

Физико-математические науки

К ЗАДАЧЕ УПРАВЛЕНИЯ ОТНОСИТЕЛЬНО ЗАДАННОЙ СИСТЕМЫ ФУНКЦИОНАЛОВ ПРИ НАЛИЧИИ ОГРАНИЧЕНИЙ НА УПРАВЛЯЮЩИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ

Максимов В.П.

*Пермский государственный национальный
исследовательский университет, Пермь,
e-mail: maksimov@econ.psu.ru*

Рассматриваются задачи управления для систем функционально-дифференциальных уравнений, охватывающих широкий класс моделей, возникающих при исследовании реальных экономических и эколого-экономических процессов с учетом эффектов последействия (запаздывания) и импульсных возмущений (шоков), приводящих к скачкообразному изменению основных показателей функционирования изучаемой системы. Для линейной системы управления с заданным начальным состоянием ставится задача управления относительно заданной системы линейных целевых функционалов: требуется найти управление, порождающее траекторию данной системы, на которой достигаются заданные значения целевых функционалов. Для такой задачи в случае отсутствия ограничений на управляющие воздействия конструктивные методы решения задачи управления, допуска-

ющие компьютерную реализацию, изложены в [1, 2]. При наличии ограничений на управляющие воздействия (например, ресурсные), естественная постановка задачи требует минимизации отклонения целевых функционалов от заданных значений (в метрике соответствующего конечномерного пространства). Для систем управления в виде обыкновенных дифференциальных уравнений такая задача всесторонне изучена в работах Н.Н. Красовского и его учеников (см., например, [3]). Для рассматриваемой задачи управления на основе результатов общей теории [4] получены аналоги конструкций Н.Н. Красовского, существенно использующие свойства матрицы Коши линейной системы с последействием.

Список литературы

1. Maksimov V.P., Rumyantsev A.N. Reliable computing experiment in the study of generalized controllability of linear functional differential systems // Mathematical Modeling. Problems, methods, applications. Ed. by L. Uvarova, A. Latyshev. Kluwer Academic: Plenum Publishers. – 2002. – P. 91–98.
2. Максимов В.П., Чадов А.Л. Гибридные модели в задачах экономической динамики // Вестник Пермского университета. Экономика. – 2011. – № 2. – С. 13–23.
3. Красовский Н.Н. Игровые задачи о встрече движений. – М.: Наука, 1970. – 420 с.
4. Азбелев Н.В., Максимов В.П., Рахматуллина Л.Ф. Введение в теорию функционально-дифференциальных уравнений. – М.: Наука, 1991. – 280 с.

Химические науки

ТРЕНД АКСИОЛОГИЧЕСКОЙ КОНЦЕПЦИИ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ

Волков А.А., Степанов М.Б.

*Московский государственный технический
университет им. Н.Э. Баумана, Москва,
e-mail: aavfn5@mail.ru*

Как показала практика, педагогическая аксиология трансформировалась в аксиологическую педагогику, основной заслугой которой является использование классических идей аксиологии в гуманизации преподаваемых предметов, в том числе химии, в технических университетах. Можно априори выделить следующие основные задачи аксиологической педагогики: 1) усиление личной нравственной мотивации, способствующей возникновению интереса и потребности в изучении химии;

2) расширение кругозора и развитие личности;
3) мировоззренческая – приобретение знаний, создающих единую научную картину мира;
4) формирование шкалы нравственных ценностей;

5) системообразующая – аксиологическое обеспечение связей всех элементов получаемых знаний между собой.

Одновременно следует отметить основные составляющие интегративного подхода в Российском образовании:

- 1) объективные предпосылки;
- 2) разобщенные компоненты;
- 3) механизм объединения;
- 4) установление межкомпонентных связей;
- 5) образование конгломерата;
- 6) синтез новообразования.

При разработке интегративного подхода основанного на идеях классической аксиологии наиболее близким является интегративно-аксиологический подход к преподаванию химии, разработанный профессором Г.Н. Фадеевым. В процессе разработки выделены основные стадии интегративно-аксиологического подхода:

- 1) образовательные ценности;
- 2) ценностные ориентации;
- 3) аксиологизация личности;
- 4) социализация личности;
- 5) появление предметно-аксиологического сознания.

В частности, профессору Г.Н. Фадееву удалось дифференцировать процессы возникновения предметно-аксиологического сознания в процессе изучения предмета «химия». В даль-

нейшем произошла трансформация идей интегративно-аксиологического подхода, поскольку в процессе обучения, по мере накопления объема предметных знаний возрастает роль аксиологического сознания, происходит процесс социализации личности. Изучение процесса социализации личности как проблемы гуманизации предметного обучения, привело к постепенной трансформации идей интегративно-аксиологического подхода в системно-аксиологический подход к обучению.

