций для обработки данных и их визуализации. Недостатки данного ПО заключаются в том, что использование данной системы предполагает наличие лицензии на использование этих программных средств у

разработчика, что требует финансовых затрат на приобретение данных программных продуктов. Также стоит отметить, громоздкость данного программного пакета, т.к. наличие большого количества не нужных для данной области функций значительно замедляет скорость работы приложения и ЭВМ в целом [25]. MathLab позволяет визуализировать все необходимые типы данных, но его сложность для не подготовленного пользователя, а также цена не позволяет использовать его в составе программного комплекса моделирования материалов.

ChemCraft позволяет обрабатывать выходные файлы множества квантово-химических программ. Это удобный инструмент для визуализации данные об атомной и электронной структуры, а также проведения редактирования и анализа результатов визуализации. Chemcraft не проводит свои расчеты, но может значительно облегчить использование распространенных квантовых пакетов химии [26]. Данная программа разрабатывалась как визуализатор атомной структуры материала и не позволяет проводить визуализацию двумерной графики.

1.2 Формирование требований к функциям и характеристикам программного обеспечения визуализации данных

По результатам анализа существующих решений разработки программного обеспечения были сформированы требования к функциям и характеристикам разрабатываемого программного обеспечения визуализации экспериментальных данных.

Разрабатываемое программное обеспечение должно обеспечивать:

- 1) Формирование метаданных эксперимента для программного пакета моделирования материалов.
- 2) Формирование транспортного файла с метаданными и результатами эксперимента.

- 3) Последовательный запуск компонентов программного пакета моделирования материалов в ходе эксперимента.
- 4) Функционирование на базе ЭВМ x86/x64 с минимальными техническими характеристиками:
 - a. частота процессора, ГГц – 1,5;
 - b. объем ОЗУ, Гб – 2;
 - c. объем ПЗУ Гб – 20;
 - d. видеоконтроллер, поддерживающий разрешение выводимого изображения, пикс. – не ниже 1280×720 и поддержкой OpenGL 2.0 и выше
- 5) Обработку массивов данных, содержащих информацию о положении атомов и их связях.
- 6) Визуализацию экспериментальных данных о структуре кристаллической решетки или молекул материала.
- 7) Визуализацию экспериментальных данных в формате отдельных массивов и зависимостей массивов.
- 8) Графическую настройку всех форм визуализации.

Разрабатываемое программное обеспечение должно соответствовать следующим характеристикам:

- 1) Кроссплатформенность;

Необходимо обеспечить пользователям с различными операционными системами без проблем запускать программное обеспечение на операционной системе предустановленной на ПЭВМ. Кроссплатформенность достигается путем выбора интегрированной среды разработки с возможностью компиляции приложения при помощи сторонних компиляторов, позволяющих создавать исполняемый файл, работающий на соответствующих операционных системах, либо при помощи внутренних компиляторов, имеющих аналогичные функции.

- 2) Интуитивно понятный интерфейс;

Интерфейс пользователя классифицируется как истинно графический двумерный интерфейс. В соответствии с этим, на данный вид интерфейса распространяются ряд стандартов ISO:

- а) ISO 9241-12-1998 – визуальное представление информации;
- б) ISO 9241-14-1997 – строка меню;
- в) ISO 9241-16-1998 – прямые манипуляции с объектами;
- г) ISO/IEC 10741-1995 – поведение курсора;
- д) ISO/IEC 11531-(1999-2000) – использование и соответствие иконок.

Также немаловажным аспектом является качество интерфейса пользователя, а именно его эргономический аспект. Качество характеризует содержание и полезность текста, в то время как стандартизованность – корректность. Все это установлено ГОСТ Р ИСО/МЭК 9126–93 и стандарта ISO 9241-10-98

3) Быстродействие и стабильность работы приложения;

Быстродействие программы достигается в создании лаконичного программного кода с использованием встроенных функций языка и отсутствием строк кода, выполняющих пустые действия, не влияющие на работу программы, но занимающие время на их выполнение. Стабильность работы достигается созданием бесконфликтного алгоритма программы и его корректной реализации, вследствие чего программа работает без ошибок и завершается в штатном режиме.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В данной части работы проводится оценка коммерческой ценности разрабатываемого программного обеспечения. Стоит помнить о том, что коммерческая привлекательность исследования зависит не только от технических характеристик полученного продукта, но и от того, насколько проект востребован, какова будет его стоимость и сколько времени потребуется для выхода на рынок. На эти вопросы призвана ответить экономическая часть данной работы.

