

УДК 004.9

## ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ КАК ИНСТРУМЕНТ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ТЕХНОЛОГИИ МЕЖДИСЦИПЛИНАРНОЙ ИНТЕГРАЦИИ ХИМИИ И ИНФОРМАТИКИ

**Бурляева Елена Валерьевна<sup>1</sup>,***д-р техн. наук, профессор,  
e-mail: burlyaeva@mirea.ru,***Ганина Наталия Викторовна<sup>1</sup>,***канд. техн. наук, доцент,  
e-mail: ganina\_n@mirea.ru,***Кузнецов Андрей Сергеевич<sup>2</sup>,***канд. техн. наук,  
e-mail: kuznetsovas@rgsu.net,***Разливинская Светлана Владимировна<sup>1</sup>,***канд. техн. наук,  
e-mail: razlivinskaya@mirea.ru,*<sup>1</sup>МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий  
имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия<sup>2</sup>Российский государственный социальный университет, г. Москва, Россия

В статье представлены особенности решения обратных задач в рамках образовательной технологии параллельной междисциплинарной интеграции химии и информатики: обсуждение содержательной постановки и переход к математической задаче на семинарах по химии, реализация решения в программной среде на занятиях по информатике и последующий анализ полученных результатов на семинарах по химии. Обоснован акцент на решение знакомых студентам химических задач с использованием различных программных средств. Особое внимание уделено программным средствам решения уравнений и систем уравнений. Описаны основные тематические блоки, связанные с решением обратных задач: задачи на смешение растворов (дробно-линейные уравнения), задачи на взаимодействие смеси металлов с кислотами-окислителями (системы линейных уравнений), задачи на химическое равновесие (нелинейные уравнения-полиномы). Последовательность блоков определяется усложнением как химических задач, так и программных средств для их решения. Представлены результаты применения разработанной образовательной технологии в Институте тонких химических технологий Российского технологического университета, свидетельствующие об ее эффективности.

**Ключевые слова:** качество образования, образовательная технология, параллельная междисциплинарная интеграция, химическая информатика, обратные задачи, Scilab

## INVERSE PROBLEMS AS AN EDUCATIONAL TECHNOLOGY TOOL FOR INTERDISCIPLINARY INTEGRATION OF CHEMISTRY AND COMPUTER SCIENCE

**Burlyaeva Ye.V.<sup>1</sup>,***doctor of technical sciences, professor,  
e-mail: burlyaeva@mirea.ru,***Ganina N.V.<sup>1</sup>,***candidate of technical sciences, associate professor,  
e-mail: ganina\_n@mirea.ru,***Kuznetsov A.S.<sup>2</sup>,***candidate of technical sciences,  
e-mail: kuznetsovas@rgsu.net,*

Razlivinskaya S.V.<sup>1</sup>,

candidate of technical sciences,

e-mail: razlivinskaya@mirea.ru,

<sup>1</sup>MIREA – Russian Technological University, Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies,  
Moscow, Russia

<sup>2</sup>Russian State Social University, Moscow, Russia

*The features of solving inverse problems within the framework of the educational technology of parallel interdisciplinary integration of chemistry and computer science are presented: discussion of the meaningful formulation and transition to a mathematical problem at chemistry seminars, implementation of the solution in a software environment in computer classes and subsequent analysis of the obtained results at chemistry seminars. The emphasis on solving chemical problems familiar to students using various software tools is justified. Special attention is paid to software tools for solving equations and systems of equations. The main thematic blocks related to solving inverse problems are described: problems for mixing solutions (fractional linear equations), problems for the interaction of a mixture of metals with oxidizing acids (systems of linear equations), problems for chemical equilibrium (nonlinear equations-polynomials). The sequence of blocks is determined by the complexity of both chemical tasks and software tools for their solution. The results of the application of the developed educational technology are presented at the Institute of Fine Chemical Technologies of the Russian Technological University, which indicates its effectiveness.*

**Keywords:** quality of education, edutech, parallel interdisciplinary integration, chemical informatics, inverse problems, Scilab

DOI 10.21777/2500-2112-2024-2-21-32

## Введение

Образовательные технологии междисциплинарной интеграции являются одним из современных инструментов повышения качества образования [1]. Большое внимание в настоящее время уделяется интеграции естественно-научных дисциплин и математики [2; 3], математики и информатики [4; 5]. Имеются работы, посвященные взаимной интеграции физики, химии и биологии в рамках средней школы [6]. Междисциплинарная интеграция химии и информатики, к сожалению, как правило, сводится к использованию средств визуализации структуры молекул или демонстрации видео химических опытов. На протяжении ряда лет авторы разрабатывают и внедряют технологию междисциплинарной интеграции химии и информатики в РТУ МИРЭА для студентов Института тонких химических технологий (ИТХТ) имени М.В. Ломоносова, которые обучаются по направлениям подготовки «Химия», «Химическая технология», «Биотехнология», «Техносферная безопасность» [7]. В основу этой технологии положено применение средств информационных технологий при решении химических задач. В данной статье в рамках предложенной технологии рассматриваются методы постановки и решения обратных задач.

