

№ 5 май 2014

Инновации в образовании

ИННОВАЦИИ В ОБРАЗОВАНИИ

№ 5, 2014

Председатель редакционного совета

Шадриков В.Д.,
доктор психологических наук, профессор, академик
РАО

Редакционный совет

Адамский А.И.,
кандидат педагогических наук, научный руководи-
тель института проблем образовательной политики
«Эврика»

Волов В.Т.,
член-корреспондент ГАН РАО, доктор педагогичес-
ких наук, профессор, заведующий кафедрой «Физи-
ка и экологическая теплофизика» Самарского госу-
дарственного университета путей сообщения

Дмитриев А.В.,
доктор философских наук, профессор,
член-корреспондент РАН, руководитель Центра
конфликтологии РАН

Карпенко М.П.,
доктор технических наук, профессор, президент
НАЧОУ ВПО Современной гуманитарной акаде-
мии

Колмогоров В.П.,
кандидат экономических наук, почетный профессор
Московской международной высшей школы бизне-
са «МИРБИС» (Институт), академик Международ-
ной академии информатизации, академик Между-
народной транспортной академии

Мясников В.А.,
доктор педагогических наук, профессор, действи-
тельный член (академик) РАО, Главный научный со-
трудник Федерального государственного научного
учреждения “Институт теории и истории педагоги-
ки” РАО

Селиванова Н.Л.,
член-корреспондент РАО, доктор педагогических
наук, профессор, руководитель лаборатории теории
воспитания Института теории и истории педагоги-
ки РАО

Солдаткин В.И.,
доктор философских наук, профессор, Первый
вице-президент Московского технологического ин-
ститута “ВТУ” (НОУ ВПО МТИ “ВТУ”)

Сыромятников И.В.,
доктор психологических наук, профессор, действи-
тельный член Академии военных наук РФ – главный
редактор

Тихонов А.Н.,
доктор технических наук, профессор, научный ру-
ководитель, директор МИЭМ НИУ ВШЭ

*Журнал
зарегистрирован
в Государственном
комитете Российской
Федерации по печати
10 июля 2000 года,
регистрационный
№ ПИ 77-3686*

*Выходит 12 раз в год. Распространяется
в Российской Федерации*

*Адрес редакции:
109029, Москва,
ул. Нижегородская, 32, корп. 5, к. 205
Тел./факс:
(495) 727-12-41
(доб. 43-18)
E-mail:
exp@tih.ru*

*Журнал включен ВАК Минобразования
и науки РФ в перечень ведущих
рецензируемых научных журналов
и изданий, в которых должны
быть опубликованы основные
научные результаты диссертаций
на соискание ученых степеней
кандидата и доктора наук.
Рекомендован экспертным советом
по педагогике*

СОДЕРЖАНИЕ

НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ

ГРЕБЕННИКОВА В.М., НИКИТИНА Н.И.

О развитии профессионально-коммуникативной культуры руководителей образовательных учреждений: деонтологический аспект. 5

ИВАНЧЕНКО М.А., КИЗЕЕВ В.М., СМОЛЯКОВА С.Н., ХАЧИН С.В.

Формирование центров «предпосевной» подготовки инновационных проектов в технических вузах 16

МАЙЕР Р.В.

Использование вычислительных экспериментов при изучении больших систем частиц 29

КОЗАЧЕК А.В.

Место и особенности применения факторно-аналитического подхода при проектировании содержания профессиональной подготовки инженера-эколога 38

КОРШЕНКО И.Ф., КОРШЕНКО О.П., ШУШАРИНА Т.Е.

Университетские кадры для малых инновационных предприятий, входящих в инновационный пояс вуза 52

ПЕРЕТЯГИНА Н.Н., ДОБШИКОВА Г.П.

Гендерный подход в целостном образовании: потребность и перспектива развития дополнительного образования 67

ПРОХОРОВА С.Ю.

Популяризация инновационных идей в регионе: из опыта проведения выставок-ярмарок инновационных образовательных проектов 79

СТАРИКОВ П.А.

