

УДК 378.147:54:004

Деркач Тетяна Михайлівна

доцент, кандидат хімічних наук, доцент кафедри фізичної та неорганічної хімії
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара, м. Дніпропетровськ, Україна
tml.derkach@gmail.com

Стець Надія Вікторівна

доцент, кандидат хімічних наук, доцент кафедри фізичної та неорганічної хімії
Дніпропетровський національний університет імені Олеся Гончара, м. Дніпропетровськ, Україна
nvstets@i.ua

СЕРЕДОВИЩЕ ПРОГРАМУВАННЯ NETLOGO У НАВЧАННІ ХІМІЇ

Анотація. У статті розглянуті переваги і можливості застосування середовища програмування NetLogo для вивчення хімічних дисциплін в університеті. Розроблені в NetLogo комп'ютерні моделі використані для організації самостійної роботи студентів у вивченні газових законів у рамках курсу неорганічної хімії. Описані особливості моделей, наведені приклади інструкцій для роботи з ними, методичних рекомендацій для викладачів, завдань для студентів, у тому числі і графічних. Показано, що застосування комп'ютерного моделювання значно покращує розуміння теми у всіх студентів, незалежно від рівня їх базової підготовки з хімії.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання; NetLogo; інформаційні технології; навчання хімії.

1. ВСТУП

Постановка проблеми та аналіз останніх досліджень і публікацій. У сучасній освіті комп'ютерне моделювання розглядається як ланка, що об'єднує можливості інформатики та інших дисциплін для формування міцних знань, і є одним з ефективних методів вивчення складних систем. Різні аспекти використання комп'ютерних технологій у вивченні хімії розглядають у своїх роботах такі автори, як В. А. Акопян, О. К. Ахлебінін, Л. П. Величко, О. М. Гаврішина, Є. І. Гетьман, Г. І. Дерябіна, О. А. Журін, Т. Кларк, Р. Козма, Г. М. Курдюмов, А. М. Льовкин, О. Р. Наумов, Д. Рассел, Є. В. Савінкіна, О. О. Сиромятников та ін. Проте можливості застосування методу комп'ютерного моделювання у вивченні базових хімічних дисциплін у вишах залишаються поки що недостатньо вивченими.

Програма підготовки студентів хімічних спеціальностей передбачає використання методу в рамках вивчення деяких спеціальних курсів. Важливу роль у формуванні практичних умінь майбутніх фахівців відіграє експериментальне моделювання складних хіміко-технологічних процесів, що дозволяє підбирати оптимальні умови їх перебігу, розраховувати склад і вихід продуктів реакцій.

На відміну від курсів спеціальної підготовки комп'ютерне моделювання рідко застосовується у вивченні базових хімічних дисциплін. Це створює суперечливу ситуацію. З одного боку, існує низка проблем, типових для студентів, які вивчають хімію, у розв'язанні яких моделювання може бути ефективним [1; 2]. Серед них слід назвати недостатньо або неправильно сформовані ще в школі концептуальні структури хімії, які майже не змінюються за традиційного навчання у виші. Взаємозалежною проблемою є неспроможність багатьох студентів подумки створювати зв'язки між різними рівнями представлення хімічних знань — мікроскопічним, макроскопічними і символічним [7; 8; 10]. Ще одна проблема — слабе вміння студентів розв'язувати задачі, представлені в графічному вигляді, порівняно з іншими видами завдань [3].

З іншого боку, — є фактори, що ускладнюють застосування методу. Слід відзначити складність пакетів прикладних програм (ППП), призначених для моделювання, і пов'язані з цим труднощі вбудовування роботи з їх застосуванням у традиційний навчальний процес. На молодших курсах, коли вивчаються базові хімічні дисципліни, студенти часто ще не мають достатнього рівня інформатичної підготовки. Пізніше, під час вивчення спецкурсів, вони використовують професійні PPP (HyperChem, MOPAC, GAMESS, Gaussian) або інтегровані програмні середовища (MathCAD, MatLab). Наразі PPP одночасно і вивчаються, і служать засобами, за допомогою яких розв'язуються навчальні завдання. Тому засвоєнню можливостей і функцій програм приділяється багато уваги як у попередньому навчанні, так і під час виконання лабораторних робіт.

За існуючих навчальних планів вивчення базових дисциплін виділення додаткового часу на освоєння спеціальних PPP є малоімовірним. Тому такий критерій, як простота використання програм для моделювання, а також відповідність їх контенту змісту дисципліни, на даний момент істотно обмежує вибір викладачів.

Триваюче в останні роки активне впровадження інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) в освітню практику відкриває нові можливості для розв'язання згаданих вище проблем. Зокрема, застосування середовища програмування NetLogo дозволяє візуалізувати зв'язки між макроскопічними і мікроскопічними рівнями представлення даних, явищами матеріального світу і символічними формами опису, а також моделювати ситуації, які розвиваються в часі [5–8]. Мова програмування, що використовується в NetLogo, досить проста, студенти і викладачі можуть створювати в цьому середовищі власні моделі. У той же час це досить потужна мова, з використанням якої його авторами в рамках дослідницького проекту була створена ціла низка моделей, що відносяться до різних розділів хімії [10]. На сайті проекту [9] наводяться і доступні до вільного використання десятки розроблених моделей. Також тут можна скачати останню версію мови.

Метою статті є висвітлення особливостей застосування моделей NetLogo в процесі самостійної роботи студентів-першокурсників у вивченні газових законів у рамках базового курсу «Неорганічної хімії». Вибір теми був заснований на тому, що для цього розділу характерна втрата зв'язків між макроскопічним і мікроскопічним представленнями досліджуваних явищ [4; 7].

2. МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Дослідження проводилось у рамках НДР «Формування компетентностей фахівців хімічних спеціальностей із застосуванням сучасних інформаційних технологій» Дніпропетровського національного університету імені Олеся Гончара (далі ДНУ). Використовувались такі методи: аналіз теоретичних джерел з проблем підготовки студентів хімічних спеціальностей засобами ІКТ, вивчення й узагальнення передового досвіду застосування комп'ютерних моделей у навчанні хімії, оцінювання, аналіз.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

3.1. Методика дослідження

Апробація методики роботи з моделями була проведена на хімічному факультеті ДНУ за участю 45 студентів першого курсу. Перед початком роботи студенти прослухали оглядову лекцію «Основні поняття і закони хімії». З ідеологією

застосування моделювання в навчанні, технологією роботи в середовищі й основними елементами управління моделей вони були ознайомлені під час практичного заняття з дисципліни «Вступ до фаху» (розрив між лекцією і практичним заняттям склав не більше двох днів). Практичне заняття проводили в аудиторії, оснащений ноутбуком і проектором викладача, а також власними ноутбуками студентів, які були забезпечені необхідним ПЗ. Ознайомлення із середовищем NetLogo разом з практичною роботою з освоєння перших 3-х моделей теми «Газові закони» зайняло 80 хв. аудиторного часу. Після цього їм було запропоновано домашнє завдання з моделювання в середовищі NetLogo. Студенти отримали покрокові інструкції для роботи з 8-ми моделями (включаючи ті три, які вони вже практично опрацювали на занятті), а також завдання, відповіді на які вони згодом записували в зошити. Домашні завдання, в основному, припускали зміни студентом якогось параметра комп'ютерної моделі, і запис результату за графіком на екрані. Студенти будували залежності, змінюючи число частинок, температуру, об'єм тощо, самостійно виводили математичні закономірності, використовували їх для прогнозування. Із залежностей, отриманих емпірично з допомогою моделювання, вони виводили рівняння стану ідеального газу вже в прийнятному наукою вигляді. На виконання самостійної роботи з моделями було заплановано 4 години.

Узагальнена методика роботи з моделями вимагала спочатку дослідження взаємодій на мікрорівні з мінімальною кількістю компонентів системи (наприклад, рух частинки в певному об'ємі), а потім — поступове ускладнення (додавання частинок, зміна температури, об'єму і т. д.).

3.2. Особливості моделей NetLogo

Раніше ніж перейти до розглядання досліджених моделей NetLogo варто звернути увагу на ті їх властивості, що дозволяють ефективніше організувати навчання. У середовищі передбачені елементи управління моделями, які надають можливість запобігти зайвому підвищенню когнітивного навантаження студентів під час роботи. Кілька прикладів наведено в табл. 1.

Таблиця 1

Деякі елементи управління моделями

Назва	Функції	Приклад застосування
Слайдер SLOW-MOTION-SLIDER	Управляє швидкістю динамічної візуалізації	Уповільнення руху частинок для полегшення спостереження за ними
Кнопки: SHOW-SPEED-AS-COLOR? VISUALIZE-SPEED?	Дозволяють позначити швидкість частинок кольором або за допомогою скалярних стрілок	Перехід від меншої до більшої швидкості частинок відображається: зміною їх кольору від темно- до світло-фіолетового; трьома різними кольорами; різною довжиною стрілок
Командний рядок CommandCenter	Дозволяє акцентувати увагу, задаючи властивості окремих об'єктів моделі: змінювати колір, швидкість, фокус спостереження	Виділення кольором і малювання шляху окремої частки; «заморожування» часток порівняно з однією, що швидко рухається та ін.

Такі елементи дозволяють: організувати покрокову роботу, уповільнювати / прискорювати показ, повторювати його декілька разів, щоб сконцентрувати увагу на різних аспектах зображення; акцентувати увагу на релевантній інформації; змінювати параметри моделі і спостерігати, що наразі відбувається; наочно показувати зв'язки між

різними рівнями уявлень (наприклад, мікроскопічним і символічним) та здійснювати переходи між ними.

3.3. Загальна характеристика моделей NetLogo для вивчення газових законів

У проведеному дослідженні для організації самостійної роботи студентів застосовували вісім моделей. Умовно їх можна поділити на чотири групи.

Група 1 включає модель 1 «Велосипедна шина» і модель 2 «Зміна тиску». Їх можна віднести до тренувальних, у яких студенти відпрацьовують операції роботи із середовищем NetLogo й елементи моделювання різних систем.

Група 2 — модель 3 «Рух часточок», яка містить спеціальні засоби для зміни вигляду візуального відображення процесів на мікрорівні (приклади у табл. 1).

Група 3 є найбільшою і включає моделі 4–7 з назвами «Число часточок та тиск», «Температура та тиск», «Об'єм та тиск», «Закон ідеального газу» відповідно. Як можна побачити з назв моделей, вони дозволяють дослідити зв'язок між різними характеристиками системи.

Група 4 включає модель 8 «Редактор моделей», яка передбачає творчу роботу студентів і дає їм можливість самостійно моделювати вигадані системи.

Розглянемо приклади технології і методичного забезпечення (інструкцій і завдань для студентів, рекомендації для викладачів) організації роботи деяких моделей із виділених груп, звертаючи увагу на особливості їх вивчення.

3.4. Приклади технологій роботи з моделями

Після запуску середовища NetLogo з «Бібліотеки моделей» курсу «Connected Chemistry» вибирають потрібну модель. Першою вивчають модель шини, яка символізує будь-який контейнер з газом, що має фіксований об'єм.

3.4.1. Модель 1 «Велосипедна шина»

Модель представляє поведінку часток газу в контейнері, який може мати різний розмір і пропорції. Вид робочого вікна екрану моделі 1 представлений на рис. 1а, елементи управління — в табл. 2.

