

СРЕДСТВА АВТОМАТИЗАЦИИ РАЗРАБОТКИ УЧЕБНОГО КОНТЕНТА ПО ФИЗИКЕ И ХИМИИ ДЛЯ СОПРОВОЖДЕНИЯ МАССОВОГО ИНДИВИДУАЛИЗИРОВАННОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Сычев С.В.¹, Чирцов А.С.¹

¹Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Аннотация

В статье рассматривается базовая структура и варианты программной реализации электронных конструкторов компьютерных моделей для естественнонаучного образования. Обсуждаются принципы физического объектно-ориентированного моделирования (PhOOM) — подхода для создания электронных образовательных приложений для изучения естественных наук. Приведены примеры реализации этого подхода для курсов физики и химии. Подход является элементом MOOC-технологии, специфика которого позволяет легко адаптировать образовательную среду к нужной задаче. Дальнейшая разработка подхода — это развитие систем автоматизированной генерации задач с элементами исследований, основанных на моделировании в реальном времени, для продвинутых курсов физики плазмы. Этот подход позволяет объединить в одном интерактивном и легко управляемом пользователем электронном продукте генерацию электронной модели явления и создание тестовой задачи с целью разработки многоуровневого контента для индивидуализированного естественнонаучного образования.

Ключевые слова: *физическое объектно-ориентированное моделирование (PhOOM), on-line образование, физика, химия, индивидуализированное образование, автогенерация тестов, автоматизация образования.*

Цитирование: Сычев С.В., Чирцов А.С. Средства автоматизации разработки учебного контента по физике и химии для сопровождения массового индивидуализированного образования // Компьютерные инструменты в образовании. 2017. № 1. С. 45–60.

1. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКОГО ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ (PhOOM) ДЛЯ СОПРОВОЖДЕНИЯ СОВРЕМЕННОГО УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Интенсивное развитие компьютерных и информационных технологий сопровождается их активным проникновением практически во все области человеческой деятельности и сегодня уже создает предпосылки для создания средств автоматизации не только в традиционной сфере физического труда, но и в ряде областей интеллектуальной деятельности, требующих творческого подхода. Сказанное в полной мере относится к образованию, активные работы по компьютеризации которого путем разработки электрон-

ных средств, нацеленных на замену традиционных подходов практически во всей номенклатуре весьма разнообразных видов учебной и преподавательской деятельности. Одновременно с началом широкого использования вычислительной техники в многочисленных прикладных областях практической деятельности возникло понимание того, что компьютеры могут быть использованы не только для осуществления вычислений и планирования, но и для интенсификации такой глубоко человеческой и личностной сферы, как образование. Пионером и идейным вдохновителем в данной сфере можно смело назвать американского архитектора и изобретателя Ричарда Бакминстера Фуллера (англ. Richard Buckminster Fuller), который ввёл термин «автоматизация образования» в одноименной работе «Education Automation» [1]. В ней Р.Б. Фуллер указывает, что «существуют веские основания полагать, что ничто не предвещает таких впечатляющих успехов в будущем, как предстоящая перестройка образовательного процесса», и там же отмечает, что «с неизбежностью грядёт всеобщая автоматизация», и увязывает это с ожидаемой «революцией в сфере образования», которую он связывает с электронными средствами коммуникаций.

Подтверждением его предвидения могут служить происходящие сегодня процессы в сфере образования [2].

Спектр мнений участников образовательного процесса относительно целесообразности его компьютеризации и автоматизации был и остается до сегодняшнего дня весьма широким и простирающимся от полного неприятия до призывов к полному переходу на электронные аналоги во всех видах учебной деятельности. Еще на первых этапах компьютеризации образования в России был предложен подход, согласно которому работам по внедрению электронных средств в любую из составляющих образовательного процесса должно предшествовать четкое понимание конкретных преимуществ в использовании этих средств по сравнению с традиционными методами [3].

Долгое время в предметной области преподавания естественных наук указанному критерию в наибольшей степени соответствовало компьютерное моделирование изучаемых процессов, сочетавшее в себе преимущества экспериментально и теоретически ориентированных методов обучения [4]. К концу 90-х годов в России был создан ряд пакетов учебных программ, моделирующих физические процессы. Их содержательное и методическое наполнение по-видимому до сих пор не имеет аналогов в мире [5–7].

Следующим этапом развития электронных средств обучения этого типа был логически естественный переход к электронным конструкторам виртуальных физических систем, основные идеи построения и использования которых вместе с действующим программным макетом были предложены еще в эпоху создания первых учебных моделирующих программ [8].

Настоящая работа посвящена краткому обзору итогов реализации программы создания ориентированных на использование в предметном обучении простых в эксплуатации электронных конструкторов виртуальных физических систем, путем развития апробированных идей и их интеграции в область создания аналогичных электронных ресурсов для поддержки преподавания химии.

2. РАЗАБОТКА И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ КОНСТРУКТОРОВ ВИРТУАЛЬНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА БАЗЕ ФИЗИЧЕСКОГО ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящее время в предметной области физического образования имеется несколько работоспособных электронных конструкторов. Большинство из них представляют собой ресурсоемкие программные комплексы (см., например, [9–13]), работа с которыми

подразумевает предварительное обучение пользователя внутреннему языку и интерфейсу и/или привлечение специально подготовленных специалистов [14–18]. Созданная же в рамках идеологии [8] современная Java-версия электронного конструктора виртуальных физических систем не требует установки дополнительного программного обеспечения и допускает работу в on-line режиме в сети неподготовленных пользователей как в форме активного использования (с изменением параметров) уже готовых компьютерных экспериментов, так и в режиме разработки собственных оригинальных моделей [19]. В отличие от подавляющего большинства аналогов, рассматриваемый конструктор допускает использование для углубленного изучения физики, что обеспечивается наличием в нем таких программных объектов, как релятивистские частицы, силы радиационного трения, поля произвольных пространственно-временных конфигураций, настраиваемые пользователем законы взаимодействия (рис. 1).