О функциональности обучения современным методам творчества 87

ЧУХЛЕБОВА И.А.

Педагогические условия реализации модели иноязычной речевой/языковой подготовки иностранных военнослужащих. 96

ШАЙДУЛЛИНА А.Р., ЗИАТДИНОВ А.М.

Интеграционные процессы в региональной системе высшего профессионального образования как основа повышения эффективности подготовки конкурентоспособного инженера. 108

ОТКРЫТЫЙ УРОК

ШЕФЕР О.Р.

Диагностика метапредметных результатов обучения физике средствами заданий на установления соответствия между элементами двух множеств. 115

Р.В. Майер, доктор педагогических наук,
доцент

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ БОЛЬШИХ СИСТЕМ ЧАСТИЦ

Сформулирована проблема создания системы учебных вычислительных экспериментов, на примере которых можно изучить наиболее важные детерминированные и стохастические методы моделирования больших систем частиц. Рассмотрены следующие методы: 1) моделирование газа твердыми сферами; 2) методы молекулярной динамики, учитывающие притяжение и отталкивание молекул; 3) метод крупных частиц; 4) метод клеточных автоматов; 5) метод хаотического движения молекул; 6) метод статистических испытаний; 7) поиск состояния с минимальной энергией. Приведены две программы, моделирующие: 1) возрастание энтропии при диффузии; 2) испарение жидкости в закрытом сосуде, образование насыщенного пара. Статья содержит 7 рисунков, полученных в результате компьютерных симуляций.

Ключевые слова: компьютерные модели, вычислительный эксперимент, большие системы частиц.

Дальнейшее развитие физико-математического образования в условиях совершенствования ИТ предполагает создание **системы учебных вычислительных экспериментов (УВЭ)**, которая объединяла бы упрощенные варианты научных вычислительных экспериментов, адаптированные к условиям обучения. УВЭ является экспериментом над математической моделью объекта, проводимым с помощью ЭВМ с целью обучения. В процессе выполнения УВЭ учащиеся изменяют параметры модели исследуемой системы, характер и величину внешних воздействий, начальные условия и «наблюдают», как при этом изменяются отклик системы, скорость и направление протекающих процессов. Это позволяет изучить динамику изменения различных величин, характеризующих изучаемое явление, сформировать его наглядный образ, повысить интерес студентов к физике. УВЭ следует рассматривать как дополнение к учебной теории и учебному

натурному эксперименту и использовать в сочетании с ними. Все это относится и к применению УВЭ при изучении систем, состоящих из большого числа частиц.

В настоящей работе обсуждается проблема отбора компьютерных моделей (программ), демонстрирующих основные методы моделирования больших систем частиц. К ним относятся [1]: 1) *детерминированные методы*, основанные на расчете энергии или силы взаимодействия между частицами, нахождении их скоростей и координат в последующие моменты времени; 2) *стохастические методы*, заключающиеся в многократном воспроизведении исследуемого процесса и статистической обработке получающихся результатов. Можно предположить, что создание системы УВЭ, которая позволила бы изложить наиболее важные методы моделирования физических систем, состоящих из большого числа частиц, действительно возможно. Рассмотрим основные методы моделирования больших систем частиц и приведем примеры соответствующих компьютерных моделей.

1. **Моделирование молекул твердыми сферами.** Эта модель состоит в замене молекул твердыми сферами или шарами диаметром d , которые при соударении упруго отталкиваются. В двумерном случае говорят о *твердых дисках*, а в одномерном – о *твердых стержнях*. В рамках этих допущений математическая схема расчетов существенно упрощается, так как она не требует интегрирования системы уравнений Ньютона. Модель позволяет получить распределение молекул по скоростям (рис. 1.1), изучить зависимость давления от времени (рис. 1.2), характер движения молекулы или броуновской частицы [2, с. 78–80; 3].

