

COMPUTER MODELS

Sychov S.V., Chirtsov A.S.

AUTOMATION OF CREATION OF EDUCATIONAL CONTENT FOR A COURSES OF PHEISCS AND CHEMISRY FOR MASS INDIVIDUALISED EDUCATION

Sychov S.V., Russia, PhD student, ITMO University
Chirtsov A.S., Russia, Doctor of Technical science,
Professor, Sanct-Petersburg State University

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 same specificity allowing deeply customize educational environment for desired task.

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

1. ВВЕДЕНИЕ:

Интенсивное развитие компьютерных и информационных технологий сопровождается их возрастающим проникновением практически во все области человеческой деятельности. Сказанное в полной мере относится к образованию, активные работы по компьютеризации и автоматизации которого нацелены на замену традиционных подходов в учебной и преподавательской деятельности. Пионером и идейным вдохновителем в данной сфере можно

смело назвать американского архитектора и изобретателя Ричарда Бакминстера Фуллера (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 ни что 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 может служить наглядно происходящая в настоящий момент революция в сфере образования [2].

Еще на первых этапах компьютеризации образования в России был предложен (Бутиков Е.И, Чирцов А.С.) подход, согласно которому, работам по внедрению электронных средств образования в любую из составляющих образовательного процесса должно предшествовать четкое понимание конкретных преимуществ в использовании этих средств по сравнению с традиционными методами.

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. В указанной области к концу 90-х годов в России был создан ряд пакетов, моделирующих физические процессы, рассмотренные в курсе физики, содержательное и методическое наполнение которых, по-видимому, не имеет аналогов в мире [3],[4],[5].

Следующим этапом развития электронных средств обучения этого типа был переход к электронным конструкторам виртуальных физических систем, основные идеи построения и использования которых, вместе с действующим программным макетом, были предложены еще во время создания первых учебных моделирующих программ [6].

Настоящая работа посвящена краткому обзору созданных конструкторов виртуальных систем в курсе физики и их дальнейшему развитию для поддержки преподавания курса химии.

2. ЭЛЕКТРОННЫЕ КОНСТРУКТОРЫ ВИРТУАЛЬНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА БАЗЕ ФИЗИЧЕСКОГО ОБЪЕКТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Использование электронных конструкторов физических процессов оказалось перспективным направлением в создании обучающего контента. Однако, ряд существующих в настоящее время конструкторов [7],[8] и др. является ресурсоёмкими или требуют привлечения подготовленных специалистов для работы с ними. В отличие от них, созданная в рамках идеологии [6] современная Java- версия электронного конструктора виртуальных физических систем, не требует установки дополнительного программного обеспечения. В on-line режиме с ней могут работать неподготовленные пользователи как в форме активного использования (с изменением параметров) уже готовых компьютерных экспериментов, так и в режиме разработки собственных оригинальных моделей. 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 взаимодействий (рис.1).

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
- возможность демонстрации эволюции во времени сложных физических систем, аналитическое описание которых затруднено или невозможно (рис.2);
- 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.

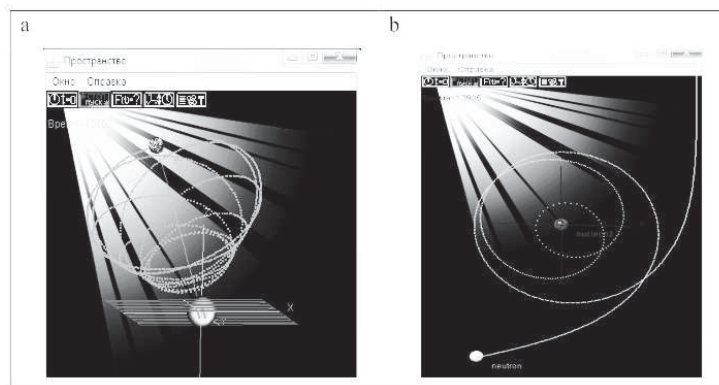


Рис.1. Примеры использования возможности переопределения законов взаимодействия между объектами: а – демонстрация гипотетической системы «электрон в поле неподвижного магнитного монополя с положительным электрическим зарядом; б – одна из возможных форм движения в поле ядерных сил, соответствующих потенциалу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

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. 2-а). Именно эта особенность позволяет использовать конструктор как средство автоматизации разработки нового электронного учебного контента для организации массового индивидуализированного обучения.