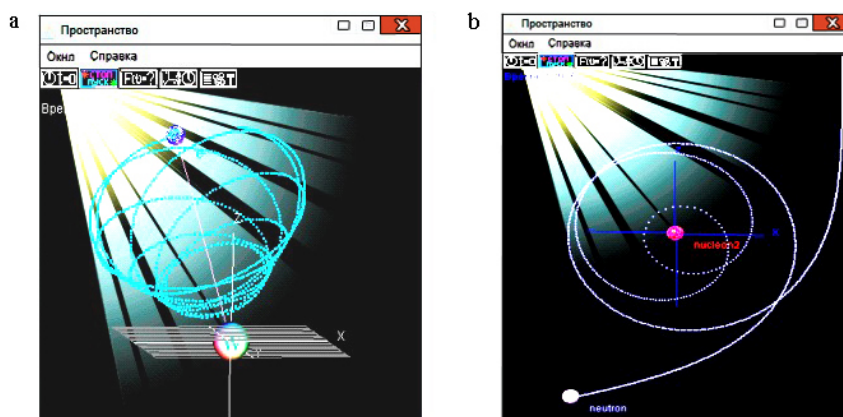


Рис. 1. Примеры использования возможности переопределения законов взаимодействия между объектами: *a* — демонстрация гипотетической системы «электрон в поле неподвижного магнитного монополя с положительным электрическим зарядом»; *b* — одна из возможных форм движения в поле ядерных сил, соответствующих потенциалу Юкавы

Новыми неоспоримыми преимуществами электронных конструкторов виртуальных физических систем является их простая адаптация к различным учебным программам и индивидуальным замыслам преподавателей; возможность демонстрации поэтапного приближения теоретических моделей к реальности (рис. 2); возможность демонстрации эволюции во времени сложных физических систем, аналитическое описание которых затруднено или невозможно (рис. 3); обеспечение активных форм обучения с привлечением учащихся к поисковой творческой работе, вплоть до организации самостоятельных мини-исследований; возможность использования для проверки и корректировки вариантов теоретического описания систем с элементами эвристического поиска; визуализация и количественный анализ новых моделей, экспериментальная проверка которых затруднена.

Еще одной важной особенностью рассматриваемого электронного конструктора является автоматическое генерирование программой адаптивных алгоритмов расчета эволюции описываемых в конфигурационных файлах-сценариях или задаваемых пользователем систем (см. пример на рис. 3а). Именно эта особенность позволяет использовать конструктор как средство автоматизации разработки нового электронного учебного контента, являющегося необходимой составляющей для решения весьма амбициозной, но становящейся технически осуществимой задачи использования электронных средств для организации массового индивидуализированного обучения.

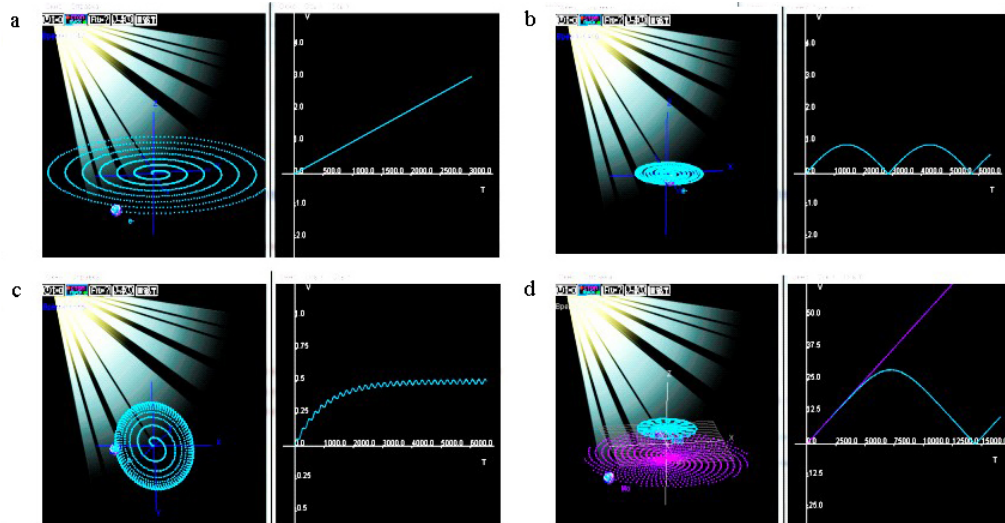


Рис. 2. Пример серии интерактивных компьютерных демонстраций зависимости результатов расчета движения заряженной частицы в ускорителе от выбора описывающей систему физической модели: *a* — классическое движение в настроенных в резонанс постоянном магнитном и переменном электрическом поле, *b* — нарушение резонанса, *c* — учет эффектов радиационного трения, *d* — учет релятивистских эффектов

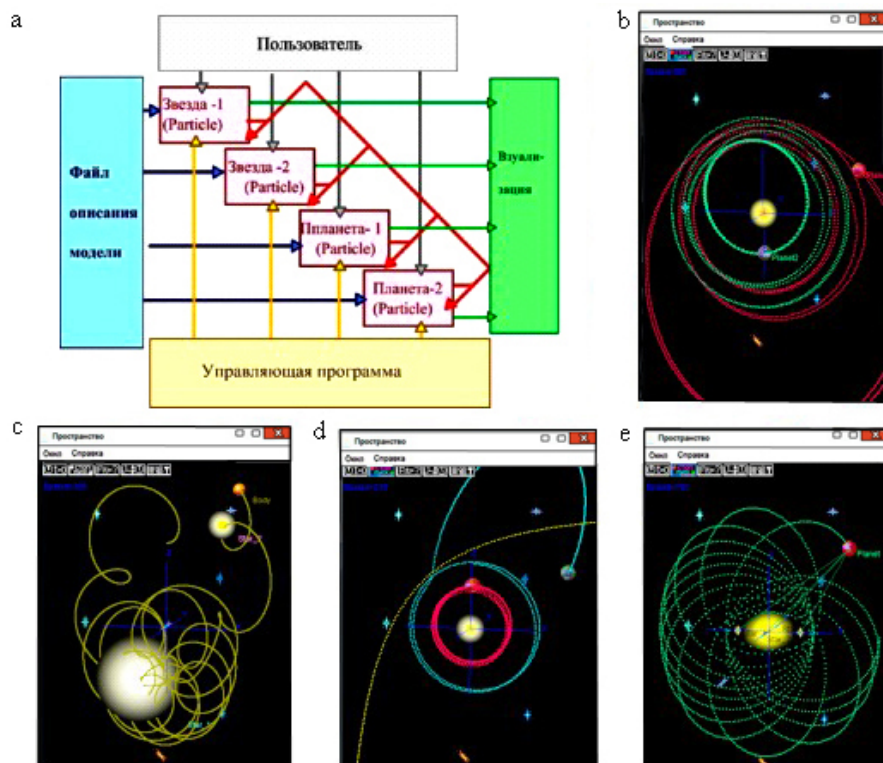


Рис. 3. Возникающий в результате работы конструктора виртуальных систем адаптированный алгоритм (*a*) серии интерактивных компьютерных демонстраций, иллюстрирующих варианты движений под действием гравитационных сил, не описываемых законами Кеплера: *b* — взаимное возмущение орбит спутников, *c* — периодический перезахват спутника компонентами двойной звезды, *d* — возмущение орбиты спутника внешним для планетной системы объектом, *e* — прецессия орбиты спутника сжатой собственной вращением звезды