Обратные задачи, как правило, вызывают сложности у первокурсников. Решение задач в школьных курсах естественно-научных дисциплин, как правило, для обучающихся основано на подходе «выразить и подставить» [8]. Представление об уравнениях и решении уравнений при таком подходе не формируется. У учащихся возникает уверенность, что если задача не имеет аналитического решения – формулы, то она не может быть решена вовсе [9]. Этот подход существенно осложняет адаптацию студентов к обучению в вузе, поскольку при изучении естественно-научных дисциплин в вузе описание процессов и явлений часто приводит к уравнениям, для которых получить аналитическое решение невозможно [10]. Анализ таких моделей на обычных семинарах («на бумаге») затруднен. Помимо этого, в рамках школьного обучения решение задачи, как правило, сводится к вычислению единственного значения, в то время как в вузе акцент делается на изучении и анализе закономерностей, взаимосвязей процессов и явлений. В частности, выполняется анализ качественных и количественных изменений зависимого параметра при тех или иных изменениях исходных данных. Использование вычислительных

средств и методов позволяет существенно расширить диапазон решаемых студентами задач, таким образом, улучшается понимание и выработка навыков практического применения изучаемых студентами закономерностей [11].

### **Постановка и решение обратных задач в рамках междисциплинарной образовательной технологии интеграции химии и информатики**

Предложенная авторами образовательная технология интеграции химии и информатики ориентирована на студентов младших курсов, обучающихся по направлениям подготовки, связанным с химией. Подавляющее большинство таких студентов ЕГЭ по информатике не сдавали, уровень их знаний по информатике, как правило, низок. Отметим, что учащиеся, как правило, осознают пробелы в своих знаниях и убеждены в отсутствии у них способностей к изучению информатики. Уровень их профильной подготовки, к сожалению, также существенно различается.

Интеграция дисциплин «Общая химия» и «Информатика» для студентов ИТХТ позволяет, с одной стороны, повысить интерес студентов к изучению информатики за счет использования примеров знакомых им химических задач [12; 13]. С другой стороны, повторение понятий и соотношений химии, углубление их количественного анализа с использованием вычислительных экспериментов способствует более глубокому изучению профильных дисциплин. Отметим, что дисциплины «Информатика» и «Общая химия» в ИТХТ, как и в большинстве вузов химического профиля, изучаются параллельно на 1-м курсе. Таким образом, осуществляется параллельная интеграция, что требует переработки рабочих программ соответствующих дисциплин.

В рамках междисциплинарной интеграции на семинарах по химии преподаватель акцентирует внимание студентов на переходах от прямых задач к обратным. Для каждой поставленной задачи выполняется анализ исходных данных и исследуемых зависимостей, проверка, возможно ли аналитическое решение или требуется использование численных методов. Существенное внимание уделяется переходу от содержательной постановки задачи к математической. Таким образом, еще на младших курсах формируется представление о целях и методах математического моделирования. На практических работах по информатике переход от содержательной постановки задачи к математической также рассматривается, но большее значение придается реализации математических методов решения задачи с помощью различных программных сред. Полученные результаты вычислительных экспериментов анализируются как с математической, так и с содержательной точки зрения. В тех случаях, когда использовались численные методы решения обратных задач, внимание студентов акцентируется на важности выбора начального приближения, понятии погрешности вычислений и сопоставлении ее с погрешностью измерений исследуемых величин.

### **Программные средства реализации решения обратных задач**

В качестве программных сред для реализации решения обратных задач используются электронные таблицы и математический пакет Scilab. Предполагается, что некоторые навыки применения электронных таблиц для выполнения рутинных расчетов приобретены студентами в школе при изучении информатики. В рамках предложенной образовательной технологии акцент делается на подпрограммах и встроенных функциях, предназначенных для решения уравнений и систем уравнений. Для решения уравнений предлагается использование подпрограммы «Подбор параметра». Решение систем линейных уравнений в электронных таблицах выполняется матричным методом с использованием встроенных функций для вычисления определителя матрицы, обратной матрицы, произведения матриц. Отметим, что, хотя в электронных таблицах имеются встроенные средства для решения обратных задач, они мало связаны с математическими постановками задач решения уравнений и систем уравнений и с этой точки зрения недостаточно наглядны.

Математический пакет Scilab является свободно распространяемым, что позволяет использовать его не только в компьютерных классах вуза, но и при самостоятельной работе студентов. Существен-

ным преимуществом пакета является его мультиплатформенность – он может работать под управлением различных операционных систем, включая MS Windows и Linux. Пакет предназначен для решения широкого круга математических задач и включает в себя большое количество встроенных функций и подпрограмм, в том числе, реализующих численные методы решения уравнений и систем уравнений. Представление средств работы с массивами как обычных арифметических операций позволяет приблизить текст программ в Scilab к обычным математическим формулам, что облегчает создание и понимание программ. Отметим также, что язык пакета Scilab близок к языку широко распространенного коммерческого пакета Matlab. К недостаткам Scilab можно отнести недостаточно мощные средства форматирования чисел и графиков.