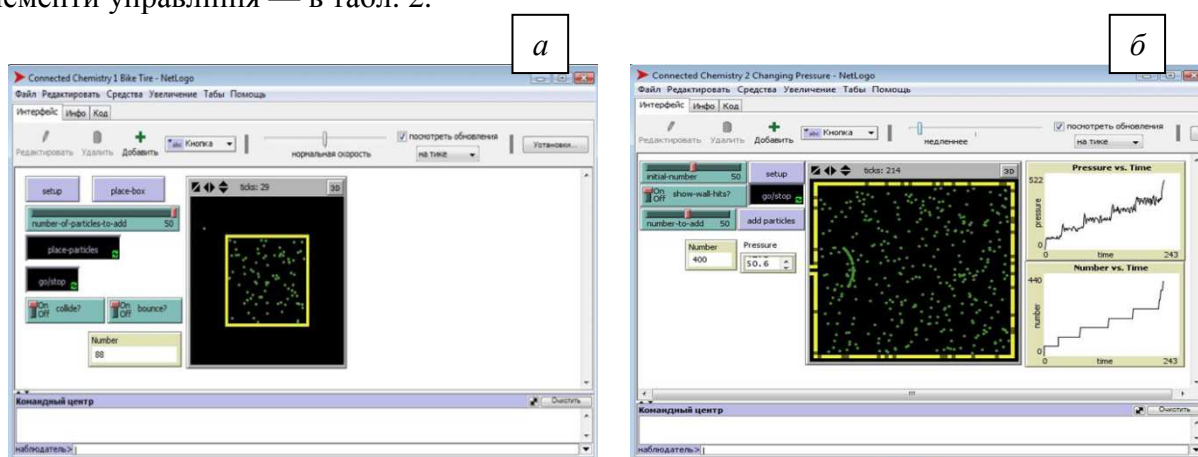


Рис. 1. Робоче вікно екрану моделей 1 (а) і 2 (б)

Число часток, що додаються всередину контейнера або з його зовнішнього боку, може змінюватися, подібно до правил їх взаємодії. Модель допомагає освоїти

призначений для користувача інтерфейс NetLogo, оцінити можливі обмеження і спрощення моделювання.

Таблиця 2

Елементи управління моделями 1 і 2

Назва елемента	Опис і функції
WORLD&VIEW	Чорна область відображення моделі
SLOW-MOTION-SLIDER	Повзунок над вікном WORLD&VIEW, дозволяє змінити темп демонстрації
Кнопки і перемикачі	
SETUP	Задає початкові умови
GO/STOP	Запускає і зупиняє модель
PLACE-BOX	Точка відліку для малювання контейнера
PLACE-PARTICLES	Дозволяє малювати часточки
ADD-PARTICLES	Додає порції часток у WORLD&VIEW у процесі роботи моделі
SHOW-WALL-HITS?	Дає можливість включити/вимкнути демонстрацію місця удару частки об стінку
COLLIDE?	Включає/вимикає зіткнення часток одна з одною
BOUNCE?	Включає/вимикає зіткнення часток зі стінками контейнера
Слайдери	
INITIAL-NUMBER	Задає початкове число часток газу
NUMBER-TO-ADD	Задає число часток газу, які додаються
Монітори показують:	
NUMBER	кількість часток у полі WORLD&VIEW
PRESSURE	загальний тиск у контейнері
CLOCK	скільки разів процедура була запущена
Графіки показують зміну:	
PRESSURE VS. TIME	тиску в контейнері з часом
NUMBER VS. TIM	числа часток в контейнері з часом

Технологія роботи.

1. Натиснути кнопку SETUP і PLACE-BOX.
2. Клацнути у будь-якому місті чорної частини області WORLD&VIEW. З'являться жовті стінки чотирикутного контейнера. Його форма може змінюватися.
3. Повторити кроки 1–2, щоб створити контейнери різних форм і розмірів.
4. Натиснути на кнопку PLACE-PARTICLES. Вона залишиться виділеною темним кольором.
5. Клацнути у будь-якій точці області WORLD&VIEW, щоб намалювати частки. При кожному клацанні в полі усередині і навколо контейнера з'являються зелені невеликі кулі — зображення молекул газу.
6. Натиснути GO/STOP і простежити, що відбувається.
7. Вивчити дію перемикача COLLIDE? Включити і вимкнути його, повторюючи кроки 4–6 і спостерігаючи ефекти.
8. Вивчити дію перемикача BOUNCE? Включити і вимкнути його, повторюючи кроки 4–6 і спостерігаючи ефекти.

Запитання для самостійної роботи студентів.

- 1) Наскільки правильно ця модель відображає основні положення молекулярно-кінетичної теорії?
- 2) У чому ця модель некоректно демонструє реальний світ?

Рекомендації для викладачів. Студенти часто не можуть оцінити зону дії й обмеження моделі, не усвідомлюють, що будь-яка модель — представлення, що лише ідеалізується, і плутають її з дійсністю. Тому під час вивчення моделей обов'язково треба робити акцент на спрощеннях, які застосовані. Для наведеної моделі це:

а) зображення реальної шини, що складається з декількох частин (гумової покритишки, внутрішньої камери й обода) у вигляді двовимірної коробки, яка не змінює своїх розмірів у разі додавання в неї часток газу, а лише дозволяє чітко розділити області усередині і поза шиною;

б) зображення повітря не у вигляді суміші, а у вигляді абстрактних часток газу без вказівки їх виду. Для більш точної моделі необхідно брати до уваги, що повітря є сумішшю газів (азоту, кисню, аргону тощо), і молекули кожного з них відрізняються;

в) відсутність зображення складових стінок контейнера, і, відповідно, ігнорування можливості виникнення взаємодії між ними і частками газу.

3.4.2. Модель 2 «Зміна тиску»

Дозволяє досліджувати співвідношення між числом часток і тиском газу в контейнері з фіксованим об'ємом, імітуючи ефект накачування шини. Початкове число часток можна варіювати і потім збільшувати його, додаючи порції газу через клапан на лівій стінці контейнера. Вид робочого вікна екрану моделі 2 представлений на рис. 1б, елементи управління — у табл. 2.

Технологія роботи.

1. Повзунком слайдера INITIAL-NUMBER встановити початкове число часток. Змінювати INITIAL-NUMBER під час роботи моделі неможливо.

2. Натиснути кнопку SETUP, потім — GO/STOP і простежити, що відбувається.

4. Включити SHOW-WALL-HITS?, щоб візуалізувати попадання часток у стіну.

5. За допомогою слайдера NUMBER-TO-ADD задати число часток, які додаватимуться в контейнер через клапан.

6. Натиснути на кнопку ADD-PARTICLES.

7. Порівняти графіки зміни числа часток і тиску в часі. Повторити додавання часток кілька разів. Спостерігати зміни на графіках.

8. За допомогою SLOW-MOTION-SLIDER уповільнити рух часток так, щоб можна було виявити, у які моменти датчик тиску в моделі показує нуль.

