P. V. Zelenkov, I. V. Kovalev, M. V. Karaseva, S.V. Rogov

MULTILINGUAL MODEL OF THE DISTRIBUTED SYSTEM ON THE THESAURUS BASIS

It is covered a model aimed at one-lingual information providing problem solving in information control systems and problems of information structuring, storage and processing in modern distributed multilingual corporative systems of decision-making support.

УДК 543.878:541.127:519.2

В. Р. Пен, И. В. Ковалев, С. И. Левченко

КИНЕТИКА ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИМЕРОВ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ КИНЕТИЧЕСКИМИ ПАРАМЕТРАМИ КАК СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС

Показана возможность представления кинетической модели полихронного процесса деструкции полимера нерегулярного строения как случайного процесса, что дает возможность решить уравнение Колмогорова и найти явный вид плотности распределения для кинетических ансамблей. Полученное решение позволяет моделировать кинетику деструкции полимеров нерегулярного строения, имеющих несколько типов различных химических связей.

Согласно теории Крамерса [1] применительно к кинетике реакций в конденсированных средах, существуют несколько кинетических режимов, зависящих от отношения

$$a = \frac{\tau_y}{\tau_x}, \qquad (1)$$

где τ_y и τ_x – соответственно время релаксации и время пребывания системы вблизи барьера [1]. При $a \to \infty$ скорость реакции

$$C(t) = \int_{K_{\min}}^{K_{\max}} C_0 \exp(-Kt) f(k,0) dk, \qquad (2)$$

где $f(k, 0)$ – распределение в начальный момент времени, определяющее условия приготовления реакционной смеси. Такой режим называется полиэкспоненциальным, а кинетика, соответственно, – полиэкспоненциальной, или полихронной. Уравнение (2) означает, что в каждой точке на оси $C(t)$ генерируется химическая реакция со своей собственной константой скорости $K(t)$, а исходная концентрация реагентов задается начальным распределением $f(k, 0)$. Такие режимы, обусловленные, как правило, стохастической природой влияния растворителя на элементарный акт химического взаимодействия и большим временем релаксации системы, неоднократно наблюдались в средах с малой подвижностью [2; 3] и в процессах делигнификации [4; 5]. При моделировании полихронной кинетики возникает необходимость определения $f(k, 0)$ по экспериментальным данным. Но эта задача, связанная с решением интегрального уравнения (2), является некорректной и требует использования методов регуляризации [6]. Учет особенностей, обусловленных высокомолекулярной природой реагента, дает возможность заменить решение интегрального уравнения параметрической идентификацией.

Для полимеров нерегулярного строения полихронность кинетики может быть следствием существенной химической неоднородности самой макромолекулы, вступающей в химическое взаимодействие, из-за затрудненности перераспределения энергии между ее связями [7]. В этом случае кинетика также будет стохастической ввиду наличия распределения связей в макромолекуле полимера по кинетическим параметрам, а уравнение (2) для таких систем окажется уравнением кинетической кривой.

Поэтому для изменения во времени наблюдаемой константы скорости процесса при первом кинетическом порядке реакции можно записать следующее стохастическое уравнение:

$$\frac{dk}{\partial\tau} = -ak + m \cdot \xi(\tau), \qquad (3)$$

где k – константа скорости; a и m – постоянные; $\xi(\tau)$ – белый шум, т. е. случайная функция, обладающая корреляционной функцией

$$K_\xi(\tau) = \delta(\tau). \qquad (4)$$

Для того чтобы решение уравнения $k(\tau)$ являлось марковским процессом, предположения о виде корреляционной функции недостаточно. Необходимо еще допустить быстрое убывание вероятностной зависимости между ординатами процесса $\xi(\tau)$ с ростом интервала времени между ординатами.

Предположим, что ординаты процесса $\xi(\tau)$ являются независимыми случайными величинами. Тогда функция $k(\tau)$ будет марковским процессом, так как она является решением уравнения первого порядка, однозначно определяемым ее начальным значением, а благодаря независимости ординат функции $\xi(\tau)$ значения последней функции в прошлом никак не влияют на ее значения в будущем. Если функция $\xi(\tau)$, в дополнение к условию (4), является еще и нормальной, то требование независимости ее ординат будет выполнено и, следовательно,

$k(\tau)$ – марковский случайный процесс. Строго говоря, требование нормальности $\xi(\tau)$ слишком сильно. Достаточно потребовать, помимо выражения условия (4), такой скорость убывания вероятностной зависимости между ординатами $\xi(\tau)$, чтобы интеграл от этой функции подчинялся нормальному закону распределения. Отвечающий данному условию белый шум называют белым шумом в узком смысле. И если $\xi(\tau)$ является белым шумом в узком смысле, то функция $k(\tau)$, задаваемая уравнением (3), является марковским процессом.