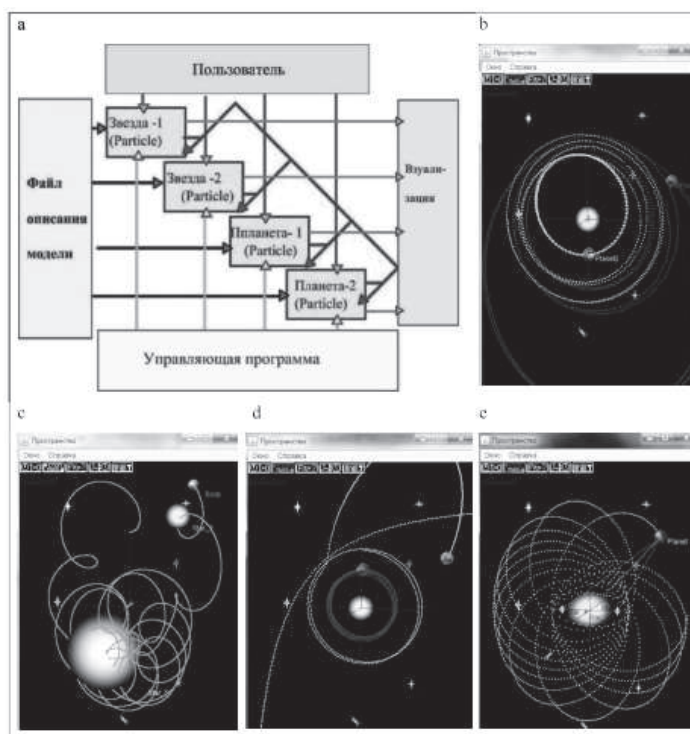


Рис. 2. а – схема адаптивного алгоритма; б – взаимное возмущение орбит спутников, с – периодический перезахват спутника компонентами двойной звезды, д – возмущение орбиты спутника внешним для планетной системы объектом, е – прецессия орбиты спутника сжатой собственным вращением звезды.

Электронный конструктор [9] нашел применение как в очном обучении в средних и высших учебных заведениях для сопровождения теоретических курсов [10] и организации самостоятельной работы учащихся, [11], так и в удаленном обучении, осуществляемом в форме созданных на базе конструктора семи электронных учебников и on-line курсов в 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» (ФООМ). Последнее существенно отличается

от широко используемого «Объектно-ориентированного моделирования» (ООМ) - подхода. Если в основе моделей, создаваемых в рамках ООМ, лежат определяемые проектировщиком алгоритмы функционирования моделируемой системы как целого (что требует знания о теоретических методах описания всего комплекса включаемых в систему объектов), то в рамках ФООМ подобные априорные знания вообще не требуются. Алгоритм представляет собой простой цикл по времени, последовательно передающий фокус активности всем программным объектам, составляющим построенную систему. Каждый их «элементарных» объектов осуществляет опрос способных к взаимодействию с ним объектов о 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.

В рамках ФООМ 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»
- «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 указанных идей является переход к моделированию изучаемых в рамках химии систем следующего уровня сложности.

3. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В РАМКАХ ФООМ

Идея о возможности создания основанных на ФООМ 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 ФООМ-модели идеального газа, состоящего из нескольких сотен частиц, в реальном времени. Также удалось создать простейшую модель неидеального газа - ансамбля способных вращаться и совершать колебания «классических электрических диполей», помещенных во внешнее электрическое поле.

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:

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

или их релятивистском аналоге:

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

где m_j и q_j – массы 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:

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

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

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

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 четвертого порядка обыкновенных дифференциальных уравнений (1).

В случае же моделирования химических процессов поведение элементов системы оказывается существенно вероятностным и многоварианным, расчет количественных характеристик которого представляет собой нетривиальную задачу квантовой химии.

Во-вторых, традиции предметного обучения химии, как правило, требуют получения результатов не на языке микромоделирования, демонстрирующего поведение системы на молекулярном уровне, а в рамках формализма усредненных макроскопически сглаженных решений для концентраций. Последнее требует решения систем известных из гидродинамики дифференциальных уравнений в частных производных (в простейшем случае однородных сред – уравнений баланса), коэффициенты которых возникают из квантовомеханических расчетов вероятностных характеристик (сечений и скоростей реакций) элементарных процессов.

Перечисленные особенности требуют существенного упрощения постановки задач моделирования химических процессов, ориентированного на задачи визуализации механизмов изучаемых явлений и автоматизацию разработки учебного контента.