Запитання для самостійної роботи студентів.

1) Чи створюють тиск частки, коли вони не ударяються об стінки контейнера?

2) Уповільнивши рух, простежте, як змінюється шлях часток за збільшення їх кількості. Об стінку частки ударяються: а) рідше; б) частіше; в) частота не змінюється?

3) Як змінюється кількість ударів однієї частки об стінку після додавання нової порції газу?

4) Чому значення тиску змінюється впродовж тривалого часу, навіть, коли кількість часток залишається постійною? Чим обумовлена наявність затримки між моментом, коли додані частки, і, коли тиск починає зростати? Скільки часу потрібно для його стабілізації? Опишіть, як можна зробити графік тиску більш згладженим.

5) Для якої системи легше помітити коливання значень тиску: що містить одну частку або тисячу часток? Чому?

Рекомендації для викладачів. Студенти мають відзначити, що тиск завжди коливається в якомусь діапазоні значень. Якщо число часток не змінюється, воно стабілізується в межах вузького і чіткого діапазону значень. З графіку видно, що після додавання часток тиск різко зростає (після невеликої затримки з моменту початку руху часток в контейнері до досягнення ними стінки), потім падає і поступово встановлюється між новим діапазоном значень.

Необхідно звернути увагу студентів на те, що в реальному житті частки газу рухаються набагато швидше, ніж у моделі. Проте, у сучасних вимірвальних приладах

(таких, як спектрометри), різниця в часі руху молекул різного типу використовується для ідентифікації складу газів.

3.4.3. Модель 3 «Рух часток»

Ця модель є точнішою і враховує зміну кінетичної енергії часток під час їх зіткнень. Для розрахунків приймають, що частки мають круглу форму і певний розмір, на відміну від попередніх моделей, де частки представляють як безрозмірні точки. Зіткнення часток розглядають як пружне. Обмін кінетичної енергії й імпульсу між двома частками відбувається згідно із законами збереження енергії й імпульсу уздовж осі зіткнення. У моделі використовують колір для візуалізації швидкості часток, виділення окремої частки на фоні інших, зображають шляхи руху тощо.

Вид робочого вікна екрану моделі представлений на рис. 2а, нові елементи управління — у табл. 3.

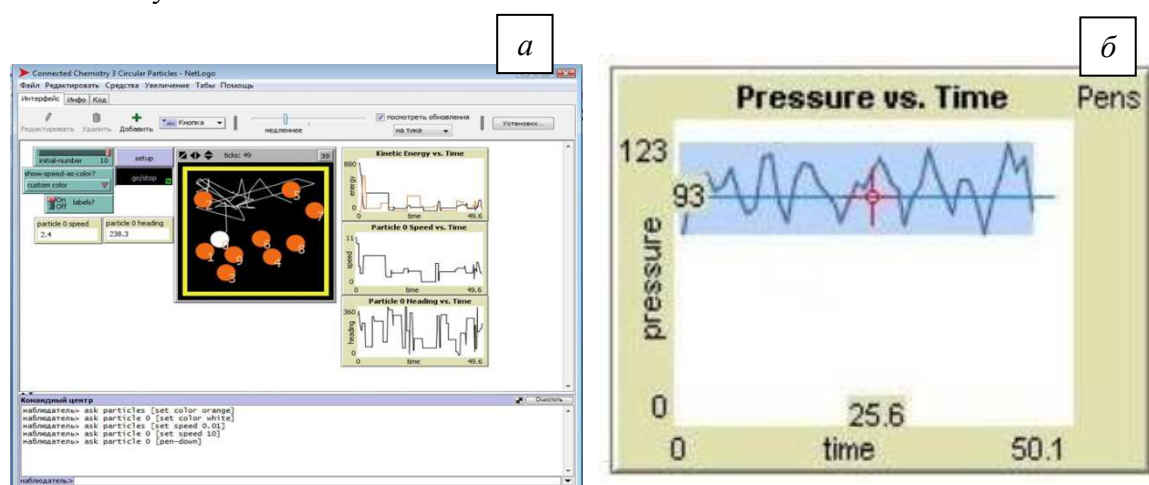


Рис. 2. Робоче вікно моделі 3 (а) і елемент «перехрестя» (б)

Таблиця 3

Нові елементи управління моделлю 3

Назва елемента	Опис і функції
Кнопки і перемикачі	
SHOW-SPEED-AS-COLOR?	Візуалізує швидкість часток, використовуючи кольорну палітру: «red-green-blue», «violet-shades», «one-color», «custom-color»
LABELS?	Включає/вимикає відображення ідентифікаційного номера
Монітори показують:	
PARTICLE 0 SPEED	швидкість однієї з часток
PARTICLE 0 HEADING	курс однієї з часток (нульової)
Графіки показують зміну:	
KINETIC ENERGY VS. TIME	кінетичної енергії двох часток
PARTICLE 0 SPEED VS. TIME	швидкості нульової частки з часом
PARTICLE 0 HEADING	зміна кута напрямку руху нульової частки з часом

Технологія роботи.

1. Натиснути й утримувати кнопку SHOW-SPEED-AS-COLOR. У списку, що розгортається, по черзі вибрати перераховані в табл. 3 кольорні схеми і запустити модель на виконання. Спостерігати зміну кольору швидких і повільніших часток.

2. Для ідентифікації кожної частки включити LABELS?, натиснути кнопки SETUP і GO/STOP. Звернути увагу на нумерацію часток. Якщо їх 10 — перша матиме номер 0, остання — 9.

Командний рядок Command Center є новим елементом інтерфейсу, працювати з ним треба за допомогою миші і клавіатури. Усі команди мають бути введені в нижній частині Command Center поряд із символами: O> .

Розглянемо роботу з Command Center на прикладі виділення кольором часток:

3. Натиснути кнопку SETUP і потім SHOW-SPEED-AS-COLOR. Зі списку вибрати «custom-color».

4. Увести за допомогою клавіатури в порожній простір нижньої частини Command Center поряд з O> ask particles [set color orange].

5. Натиснути Enter, а потім GO/STOP, щоб перевірити дію цієї команди (усі частки мають забарвитися в помаранчевий колір).