### **Основные тематические блоки, связанные с постановкой и решением обратных задач**

Далее рассматриваются примеры тематических блоков, разработанных авторами в рамках интеграции дисциплин «Информатика» и «Общая химия». Порядок следования блоков определяется усложнением как содержательных химических задач, так и математических методов, применяемых для их решения. Отметим, что в рамках каждого тематического блока каждому студенту предлагается индивидуальное задание, отличающееся не только числовыми значениями, но и исследуемыми параметрами.

#### ***Задачи на смешение растворов***

Первый тематический блок основан на решении задач на смешение растворов. В основе таких задач лежит понятие массовой доли как отношения массы растворенного вещества к общей массе раствора. В прямых задачах заданы параметры исходных растворов (масса и массовая доля растворенного вещества) и требуется вычислить параметры раствора, полученного в результате смешения исходных растворов. Расчетные формулы для решения таких задач известны учащимся, они различаются в зависимости от количества смешиваемых растворов (обычно рассматривают 2 или 3 раствора) и их параметров. В частности, один из смешиваемых растворов может являться чистым растворителем, тогда при составлении расчетной формулы необходимо учесть, что масса растворенного вещества в таком растворе равна нулю. Возможен и обратный вариант, когда в раствор добавляют твердое вещество, тогда масса растворенного вещества совпадает с массой добавляемого вещества. Расчетные формулы для вычисления массовой доли растворенного вещества в смешанном растворе представляют собой дробно-линейные зависимости.

В обратных задачах необходимо определить один из параметров исходных растворов по заданным параметрам итогового раствора. Решение таких задач в рамках школьного курса выполняется аналитическим методом и сводится к необходимости выразить неизвестный параметр из исходной формулы. При решении таких задач на практических занятиях по информатике студентам предлагается использовать не только аналитический метод, но и приближенные методы, основанные на решении уравнений [14].

Изучение этих методов начинается с выполнения подбора исследуемого параметра вручную в электронной таблице: студент изменяет значение параметра, при этом изменяется значение массовой доли растворенного вещества в итоговом растворе, которое сравнивается с требуемым значением. В процессе подбора преподаватель вводит понятие погрешности вычислений. Далее студент использует в электронных таблицах подпрограмму «Подбор параметра». Эта программа избавляет учащегося от рутинных действий, связанных с подбором значений, однако вычисленное значение массовой доли растворенного вещества в итоговом растворе не полностью совпадает с требуемым, что позволяет преподавателю еще раз привлечь внимание студента к погрешности вычислений. Далее студент выполняет ту же задачу с использованием встроенной функции `fsolve` математического пакета Scilab. Эта функция предназначена для решения уравнений. Для того, чтобы ей воспользоваться, студенту необходимо записать уравнение в каноническом виде сначала как математическую формулу, а затем как функцию пользователя в среде Scilab. Отметим, что реализация численных методов решения уравнений при таком подходе не рассматривается, используются встроенные средства математического пакета Scilab. Таким образом, внимание студента сосредоточено именно на формулировке решаемой задачи.

Как правило, большинство студентов в состоянии описать характер зависимости между параметром исходного раствора и массовой долей растворенного вещества в итоговом растворе, например, ответить на вопрос: «как будет изменяться массовая доля растворенного вещества в итоговом растворе при увеличении массы исходного раствора, в котором массовая доля растворенного вещества больше, чем во втором исходном растворе?». Однако формулировки обратных зависимостей вызывают у студентов сложности, поэтому на занятии по информатике учащимся предлагается исследовать решение обратной задачи, не только составив уравнение, но и решив его для различных значений массовой доли растворенного вещества в итоговом растворе. По результатам исследования требуется построить график и описать характер полученной зависимости. На рисунке 1 приведен пример решения обратной задачи в пакете Scilab: исходные данные, расчетная таблица и график, построенный по результатам вычислений.

Отметим, что при построении графика исследуется зависимость массовой доли растворенного вещества в итоговом растворе от массы исходного раствора, поскольку вывод по результатам решения должен быть сформулирован следующим образом: «Для повышения массовой доли растворенного вещества в итоговом растворе необходимо увеличить массу исходного раствора с большей массовой долей растворенного вещества. Массовая доля растворенного вещества в итоговом растворе может принимать значения в интервале между массовыми долями растворенного вещества в исходных растворах (от 5 до 17 %)».

Таким образом, в рамках первого тематического блока вводится понятие обратной задачи, представления о взаимосвязи обратной задачи и уравнения, методах решения уравнений и погрешности решения, вырабатываются навыки использования различных программных сред для решения уравнений.