Для определения конкурентоспособности продукта и направлений ее повышения большое значение имеет анализ конкурентных технических решений. Необходимо оценить их сильные и слабые стороны. Для этого может быть использована любая имеющаяся информация о продукте-конкуренте, которая может быть наглядно представлена в виде оценочной карты

Бк1 – программа визуализации Chemcraft, представляет собой графическую программу для работы с квантовохимическими расчетами и предоставляющую удобный интерфейс для просмотра и анализа расчетных файлов и различные утилиты для подготовки новых заданий. В основном программа разработана как средство визуализации выходных файлов GAMESS и Gaussian.

Бк2 – программный пакет Origin. Данный пакет является разработкой фирмы OriginLab Corporation и позволяет проводить численный анализ данных, а также создавать двумерную и трёхмерную научную графику.

					643.ФЮРА.00004 – 01 81 01				
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата					
Разраб.	Кузнецов				Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Лит.	Лист	Листов	
Провер.	Обходский								
Консульт	Меньшикова					ТПУ ФТИ Группа 0711			
Н. Контр.	Ефремов								
Утверд.	Горюнов								

Анализ конкурентных технических решений целесообразно проводить с помощью оценочной карты (таблица 4.1).

Таблица 4.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1 Повышение производительности труда пользователя	0,13	5	5	5	0,65	0,65	0,65
2 Удобство в эксплуатации	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
3 Надежность	0,1	3	3	4	0,3	0,3	0,4
4 Потребность в ресурсах памяти	0,05	4	4	2	0,2	0,2	0,1
5 Функциональная мощность	0,15	4	3	3	0,6	0,45	0,45
6 Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,08	4	1	1	0,32	0,08	0,08
Экономические критерии оценки эффективности							
7 Конкурентоспособность продукта	0,08	3	3	4	0,24	0,24	0,32
8 Уровень проникновения на рынок	0,06	2	3	4	0,12	0,18	0,24
9 Цена	0,1	2	4	3	0,2	0,4	0,3
10 Предполагаемый срок эксплуатации	0,05	4	4	4	0,2	0,2	0,2
11 Послепродажное обслуживание	0,08	3	2	4	0,24	0,16	0,32
12 Срок выхода на рынок	0,02	4	5	5	0,08	0,1	0,1
Итого	1	42	41	42	3,55	3,36	3,46

Из таблицы 4.1 можно сделать вывод о том, что наиболее важными параметрами являются Повышение производительности труда пользователя и как можно больший поддерживаемый функционал. Последнее делает программу универсальной, что является очень важным критерием оценки.

Коэффициенты конкурентоспособности разработки по отношению к аналогам будут равны:

$$K_1 = \frac{K_{\phi}}{K_{\kappa 1}} = \frac{3,55}{3,36} = 1,05, \quad (4.1)$$

$$K_2 = \frac{K_{\phi}}{K_{\kappa 2}} = \frac{3,55}{3,46} = 1,03. \quad (4.2)$$

Таким образом, разработанное программное обеспечение имеет практически равную конкурентоспособность по сравнению с аналогами. Однако, более широкие функциональные возможности разработки позволяют применять ее для визуализации в различных областях науки, что является преимуществом над конкурентами. Например, ChemCraft не позволяет проводить анализ и визуализацию кристаллов, а также проводить построение зависимостей массивов данных в виде графиков.

Помимо этого, уникальность разработки заключается в том, что разработанное решение предоставляет полный функционал для визуализации экспериментальных данных в рамках задачи моделирования материалов. Решение ориентировано на пользователей, которые не очень хорошо разбираются в методах моделирования и способах анализа результатов эксперимента.

Ценовая политика компаний-конкурентов позволяет продвинуть разработку на рынок небольших исследовательских центров и компаний.