6. Увести наступні команди в Command Center: ask particle 0 [set color white] і ask particle 1 [set color pink].

7. Після введення команд натиснути Enter і GO/STOP, щоб побачити їх ефект. Повторити кроки, вибираючи інший колір.

Аналогічно можна простежити шлях частинки, відрегулювати швидкість часток, задати початковий кут руху частинки.

Запитання для самостійної роботи студентів.

1) Чи змінюється кінетична енергія частки, коли вона ударяється об стінку контейнера? Що відбувається, коли частка потрапляє в стінку?

2) Які докази того, що у разі зіткнення загальна енергія двох часток зберігається, можна побачити на графіках моделі?

Рекомендації для викладачів. Для подальшого вивчення моделей студентам необхідно використовувати значення параметрів, які вони отримують з графіків. У моделі тиск постійно змінюється, що ускладнює вибір правильного його значення для запису в таблиці даних. Тому використовують спеціальний інструмент — перехрестя, на яке перетворюється зображення покажчика миші у разі наведення на графік (рис. 2б).

Перехрестя має два числа, пов'язані з його поточним положенням: під ним і зліва від нього. Це необхідні дані для запису координат. На рис. 2б перехрестя знаходиться приблизно посередині між найбільшим і найменшим значеннями тиску. Студенти мають навчитися уявляти собі, де знаходиться середина діапазону коливань тиску, щоб з більшою точністю визначати необхідне значення.

Оскільки технології вивчення взаємозв'язків між параметрами системи для моделей 4–7 подібні, розглянемо їх роботу на прикладі двох моделей: моделі 4, що вивчає вплив одного параметру; і моделі 7, яка дозволяє вивести узагальнене рівняння для урахування впливу тиску, температури й об'єму.

3.4.4. Модель 4 «Число часток і тиск»

Дозволяє встановити зв'язок між кількістю часток газу в контейнері і тиском у системі. Додаючи певні порції часток у контейнер і здійснюючи вимірювання тиску, студенти самостійно виводять рівняння відповідної математичної залежності. Вид робочого вікна екрану моделі представлений на рис. 3а, нові елементи управління — у табл. 4.

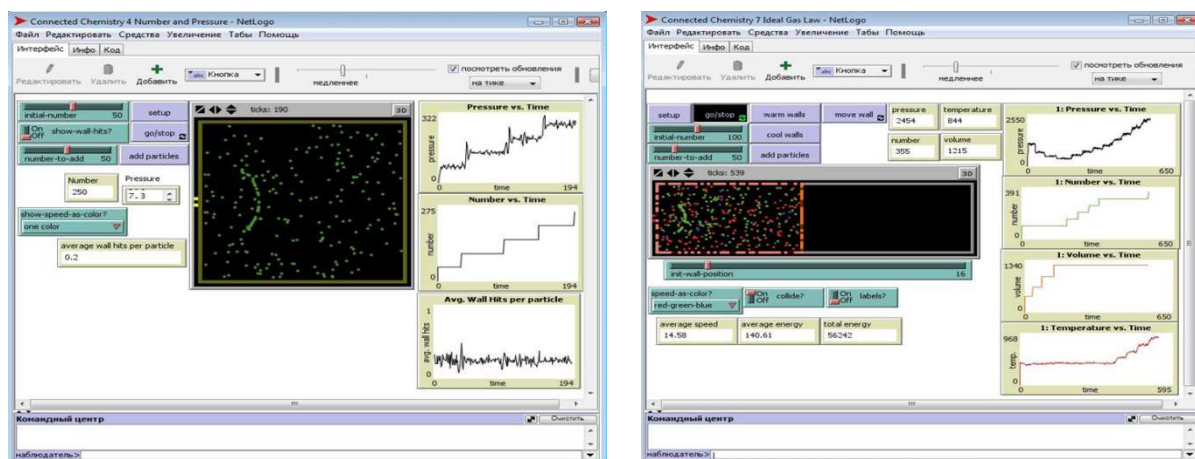


Рис. 3. Робочі вікна моделей 4 (а) і 7 (б)

Таблиця 4

Нові елементи управління моделями 4–7

Назва елемента	Опис і функції
Слайдери	
INITIAL-WALL-POSITION	Регулює початковий об'єм, встановленням положення помаранчевої стінки контейнера
Кнопки і перемикачі	
WARM UP WALLS	Збільшує температуру стінок контейнера (при натисканні)
COOL DOWN WALLS	Зменшує температуру стінок контейнера (при натисканні)
MOVE-WALL	Тимчасово призупиняє роботу моделі для коригування об'єму контейнера
Монітори показують:	
VOLUME	об'єм контейнера
GAS TEMP	температуру газу
AVERAGE WALL HITS PER PARTICLE	середню кількість ударів часток об стінки
AVERAGE SPEED	середню швидкість часток
AVERAGE ENERGY	середню кінетичну енергію часток
TOTAL KINETIC ENERGY	повну кінетичну енергію часток
WALL HITS PER PARTICLE	кількість ударів частки об стінки
Графіки показують зміну:	
GAS TEMP. VS. TIME	температури часток усередині контейнера з часом
VOLUME VS. TIME	об'єму контейнера з часом
AVG. WALL HITS PER PARTICLE	середньої кількості ударів часточок у часі
AVERAGE SPEEDS VS. TIME	середньої швидкості часток усередині контейнера з часом

Технологія роботи.

Спочатку частки не рухаються, тому початковий тиск дорівнює нулю.

1. Встановити і запустити модель з 50 частками, виміряти значення тиску для цього числа часток.

2. Додати ще 25 часток, виміряти значення тиску для цього числа часток, записати значення в таблицю (див. табл. 5).

Шаблон таблиці для запису параметрів моделей

Число часток	Тиск
50	
75	
...	
200	

3. Додати ще 25 або більше часток.

4. Повторити кроки 2–3, поки табл. 5 не буде завершена. За результатами побудувати графік залежності тиску від числа часток.

Запитання і завдання для самостійної роботи студентів.

1) Яке математичне відношення краще всього описує отримані дані?