#### *Задачи на взаимодействие смеси металлов с кислотами-окислителями*

Следующий тематический блок направлен на решение задач, связанных с окислительно-восстановительными реакциями, которые происходят при взаимодействии смеси металлов с кислотами-окислителями. Каждый из металлов взаимодействует с кислотой, между собой металлы не взаимодействуют. В таких реакциях образуются соль, газ и, возможно, вода. В прямых задачах массы металлов, входящих в состав смеси, известны, необходимо рассчитать количество газа, выделяющегося в результате каждой из реакций, и затем определить общий объем газа. В обратных задачах по массе смеси металлов и общему объему газа необходимо определить массовый состав исходной смеси. Решение обратной задачи сводится к решению системы линейных уравнений, в которых неизвестно количество металлов [15]. Одно уравнение связывает массы металлов с массой всей смеси. Массы металлов рассчитываются как произведение молярной массы на количество металла. Таким образом, коэффициентами первого линейного уравнения являются молярные массы металлов, а свободным членом – общая масса смеси. Второе уравнение связывает количество металлов и количество выделившегося газа с учетом стехиометрических коэффициентов. Коэффициенты этого уравнения представляют собой отношения стехиометрического коэффициента газа к стехиометрическому коэффициенту металла, а свободный член равен количеству газа. Составление системы уравнений подробно обсуждается на семинарах по химии. Поскольку уравнений всего два, решение системы может быть выполнено и без использования компьютеров. Однако представляет интерес проведение исследования изменений количественного состава смеси при изменении одного из параметров (либо общей массы смеси, либо объема выделившегося газа) при неизменном втором параметре. В этом случае систему линейных уравнений необходимо решить несколько раз для различных векторов свободных членов. Такое исследование выполняется на занятиях по информатике.

Для решения системы линейных уравнений в электронных таблицах используется матричный метод, требующий вычисления обратной матрицы и произведения матриц. Для реализации матричных операций в электронных таблицах имеются встроенные функции, и аргументы, и результаты вычислений которых представляют собой диапазоны ячеек. Поскольку матрица коэффициентов остается неизменной, необходимо задать диапазон ячеек, в котором значение одного параметра изменяется, а значение другого остается неизменным, записать матричную формулу с использованием абсолютных ссылок на коэффициенты системы и скопировать эту формулу для получения диапазона решений.

В пакете Scilab решение систем линейных уравнений также можно выполнять матричным методом. Наиболее наглядной реализацией этого метода является оператор «обратный слэш». Матричная

формула с использованием этого оператора выглядит как «деление» матрицы коэффициентов на вектор свободных членов системы линейных уравнений. Для анализа зависимости количественного состава смеси студентам потребуется определить массив значений изменяемого параметра и построить цикл по элементам этого массива. Результаты вычислений необходимо представить в виде матрицы из двух строк, каждая строка такой матрицы определяет количество соответствующего металла, а каждый столбец задает решение системы уравнений при заданном значении параметра. Для вычисления масс металлов эту матрицу необходимо умножить на вектор молярных масс.

"ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ"

"1-й РАСТВОР: Масса 500 г"

"Массовая доля растворенного вещества 5%"

"2-й РАСТВОР: Массовая доля растворенного вещества 17%"

"ИТОГ. РАСТВОР: Массовая доля растворенного вещества изменяется от 5% до 15%"

"РАСЧЕТ"

"w-массовая доля растворенного вещества в итоговом растворе"

"mt-масса 2-го исходного раствора, рассчитанная аналитически"

"me-масса 2-го исходного раствора, полученная при решении уравнения"

| "w, %" | mt, г     | me, г"    |
|--------|-----------|-----------|
| 5.     | 0.        | 4.394D-16 |
| 6.     | 45.454545 | 45.454545 |
| 7.     | 100.      | 100.      |
| 8.     | 166.66667 | 166.66667 |
| 9.     | 250.      | 250.      |
| 10.    | 357.14286 | 357.14286 |
| 11.    | 500.      | 500.      |
| 12.    | 700.      | 700.      |
| 13.    | 1000.     | 1000.     |
| 14.    | 1500.     | 1500.     |
| 15.    | 2500.     | 2500.     |

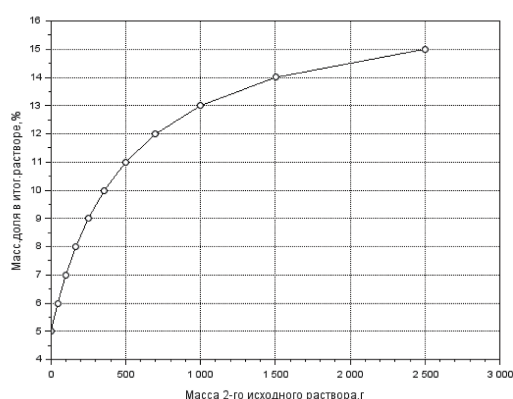
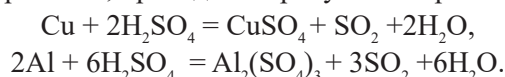