Уравнению (3) соответствует второе уравнение Колмогорова

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial k}\left(-akf - D\frac{\partial f}{\partial k}\right). \qquad (5)$$

Для полимеров древесины, подвергающихся деструкции, существует достаточно продолжительный начальный интервал времени, в течение которого количество разорванных связей существенно меньше их общего количества в макромолекуле. Очевидно, что в течение этого периода можно постулировать неизменность $f(k, \tau)$ во времени. Тогда $\frac{\partial f(k,0)}{\partial t} = 0$ и уравнение (5) имеет вид

$$\frac{d}{dk}\left(akf + m^2\frac{df}{dk}\right) = 0, \qquad (6)$$

где a и m^2 – определяемые на основании (3) константы; $f(k, \tau)$ – плотность распределения связей по кинетическим параметрам, входящая в уравнение (2), причем $f(0, 0) = f_0(k)$; $\int_{-\infty}^{\infty} f(k,0)dk = 1$; $f(k,t) \geq 0$. На границах области изменения случайного процесса плотность вероятности обращается в нуль.

Когда область (б, в) возможных значений ординат случайного процесса ограничена, то на границах должны выполняться условия

$$\left\{a(t_1,k_1)\,f(t_1,k_1;t_2,k_2) - \frac{1}{2}\frac{\partial\left[b(t_2,k_2)\,f(t_1,k_1;t_2,k_2)\right]}{\partial k_2}\right\}_{k_1-\alpha} = 0, \qquad (7)$$

$$\left\{a(t_1,k_1)\,f(t_1,k_1;t_2,k_2) - \tfrac{1}{2}\frac{\partial\left[b(t_2,k_2)\,f(t_1,k_1;t_2,k_2)\right]}{\partial k_2}\right\}_{k_2-\beta} = 0.$$

Интегрируя (6) и учитывая (7), получим

$$m^2\frac{df}{dk} + akf = 0. \qquad (8)$$

Это уравнение легко решается:

$$f = \frac{c}{m^2}e^{-\frac{ak^2}{m^2}}. \qquad (9)$$

Найденному таким образом решению можно придать форму нормального распределения. Записав его плотность в обычной форме:

$$f(k) = \frac{1}{\sigma_k\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(k-m_k)^2}{2\sigma_k^2}}, \qquad (10)$$

определим постоянную c:

$$c = \frac{m^2}{\sigma_k\sqrt{2\pi}} = \frac{m\sqrt{a}}{\sqrt{\pi}}. \qquad (11)$$

где

$$\sigma_k^2 = \frac{m^2}{2a}. \qquad (12)$$

Если в подвергающейся деструкции макромолекуле есть n связей различного типа, то уравнение (10) будет выполняться для каждой из них. В этом случае

$$f(k,t) = \sum_{i=1}^{n} f_i(k,t). \qquad (13)$$

Таким образом, найденная плотность распределения $f(k, \tau) = f(k)$ имеет $2n$ неизвестных параметров, которые могут быть определены по эксперименту минимизацией соответствующего функционала, характеризующего невязку между экспериментально найденными и вычисленными по модели (2) значениями концентраций полимеров, подвергающихся деструкции:

$$\Phi = \sum_i (C_i - \tilde{C}_i)^2 \xrightarrow[\sigma_k, m_k]{} \min, \qquad (14)$$

что позволяет использовать уравнение (2) для моделирования процессов деструкции полимеров с распределенными кинетическими параметрами.

Библиографический список

1. Базилевский, М. В. Современные теории химических реакций в конденсированной фазе / М. В. Базилевский, В. И. Фаустов // Успехи химии. 1992. Т. 61. С. 1185.

2. Аринштейн, А. Э. Полихронная кинетика химических реакций в конденсированных системах / А. Э. Аринштейн // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеров. сообщения. 2001. № 4. С. 45–46.

3. Белькова, Л. П. Полихронная кинетика процессов делигнификации древесины. 1. Процесс азотнокислой делигнификации / Л. П. Белькова, В. С. Громов, А. И. Михайлов // Химия древесины. 1980. № 6. С. 50–54.

4. Белькова, Л. П. Полихронная кинетика процессов делигнификации древесины. 3. Кинетические закономерности процесса удаления пентозанов древесины березы при азотнокислотной делигнификации / Л. П. Белькова, В. С. Громов, А. И. Михайлов // Химия древесины. 1982. № 1. С. 50–64.