Якщо ви виявили лінійний зв'язок, ваш результат відповідає тому, що учені встановили при дослідженні газів. Лінійна залежність може бути описана у вигляді лінійного рівняння виду:

$$y = m_1 \cdot x + b_1.$$

де m_1 характеризує нахил лінії.

2) Визначте нахил вашого графіка. Він показує зміну тиску, що припадає на одну частку. Як ви думаєте, чи зміниться частота, з якою одна частка ударяється об стінку, якщо часток у контейнері стане більше? Поясніть, чому вона буде або не буде змінюватись?

3) Підтвердьте припущення результатами дослідження моделі. Встановіть і запустіть модель з різною кількістю часток. Вивчіть середню кількість ударів об стіну, що припадає на одну частку.

Ви повинні побачити, що середнє значення попадань в стіну, що припадає на частку, коливається близько одного і того ж значення. Воно не залежить від того, скільки часток знаходиться в контейнері. Цей факт і демонструє лінійна залежність. Постійність нахилу графіка означає, що більша кількість часток викликає більший тиск, проте відношення тиску до числа часток, що обумовлюють цей тиск, залишається постійним.

У наступному завданні необхідно використати символні математичні рівняння для того, щоб зрозуміти зв'язок між ними і процесами, що вивчаються. Треба вивести рівняння, яке допомогло б передбачити, що станеться, коли будуть змінені налаштування комп'ютерної моделі.

4) Замінивши $y = P$ і N , перепишіть лінійне рівняння в таке

$$P = m_1 \cdot N + b_1.$$

де P — тиск, N — число часток, m_1 — нахил, b_1 — значення по ОУ, апроксимоване до нуля. Використайте це рівняння, щоб зробити прогноз для P при $N = 10$; 100; 1000 і 3240 часток. Перевірте його за допомогою комп'ютерної моделі.

5) Розрахуйте помилку прогнозу у % для 10 і для 100 часток. Чому один із прогнозів виявився точнішим? Чому запис результатів декількох досліджень й обчислення середнього значення дає результати, ближчі до передбачених?

Рекомендації для викладачів. Слід обговорити зі студентами спрощення, які були зроблені. А саме: частки газу рухаються зі швидкістю, яку можна помітити людині; повітря складається тільки з одного виду молекул газу; під час накачування шини її об'єм не змінюється; контейнер повністю жорсткий і містить всього сотню часток; геометрія стін шини зображена у вигляді двовимірної коробки. Можна запропонувати

студентам для кожного з перерахованих спрощень пояснити, що ми хотіли б уявити, що відбувається насправді і чому спрощення в моделі є корисним або необхідним.

3.4.5. Модель 7 «Закон ідеального газу»

Модель призначена для дослідження відношення між числом часток, об'ємом контейнера, тиском і температурою газу. Частки моделюються як кульки без внутрішньої енергії, за винятком енергії, пов'язаної з їх рухом. Зіткнення між частками є пружними.

Температура стінок після встановлення залишається постійною упродовж експерименту, при нагріванні вони змінюватимуть колір. Правила поведінки часток під час їх удару об стінку контейнера: частки мають певну кінетичну енергію; ударяючись, частки отримують енергію від стінки контейнера, у них встановлюється нова енергія, як середнє між кінетичною енергією частки й енергією стінки; частки змінюють швидкість і напрям після удару об стінку.

Вид робочого вікна екрану моделі 7 представлений на рис. 4б, елементи управління — у табл. 4.

Технологія роботи.

1. Відрегулювати INITIAL-NUMBER. Натиснути SETUP і GO/STOP, простежити, що відбувається. Почекаати, поки температура газу стабілізується.

2. Натиснути WARM-WALLS або COOL-WALLS кілька разів. Почекаати, поки температура газу стабілізується.

3. Натиснути MOVE-WALL. Частки на мить зупиняться. Перемістити курсор у місце розташування праворуч від поточної позиції помаранчевої стінки усередині WORLD&VIEW. Клацнути на цьому місці, стінка переміститься у вказане положення. Натиснути GO/STOP. Рух часток буде відновлений.

4. Відрегулювати NUMBER-TO-ADD і натиснути ADD-PARTICLES.

5. Регулюванням параметрів (кількість часток, температура, об'єм контейнера) зробити тиск максимальним. Записати відповідні параметри в табл. 6.

6. За допомогою рівняння, запропонованого раніше (його іноді представляють у такому вигляді:

$$p = \frac{kT \cdot N}{V}), \text{ розрахувати } k \text{ і записати в табл. 6. Отримане значення } k \text{ має бути}$$

близьким до 10.

Таблиця 6

Шаблон таблиці для запису параметрів моделі

Параметри	Максимальне значення, що викликається величиною
Тиск газу (F)	
Число часток (N)	
Температура газу (T)	
Об'єм контейнера (V)	
Константа (k)	

Для різних комбінацій параметрів (N , T і V) порівняти величину тиску, яка встановлюється після запуску моделі, і розраховану за рівнянням з використанням k . Записати отримані результати в табл. 7. Для цього:

7. Вибрати набір значень для N , T і V , які доступні у рамках моделі. Такий набір буде названий *комбінація 1*. За допомогою рівняння і відомого k розрахувати тиск e

системі з параметрами *комбінації 1*. Вписати результат як прогноз у відповідну колонку табл. 7.

Таблиця 7

Шаблон таблиці для порівняння даних прогнозу і моделювання

Параметри	Комбінація 1		Комбінація 2		Комбінація 3	
	модель	прогноз	модель	прогноз	модель	прогноз
Тиск газу ()						
Число часток (N)						
Температура газу (T)						
Об'єм контейнера (V)						
Константа (k)						

8. Встановити і запустити модель з параметрами *комбінації 1*. Можливо, що деякі значення температури й об'єму не встановлюватимуться точно, оскільки модель дозволяє збільшувати і зменшувати їх з фіксованим кроком. Треба намагатися отримати якомога ближчі значення до *комбінації 1*. За графіком визначити тиск. Записати значення в колонку «модель» табл. 7.

Порівняти тиск, розрахований за рівнянням, і значення, отримане під час моделювання для інших умов. Для усіх комбінацій встановити однаковий прогнозований тиск.