Рисунок 1 – Пример результатов решения в пакете Scilab обратной задачи о смешении растворов

Пример решения в пакете Scilab обратной задачи для смеси меди и алюминия, взаимодействующей с серной кислотой при нагревании, приведен на рисунке 2. Уравнения соответствующих реакций:



**"ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ"****"Масса смеси 50 г"****"Объем газа V от 12 до 40 л"****"РЕЗУЛЬТАТЫ"**

| <b>"V</b> | <b>m (Cu)</b> | <b>m (Al) "</b> |
|-----------|---------------|-----------------|
| 12.       | 49.440994     | 0.5590062       |
| 14.       | 46.086957     | 3.9130435       |
| 16.       | 42.732919     | 7.2670807       |
| 18.       | 39.378882     | 10.621118       |
| 20.       | 36.024845     | 13.975155       |
| 22.       | 32.670807     | 17.329193       |
| 24.       | 29.31677      | 20.68323        |
| 26.       | 25.962733     | 24.037267       |
| 28.       | 22.608696     | 27.391304       |
| 30.       | 19.254658     | 30.745342       |
| 32.       | 15.900621     | 34.099379       |
| 34.       | 12.546584     | 37.453416       |
| 36.       | 9.1925466     | 40.807453       |
| 38.       | 5.8385093     | 44.161491       |
| 40.       | 2.484472      | 47.515528       |

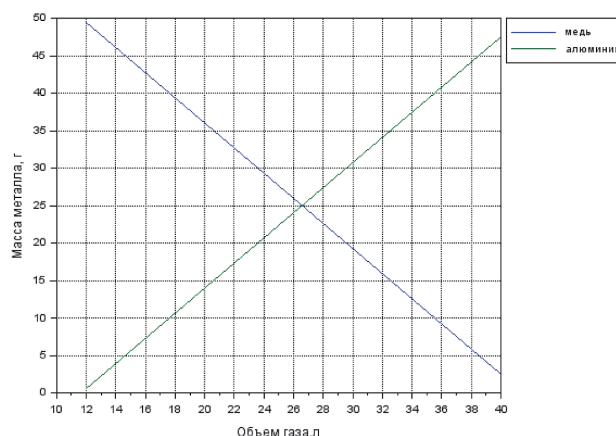


Рисунок 2 – Пример результатов решения в пакете Scilab обратной задачи о количественном составе смеси металлов

Полученные результаты с содержательной точки зрения обсуждаются на семинаре по химии. Преподаватель обращает внимание студентов на линейную зависимость массы металла от объема выделившегося газа. Характер зависимости (обратная для более тяжелого металла и прямая для более легкого) также требует содержательного обсуждения. Следует также отметить, что объем выделившегося газа не может принимать произвольные значения. В качестве задания для самостоятельной работы можно предложить студентам рассчитать граничные значения – какой объем газа выделится из 50 г меди (если смесь вообще не содержит алюминий) и какой – из 50 г алюминия (если смесь полностью состоит из алюминия).

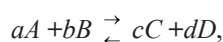
Таким образом, в рамках второго тематического блока уточняется представление об обратных задачах, формируется представление о возможности подбора нескольких взаимосвязанных параметров путем решения системы линейных уравнений и вырабатываются навыки решения систем линейных уравнений в различных программных средах.

### ***Задачи на химическое равновесие***

Эта группа задач опирается на закон действующих масс, который связывает между собой концентрации веществ, участвующих в обратимой химической реакции, после установления химического равновесия. Постановка прямой задачи химического равновесия предполагает вычисление константы равновесия по известным начальным концентрациям участвующих в реакции веществ и равновесной концентрации одного из этих веществ. При решении этой задачи необходимо последовательно рассчитать изменения концентраций всех веществ с учетом стехиометрических коэффициентов, затем определить равновесные концентрации всех веществ и подставить эти концентрации в формулу закона действующих масс. Наибольшую сложность для учащихся в этой задаче представляет учет стехиометрических коэффициентов и знаков, определяющих направление изменений концентраций реагентов и продуктов реакции. Решение обратной задачи гораздо сложнее. В этой задаче, помимо начальных концентраций, задана константа равновесия, и необходимо найти равновесные концентрации всех участвующих в реакции веществ. Для решения обратной задачи необходимо выбрать равновесную кон-

центрацию одного из веществ и выразить через нее равновесные концентрации остальных веществ. При подстановке полученных выражений в закон действующих масс получится уравнение с одним неизвестным. Уравнение будет представлять собой полином, наивысшая степень переменной в котором зависит от рассматриваемой реакции. Если полученное уравнение не является квадратным, то его аналитическое решение учащиеся получить не смогут.