Электронный конструктор [19] нашел применение как в очном обучении в средних и высших учебных заведениях для сопровождения теоретических курсов [20, 21] и организации самостоятельной работы учащихся [22], так и в удаленном обучении, осуществляемом в форме созданных на его базе семи электронных учебников [23] и online интернет-курсов, создаваемых в ставшем популярным на мировом уровне MOOC-формате. Совокупность идей в области методологии использования, алгоритмов функционирования, архитектуры и программной реализации простых и удобных для предметного обучения физике электронных конструкторов получила название «Физического объектно-ориентированного моделирования» (PhOOM) [24]. PhOOM существенно отличается от широко используемого «Объектно-ориентированного моделирования» (ООМ-подхода), основанного на использовании весьма универсальных, но сильно формализованных понятий, требующих от пользователя специальной предварительной подготовки. Если в основе моделей, создаваемых в рамках ООМ, лежат определяемые проектировщиком алгоритмы функционирования моделируемой системы как целого (что требует знания теоретических методов описания всего комплекса включаемых в систему объектов), то в рамках PhOOM подобные априорные знания не требуются. Глобальный алгоритм моделирующей программы представляет собой простой цикл по времени, последовательно передающий фокус активности всем программным объектам, составляющим построенную систему. Каждый из «элементарных» объектов осуществляет опрос способных к взаимодействию с ним объектов об их состояниях и на основе полученной информации и в соответствии со своими внутренними алгоритмами вырабатывает тактику своего поведения на текущем временном интервале эволюции системы. Внутренние алгоритмы элементов систем прописываются создателями конструкторов и опираются на физические законы, надежно установленные для простых объектов. Это обеспечивает наличие определенного эвристического потенциала у конструкторов, созданных в рамках PhOOM-идеологии. При желании пользователь может корректировать эти законы, но в этом случае ответственность за корректность результатов моделирования полностью ложится на него.

Принципиальная возможность использования PhOOM моделирования для эвристического анализа эволюции во времени относительно сложных систем может быть проиллюстрирована на почти хрестоматийном примере падения с заданной высоты небольшого шарика на упругую пружину с нулевой массой. Большинство численных моделей [14, 25] описанной тестовой системы строится в виде суперпозиции двух элементарных моделей свободного падения тела и его движения в упругой среде при наличии сил тяжести. Иногда в рассмотрение включаются возможности мгновенных упругих отскоков от полностью сжатой пружины. Очевидно, что в таком случае движение падающего тела оказывается периодическим, а его механическая энергия — сохраняющейся во времени.

Создаваемая же с помощью PhOOM-конструктора более реалистичная модель пружины в виде набора упруго соединенных между собой звеньев (например, 8) малой (но конечной) массы указывает на недостаточное соответствие физической реальности широко используемой модели пружины в виде упругой линейной среды. В результате взаимодействия с шариком в пружине возбуждаются различные моды собственных колебаний, и пружина начинает совершать сложные многомодовые колебания и прыгать, упруго сталкиваясь с поверхностью земли или/и рассматриваемым шариком. При достижении равновесия шарик практически останавливается на некоторой высоте, сохранив около 1/8 исходной энергии и отдав остальную часть поддерживающей его пружине. Последняя совершает сложное движение между опорной поверхностью и шариком. Конечная энергия пружины колеблется в районе 7/8 от исходной энергии шарика в полном соответствии с равномерным распределением энергии по степеням свободы.

Многолетний опыт использования PhOOM-конструкторов физических моделей демонстрирует большое количество аналогичных примеров реализации эвристических возможностей интерактивных моделей в механике, электродинамике и оптике, подробное описание которых может составить тему отдельной публикации.

В рамках описанного подхода удалось реализовать электронные конструкторы, позволяющие создавать модели практически по всему курсу классической физики: «Частицы в силовых полях», «Визуализатор конфигураций электромагнитных полей сложных источников», «Лучепостроитель» и «Генератор дифракционных картин». С их помощью на сегодняшний день создано более 500 учебных моделей, результаты работы которых полностью соответствуют априорным теоретическим представлениям в тех случаях, когда последние имелись.

Естественным развитием идей создания простых в использовании электронных конструкторов на базе физического объектно-ориентированного моделирования и автоматической генерации адаптивных алгоритмов моделирования физических процессов является переход к моделированию изучаемых в рамках химии систем следующего уровня сложности.

3. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В РАМКАХ PhOOM

Идея о возможности создания основанных на PhOOM электронных конструкторов для обучения химии возникла после того, как на базе конструктора «Частицы в силовых полях» были созданы серии работоспособных 3d-моделей поведения идеального газа.

Возможностей современного персонального портативного компьютера оказалось достаточно для обеспечения устойчивой работы PhOOM-модели идеального газа, состоящего из нескольких сотен частиц, в реальном времени лекционной демонстрации. Следует признать успешным и опыт создания простейшей модели неидеального газа — ансамбля способных вращаться и совершать колебания «классических электрических диполей», помещенных во внешнее электрическое поле (рис. 4).

Переход от описанных моделей к конструированию полноценных химических систем сопряжен с рядом принципиальных проблем. Во-первых, алгоритмы поведения элементарных объектов систем классической физики (частиц) основывались на весьма простых уравнениях классической динамики:

$$m_j \frac{d^2 \mathbf{r}_j}{dt^2} = \mathbf{F}_{j\Sigma}, \quad \mathbf{F}_{j\Sigma} = m_j \mathbf{g}(\mathbf{r}_j, t) + q_j \mathbf{E}_j(\mathbf{r}_j, t) + \frac{q_j}{c} \left[\frac{d\mathbf{r}_j}{dt}, \mathbf{B}(\mathbf{r}_j, t) \right] - \eta \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} + \sum_{j' \neq j} k(r_j - r_{j'}) \quad (1)$$

или их релятивистском аналоге:

$$\frac{d\mathbf{p}_j}{dt} = \mathbf{F}_{j\Sigma}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{F}_{rad}, \quad \mathbf{p}_j = \frac{m_j \mathbf{v}_j}{\sqrt{1 - (v_j/c)^2}},$$