Исследование системно-аксиологического подхода к обучению позволило распознать отдельные стадии интегративных процессов обучения:

- 1) интегративная суть системно-аксиологического подхода;
- 2) личные смысловые мотивации;
- 3) обоснование аксиологической мотивации;
- 4) формирование компетенций личности;
- 5) появление системно-аксиологических компетенций;
- 6) включение информационных технологий к организации системного технического образования.

В тоже время, еще на начальном этапе теоретической разработки парадигмы непрерывного предметного образования, профессор Г.Н. Фадеев указывал на важную роль (как в теоретическом плане, так и в плане педагогической практической деятельности обучения) информационной составляющей интегративно-аксиологического подхода к методике обучения. Более того, в своей постановочной работе профессор Г.Н. Фадеев показал практически полное совпадение методов и средств обучения с современными положениями теории и практики информатики.

Включение информационных технологий в интегративный и аксиологический подход к организации системного технического образования является следующим этапом в аксиологической педагогике — информационно-аксиологическим. Внедрение информационно-аксиологических подходов в практику технического образования по мере накопления массива информационно — образовательных материалов наиболее системно проводятся доцентом А.А. Волковым в МГТУ им. Н.Э. Баумана.

При формировании информационно-аксиологического подхода необходимо выделить наличие следующих составляющих:

- минимально необходимая база информационно-аксиологических компонентов;
- иерархия наполнения учебных комплексов информационно-аксиологическими компонентами;
- разработка методики и дидактики информационно-аксиологического подхода при использовании on line- и case- технологий обучения;

■ создание информационно-аксиологических комплексов в подготовке компетентных специалистов.

Разработка методики и дидактики информационно-аксиологического подхода при использовании on line- и case- технологий обучения требует введения понятия компетенции, в нашем случае — компетенции в химической практике.

В классическом понимании компетентность — способность выполнять с достаточной эффективностью определенные производственно-общественные функции. Применительно к теории педагогики, компетенция — обладание знаниями и свойствами личности, позволяющими эффективно выполнять необходимые общественно-производственные функции.

Окончательно, систематизацию тренда аксиологической концепции образования можно представить в виде следующих последовательных этапов:

- привлечение теоретических предпосылок классической аксиологии;
- появление аксиологической концепции, как основы педагогических подходов;
- трансформация интегративного подхода в интегративно-аксиологическую практику;
- интегрирование информационных технологий и формирование информационно-аксиологического подхода.

Временные систематизированные сведения по развитию аксиологической педагогики в педагогической практике, позволили выделить временной тренд аксиологической концепции образования:

- ✕ создание теоретических предпосылок классической аксиологии;
- ✕ появление аксиологической педагогики;
- ✕ трансформация аксиологической педагогики в практическую педагогическую аксиологию;
- ✕ создание интегративной теории педагогики;
- ✕ наполнение интегративной теории педагогики идеями педагогической аксиологии и создание интегративно-аксиологического подхода;
- ✕ приложение интегративно-аксиологического подхода к системному техническому образованию и создание системно-аксиологического подхода;
- ✕ интегрирование информационных технологий и интегративно-аксиологического подхода в систему создания компетентного специалиста на основе деятельностной формы обучения;
- ✕ создание информационно-аксиологического подхода.

Ускорение научно-технического прогресса, переход на инновационные методы разработки устройств, использующих информационные технологии, позволяют создать некоторую прогностическую функцию в аксиологических подходах в методиках обучения, аппроксимировать изложенные временные тенденции развития педагогического процесса в направлении создания

в ближайшем будущем инновационно-аксиологических подходов в методиках обучения. Косвенным доказательством такого тренда в практической деятельности является проведенный нами анализ развития научных направлений в области информатики.

Изложенные результаты на наш взгляд позволяют сосредоточить усилия педагогических коллективов на прорывных направлениях учебно-педагогического процесса в области инновационно-аксиологических подходов в методиках обучения.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР СЕМЕЙСТВА ДЕЛАФОССИТА

Голубев А.М., Писаревский А.И.,
Журавлев С.В., Степанов М.Б.