4.2 SWOT-анализ

Для объективного оценивания конкурентоспособности и перспектив развития разработки необходимо проанализировать сильные и слабые стороны, а также угрозы и возможности, которые могут повлиять на разработку. SWOT-

анализ позволит сформировать направление, в котором необходимо работать, чтобы повысить конкурентоспособность научной разработки.

Для составления итоговой матрицы SWOT-анализа необходимо определить сильные и слабые стороны проекта, угрозы и возможности проекта, а также взаимную корреляцию между ними.

Сильными сторонами разрабатываемого ПО является: более низкая стоимость, чем у конкурентов, возможность визуализации различных типов данных в одном ПО, использование актуальных технологий, а также кроссплатформенность.

Слабыми сторонами разрабатываемого ПО являются зависимость от стороннего ПО, разработчики которого не являются партнерами.

Возможностями проекта является расширение поддерживаемого функционала, а также интерес со стороны потенциальных покупателей и инвесторов.

Угрозой данному проекту является большое количество конкурентных разработок, Изменения в лицензионных соглашениях используемого стороннего ПО.

Корреляция между сильными и слабыми сторонами проекта с возможностями и угрозами отображена в итоговой матрице SWOT-анализа (таблица 4.2)

Таблица 4.2 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С0. Стоимость ниже чем у существующих платных аналогов. С1. Интуитивно понятный для пользователя интерфейс С2. Возможность визуализации различных типов данных в одном ПО	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие опыта разработки и поддержания проектов подобного рода у разработчика Сл2. Зависимость от стороннего ПО,
--	--	---

	С3. Уникальные технические и программные решения С4. Использование актуальных технологий в основе проекта С6. Кроссплатформенность ПО С5 Платформа для новых научных исследований	разработчики которого не являются партнерами. Сл3. Недостаточность программно-технической документации для пользователей
Возможности: В1. Межвузовское сотрудничество В2. Дальнейшее финансирование Минобрнаукой разработки для развития В3. Проведение новых научных исследований В4. Интерес со стороны потенциальных покупателей и инвесторов В4. Расширение поддерживаемого функционала	Проект может получить серьезное развитие, итогами которого станут обширное внедрение разработки в наукоемких производствах, расширение функционала, технических возможностей.	Проект может использовать разработки других ведущих вузов, находящихся в взаимном соглашении, для компенсации зависимости от стороннего ПО. Использование спонсорской поддержки на компенсацию расходов, связанную с разработкой и поддержанием проекта.
Угрозы: У1. Большое количество конкурентных разработок У2. Сокращение финансирования в связи с оптимизацией расходов У3. Изменения в лицензионных соглашениях используемого стороннего ПО	Проект претерпит изменения в программной части, чтобы оставаться конкурентоспособным или будет временно заморожен до появления благоприятных условий для дальнейшего развития. Возможно слияние с другим проектом из данной области.	Существует риск закрытия проекта, из-за признания проектируемого решения недееспособным в следствие чего произойдет прекращение финансирования. Поиск инвесторов для дальнейшей поддержки финансирования.

4.3 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На любой стадии жизненного цикла проекта полезно оценивать степень его готовности к коммерциализации. Для этого необходимо оценить степень проработанности научного проекта и уровень имеющихся знаний у разработчика (таблица 4.3).

Таблица 4.3 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	3
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	3	2
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	5
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	5	3
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	2
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	1
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	2
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	2
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	4	1

Проработаны вопросы использования инфраструктуры получения льгот услуг поддержки,	5	2
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	5	2
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	2
Проработан механизм реализации научного проекта	5	3
ИТОГО БАЛЛОВ	62	40

Исходя из степени проработанности проекта, усреднив получившиеся расчеты перспективность разработки принимается средней. Тем не менее, в проект был обеспечен приток инвестиций, а недостаточная компетенция разработчика в области рыночных исследований, а также реализации данной продукции, компенсируются наличием в составе научной группы независимых лиц, активно занимающихся данными вопросами.

4.4 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Для успешной коммерциализации продукта используется инжиниринг. Клиенту предоставляется платное программное обеспечение, а также обеспечивается сопровождение программного обеспечения в целях поддержания работоспособности и актуальности предлагаемого товара

4.5 Инициация проекта

Инициация проекта состоит из процессов, которые выполняются для нового проекта или новой стадии проекта. Для этого определяются начальные

цели, содержание, фиксируются ресурсы. Также определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта.