где m_j и q_j — масса и заряд частицы с текущим номером j ; $\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j, \mathbf{p}_j, \mathbf{F}_{j\Sigma}$ — соответственно ее радиус-вектор, скорость, импульс и воздействующая суммарная сила, определяемая гравитационным (\mathbf{g}), электрическим (\mathbf{E}) и магнитным (\mathbf{B}) полями, вязким трением (η) и упругими взаимодействиями (k). Учитываемые при моделировании поля вычисляются как суммы задаваемых при конструировании системы внешних полей и дополнительных вкладов партнеров частицы по взаимодействиям:

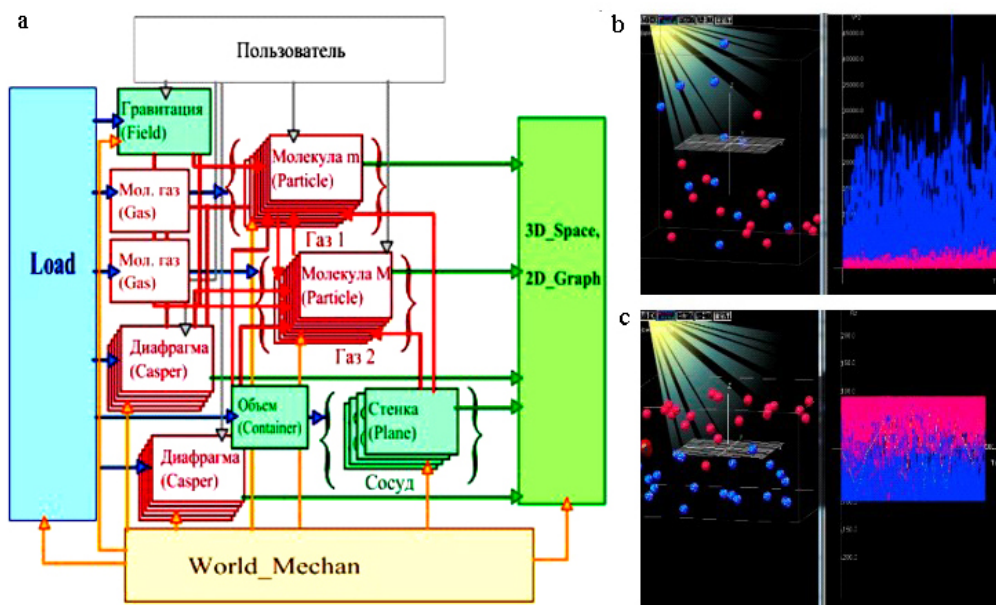


Рис. 4. Алгоритм для серии компьютерных моделей поведения ансамбля способных совершать колебания «классических мягких диполей» во внешнем электрическом поле (а) и соответствующие интерактивные модели: *b* — поляризация твердого диэлектрика, *c* — поляризация газа из полярных молекул

$$\mathbf{g}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{g}^{(внеш)}(\mathbf{R}, t) - \sum_{j' \neq j} G \frac{m_{j'}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_{j'}|^3} (\mathbf{R} - \mathbf{r}_{j'}),$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{E}^{(внеш)}(\mathbf{R}, t) - \sum_{j' \neq j} \frac{q_{j'}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_{j'}|^3} (\mathbf{R} - \mathbf{r}_{j'}), \quad (2)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{B}^{(внеш)}(\mathbf{R}, t) + \sum_{j' \neq j} \frac{q_{j'}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_{j'}|^3} \left[\frac{v_{j'}}{c}, (\mathbf{R} - \mathbf{r}_{j'}) \right].$$

В результате поведение всех основных элементов системы оказывается строго детерминированным, а соответствующие алгоритмы сводятся к простым вычислениям по формулам (2) и решению по методу Рунге-Кутты обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого порядка (1).

В случае же моделирования химических процессов поведение элементов системы оказывается существенно вероятностным и многовариантным. Расчет его количественных характеристик представляет собой нетривиальную задачу квантовой химии.

Во-вторых, традиции предметного обучения химии, как правило, требуют получения результатов не на языке микромоделирования, демонстрирующего поведении системы на молекулярном уровне, а в рамках формализма усредненных макроскопически сглаженных решений для концентраций. Последнее в случае пространственно однородных сред требует решения систем уравнений баланса

$$\frac{dn_j}{dt} = \sum_{pq i} (k_{pq-ij} n_p n_q - k_{ij-pq} n_i n_j)$$

для концентраций учитываемых в химическом процессе типов молекул n_j , вероятности взаимопревращений которых характеризуются константами скоростей $K_{pq \rightarrow ij}$ соответствующих «элементарных» химических процессов ($p + q \rightarrow i + j$).

Перечисленные особенности требуют существенного упрощения постановки задач моделирования химических процессов, ориентированной на задачи визуализации механизмов изучаемых явлений и автоматизацию разработки учебного контента. Первый этап реализации описанной задачи к настоящему времени может считаться реализованным.

4. КОНЦЕПЦИЯ И ПУТИ РАЗРАБОТКИ КОНСТРУКТОРА ЭЛЕКТРОННЫХ МОДЕЛЕЙ ПО ШКОЛЬНОМУ КУРСУ ХИМИИ

Особенностью преподавания химии в рамках начальных курсов для средних учебных заведений (примерно соответствующего уровню K-12 в США) является практический отказ от рассмотрения взаимодействия молекул веществ, участвующих в химической реакции, в форме многоканального вероятностного процесса и использование модели, предполагающей детерминированное поведение микрообъектов по сценариям, соответствующим наиболее вероятным каналам химических реакций. Это позволяет сформулировать концепцию заведомо упрощенного конструктора моделей химических процессов, построение которого возможно на базе уже имеющегося PhOOM-конструктора классических систем взаимодействующих между собой частиц. В отличие от используемых в имеющихся версиях алгоритмов обработки столкновений, соответствующих приближению упругих сфер, в химическом варианте конструктора столкновения частиц («молекул» или «атомов») должны приводить к рождению новых, соответствующих одноканальному описанию реакции объектов, сопровождающихся исчезновением исходных. Основной сложностью на этом пути является создание корректных, с точки зрения курса начальной химии, алгоритмов взаимопревращений молекул, которые должны быть приписаны классам объектов, дочерних по отношению к уже используемым «классическим частицам».

К настоящему времени требуемый алгоритм уже разработан и используется во внедряемом в учебную практику программном продукте ChemGenerator, предназначенном для автоматизации создания задач по химии [26, 27].

ChemGenerator прошел апробацию в процессе создания сборника задач по химии [27, 28], включающего как количественные, так и качественные вариации заданий и охватывающего практически все темы начального курса неорганической химии.