9. Для *комбінації 2* в колонці прогноз записати будь-яку нову комбінацію NIT . Відповідне значення V розрахувати за допомогою рівняння закону ідеального газу (значення k є постійним).

10. Для *комбінації 3* в колонці прогноз записати ще одну комбінацію NIT , яка відрізняється від попередніх двох варіантів. Об'єм V розрахувати за допомогою рівняння закону ідеального газу

11. Встановити і запустити моделі для *комбінацій 2* і *3*. Постаратися отримати значення параметрів моделей, якомога ближчі до табл. 7. Записати свідчення в колонку «модель». Порівняти прогнозовані значення з величинами тиску, визначеними для моделі.

Рекомендації для викладачів. Необхідно звернути увагу студентів на те, що коли нагрівають або охолоджують стінки, швидкість часток змінюється не відразу. Температура газу також змінюється поступово, поки не стабілізується. Потрібно провести аналогію з реальними системами, у яких процеси теплообміну відбуваються постійно. У моделі не зображують склад стінок контейнера, а показують просто передачу енергії, яка насправді пов'язана з взаємодією мікрочасток твердої речовини з частками газу, що рухаються.

Варто розглянути відмінність моделі від реального життя. Багато контейнерів, які містять газ, виготовляють з міцних і жорстких матеріалів. Проте, їхні об'єми піддаються змінам за рахунок деформації. У повітряних кулях, камерах, шприцах і поршнях дуже чітко видно зміну об'єму, пов'язану з кількістю або тиском газу усередині.

Підкреслити треба те, що комп'ютерна модель використовує умовні одиниці для змінних одиниць, таких як температура, час і об'єм. І значення для k , також як і одиниці вимірювання, не відповідають масштабам явищ реальних систем. У реальних системах тиск вимірюється, наприклад, в кПа. Число ж молекул у газових балонах настільки велике, що використовують спеціальну міру кількості речовини — молі.

Потрібно пояснити, що рівняння стану ідеального газу записують в еквівалентних формах, наприклад: $P \cdot V = k \cdot T \cdot N$, які можна використати для знаходження будь-якого з параметрів, якщо значення усіх інших змінних і константи відомі. У підручниках рівняння стану ідеального газу, як правило, наводиться в схожій формі, з невеликими відмінностями:

$P \cdot V = k \cdot T \cdot N$ — виведений студентами самостійно варіант;

$P \cdot V = R \cdot T \cdot \nu$ — вид рівняння, який часто наводять у підручниках.

Як бачимо, у рівнянні стану ідеального газу N замінюють на ν , щоб позначити міру кількості молів газу. Крім того, константу k , розраховану для комп'ютерної моделі, замінюють на R , розраховану для реальних систем.

Основною особливістю останньої з досліджених моделей (модель 8 — «Редактор моделей з частками») є те, що вона надає студентам зручні інструменти для самостійного моделювання. Вони можуть придумати будь-яку цікаву ситуацію (реальну або уявну), створити модель будь-якої системи на свій розсуд та спостерігати ефекти після запуску її на виконання.

4. ВИСНОВКИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ПОДАЛЬШИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

У ході нашого експерименту встановлено, що використання комп'ютерного моделювання в середовищі NetLogo в процесі самостійної роботи студентів забезпечує стійке поліпшення рівня хімічних знань під час вивчення теми «Газові закони» дисципліни «Неорганічна хімія». Отриманий ефект слабо залежить від рівня базової підготовки і трохи більше виражений для студентів із слабкою і середньою успішністю.

Застосування комп'ютерного моделювання здатне скоректувати деякі неправильно сформовані в школі поняття у студентів. Використаний підхід забезпечив перехід від оперування глобальними, недиференційованими образами хімічної реальності до застосування в міркуваннях усе більш розділених на частини її елементів, властивостей і стосунків. Це привело до збільшення здатності студентів подумки створювати зв'язки між різними рівнями представлень матеріалу і забезпечило найкращий приріст знань саме для формування найскладніших зв'язків.

На початковому етапі експерименту інтерпретація математичних рівнянь у поєднанні з графіками і без них порівняно з іншими формами представлення інформації викликала найбільше утруднення у студентів. Самостійне зайняття з використанням комп'ютерних моделей сприяло значному прогресу в умінні працювати з рівняннями і графіками. Приріст балів для таких завдань, отриманих на підсумковому тестуванні, виявився значно вищий, ніж прогрес у балах для інших форм, що ґрунтуються на образному або вербальному представленні. Отже, використання комп'ютерних моделей у середовищі NetLogo може розглядатися як ефективний засіб для поліпшення навичок роботи з графічною інформацією.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Волкова Е. В. Общий универсальный закон развития, развитие когнитивных структур химического знания и химические способности / Е. В. Волкова. — Екатеринбург : Изд-во Уральского университета, 2008. — 512 с.
2. Деркач Т. М. Информатизация викладання хімії: від теорії до практики / Т. М. Деркач. — Дніпропетровськ : Вид-во ДНУ, 2011. — 225 с.

3. Деркач Т. М. Порівняльний аналіз якості виконання студентами алгоритмічних, концептуальних та графічних хімічних задач / Т. М. Деркач // Наукові записки НПУ імені М. П. Драгоманова. — Серія «Пед. науки». — 2011. — № 96. — С. 70–81.
4. Деркач Т. М. Эффективность компьютерного моделирования при изучении газовых законов в курсе «Неорганическая химия» / Т. М. Деркач // Международный электронный журнал «Образовательные технологии и общество (Educational Technology & Society)». — 2013. — V. 16. — № 2. — С. 345–361. — Режим доступа до журналу : <http://ifets.ieee.org/russian/periodical/journal.html>.
5. Патаракин Е. Д. Моделирование организационных отношений с использованием «связей» Netlogo / Е. Д. Патаракин, Б. Б. Ярмахов // Международный электронный журнал «Образовательные технологии и общество (Educational Technology & Society)». — 2009. — V. 12. — № 2. — Р. 409–422 [Электронный ресурс]. — Режим доступа : <http://ifets.ieee.org/russian/periodical/journal.html>.
6. Ядровская М. В. Моделирование в реализации когнитивного обучения / М. В. Ядровская // Международный электронный журнал «Образовательные технологии и общество (Educational Technology & Society)». — 2012. — V. 15. — № 2. — Р. 602–617 [Электронный ресурс]. — Режим доступа : <http://ifets.ieee.org/russian/periodical/journal.html>.
7. Levy S. T. Crossing Levels and Representations: The Connected Chemistry (CC1) Curriculum / S. T. Levy, U. Wilensky // Journal of Science Education and Technology. — 2009. — V. 18. — P. 224–242.
8. Levy S. T. Students' Learning with the Connected Chemistry (CC1) Curriculum: Navigating the Complexities of the Particulate World / S. T. Levy, U. Wilensky // Journal of Science Education and Technology. — 2009. — V. 18. — P. 243–254.
9. NetLogo Models Library // Center for Connected Learning and Computer-Based Modeling. — Northwestern University, Evanston, IL [Электронный ресурс]. — Режим доступа : <http://ccl.northwestern.edu/NetLogo/models/index.cgi>.
10. Steff M. Connected Chemistry — incorporating interactive simulations into the chemistry classroom / M. Steff, U. Wilensky // J. Sci. Educ. Technol. — 2003. — Vol. 12. — № 3. — P. 285–302.