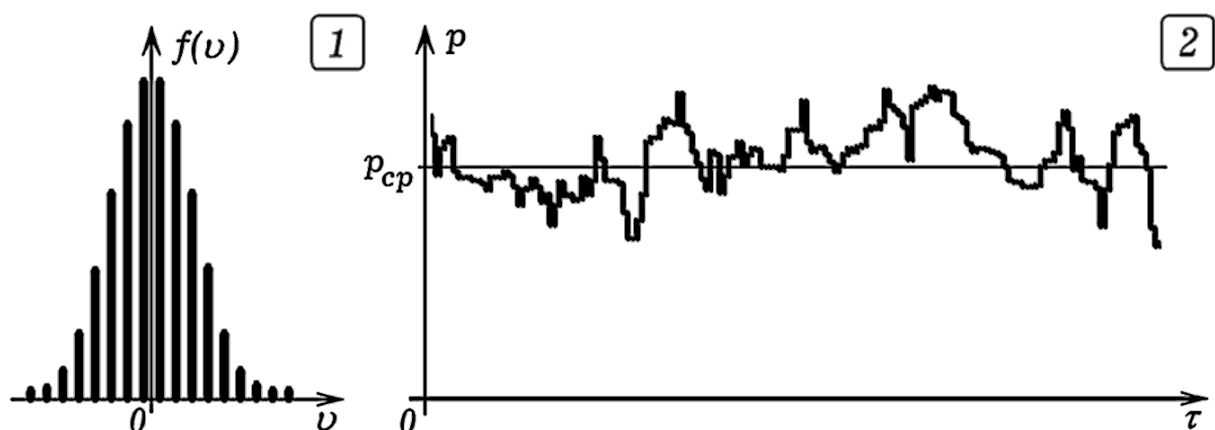


Рис. 1. Распределение молекул по скоростям. Давление газа

2. **Методы молекулярной динамики, учитывающие притяжение и отталкивание молекул.** Рассмотренная модель «твердые сферы» не учитывает

притяжение молекул и поэтому не позволяет промоделировать объединение частиц в кластеры, конденсацию и кристаллизацию. Для исследования этих явлений силу взаимодействия молекул аппроксимируют выражением $F(r) = k_1 / r^n - k_2 / r^m$ так, что на больших расстояниях r преобладает сила притяжения, а на маленьких – сила отталкивания. Рассмотрим систему из N частиц с массами $m_i, i = 1, 2, \dots, N$, находящуюся в силовом поле. Моделирование сводится к решению задачи Коши для системы дифференциальных уравнений, получающейся из законов Ньютона [1–5]. На рис. 2 представлены результаты использования метода МД для моделирования конденсации газа при охлаждении.