В качестве исходных данных программа использует пять баз-таблиц (рис. 5):

1. Периодическую таблицу элементов, содержащую сведения о названиях элементов, электронной конфигурации атомов, допустимых степенях окисления и т. д.
2. Таблицу катионов, содержащую 162 катиона, простых, например Fe^{3+} , Cu^{2+} , и более сложных, например UO_2^{2+} .
3. Таблицу анионов, содержащую 139 анионов, простых, например SO_4^{2-} , и комплексных, таких как гексацианоферрат (II) — ион — $[Fe(CN)_6]^{4-}$.
4. Таблицу растворимости, построенную для большинства веществ, полученных комбинацией катионов и анионов, содержащихся в двух предыдущих таблицах, общим числом более 22000.
5. Таблицу плотностей растворов солей, содержащую зависимости плотности растворов от концентрации для основных солей, используемых в учебных лабораториях, таких как $NaCl$, KNO_3 , $Ca(NO_3)_2$ и другие.



Рис. 5. Иерархия баз данных, описывающих химические свойства веществ

Основной особенностью программы является оригинальный алгоритм, связывающий отдельные таблицы в единый объект, отображающий вещество и выражающий в цифровом виде те свойства и характеристики, которые приписываются веществу в начальном курсе химии. Суть его заключается в следовании номенклатурному принципу химии, который в неявном виде выделяет электроотрицательную часть вещества (расположенную в начале составного названия), и электроположительную, расположенную во второй части названия. Наглядным примером такого принципа может служить $NaCl$ — хлорид натрия. На рис. 6 представлена схема работы этого алгоритма. В ходе формирования объекта-вещества для него определяются следующие параметры: название, формула, молярная масса, эквивалент, составляющие ионы.

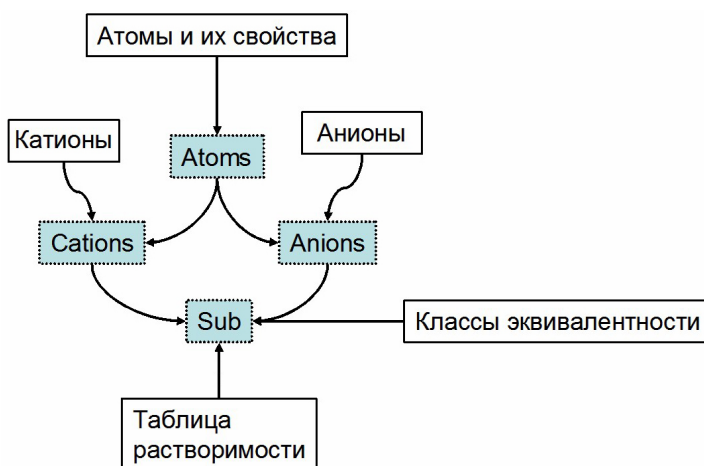


Рис. 6. Принципиальная схема алгоритма формирования свойств вещества

Указанная структура вещества позволяет описывать реакции с помощью шаблонов реакции, что, в свою очередь, приводит к тому, что, создав шаблон реакции, можно задать значительное количество сходных по типу и сложности реакций, указав эквива-

лентные группы, участвующие в этих реакциях (примером таких групп могут быть анионы кислот и металлы в реакциях вытеснения водорода или металлы и газы окислители в реакциях соединения). Данный алгоритм представлен на рис. 7.

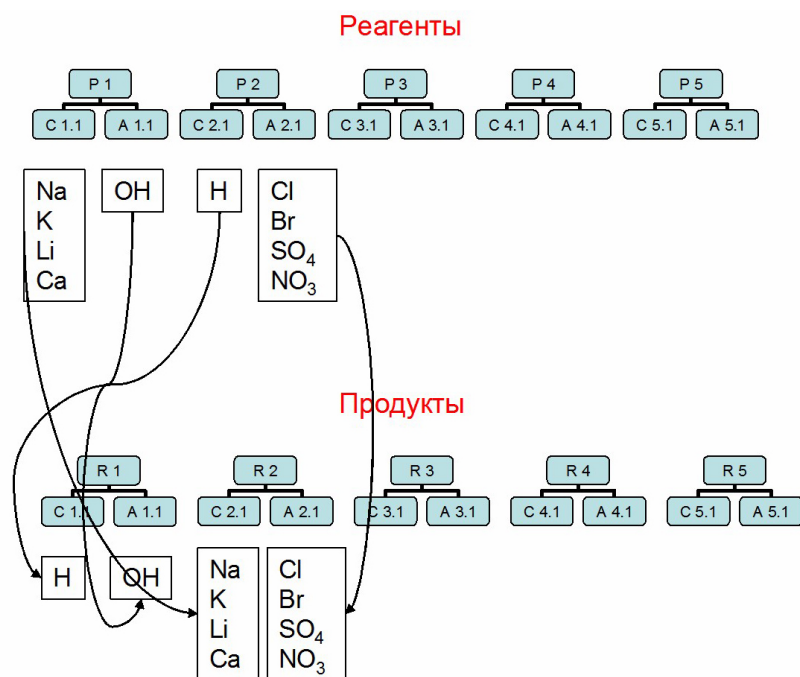


Рис. 7. Идея алгоритма выбора шаблона химической реакции

Использование компьютера при расчёте коэффициентов реакции (а также других параметров реакции и веществ, таких как массы, объёмы и т. д.) позволяет при проверенном и оттестированном алгоритме избежать ошибок вычисления. Шаблоны в программе варьируются от простых (для реакций соединения, разложения и обмена) до более сложных (например, для окислительно-восстановительных реакций).

Объединение идей PhOOM и разработанных на их базе конструкторов с описанным алгоритмом представляется весьма перспективным направлением работ по дальнейшему развитию средств автоматизации школьного образования в интересах его индивидуализации.

5. РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗОРАЗРЯДНЫХ СРЕДАХ КАК ПЕРВЫЙ ЭТАП РАБОТ ПО СОЗДАНИЮ ЭЛЕКТРОННЫХ СРЕДСТВ УЧЕБНО-НАУЧНОГО НАЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ХИМИИ И АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ

Стратегическая идея использования электронных средств для индивидуализации образования подразумевает разработку ресурсов не только для обучения по минимальным базовым программам, но и контента для углубленного («элитарного») образования, доступного для групп наиболее способных и мотивированных обучающихся вне зависимости от их социального статуса и мест проживания. Современные тенденции развития «элитарных» форм учебного процесса во многом ориентированы на привлечение наи-

более успешных учащихся к участию в научно-исследовательском процессе. Основным препятствием на этом пути является недостаточный уровень подготовки молодых исследователей в выбранной и смежных с ней дисциплинах в сочетании с административно-экономическими проблемами организации очного индивидуального обучения. В такой ситуации создание электронных средств поддержки самообразования и частичной автоматизации научных исследований, по-видимому, оказывается безальтернативным.