На семинарах по химии решение обратной задачи начинают с подготовки таблицы, по столбцам которой перечислены участвующие в реакции вещества. В строки таблицы последовательно заносятся стехиометрические коэффициенты реакции и начальные концентрации. Далее выбирается одно из веществ и изменения концентраций всех остальных веществ выражаются через концентрацию этого «базового» вещества. Таким образом, формируется строка таблицы, описывающая изменения концентраций. В следующей строке таблицы записывают выражения для равновесных концентраций. Таблица 1 представляет собой пример такой таблицы, построенной для реакции



в которой начальные концентрации продуктов реакции равны 0, «базовым» выбрано вещество C и равновесные концентрации всех веществ выражены через изменение концентрации этого вещества  $\Delta C_C$ .

Таблица 1 – Вычисление равновесных концентраций через изменение концентрации вещества C

| Вещество                 | A                                                           | B                                                           | C                    | D                                           |
|--------------------------|-------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|----------------------|---------------------------------------------|
| Коэффициент              | a                                                           | b                                                           | c                    | d                                           |
| Начальная концентрация   | $C_A^0$                                                     | $C_B^0$                                                     | 0                    | 0                                           |
| Изменение                | $\Delta C_A = \Delta C_C \cdot a/c$                         | $\Delta C_B = \Delta C_C \cdot b/c$                         | $\Delta C_C$         | $\Delta C_D = \Delta C_C \cdot d/c$         |
| Равновесная концентрация | $[C_A] = C_A^0 - \Delta C_A = C_A^0 - \Delta C_C \cdot a/c$ | $[C_B] = C_B^0 - \Delta C_B = C_B^0 - \Delta C_C \cdot b/c$ | $[C_C] = \Delta C_C$ | $[C_D] = \Delta C_D = \Delta C_C \cdot d/c$ |

Закон действующих масс связывает константу равновесия с равновесными концентрациями, после подстановки полученных в таблице формул получается уравнение с одним неизвестным. Для приведенной выше таблицы уравнение имеет вид (1):

$$K = \frac{(\Delta C_C)^c \left( \frac{d}{c} \Delta C_C \right)^d}{\left( C_A^0 - \frac{a}{c} \Delta C_C \right)^a \left( C_B^0 - \frac{b}{c} \Delta C_C \right)^b}. \quad (1)$$

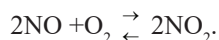
В качестве примера преподаватель может провести математические преобразования и привести уравнение к привычному для учащихся виду полинома, однако требовать выполнения таких преобразований от студентов нецелесообразно. Решение уравнения, построенного студентами для заданной им реакции, реализуется на занятии по информатике.

В электронных таблицах используется подпрограмма «Подбор параметра», в качестве изменяемой указывается та ячейка таблицы, в которой находится неизвестное приращение  $\Delta C_C$ , в качестве целевой – ячейка с формулой константы равновесия, требуемое значение константы равновесия задано в условии задачи.

В пакете Scilab решение уравнения выполняется с помощью встроенной функции `fsolve`. Для того, чтобы получить решение, студент должен определить функцию пользователя от одного аргумента. Эта функция описывает решаемое уравнение. Для того, чтобы вид функции был более наглядным, можно использовать вспомогательные переменные для изменений концентраций, равновесные концентрации описать как сумму массива начальных концентраций и массива изменений. Необходимо напомнить студентам, что использовать функцию `fsolve` можно только для решения уравнений, заданных в каноническом виде, поэтому значение функции должно представлять собой разность между требуемым и расчетным значениями константы равновесия. Помимо функции пользователя, аргументом функции `fsolve` является значение начального приближения. Для полиномов в зависимости от начального приближения могут быть получены различные значения корней. Только один из корней уравнения имеет физический смысл, для остальных некоторые равновесные концентрации оказываются отрицательными. Следует обратить внимание студентов на важность выбора начального приближения. Для

правильного выбора необходимо построить график зависимости константы равновесия от выбранного неизвестного приращения и по графику подобрать такое начальное значение, для которого константа равновесия близка к требуемой.

Рассмотрим пример решения обратной задачи химического равновесия для обратимой химической реакции



Начальные концентрации реагентов одинаковы и равны 0,7, начальная концентрация продукта равна 0. Константа равновесия равна 2. В таблице 2 получены формулы равновесных концентраций для этой реакции, в качестве переменной выбрано приращение концентрации  $\text{NO}_2$ .