Московский государственный технический
университет им. Н.Э. Баумана, Москва,
e-mail: almgol@rambler.ru

Кристаллы семейства делафоссита (ABX_2 , пр. гр. симметрии $R-3m$) интенсивно исследуются в настоящее время вследствие проявляемых ими свойств и перспективности создания на их основе устройств современной техники [1]. Варьирование состава и модификация кристаллической структуры открывают дополнительные возможности получения новых материалов с прогнозируемыми свойствами. Моделирование кристаллических структур становится неотъемлемой частью научного эксперимента, как предварительный этап синтеза новых соединений, позволяющий теоретическим путем ограничить объем экспериментальных исследований и оценить возможность существования заданной кристаллической структуры.

Особенностью структурного типа делафоссита является наличие слоев катионов A , межатомные расстояния в которых сравнимы с соответствующими расстояниями в структурах металлов. Такие слои чередуются со слоями из совмещенных по ребрам октаэдров $\{BX_6\}$, образованных катионами B и анионами X . Соединение между слоями осуществляется за счет связей $X-A-X$. Делафоссит, $CuFeO_2$ и структуры типа α - $NaFeO_2$ и $CsICl_2$ объединяют в одно семейство вследствие изотипности занимаемых атомами кристаллографических позиций пр. гр. симметрии $R-3m$: $3a$ (катионы A), $3b$ (катионы B) и $6c$ (анионы X , координаты $0, 0, z$). Катионные мотивы данных трех структурных типов аналогичны. Различие в значениях параметра z приводит к различиям в анионном мотиве и в координационных числах и координационных полиэдрах катионов A и B . Значение параметра z 0,10–0,12 и отношения $c/a \approx 5-6$ характерно для делафоссита, и в этом случае катионы A образуют линейные мостики $X-A-X$ между слоями из октаэдров $\{BX_6\}$. При значениях параметра z от 0,22 до 0,26 и отношения $c/a \approx 4-5$ (структурный тип

α - $NaFeO_2$) и катионы A , и катионы B образуют октаэдры, в вершинах которых находятся анионы X . Эти октаэдры, соединяясь по ребрам, образуют слои, связанные между собой за счет соединения по ребрам октаэдров $\{AX_6\}$ и $\{BX_6\}$. Для структурного типа $CsICl_2$ значение параметра $z = 0,2913$, а отношение $c/a = 1,8$. Уменьшение этого отношения связано с увеличением параметра элементарной ячейки a , примерно в два раза и с уменьшением параметра c примерно в полтора раза по сравнению со структурой делафоссита $CuFeO_2$. В структуре $CsICl_2$, в отличие от рассмотренных выше структур, слои катионных полиэдров образованы не октаэдрами, а соединенными по ребрам восьмивершинниками – квадратными антипризмами $\{CsCl_8\}$. Расположены такие слои на более близком расстоянии, вследствие чего они объединяются в трехмерный каркас, в пустотах которого расположены атомы I , дополнительно связывающие полиэдры $\{CsCl_8\}$ мостиками $Cl-I-Cl$.

Вследствие слоистого характера структур семейства делафоссита можно предположить возможность синтеза новых соединений, с производной от делафоссита структурой и увеличением параметров элементарной ячейки, как за счет изменения порядка упаковки и соотношения слоев, так и за счет модификации самих слоев. Соединения с производной от делафоссита структурой с модифицированными слоями были недавно получены [2]. В настоящей работе проведено моделирование кристаллических структур семейства делафоссита – базовых структур, на основе которых планируется поиск новых структур, производных от структур данного семейства.

Для моделирования кристаллических структур нами была использована концепция валентностей химических связей [3], базирующаяся на постулате о равенстве суммы валентностей связей каждого иона его формальному заряду (степени окисления). Расчет валентностей связей осуществлялся по экспоненциальной зависимости [3]:

$$s_{ij} = \exp[(R_{ij} - d_{ij})/b],$$

где R_{ij} и b – табулированные эмпирические константы; d_{ij} – межатомное расстояние. В случае связей $H-F$, $Pt-O$, $Pd-O$ и $I-Cl$, ввиду отсутствия протестированных табличных данных (в том числе для необычных степеней окисления +1 для платины и палладия) использовались значения R_{ij} , найденные в настоящей работе: 0.845, 1.782, 1.718 и 2.297 соответственно. В качестве минимизируемого функционала (Φ) использовалась сумма квадратичных отклонений рассчитанных зарядов ионов от табличных с учетом расстояний анион-анион, для исключения недопустимо коротких расстояний такого типа:

$$\Phi = \sum (\Delta Z_i)^2 + \sum [B/(d_{X-X})^{12}]/2,$$