В [29] предлагается вариант и обсуждается первый опыт приближения учебных лабораторных работ к научным исследованиям путем дополнения их компьютерным практикумом моделирования экспериментально изучаемой системы. В качестве тестового объекта использовалась стандартная учебная работа «Изучение тлеющего разряда в воздушной смеси при пониженных давлениях», изначально ориентированная на знакомство учащихся с тлеющим разрядом в газе лишь на качественном (а не количественном) уровне. Дополнение экспериментальной работы численным моделированием газового разряда в рамках простейшей одномерной полуаналитической модели [30] сразу превратило ее в средство для организации практикума учащихся, полноценное выполнение заданий которого привело к результатам, представляющим определенный интерес для физики нелокальной плазмы [31]. Полученные систематические расхождения результатов моделирования электрических параметров многокомпонентной плазмы тлеющего разряда в воздухе с расчетами по стандартной широко используемой на практике модели поставили задачу перехода к более детальному микромоделированию нелокальной плазмы воздушного разряда, осуществляемому на базе гидродинамического подхода [32], учитывающего искусственно ограничиваемый набор элементарных процессов в объеме газового разряда.

Соответствующее моделирование нелокальной плазмы осуществлялось для двумерного приближения в результате решения системы дифференциальных уравнений, выражающих законы сохранения числа частиц, учитываемых в модели компонент плазмы:

$$\begin{cases} \frac{\partial n_j^{(\Sigma)}}{\partial t} = \sum_{p,q,j'} k_{p+q \rightarrow j+\{j'\}}^{(+)} n_j n_p - \sum_{p,j'} k_{p+q \rightarrow \{j'\}}^{(+)} n_j n_p - (\nabla, \mathbf{J}_j^{(\alpha)}), \\ \mathbf{J}_j^{(\alpha)} = -D_j \nabla n_j^{(\alpha)} + \mu_j q_j n_j^{(\alpha)} \mathbf{E}, \end{cases} \quad (3)$$

аналогичные законы сохранения их энергий T_j :

$$\begin{cases} \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (n_j T_j) + (\nabla, \mathbf{Q}_j) + q_j (\mathbf{E}, \mathbf{J}_j) = S_{T_j}^{(elastic)} + S_{T_j}^{(inelastic)}, \\ \mathbf{Q}_j = -\left(\frac{5}{2} D_j\right) \nabla (n_j T_j) + \left(\frac{5}{2} \mu_j\right) \mathbf{E} n_j T_j, \end{cases} \quad (4)$$

и связь между напряженностью электрического поля \mathbf{E} , потенциалом φ и плотностью заряда, вычисляемую как сумму произведений концентраций n_j частиц всех сортов на их заряды q_j :

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad \Delta \varphi = -4\pi \sum_j q_j n_j. \quad (5)$$

В уравнениях (2–4) учтены процессы переноса, описываемые потоками частиц \mathbf{J}_j и энергий \mathbf{Q}_j , возникающими в результате диффузии и дрейфа под действием сил электрического поля (коэффициенты D_j и μ_j соответственно), и процессы взаимопревращений включенных в модель частиц (электронов, фотонов, атомов, молекул и их ионов в различных квантовых состояниях), вероятности которых характеризуются константами

скоростей k , а скорости сопровождающих эти процессы выделения или поглощения тепловой энергии задаются параметрами S .

Процедура построения и численного решения системы уравнений (2–4), соответствующей формулируемой пользователем плазмохимической модели и задаваемой им геометрии разрядного промежутка, в значительной степени автоматизирована и после появления плазменного модуля профессиональной среды численного моделирования *Comsol* оказалась в принципе доступной для лиц, не владеющих техникой решения систем дифференциальных уравнений в частных производных.

Что же касается выбора значений констант скоростей плазмохимических реакций, входящих в систему уравнений (3–5), то эта проблема представляет собой отдельную задачу, возникающую при формализации физической модели. Имеющихся в литературе данных такого рода, как правило, оказывается недостаточно для построения даже заведомо упрощенных, но физически непротиворечивых (замкнутых) гидродинамических моделей плазмы. В описанной ситуации возрастает потребность в простых и надежных средствах теоретического расчета вероятностных характеристик элементарных процессов в плазме, ресурсоемкость которых допускает проведение систематических вычислений для большого числа процессов, включаемых в модели. В случае играющих наиболее важную роль в физике газового разряда взаимодействий атомов и молекул с бесструктурными частицами (электронами и фотонами) приемлемую точность для рассматриваемого класса задач обеспечивает Борновское приближение, основанное на использовании первого порядка теории возмущений, в котором вызывающие переходы частицы описываются с помощью плоских волн [33]. Построение необходимых для расчета борновских сечений волновых функций многоэлектронных атомов и молекул также требует использования ресурсоемкого метода Хартри-Фока [34] или его упрощенных вариантов, частично использующих эмпирические данные об атомах или молекулах [35].

Для систематического использования имеющихся средств численного моделирования совокупностей плазмохимических процессов в газоразрядных средах как в интересах прикладных исследований, так и в целях организации учебно-научного процесса, раннего привлечения молодежи к исследовательской деятельности представляется целесообразной работа по более полной автоматизации плазмохимических расчетов и ее приближению к уровню физических конструкторов [36]. Ключевой проблемой на этом пути, имеющей как физическую, так и алгоритмическую составляющую, по-видимому является создание достаточно универсальных, простых и надежных средств приближенного построения необходимых для расчета сечений элементарных процессов волновых функций, включаемых в плазмохимические модели атомов и их ионов в различных квантовых состояниях (а в перспективе — молекул и молекулярных ионов). Эти программные средства должны допускать возможность параллельного решения большого числа квантовомеханических задач за разумное время, поскольку, например, в практически важном случае разрядов в воздушных смесях для получения удовлетворительного согласия с экспериментом приходится использовать плазмохимические модели, учитывающие несколько десятков элементарных процессов. В настоящее время близка к завершению разработка программных средств построения полуэмпирических волновых функций многоэлектронных атомов и ионов на базе использования генетических алгоритмов [38]. Сходная по идеологии схема компьютерного поиска оптимального решения используется и при решении задачи автоматизированного задания начального приближения для итерационного решения системы уравнений (3–5), неудачный выбор которого нередко приводит к сбоям в работе плазменного модуля [32].