Таблица 2 – Пример таблицы вычисления равновесных концентраций

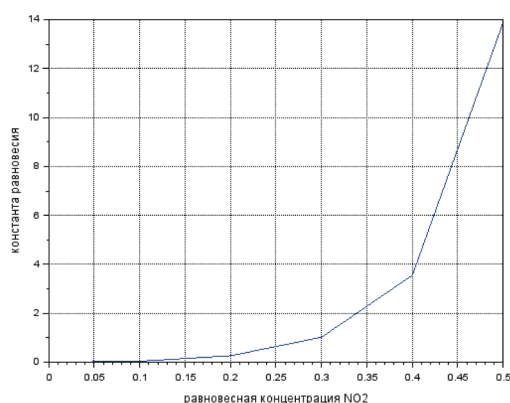
| Вещество                 | NO         | O <sub>2</sub> | NO <sub>2</sub> |
|--------------------------|------------|----------------|-----------------|
| Коэффициент              | 2          | 1              | 2               |
| Начальная концентрация   | 0,7        | 0,7            | 0               |
| Изменение                | -x*2/2     | -x*1/2         | x               |
| Равновесная концентрация | 0,7- x*2/2 | 0,7-x*1/2      | x               |

Нелинейное уравнение относительно x, полученное на основе таблицы 2, имеет вид (2)

$$2 = \frac{x^2}{(0.7 - x)^2 \left(0.7 - \frac{1}{2}x\right)}. \quad (2)$$

Это уравнение 3-й степени, решить его аналитически студенты не могут.

График зависимости константы равновесия от выбранной переменной приведен на рисунке 3а. Из графика видно, что константа равновесия равна 2 при  $x \approx 0.35$ . Это значение и следует выбрать в качестве начального приближения. Результаты решения – равновесные концентрации всех веществ, участвующих в реакции – приведены на рисунке 3б.



а

"Равновесная концентрация NO: 0.34606"

"Равновесная концентрация O2: 0.52303"

"Равновесная концентрация NO2: 0.35394"

б

Рисунок 3 – Пример результатов решения в пакете Scilab обратной задачи химического равновесия

Таким образом, в рамках третьего тематического блока рассматриваются обратные задачи, для которых требуется решение нелинейного уравнения. Вводится понятие начального приближения. Студенты вырабатывают навыки подбора начального приближения с помощью графика функции и решения нелинейного уравнения в различных программных средах.

Реализация представленной образовательной технологии междисциплинарной интеграции химии и информатики проводится в РТУ МИРЭА с 2022 года. Решение обратных задач в рамках представленных тематических блоков выполняется как на семинарах по химии, так и на занятиях по информ-

матике в компьютерных классах. Применение различных программных сред для решения химических задач позволяет студентам сосредоточить внимание на содержательных особенностях изучаемых ими понятий и закономерностей.

### Заключение

Решение обратных задач рассматривается в статье в контексте образовательной технологии параллельной междисциплинарной интеграции химии и информатики. Разработана последовательность тематических блоков, связанных с изучением обратных задач. На примерах демонстрируется формализация и решение обратных задач, разработаны рекомендации по их применению в учебном процессе. При этом подробно описана специфика обратных задач применительно к особенностям их решения.

Анкетирование студентов после окончания 1-го курса показало достижение поставленных целей междисциплинарной интеграции:

- увеличение интереса студентов к изучению обеих дисциплин;
- расширение возможностей самостоятельной работы студентов;
- ускорение адаптации первокурсников к требованиям высшей школы;
- повышение успешности обучения.

Таким образом, практическая реализация показала эффективность предложенного инструмента междисциплинарной интеграции информатики и химии.

### Список литературы

1. Гедиева Е.Б., Гедыгушева Т.Х., Кипкеева Р.Х. Междисциплинарная интеграция как условие повышения качества профессиональной подготовки студентов // Образование. Наука. Научные кадры. – 2020. – № 3. – С. 187–191.
2. Логиновская Т.Н., Вопилова Л.В. О концепции интеграции знаний естественно-научных и специальных дисциплин // Образовательные ресурсы и технологии. – 2016. – № 2 (14). – С. 51–55.
3. Мателенок А.П., Вакульчик В.С. Междисциплинарная интеграция как основа обучения математике студентов технических специальностей // Известия Российского государственного педагогического университета имени А.И. Герцена. – 2022. – № 206. – С. 167–183.
4. Моисеева Н.А., Полякова Т.А. Задачи информационно-математического моделирования как средство реализации междисциплинарной интеграции в преподавании математики и информатики в техническом вузе // Научно-методический электронный журнал «Концепт». – 2022. – № 9. – С. 52–64.
5. Мартон М.В. Интеграция математики и информатики для студентов химических специальностей // Математическое и компьютерное моделирование: сборник материалов IX Международной научной конференции. – Омск: Издательство Омского государственного университета имени Ф.М. Достоевского, 2021. – С. 40–43.
6. Химия, физика, биология: пути интеграции: сборник тезисов докладов IX Всероссийской научной молодежной школы-конференции. – Москва: Изд-во «Первый МГМУ им. И.М. Сеченова», 2022. – 224 с.
7. Бурляева Е.В., Ганина Н.В., Кузнецов А.С., Разливинская С.В. Интеграция дисциплин информатики и химии в целях повышения качества образования // Информатизация образования и науки. – 2023. – № 2 (58). – С. 43–54.
8. Ардуванова Ф.Ф., Манько Н.Н. О прямой и обратной задачах в преподавании химии и других предметов естественно-научного цикла // Тенденции и инновации в школьном химическом образовании: сборник материалов Международной научно-методической конференции. – Уфа: Изд-во Башкирского института развития образования, 2004. – С. 54–55.
9. Ардуванова Ф.Ф., Манько Н.Н. Причинно-следственные связи в структуре прямой и обратной задач // Совершенствование процесса обучения математике в условиях модернизации российского образования: сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции. – Уфа: Изд-во Башкирского института развития образования, 2004. – С. 94–95.