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

Особенностью преподавания химии в рамках базового курса для средних учебных заведений является практический отказ от рассмотрения взаимодействия молекул веществ, участвующих в химической реакции, в форме реального многоканального вероятностного процесса и использование модели, предполагающей детерминированное поведение микрообъектов по сценариям, соответствующим наиболее вероятным каналам химических реакций. Это позволяют сформулировать концепцию заведомо упрощенного конструктора моделей химических процессов, построение которого возможно на базе уже имеющегося ФООМ-конструктора классических систем взаимодействующих между собой частиц.

Данный алгоритм применяется во внедряемом в учебную практику программном продукте, предназначенном для автоматизации создания задач по химии [12],[13].

Данный генератор тестовых заданий по химии прошел апробацию в процессе создания с его помощью уже изданного сборника задач по химии [14], включающего как количественные, так и качественные вариации заданий и охватывающего практически все темы, рассматриваемые в начальном курсе неорганической химии.

В качестве исходных данных программа использует пять баз-таблиц (рис. 3):



Рис 3. 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.4 представлена схема работы этого алгоритма. В ходе формирования объекта-вещества для него определяются следующие параметры: название, формула, молярная масса, эквивалент, составляющие ионы.

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

Формирование свойства вещества

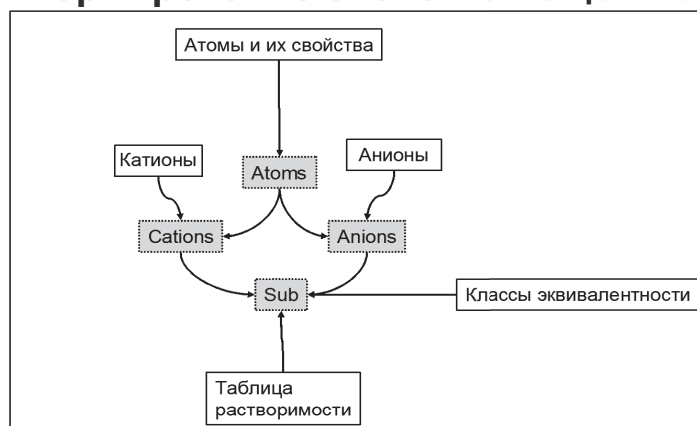


Рис.4. Принципиальная схема алгоритма формирования свойств вещества.

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 ФООМ 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 ДЛЯ
СОЗДАНИЯ УЧЕБНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Использование электронных средств для индивидуализации образования подразумевает разработку ресурсов не только для массового 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. В такой ситуации создание электронных средств поддержки самообразования и частичной автоматизации научных исследований с возможностями удалённого доступа, оказывается весьма эффективным.

В качестве примера рассмотрим приближение 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 [15] сразу превратило ее в средство для организации практикума учащихся, полноценное выполнение заданий которого привело к результатам, представляющим определенный интерес для физики нелокальной плазмы [16].

При дальнейшем развитии модели 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, включённых в модель. 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 [17]. Построение необходимых для расчета

борновских сечений волновых функций многоэлектронных атомов и молекул также требует использования ресурсоемкого метода Хартри-Фока [18] или его упрощенных вариантов, частично использующих эмпирические данные об атомах или молекулах [19].

В настоящее время близка к завершению разработка программных средств построения полуэмпирических волновых функций многоэлектронных атомов и ионов на базе использования генетических алгоритмов [20].

Задачи корректного численного моделирования газоразрядных сред во многом сходны с традиционными задачами химии, но оказываются существенно более простыми. 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.

ВЫВОДЫ:

В данной статье продемонстрирован успешный опыт создания программ, генерирующих уникальный обучающий контент для естественных наук (учебные материалы и проверочные задания). Возможности автоматической генерации позволяют облегчить и автоматизировать труд преподавателя, и дать ему возможность сконцентрироваться на творческих задачах обучения. On-line доступ обеспечивает возможность обучения даже для студентов, расположенных в труднодоступных областях. Продemonстрированный ФООМ подход является перспективным направлением и эффективным средством создания обучающих материалов по физике и химии и имеет перспективы дальнейшего развития..