Задачи корректного численного моделирования газоразрядных сред в рамках приближений (2–4) во многом сходны с традиционными задачами химии, но оказываются существенно более простыми, с точки зрения решения подготовки исходных данных для гидродинамического моделирования в виде наборов констант скоростей учитываемых реакций. Это обусловлено тем, что в условиях газоразрядной плазмы доминирующую роль играют столкновения атомов или молекул с бесструктурными частицами — электронами и в отдельных случаях — фотонами. Последнее существенно упрощает решение квантовомеханической задачи расчета сечений элементарных процессов. Вычисление же вероятностных характеристик, представляющих интерес для классической химии элементарных столкновительных процессов с участием двух тяжелых частиц (атомов или молекул), обладающих богатым набором потенциально возбужденных квантовых состояний, представляет собой весьма сложную и ресурсоемкую задачу квантовой химии, автоматизация решения пока кажется преждевременной.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Задача расширения области применения электронных конструкторов физических моделей в смежные с физикой разделы химических дисциплин является закономерным этапом развития работ по автоматизации численного моделирования сложных физических систем с целью создания современных учебно-научных электронных ресурсов. Сходство используемых в современных нелокальных плазмохимических моделях газовых разрядов систем сглаженных гидродинамических уравнений типа (2–4) с уравнениями баланса (1) для концентраций компонент смесей в химических реакциях создает хороший фундамент и задел для развития работ в этом направлении. Путем решения задачи является объединение идей:

- 1) развитой идеологии электронных конструкторов учебно-научных моделей для физики;
- 2) недавно завершенных работ по алгоритмизации и частичной автоматизации обучения по базовым разделам традиционных школьных и вузовских курсов химии;
- 3) интенсивно развивающихся в физике нелокальной плазмы допускающих включение идеологии PhOOM методах и алгоритмах решения систем нелокальных уравнений типа (2–4).

Накопленный опыт использования последних для моделирования газовых разрядов в рамках нелокального приближения [40–43] делает перспективной задачу его использования при создании образовательных ресурсов для сопровождения обучения по базовым учебным программам по химии. На первом этапе в области задач учебного и носящего оценочный характер учебно-научного моделирования кажется вполне оправданным использование локального приближения. Система автоматизированной генерации численной модели и поиска необходимых коэффициентов скоростей для уравнений баланса сравнительно легко строится на базе уже апробированных алгоритмов, описанных в разделе 4.

С другой стороны, очевидное сходство между уравнениями кинетики традиционных для химии процессов и интенсивно развивающейся сегодня плазмохимии открывает привлекательные возможности организации междисциплинарного факультативного обучения для наиболее мотивированных старшеклассников и студентов младших курсов, проявляющих интерес к физике и химии одновременно.

Список литературы

1. *Buckminster Fuller R.* Education Automation: Freeing the Scholar to Return to his Studies (Southern Illinois University occasional publication). Carbondale: Southern Illinois University Press, 1962.
2. *Wasfy H.M. et al.* The education sector revolution: the automation of education // 120th Annual American Society for Engineering Education Conference & Exposition. Atlanta (GA), 2013.
3. *Бутиков Е.И., Чирцов А.С.* Законы движения макроскопических тел — пакет обучающих и демонстрационных программ по курсу общей физики // III Международная конференция «Model-oriented Data Analysis». СПб., 1992.
4. *Бутиков Е.И.* Роль моделирования в обучении физике // Компьютерные инструменты в образовании. 2002. № 5. С. 3–20.
5. *Butikov E.I.* Physics of oscillations // Educational Software Package. Saint-Petersburg (Russia), 1992.
6. *Butikov E.I.* Planets and satellites // Educational Software Package. Saint-Petersburg (Russia), 1992.
7. *Козел С.М., Орлов В.А. и др.* Открытая физика. М., 2008.
8. *Чирцов А.С.* Движение заряженных частиц в силовых полях — пакет обучающих программ и физический конструктор // Труды Международной конференции «Современные технологии обучения». СПб., 1995. С. 56.
9. Interactive physics — physics simulation software for the classroom // Design Simulation Technologies. 2016. URL: <http://www.design-simulation.com/IP/Index.php> (дата обращения: 15.08.2016).
10. LabVIEW. 2016. URL: <http://www.labview.ru> (дата обращения: 15.08.2016).
11. Живая физика // Design Simulation Technologies. 2010.
12. *Баяндин Д.В., Мухин О.И.* Виртуальная физика (STRATUM). 2010.
13. Конструктор виртуальных экспериментов. Физика / Разработчик: Crocodile Clips. 2009.
14. *Колесов Ю.Б., Сениченков Ю.Б.* Математическое моделирование в картинках или рисуем поведение динамических систем с помощью «MODEL VISION» // Компьютерные инструменты в образовании. 1998. № 5. С. 45–52.
15. *Баяндин Д.В., Мухин О.И.* Модельный практикум и интерактивный задачник по физике на основе системы STRATUM 2000 // Компьютерные учебные программы. 2002. № 3. С. 28–37.
16. Электричество и магнетизм. Оптика и волны. Виртуальные лаборатории ЕНКА // INT — Институт Новых Технологий. 2010. URL: <http://www.int-edu.ru/content/elektrichestvo-i-magnetizm-optika-i-volny-virtualnye-laboratorii-enkam> (дата обращения: 15.08.2016).
17. Девятая научно-практическая конференция «Образовательные, научные и инженерные приложения в среде LabVIEW и технологии National Instruments – 2010» / Сб. науч. тр. М.: РУДН, 2010. С. 400.
18. *Попов Г.В., Тихонов А.И.* Компьютерная система имитации динамических процессов в силовых трансформаторах // Электро. 2004. № 2.
19. *Чирцов А.С.* Серия электронных сборников мультимедийных материалов по курсу общей физики: новые подходы к созданию электронных конструкторов виртуальных физических моделей с простым удаленным доступом // Компьютерные инструменты в образовании. 2010. № 6. С. 42–56.
20. *Микушев В.М., Сомнов Я.М., Чирцов А.С.* Концепция использования МООС-технологий для дистанционного активного индивидуализированного обучения физике и ее апробация // Международный журнал экспериментального образования. 2015. № 12. С. 359–362.
21. *Марек В.П., Микушев В.М., Чирцов А.С.* Использование информационных технологий при создании инновационной образовательной среды на физическом факультете классического университета // Международный журнал экспериментального образования. 2009. № 6. С. 23–26.
22. *Стафеев С.К., Мустафаев А.С., Чирцов А.С.* Использование физического объектно-ориентированного моделирования для поддержки учебной и исследовательской активности // Сб. науч. тр. II Международной научно-практической конференции «Современные образовательные технологии в преподавании естественно-научных и гуманитарных дисциплин». СПб., 2015.