Заинтересованные стороны проекта отображены в таблице 4.4.

Таблица 4.4 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
ТПУ	Создание и коммерческая реализация перспективной научной разработки; написание научных статей, с целью публикации в известных научных журналах для поднятия рейтинга ВУЗа
ТГУ	Участие в межвузовском сотрудничестве по созданию и внедрению научных разработок
Министерство образования и науки РФ	Создание и коммерческая реализация перспективной научной разработки; написание научных статей, с целью публикации в известных научных журналах для поднятия рейтинга российских ВУЗов.
Предприятия, ведущие разработки в области моделирования материалов	Использование ПО в научной деятельности предприятия; написание научных статей, с целью публикации в известных научных журналах с целью повышения рейтинга предприятия

В таблице 4.5 представлена информация о целях проекта, критериях достижения целей, а также требования к результатам проекта.

Таблица 4.5 – Цели и результаты проекта

Цели проекта:	Разработка программного обеспечения визуализации экспериментальных данных, функционирующего в составе программного комплекса по моделированию материалов
Ожидаемые результаты проекта:	Конкурентоспособное программное обеспечение для визуализации экспериментальных данных
Критерии приемки результата проекта:	Работоспособность программного обеспечения, технические характеристики, востребованность продукта на рынке
Требования к результату проекта:	Требование:
	Осуществление визуализации свойств материала в виде отдельных числовых значений, зависимостей в виде рядов значений
	Осуществление визуализации статических распределений, а также распределений, зависящих от времени
	Осуществление трехмерных визуализаций, описывающих структуру молекулы или ячейки кристалла
	Кроссплатформенность

Рабочая группа проекта отображена в таблице 4.6

Таблица 4.6 – Рабочая группа проекта

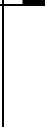
ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, ч
Обходский А.В., Кафедра ЭАФУ, доцент	Руководитель проекта	Организация работ, координация действий участников проекта	60

Кузнецов С.Г., Кафедра ЭАФУ, студент	Исполнитель по проекту	Анализ существующих программных продуктов, проведение патентных исследований разработка ПО, проведение экспериментов, составление технической документации.	492
ИТОГО:			552

4.6 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта, который может быть представлен в виде диаграммы Ганта. Календарный план в виде диаграммы Ганта представлен в таблице 4.7.

Таблица 4.7 – Диаграмма Ганта

Код работ ты (из ИСР)	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ														
				Окт				Ноя				Дек				Янв		
				1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3
1	Составление технического задания	Руководитель	7															
2	Анализ существующих программных продуктов	Инженер (дипломник)	7															
3	Патентные исследования	Инженер (дипломник)	7															

Средства на приобретение компьютера не затрачивались, т.к. он уже был в наличии. Необходимо рассчитать амортизационные отчисления для данного оборудования.

Норма амортизации:

$$H_a = \frac{1}{n} \cdot 100 = \frac{1}{5} \cdot 100 = 20 \%, \quad (4.3)$$

где H_a – норма амортизации в процентах;
 n – срок полезного использования в годах.

Годовая сумма амортизации:

$$A_r = \frac{F_n \cdot H_a}{100} = \frac{32000 \cdot 20}{100} = 6400 \text{ р.}, \quad (4.4)$$

где F_n – первоначальная стоимость.

Ежемесячная сумма амортизации:

$$A_m = \frac{A_r}{12} = \frac{6400}{12} = 633,3 \text{ р.}. \quad (4.5)$$

Амортизация за все время разработки:

$$A_{\text{разр}} = A_m \cdot 3,5 = 633,3 \cdot 3,5 = 2216,5 \text{ р.}. \quad (4.6)$$

4.7.1 Основная заработная плата

В данную статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников. Величина расходов определяется из

трудоемкости выполняемых работ. Расчет основной заработной платы представлен в таблице 4.9.