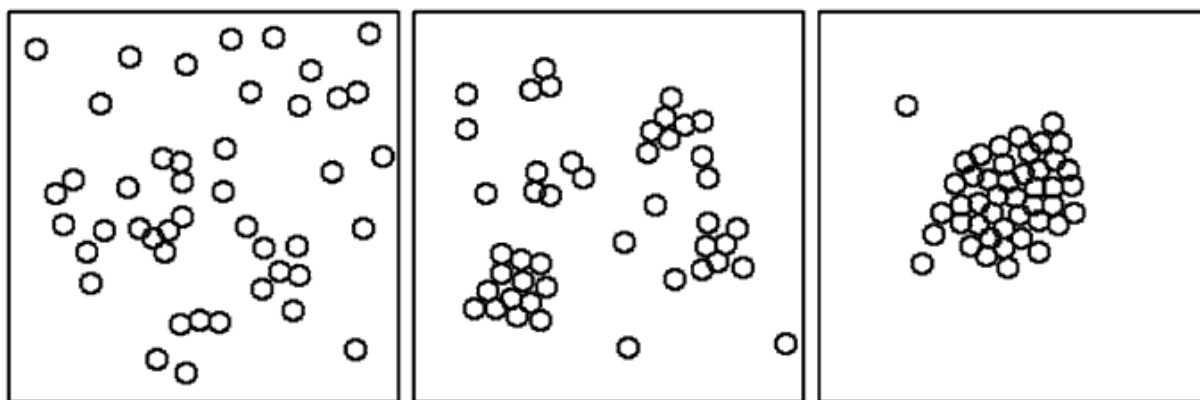


Рис. 2. Моделирование конденсации газа при охлаждении

3. Метод крупных частиц. Развитием метода МД стал метод крупных частиц, который заключается в представлении тела совокупностью крупных шарообразных частиц, взаимодействующих и движущихся в соответствии с законами классической механики. В качестве примера рассмотрим обтекание газом препятствия (рис. 3). Частицы перемещаются вниз под

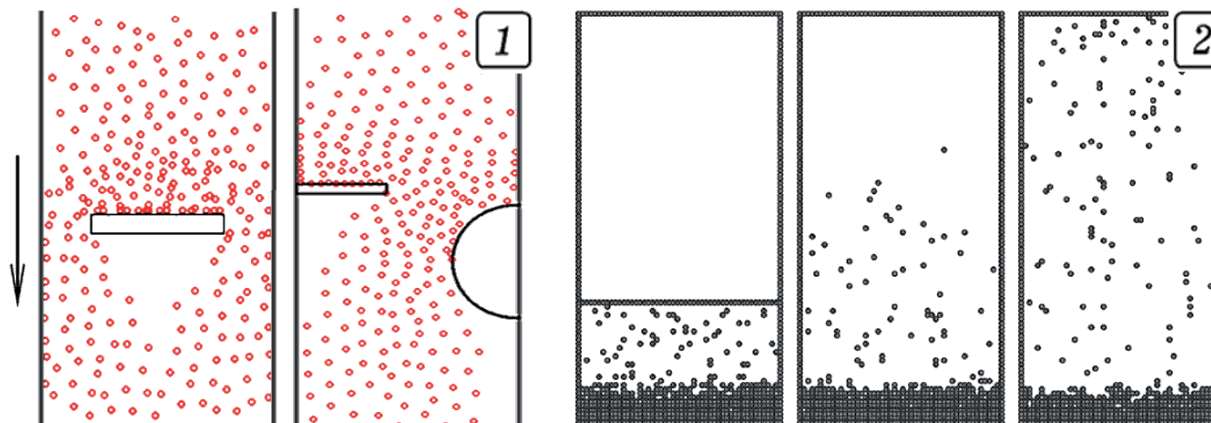


Рис. 3. Обтекание газом препятствия. Образование насыщенного пара

действием внешней силы; достигая нижней границы расчетной области, они исчезают и появляются у ее верхней границы. Хорошо видно, что у передней стенки тела концентрация частиц (а значит, и плотность газа) существенно выше средней, а за препятствием – ниже [4].

4. Метод клеточных автоматов. Движение газа и жидкости может быть исследовано методом клеточных автоматов (КА) [1]. Рассмотрим вероятностный КА, позволяющий моделировать хаотическое движение молекул газа, испарение жидкости, образование насыщенного пара. Представим двумерный сосуд, разбитый на квадратные ячейки; в некоторых ячейках находятся молекулы, а остальные пусты. На каждом шаге ЭВМ случайно выбирает молекулу и с заданными вероятностями p_L , p_R , p_U , p_D смещает ее в левую, правую, верхнюю или нижнюю ячейку, если она пуста. Для того чтобы промоделировать расширение или диффузию газа, необходимо задать $p_L = p_R = p_U = p_D = 0,25$. КА будет моделировать насыщенный пар в случае, когда вероятности смещения молекулы вверх (испарение, заполнение сосуда) и вниз (конденсация, переход в жидкость) зависят от концентрации молекул C в окрестности рассматриваемой молекулы с координатами (i, j) . Для определения концентрации C будем подсчитывать число молекул в квадрате 5×5 , построенном вокруг частицы (i, j) . Если концентрация велика ($C > 2$), то молекула с большей вероятностью идет вниз: $p_D = 0,35$, $p_U = 0,15$. Если концентрация молекул пара мала ($C \leq 2$), то молекула с большей вероятностью поднимается вверх: $p_D = 0,15$, $p_U = 0,35$. Смещения влево и вправо по-прежнему равновероятны: $p_L = p_R = 0,25$. Используется программа PR-1; результаты моделирования – на рис. 3.2. Сначала моделируется испарение жидкости и образование насыщенного пара в небольшом объеме. Через некоторое время, когда наступает динамическое равновесие между паром и жидкостью, горизонтальная перегородка удаляется, и молекулы заполняют весь объем большого сосуда. Часть жидкости переходит в пар, который через некоторое время становится насыщенным.