23. *Марек В.П., Чирцов А.С.* Серия электронных сборников мультимедийных материалов по курсу общей физики: оригинальные подходы к созданию мультимедийных ресурсов и их использованию // Компьютерные инструменты в образовании. 2012. № 1. С. 58–72.
24. *Чирцов А.С., Микушев В.М., Чайковская О.Н.* Использование физического объектно-ориентированного моделирования в МООС по механике. Томск: Изд-во НТЛ, 2015.
25. *Колесов Ю.Б., Сениченков Ю.Б.* Компьютерное моделирование в научных исследованиях и в образовании // Компьютерные инструменты в образовании. 2003. № 1.
26. *Сычѳв С.В.* Автоматическая генерация тестовых заданий по химии с качественными и количественными вариациями // Информатика и образование. 2016. № 5 (274). С. 46–53.
27. *Sychov S.V.* ChemGenerator. 2016. URL: ChemGenerator.ru (дата обращения: 15.12.2016).
28. *Сычѳв С.В., Назина Т.Г.* Сборник задач по химии 4 варианта с ответами и схемами решений. СПб.: Невская книжная типография, 2015.
29. *Марек В.П., Чирцов А.С.* Использование компьютерных технологий и моделирования для приближения лабораторных работ к научным исследованиям // Компьютерные инструменты в образовании. 2014. № 1. С. 44–59.
30. *Грановский В.Л.* Электрический ток в газе. Установившийся ток. М.: Наука, 1971.
31. *Чернышева М.В. и др.* Компьютерное моделирование при изучении физических процессов в тлеющем разряде в воздушных смесях при низких давлениях // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2014. № 3 (91). С. 140–148.
32. *Кудрявцев А.А., Смирнов А.С., Цендин Л.Д.* Физика тлеющего разряда. СПб.: Лань, 2010.
33. Comsol 4.0a. Plasma module user guide. 2016.
34. *Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М: Наука, 1973.
35. *Фок В.А.* Начала квантовой механики. М: Наука, 1976.
36. *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. М: Физматгиз, 1963.
37. *Марек В.П., Чирцов А.С.* Электронные образовательные ресурсы по физике плазмы для нового тома «Атомная и субатомная физика» мультимедийного сборника «Физика: модель, эксперимент, реальность» // Международная конференция. «Физика в системе современного образования» (ФССО-13). Петрозаводск, 2013.
38. *Sychov S.V., Chirtsov A.S.* Genetic Algorithm as a Means for Solving a Radial Schrödinger Equations System // XIX IEEE International Conference on Soft Computing and Measurements (SCM). 2016. Issue 1. P. 265–267.
39. *Bogdanov E.A., Chirtsov A.S., Kudryavtsev A.A.* Fundamental non-ambipolarity of electron fluxes in 2D plasmas // Phys. Rev. Lett. 2011, 106.195001.
40. *Богданов Е.А., Кудрявцев А.А., Очикова Н., Чирцов А.С.* Нарушение распределения Больцмана для плотности электронов плазмы в двухкамерных ИСР-разрядах // Журнал технической физики. 2015. Т. 85, № 10. С. 155–158.
41. *Chirtsov A.S., Demidova M.V., Kuryandskaya I.P.* Comment on «Use of dc Ar microdischarge with nonlocal plasma for identification of metal samples» [J. Appl. Phys.117, 133303 (2015)] // J. Appl. Phys. 119, 136101 (2016).
42. *Eliseev S., Kudryavtsev A.A., Liu H., Ning Z., Daren Z., Chirtsov A.S.* Transition from Glow Microdischarge to Arc Discharge with Thermionic Cathode in Argon at Atmospheric Pressure // IEEE Transactions on Plasma Science. 2016. Vol. 44. Issue 11. P. 2536–2544.
43. *Чернышева М.В., Чирцов А.С., Швагер Д.А.* Сравнительный анализ плазмохимических моделей для компьютерного моделирования тлеющих разрядов в воздушных смесях // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2016. Т. 16, № 5 (105). С. 903–916.

Поступила в редакцию 18.12.2016, окончательный вариант — 12.02.2017.

Computer tools in education, 2017

№ 1: 45–60

<http://ipo.spb.ru/journal>

AUTOMATED CONTENT DEVELOPMENT FOR A MASSIVELY INDIVIDUALIZED EDUCATION IN PHYSICS AND CHEMISTRY

Sychov S.V.¹, Chirtsov A.S.¹

¹ITMO University, Russia, Sanct-Petersburg

Abstract

The article considers the base structure and mechanisms of developing science education constructors, particularly Physical Object Oriented Modeling (PhOOM) — the approach that makes it possible to create innumerable educational applications in natural sciences. Some examples of realization of this approach for physics and chemistry courses are mentioned. This approach is a variant of MOOC but has some specificity allowing deeply customize educational environment for a desired task. A further development of the approach is a system constructing advanced problems, based on a real time simulation, for advanced plasma physics courses. Generally speaking the approach based on PhOOM makes it possible to combine model demonstration, test problem creation and easy adjustment by inexperienced user in one easy manageable product or on-line service for the purpose of engineering an natural science education.

Keywords: *PhOOM, MOOC, ChemGenerator, physics, chemistry, individualized education, automated generation of test, standardized tasks, education automation.*

Citation: Sychov, S. & Chirtsov A., 2017. "Sredstva avtomatizatsii razrabotki uchebnogo kontenta po fizike i khimii dlya soprovozheniya massovogo individualizirovannogo obrazovaniya" ["Automated Content Development for a Massively Individualized Education in Physics and Chemistry"], *Computer tools in education*, no. 1, pp. 45–60.

Received 18.12.2016, the final version — 12.02.2017.

Sergey V. Sychov, PhD student, ITMO University sergey.v.sychev@gmail.com
Alexandr S. Chirtsov, Doctor of Technical science, Professor, ITMO University, alex_chirtsov@mail.ru



Наши авторы, 2017.

Our authors, 2017.

Сычев Сергей Владимирович,
аспирант Университета ИТМО;
197101, Россия, Санкт-Петербург,
Кронверкский пр., д. 49, ИТМО,
sergey.v.sychev@gmail.com

Чирцов Александр Сергеевич,
доктор технических наук, профессор
Университета ИТМО,
alex_chirtsov@mail.ru