References:

- [1] Buckminster Fuller, R., Education automation: freeing the scholar to return to his studies. Illinois University

- occasional publication. 1962: Southern Illinois University Press. 88.
- [2] Wasfy, H.M., et al. The Education Sector Revolution: The Automation of Education. in 120th Annual American Society for Engineering Education Conference & Exposition. 2013. Atlanta, GA.
- [3] Butikov, E.I., Physics of Oscillations, in Educational software package. 1992: Sanct-Petersburg, Russia. p. Physics Academic Software, American Institute of Physics, 1997. European Academic Software Award winner (EASA'96), Ninth Annual Educational Software Contest winner (1998, Computers in Physics magazine).
- [4] Butikov, E.I., Planets and Satellites, in Educational software package. 1992. p. Physics Academic Software, American Institute of Physics, 1998. 10th Annual Educational Software Contest winner (1999, Computing in Science and Engineering magazine), European Academic Software Award winner (EASA'2004).
- [5] Kozel, S.M., V.A. Orlov, and i. dr., Otkrytaya fizika. 2008.
- [6] Chircov, A.S., "Dvizhenie zaryazhennyh chastic v silovyh polyah" - paket obuchayuschih programm i fizicheskij konstruktor, in Tr. Mezhdunar. konf. "Sovremennyye tehnologii obucheniya". 1995: SPb. p. 56.
- [7] Interactive Physics: Physics Simulation Software for the Classroom Design Simulation Technologies 2016 [cited 2016 15.08.2016]; Available from: <http://www.design-simulation.com/IP/Index.php>.
- [8] LabView. 2016 [cited 2016 15.08.2016]; Available from: <http://www.labview.ru>.
- [9] Chircov, A.S., Seriya `elektronnyh sbornikov mul'timedijnyh materialov po kursu obschej fiziki: novyye podhody k sozdaniyu `elektronnyh konstruktorov virtual'nyh fizicheskikh modelej s prostym udalennym dostupom. Komp'yuternyye instrumenty v obrazovanii., 2010(6): p. 42 - 56.
- [10] Mikushev, V.M., Ya.M. Somnov, and A.S. Chircov, Konceptiya ispol'zovaniya MOOS-tehnologij dlya distancionnogo aktivnogo individualizirovannogo obucheniya fizike i ee aprobaciya. Mezhdunarodnyj zhurnal `eksperimental'nogo obrazovaniya, 2015(12(3)): p. 359-362.
- [11] Stafeev, S.K., A.S. Mustafaev, and A.S. Chircov. Ispol'zovanie fizicheskogo ob`ektno-orientirovannogo

- modelirovaniya dlya podderzhki uchebnoj i issledovatel'skoj aktivnosti. in V sb. Nauchnyh trudov IIMezhd. Nauchno-prakt. konferencii «Sovremennye obrazovatel'nye tehnologii v prepodavanii estestvenno-nauchnyh i gumanitarnyh disciplin». 2015. SPb.
- [12] Sychev, S.V., Avtomaticheskaya generaciya testovyh zadaniy po himii s kachestvennymi i kolichestvennymi variacijami Informatika i obrazovanie., 2016(5(274)): p. 46-53.
- [13] Sychev, S.V. ChemGenerator 2016; Available from: ChemGenerator.ru.
- [14] Sychev, S.V. and T.G. Nazina, "Sbornik zadach po himii 4 varianta s otvetami i shemami reshenij". 2015, Sankt-Peterburg: OOO "Nevskaya knizhnaya tipografiya". 280.
- [15] Granovskij, V.L., `Elektricheskij tok v gaze. Ustanovivshijsya tok. 1971, M: Nauka.
- [16] Chernysheva, M.V., et al., Komp'yuternoe modelirovaniya pri izuchenii fizicheskikh processov v tlevshem razryade v vozdušnyh smesyah pri nizkih davleniyah. Nauchno-tehnicheskij vestnik informacionnyh tehnologij, mehaniki i optiki, 2014(3 (91)): p. 140 - 148.
- [17] Vajnshtejn, L.A., I.I. Sobel'man, and E.A. Yukov, Secheniya vzbuzhdeniya atomov i ionov `elektronami. 1973, M: Nauka.
- [18] Fok, V.A., Nachala kvantovoj mehaniki. 1976. 376.
- [19] Sobel'man, I.I., Vvedenie v teoriyu atomnyh spektrov. 1963, M: Fizmatgiz. 245.
- [20] Sychov, S.V. and A.S. Chirtsov Genetic Algorithm as a Means for Solving a Radial Schrodinger Equations System. 2016 XIX IEEE International Conference on Soft Computing and Measurements (SCM), 2016. 1, 265-267 DOI: 10.1109/SCM.2016.7519749.