5. Метод хаотического движения молекул состоит в том, что на каждом шаге молекулы смещаются на случайные расстояния в случайных направлениях. Такая модель позволяет изучить движение одной молекулы, зависимость среднего квадрата смещения молекулы от времени (числа шагов), промоделировать расширение и диффузию газа, исследовать изменение энтропии при диффузии.

Представим длинный сосуд, разделенный двумя перегородками на три части, которые открываются одна за другой в моменты τ_1 и τ_2 [5, с. 48–50].

Сосуд полностью заполнен молекулами вещества 1, а в левой части еще имеются N молекул вещества 2. Разобьем сосуд на r равных элементарных объемов, число молекул вещества 2 в j -м объеме обозначим n_j . Тогда энтропия системы равна:

$$S = -\sum_{j=1}^r p_j \ln p_j = -\sum_{j=1}^r \frac{n_j}{N} \ln \frac{n_j}{N}.$$

Программа PR-2 моделирует хаотическое движение молекул, вычисляет энтропию системы в последовательные моменты времени, строит график $S(\tau)$ в случае, когда открывается сначала одна, а потом другая перегородка (рис. 4).

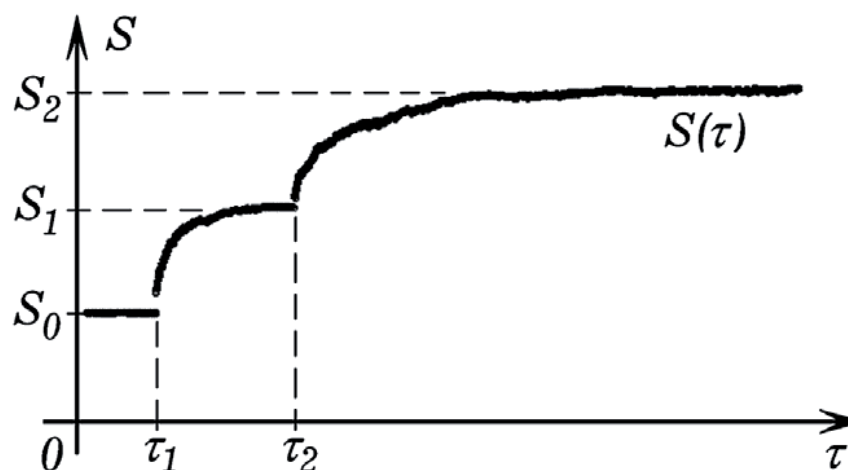


Рис. 4. Возрастание энтропии при диффузии газа

6. Метод статистических испытаний. Изучение системы с термодинамической точки зрения не требует точного знания координат и скоростей движения частиц в различные моменты времени. Для нахождения средних значений макроскопических величин и установления характера распределения микроскопических характеристик движения молекул используется метод статистических испытаний, заключающийся в многократном воспроизведении исследуемого процесса и статистической обработке получающихся результатов [1]. Например, в длинном сосуде находится N молекул газа. Если в левой половине оказалось n частиц, то в правой – $(N - n)$ частиц. Рассчитаем вероятности различных распределений молекул в левой и правой половинах сосуда и построим график $p(n)$. Для этого будем случайным образом задавать координаты N молекул и подсчитывать их число n в левой половине сосуда. Более 1000 раз повторяя эту процедуру, определим вероятности $p_1, p_2, p_3, \dots, p_{N-1}, p_N$ того, что в левой части

окажется 1, 2, 3, ..., $N-1$, N молекул. Результаты моделирования для системы из 10, 20 и 50 молекул представлены на рис. 5. Максимальную вероятность имеет состояние с наибольшей энтропией, при котором в левой половине находится $N/2$ молекул.