Основная заработная плата работника рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (4.7)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

$Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника;

$T_{\text{раб}}$ – продолжительность работ, выполняемых работником.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (4.8)$$

где $Z_{\text{м}}$ – оклад работника;

M – количество месяцев работы без отпуска в год;

$F_{\text{д}}$ – годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала.

Таблица 4.9 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер (дипломник)
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
– выходные дни	52	52
– праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
– отпуск	48	48
– невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	299	299

Далее была рассчитана среднедневная заработная плата для дипломника:

$$З_{\text{дн}} = \frac{З_{\text{м}} \cdot М}{F_{\text{д}}} = \frac{8320 \cdot 10,4}{299} = 289 \text{ р./день.} \quad (4.9)$$

Среднедневная заработная плата для руководителя:

$$З_{\text{дн}} = \frac{З_{\text{м}} \cdot М}{F_{\text{д}}} = \frac{27352 \cdot 10,4}{299} = 951 \text{ р./день.} \quad (4.10)$$

В результате основная заработная плата руководителя $З_{\text{осн}}$:

$$З_{\text{осн}} = З_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}} = 951 \cdot 10 = 9510 \text{ р.} \quad (4.11)$$

Основная заработная плата руководителя $З_{\text{осн}}$:

$$З_{\text{осн}} = З_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}} = 289 \cdot 82 = 23698 \text{ р.,} \quad (4.12)$$

где $T_{\text{раб}}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником.

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (4.13)$$

где $З_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент (30 % от $З_{\text{тс}}$);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2–0,5 (в НИИ за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15–20 % от $З_{\text{тс}}$);

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Итоговый расчет представлен в таблице 4.10.

Таблица 4.10 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_{б,}$ руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	$Z_{м,}$ руб.	$Z_{дн,}$ руб.	$T_{р,}$ раб. дн.	$Z_{осн,}$ руб.
Руководитель	26300	0,3	0,5	1,3	27352	951	10	9510
Инженер (дипломник)	8000	0,3	0,5	1,3	8320	289	82	23698

Дополнительная заработная плата $Z_{доп}$ рассчитывается исходя из 10–15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} = 0,1 \cdot 33208 = 3320 \text{ р.}, \quad (4.14)$$

где $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата, р.;

$k_{доп}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$Z_{осн}$ – основная заработная плата, р.

Отчисления во внебюджетные фонды рассчитываются:

$$\begin{aligned} C_{внеб} &= k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}) = \\ &= 0,3 \cdot (33208 + 3320) = 10958 \text{ р.}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды

Накладные расходы составляют 80–100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) =$$

$$= 1 \cdot (33208 + 3320) = 36528 \text{ р.} \quad (4.16)$$

4.7.2 Расчет потребляемого сырья

Основным потребляемым сырьем в данной научной разработке является потребление электроэнергии компьютером Acer Aspire 5750g, на котором велась разработка ПО. Для расчета стоимости потребляемой электроэнергии необходимо знать потребляемую мощность компьютером, время работы и текущий тариф на электроэнергию.

$$C_{\text{ээ}} = 6 \cdot D \cdot T \cdot M = 6 \cdot 82 \cdot 5,8 \cdot 0,15 = 428 \text{ р.} \quad (4.17)$$

где 6 – 6-часовой рабочий день;

D – продолжительность работ;

T – тариф на электроэнергию;

M – мощность, потребляемая ноутбуком.

Рассчитанные затраты на исследования и итоговая плановая себестоимость отображены в таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Затраты на разработку

Статьи	Сумма, тыс. р.
Сырье, материалы (электроэнергия)	0,43
Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ (амортизация)	2,21
Основная заработная плата	33,2
Дополнительная заработная плата	3,32
Отчисления на социальные нужды	10,96
Накладные расходы	36,53

Итого плановая себестоимость	86,65
------------------------------	-------

4.8 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты. Перечень возможных рисков приведен в таблице 4.12.