5. Марголин, А. Л. Неопределенность и инварианты решений обратной задачи для реакций первого порядка / А. Л. Марголин // Кинетика и катализ. 2003. Т. 44, № 4. С. 505.

6. Барашев, П. П. Некоторые особенности обратных задач фрактальной химической кинетики / П. П. Барашев // Хим. физика. 2001. Т. 20, № 2. С. 34.

7. Ван Кампен, Н. Г. Стохастические процессы в физике и химии / Н. Г. Ван Кампен. М. : Высш. шк., 1990.

V. R. Pen, I. V. Kovalev, S. I. Levchenko

KINETICS OF DESTRUCTION OF POLYMERS WITH DISTRIBUTED IN KINETIC PARAMETERS AS STOCHASTIC PROCESS

It is shown possibility to present the kinetic model polychronic process polymer of the irregular construction, at row of the suggestions, as stochastic process that enables to solve the getting equation of Kolmogoroff and find the evident type to density of the distribution for kinetic ensembles. Find solution allows to simulate the destruction kinetics of polymers of the irregular construction having several types of the chemical relationships.

УДК 004.588

А. В. Редькина

ОБУЧЕНИЕ СИНТЕЗУ АЛГОРИТМОВ[1]

Рассмотрены вопросы разработки обучающих программ, позволяющих самостоятельно вести поиск решения задач и контролирующих на каждом этапе уровень усвоения знаний. Предложен алгоритм обучения процессу алгоритмизации в курсе программирования с использованием автоматизированной обучающей системы.

Рост интеллектуализации отраслей и технологий порождает все больший спрос на профессиональные и высококвалифицированные кадры. Поэтому работы по интеграции новых информационных технологий в образовательный процесс как для повышения индивидуализации обучения и развития адаптивных методов обучения, так и для дистанционного образования представляются весьма перспективными.

Одной из основных целей внедрения современных автоматизированных систем учебного назначения является повышение доступности и качества профессиональной подготовки обучаемых. Однако, как свидетельствуют факты, существенных успехов в этом направлении удается достичь далеко не всегда. В первую очередь это относится к сфере инженерного и естественно-научного образования, где важную роль в процессе обучения играют практические занятия по решению задач и выполнению лабораторных работ. Основным направлением решения проблемы информатизации инженерно-технического образования является разработка обучающих программ, охватывающих широкий спектр образовательных задач и ориентированных в первую очередь на автоматизацию практикумов, позволяющих приобрести профессиональные навыки [1]. Здесь необходимо отметить работы А. В. Соловова, И. П. Норенкова, А. М. Зимина, С. И. Маслова, А. А. Полякова и др. Для повышения дидактической эффективности обучающих программ все чаще используются технологии экспертных систем.

В настоящее время разработаны мощные информационно-образовательные среды (Learning Space, WebCT, BlackBoard, MOODLE), обеспечивающие поддержку методического комплекса дисциплин и представляющие ту часть знаний, которая называется декларативными знаниями и может быть преобразована в тексты, рисунки, видеоролики и т. д., но не позволяющие вырабатывать процедурную часть знаний – навыки и умения. Существуют свои программы и для обучения процедурной части знания, но они имеют разрозненный характер и не интегрированы в единый учебно-методический комплекс. Чаще всего эти программы решают частные задачи и не обеспечивают поддержку полной траектории обучения, включающей представление знаний, выработку навыков и умений, а также контроль полученных декларативных и процедурных знаний.

Одна из дисциплин, которую нельзя освоить без решения задач, – это программирование. Существуют различные методики обучения программированию. В 1960–1970 гг. основой курса программирования была алгоритмизация, хотя с появлением персональных компьютеров акценты в обучении были смещены в сторону кодирования. Но, тем не менее, именно раздел «Алгоритмизация» определяет всю дальнейшую квалификацию программиста. Этот раздел является сложным для начинающих программистов и трудоемким для преподавателей.

Проблема усугубляется разным стартовым уровнем обучаемых. При обучении программированию необходимо выработать алгоритмическое мышление, а сделать это без индивидуального подхода к каждому студенту невозможно. Необходимость разработки обучающей системы, адаптивной к уровню знаний обучаемых, также диктует и развитие дистанционного образования.

Для исследования возможностей, представляемых для обучения синтезу алгоритмов, был проведен анализ программ, обучающих языкам программирования.

В настоящее время среди программ, содержащих элементы обучения алгоритмизации, можно выделить олим-

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке научно-методического проекта Сибирского федерального университета «Решение некоторых задач прикладной математики и информатики для повышения потенциала образовательного процесса».