Другим примером может быть задача об одномерном или многомерном случайном блуждании молекулы [4]. Молекула совершает N шагов случайной длины в случайных направлениях, необходимо получить распределение конечной координаты z^N блуждающей точки при различном числе шагов N . Используемая программа содержит цикл, в котором случайным образом определяется направление и величина смещения молекулы на следующем временном шаге. Цикл совершает N итераций, в результате чего определяется конечная координата молекулы z^N . Эта процедура повторяется 10 000 раз, строится распределение z^N , вычисляется среднее квадратическое отклонение.

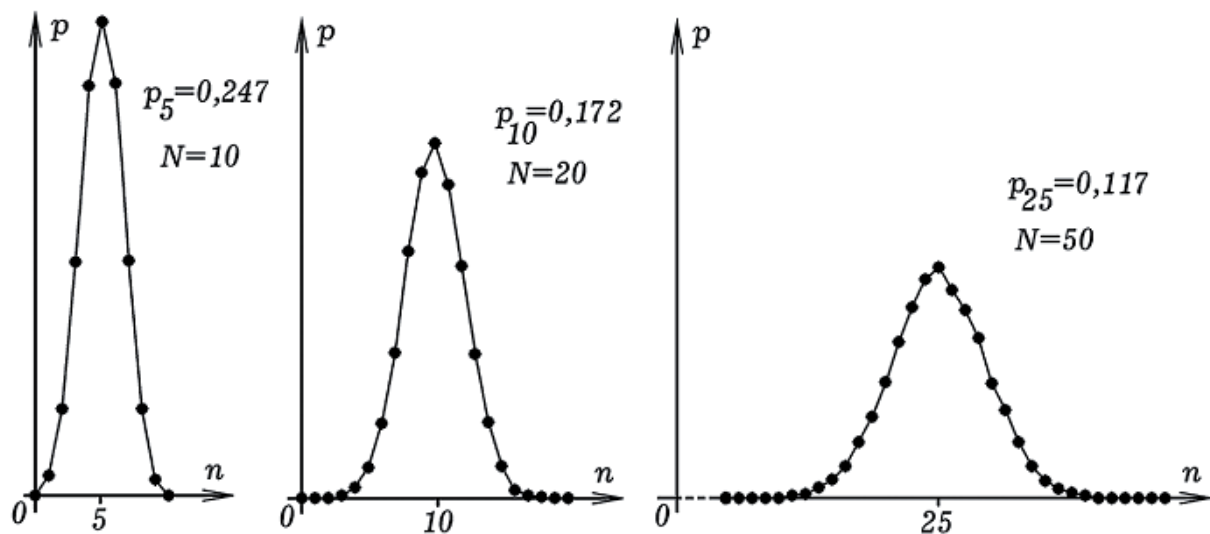


Рис. 5. Зависимость вероятности от числа молекул в левой половине

7. Поиск состояния с минимальной энергией. В некоторых случаях необходимо определить состояние системы из большого количества частиц, соответствующее минимуму потенциальной энергии $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = U(x_i, y_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$. Простейший алгоритм состоит в следующем. Сначала программа задает начальную конфигурацию системы, располагая частицы в узлах прямоугольной решетки. Вычисляется потенциальная энергия системы U_1 . Затем случайным образом выбирается частица и смещается на небольшую случайную величину, после чего рассчитывается новое значение энергии

U_2 . Частицы считаются твердыми шарами, при смещении они не перекрываются. Если потенциальная энергия системы уменьшилась ($U_2 < U_1$), то изменения координат принимаются, а если нет – отвергаются.