Таблица 4.12 – Реестр рисков

Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска *	Способы смягчения риска	Условия наступления
Низкое качество итогового продукта	Низкий спрос на готовый продукт	3	5	Высокий	Оптимизация программного кода, поиск и устранение ошибок в работе программы	Некомпетентность разработчика ПО, низкие знания в предметной области
Отсутствие заинтересованных потребителей на момент завершения проекта	Низкий спрос на готовый продукт, финансовые убытки	1	3	Низкий	Проведение рекламной компании, предоставление временной бесплатной лицензии образовательным учреждениям	Выход на рынок продукта от уже существующих на рынке предприятий
Преждевременное прекращение финансирования	Заморозка разработки до появления	3	3	Средний	Возможное слияние с другим проектом из данной области.	Признание заказчиком недееспособности проектируемого решения.

	благоприятных условий для дальнейшего развития .				Поиск дополнительных инвесторов	Сокращение финансирования в связи с оптимизацией расходов заказчика.
Выход из строя проектно-оборудования	Остановка разработки продукта	1	4	Низкий	Своевременное техническое обслуживание оборудования. Наличие запасного оборудования	Отсутствие технического обслуживания оборудования. Нарушение условий эксплуатации.
Невыполнение проекта в срок	Выплата разработчиком финансовых потерь заказчику	3	3	Средний	Увеличение числа разработчиков .	Некомпетентность разработчика ПО, низкие знания в предметной области. Невыполнение обязательств разработчиком

4.9 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности I_{ϕ}^P и ресурсоэффективности I_m^P .

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают I_{ϕ}^P в ходе оценки бюджета затрат для вариантов исполнения научного исследования. Для разрабатываемого приложения для визуализации затратами на разработку являются 86650 рублей. В качестве

аналогов выступает программный пакет Origin, стоимость лицензии которого составляет 55250 р.

Интегральный финансовый показатель разработки:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{86650}{55250} = 1,57. \quad (4.18)$$

Соответственно, интегральный финансовый показатель аналога будет равен:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{55250}{55250} = 1. \quad (4.19)$$

Показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения определяется как сумма произведений балла критерия на его оценку. Интегральный показатель ресурсоэффективности рассчитан в таблице 4.13.

Таблица 4.13 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1
1 Повышение производительности труда пользователя	0,13	5	5
2 Удобство в эксплуатации	0,1	4	3
3 Надежность	0,1	3	4
4 Потребность в ресурсах памяти	0,05	4	2
5 Функциональная мощность	0,15	4	3
6 Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,08	4	1

7 Конкурентоспособность продукта	0,08	3	4
8 Уровень проникновения на рынок	0,06	2	4
9 Цена	0,1	2	3
10 Предполагаемый срок эксплуатации	0,05	4	4
11 Послепродажное обслуживание	0,08	3	4
12 Срок выхода на рынок	0,02	4	5
ИТОГО	1	42	42

Интегральный показатель ресурсоэффективности текущего проекта:

$$I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p = 3,55. \quad (4.20)$$

Интегральный показатель ресурсоэффективности аналога:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a = 3,46. \quad (4.21)$$

Интегральный показатель эффективности разработки определяется по формуле:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\text{ф}}^p} = \frac{3,55}{1,57} = 2,26. \quad (4.22)$$

Интегральный показатель эффективности аналога определяется по формуле:

$$I_{\text{финр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a} = \frac{3,46}{1} = 3,46. \quad (4.23)$$

Сравнение интегральных показателей эффективности текущего проекта и аналога позволяет определить сравнительную эффективность проекта $\mathfrak{E}_{\text{ср}}$:

$$\mathfrak{E}_{\text{ср}}^{a1} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^a} = \frac{2,26}{3,46} = 0,65 \quad (4.24)$$

Результаты расчетов сравнительной эффективности проекта приведены в таблице 4.14.

Таблица 4.14 – Сравнительная эффективность проекта

Показатели	Аналог	Разработка
Интегральный финансовый показатель разработки	1	1,57
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,46	3,55
Интегральный показатель эффективности	3,46	2,26
Сравнительная эффективность проекта	0,65	

Как видно из таблицы, разработанное программное обеспечение имеет больший финансовый показатель чем у представленных аналогов. Однако, это компенсируется ресурсоэффективностью данной программы. Таким образом цена приложения не должна оказать большое влияние на спрос на рынке. Помимо этого, при достаточном спросе, установив цену на лицензию ниже

стоимости разработки, можно увеличить привлекательность продукта для покупателей.