Матеріал надійшов до редакції 03.12.2013 р.

СРЕДА ПРОГРАММИРОВАНИЯ NETLOGO В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ

Деркач Татьяна Михайловна

доцент, кандидат химических наук, доцент кафедры физической и неорганической химии
Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара, г. Днепропетровск, Украина
tml.derkach@gmail.com

Стець Надежда Викторовна

доцент, кандидат химических наук, доцент кафедры физической и неорганической химии
Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара, г. Днепропетровск, Украина
nvstets@i.ua

Аннотация. В статье рассмотрены преимущества и возможности применения среды программирования NetLogo в обучении химическим дисциплинам в университете. Созданные в NetLogo компьютерные модели использованы в процессе самостоятельной работы студентов при изучении газовых законов в рамках курса неорганической химии. Описаны особенности моделей, приведены краткие инструкции по работе с ними, методические рекомендации для преподавателей, примеры заданий для студентов. Показано, что применение компьютерного моделирования значительно улучшает понимание темы у всех студентов, независимо от уровня их базовой подготовки по химии, а также работу учащихся с графическими заданиями.

Ключевые слова: компьютерное моделирование; NetLogo; информационные технологии; обучение химии.

NETLOGO PROGRAMMING ENVIRONMENT IN CHEMISTRY INSTRUCTION

Tetiana M. Derkach

PhD in Chemistry, Reader at the Department of Physical and Inorganic Chemistry
Oles Honchar Dnipropetrovsk National University, Dnipropetrovsk, Ukraine
tml.derkach@gmail.com

Nadiia V. Stets

PhD in Chemistry, Reader at the Department of Physical and Inorganic Chemistry
Oles Honchar Dnipropetrovsk National University, Dnipropetrovsk, Ukraine
nvstets@i.ua

Abstract. Advantages and scope for application of NetLogo programming environment in chemical discipline instruction have been considered for university curricula. Computer models designed by means of NetLogo language have been used for students' self-administering tests to study gas laws within the frames of university course of inorganic chemistry. Model features, brief manuals as well as teachers' guides and some examples of students' tasks have been described. The use of computer modelling significantly improves both students' understanding of a considered theme and work with graphics tasks. The effect is independent of the level of students' basic training in chemistry.

Keywords: computer simulation; NetLogo; information technologies; chemistry instruction.

REFERENCES (TRANSLATED AND TRANSLITERATED)

1. Volkova E. V. General universal law of development, development of cognitive structures of chemical knowledge, and chemical ability / E. V. Volkova. — Ekaterinburg : UrFU, 2008. — 512 p. (in Russian)
2. Derkach T. M. Informatisation of chemistry teaching: from theory to practice / T. M. Derkach. — Dnepropetrovsk : DNU, 2011. — 225 p. (in Ukrainian)
3. Derkach T. M. Comparative analysis of quality of performance of algorithmic, conceptual and graphic chemical tasks by students / T. M. Derkach // *Naukovi zapiski NPU Dragomanova*. — Ser. «Ped. nauki». — 2011. — № 96. — P.70–81. (in Ukrainian)
4. Derkach T. M. Efficiency of computer simulation during the study of gas laws in the «Inorganic Chemistry» course / T. M. Derkach // *Educational Technology & Society*. — 2013. — V. 16. — № 2. — P. 345–361 [online]. — Available from : <http://ifets.ieee.org/russian/periodical/journal.html>. (in Russian)
5. Patarakin E. D. Modeling of organisational relationships with the of Netlogo «links» / E. D. Patarakin, B. B. Yarmahov // *Educational Technology & Society*. — 2009. — V. 12. — № 2. — P. 409–422 [online]. — Available from : <http://ifets.ieee.org/russian/periodical/journal.html>. (in Russian)
6. Yadrovskaiia M. V. Simulation in the realisation of cognitive training / M. V. Yadrovskaiia // *Educational Technology & Society*. — 2012. — V. 15. — № 2. — P. 602–617 [online]. — Available from : <http://ifets.ieee.org/russian/periodical/journal.html>. (in Russian)
7. Levy S. T. Crossing Levels and Representations: The Connected Chemistry (CC1) Curriculum / S. T. Levy, U. Wilensky // *Journal of Science Education and Technology*. — 2009. — V. 18. — P. 224–242.
8. Levy S. T. Students' Learning with the Connected Chemistry (CC1) Curriculum: Navigating the Complexities of the Particulate World / S. T. Levy, U. Wilensky // *Journal of Science Education and Technology*. — 2009. — V. 18. — P. 243–254. (in English)
9. NetLogo Models Library // Center for Connected Learning and Computer-Based Modeling. — Northwestern University, Evanston, IL [online]. — Available from : <http://ccl.northwestern.edu/NetLogo/models/index.cgi>. (in English)
10. Stieff M. Connected Chemistry — incorporating interactive simulations into the chemistry classroom / M. Stieff, U. Wilensky // *J. Sci. Educ. Technol.* — 2003. — Vol. 12. — № 3. — P. 285–302. (in English)