Рассмотрим УВЭ по изучению модели ферромагнетика. Компьютерная программа моделирует образование доменов в двумерной модели Изинга (рис. 6.1) и позволяет изучить зависимость суммарного магнитного момента атомов M от температуры T (рис. 6.2). При заданной температуре T случайным образом выбирается атом и переворачивается его спин. Если суммарная энергия системы уменьшается, то это изменение принимается, а иначе – отвергается. Эта процедура повторяется до тех пор, пока система не окажется в состоянии с минимальной энергией взаимодействия. Вычисляется суммарный магнитный момент M , затем эта процедура многократно повторяется и определяется среднее значение $M_{\text{ср}}$. Аналогично рассчитывается $M_{\text{ср}}$ при других T . Из графика $M_{\text{ср}}(T)$ (рис. 6.2) видно, что при прохождении точки Кюри происходит фазовый переход, и материал из ферромагнетика превращается в парамагнетик [1; 4; 5].

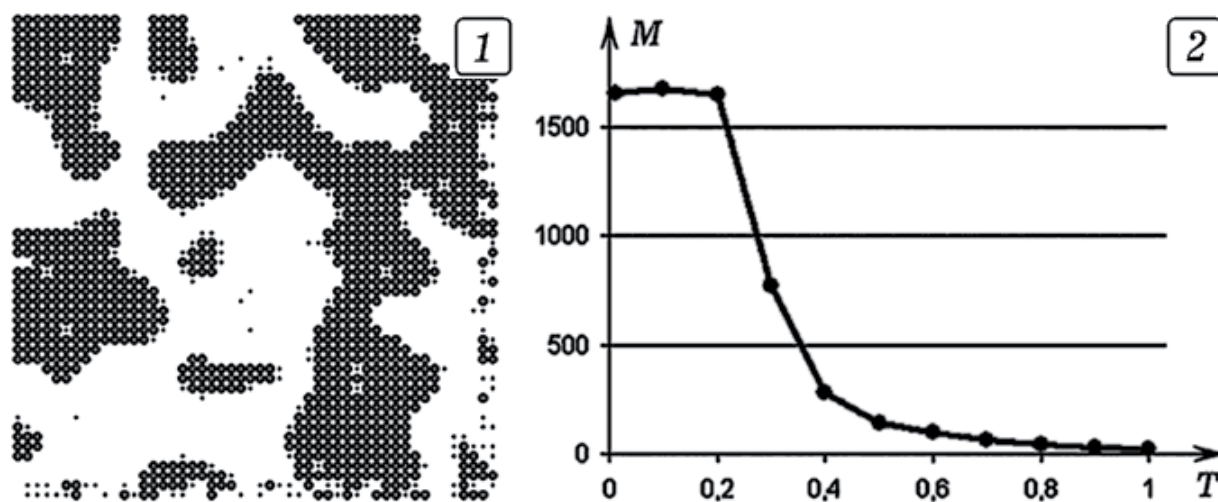


Рис. 6. Зависимость намагничивания от температуры

Часто задача поиска глобального минимума функции $U(x_i, y_i)$ осложняется тем, что эта функция имеет множество локальных минимумов, в которых может «застрять» программа. Рассмотрим совокупность N частиц, которые притягиваются друг к другу и могут образовать двумерную каплю жидкости. Необходимо определить форму капли в невесомости и когда она лежит на горизонтальной поверхности в поле тяжести. Казалось бы, такой алгоритм неизбежно должен приводить к правильному решению, но это не так: программа останавливается в одном из локальных минимумов. Для

нахождения глобального минимума используется алгоритм Метрополиса, который отличается следующим. В случае когда новое значение энергии больше предыдущего ($U_2 > U_1$), эта конфигурация не всегда отвергается, а принимается с вероятностью $p = \exp(-(U_2 - U_1)/kT)$, где T – «температура» системы [1]. Это позволяет при попадании программы в локальный минимум «потоптаться на месте», а затем «выскочить» из него и попытаться снова найти глобальный минимум функции $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$.

Для решения рассмотренной задачи используется программа, которая ищет минимум потенциальной энергии системы из 50 – 200 частиц. Применяется усовершенствованный алгоритм Метрополиса, который называется **методом модельного отжига**. Система как бы медленно «охлаждается», затем осуществляется случайное смещение всех частиц и резкое «нагревание», после этого снова «охлаждение» и т. д. В поле тяжести потенциальная энергия каждой частицы зависит от высоты y_i . Через несколько сотен итераций система переходит в состояние, изображенное на рис. 7.1, затем формируется «капля» на поверхности (рис. 7.2). В невесомости частицы собираются в «шарообразную каплю» (рис. 7.3).

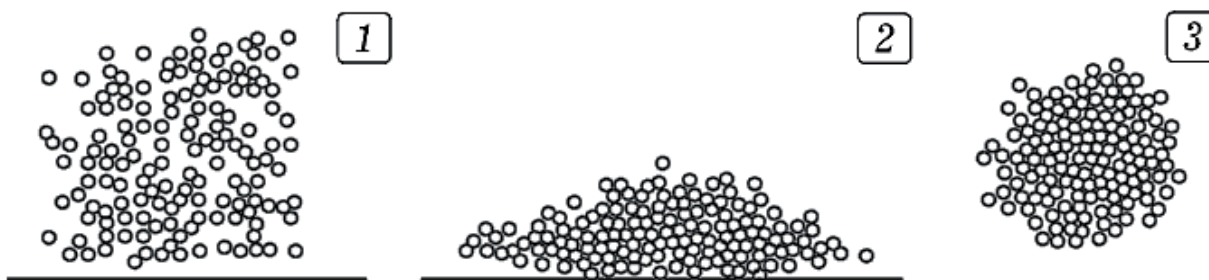


Рис. 7. Поиск состояния с минимальной потенциальной энергией

Рассмотренные выше модели позволяют сформировать наглядный образ изучаемых явлений, понять их сущность. Они могут быть использованы при выполнении студентами курсовых и дипломных работ, а также при изучении курса «Компьютерное моделирование» [4; 5]. Автор статьи работает над созданием учебника по компьютерному моделированию для студентов педвузов. Отдельные главы учебника представлены на сайте maier-rv.glazov.net (mayer.hop.ru).

Литература

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. М.: Мир, 1990. (Часть 1 – 350 с.; Часть 2 – 400 с.)

2. Данилов О.Е. Компьютерное моделирование движения молекул газа // Проблемы учебного физического эксперимента: Сборник научных и методических работ. Вып. 2. Глазов: ГГПИ, 1996.

3. Компьютерная модель идеального газа [Электронный ресурс] / Режим доступа: <https://sites.google.com/site/gascommo/> (последнее обращение 01.10.13)

4. Майер Р.В. Задачи, алгоритмы, программы. [Электронный ресурс] / URL: <http://maier-rv.glazov.net>, <http://komp-model.narod.ru>.

5. Майер Р.В. Компьютерное моделирование физических явлений. Глазов, ГГПИ, 2009.

Mayer R.V., Doctor of Education, Associate Professor, Professor of physics and didactic physics GGPI

USE OF COMPUTER EXPERIMENTS FOR THE STUDY OF LARGE SYSTEMS OF PARTICLES

Presents the problem of creating a system of educational of computational experiments, on the example of which you can explore the most important deterministic and stochastic methods of modeling of large systems of particles. Considered the following methods: 1) the modeling of the gas with use hard spheres; 2) the methods of molecular dynamics, taking into account the attraction and repulsion of molecules; 3) the method of large particles; 4) the method of cellular automata; 5) the method of the random motion of molecules; 6) the method of statistical tests; 7) search the state with minimum energy. Given two computer programs that simulate: 1) the increase in entropy of the diffusion; 2) the evaporation of a liquid in a closed vessel, the formation of vapor. The paper contains 7 figures, obtained as a result computer simulations.

Key words: *computer models, numerical experiment, a large system of particles.*