10. Макаров С.Е., Макарова И.Д. Особенности преподавания информатики на химическом факультете ОмГУ // Методика преподавания математических и естественно-научных дисциплин: современные проблемы и тенденции развития: сборник материалов VIII Всероссийской научно-практической конференции. – Омск: Изд-во Омского государственного университета имени Ф.М. Достоевского, 2021. – С. 243–248.
11. Горяев С.С. Прямые и обратные задачи с элементами прогнозирования и проблемных ситуаций // Современные технологии повышения качества профессионального образования: материалы Научно-методической конференции. – Элиста: Изд-во Калмыцкого государственного университета, 2008. – С. 100–101.
12. Серебрянников Н.П., Солохин М.А. Генерация задач и автоматизация проверки их выполнения на примере обработки результатов титриметрического анализа // Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности: сборник трудов XXVII Международной конференции. – Москва: Экон-Информ, 2024. – С. 68–71.
13. Чиреев В.В., Солохин М.А. Использование программного продукта Jupyter notebook для решения задач общей химии в рамках реализации междисциплинарной интеграции // Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности: сборник трудов XXVII Международной конференции. – Москва: Экон-Информ, 2024. – С. 83–90.
14. Бурляева Е.В., Ганина Н.В., Кузнецов А.С., Разливинская С.В. Интеграция дисциплин информатики и химии в целях повышения качества образования (на примере задач на смешение растворов) // Информатизация образования и науки. – 2022. – № 4 (56). – С. 83–93.
15. Бурляева Е.В., Ганина Н.В., Кузнецов А.С., Разливинская С.В. Решение задач на смеси металлов при изучении химической информатики // Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности: сборник трудов XXVI Международной конференции. – Москва: Экон-Информ, 2023. – С. 32–37.

### References

1. Gedieva E.B., Gedygusheva T.H., Kipkeeva R.H. Mezhdisciplinarnaya integraciya kak uslovie povysheniya kachestva professional'noj podgotovki studentov // Obrazovanie. Nauka. Nauchnye kadry. – 2020. – № 3. – S. 187–191.
2. Loginovskaya T.N., Vopilova L.V. O koncepcii integracii znaniy estestvenno-nauchnyh i special'nyh disciplin // Obrazovatel'nye resursy i tekhnologii. – 2016. – № 2 (14). – S. 51–55.
3. Matelenok A.P., Vakul'chik V.S. Mezhdisciplinarnaya integraciya kak osnova obucheniya matematike studentov tekhnicheskikh special'nostej // Izvestiya Rossijskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta imeni A.I. Gercena. – 2022. – № 206. – S. 167–183.
4. Moiseeva N.A., Polyakova T.A. Zadachi informacionno-matematicheskogo modelirovaniya kak sredstvo realizacii mezhdisciplinarnoj integracii v prepodavanii matematiki i informatiki v tekhnicheskom vuze // Nauchno-metodicheskij elektronnyj zhurnal «Koncept». – 2022. – № 9. – S. 52–64.
5. Marton M.V. Integraciya matematiki i informatiki dlya studentov himicheskikh special'nostej // Matematicheskoe i komp'yuternoe modelirovanie: sbornik materialov IX Mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii. – Омск: Izdatel'stvo Омского государственного университета имени Ф.М. Достоевского, 2021. – S. 40–43.
6. Himiya, fizika, biologiya: puti integracii: sbornik tezisov dokladov IX Vserossijskoj nauchnoj molodezhnoj shkoly-konferencii. – Москва: Изд-во «Первый МГМУ им. И.М. Сеченова», 2022. – 224 s.
7. Burlyayeva E.V., Ganina N.V., Kuznecov A.S., Razlivinskaya S.V. Integraciya disciplin informatiki i himii v celyah povysheniya kachestva obrazovaniya // Informatizaciya obrazovaniya i nauki. – 2023. – № 2 (58). – S. 43–54.
8. Arduvanova F.F., Man'ko N.N. O pryamoj i obratnoj zadachah v prepodavanii himii i drugih predmetov estestvenno-nauchnogo cikla // Tendencii i innovacii v shkol'nom himicheskom obrazovanii: sbornik materialov Mezhdunarodnoj nauchno-metodicheskoy konferencii. – Ufa: Изд-во Башкирского института развития образования, 2004. – S. 54–55.
9. Arduvanova F.F., Man'ko N.N. Prichinno-sledstvennye svyazi v strukture pryamoj i obratnoj zadach // Sovershennost' processa obucheniya matematike v usloviyah modernizacii rossijskogo obrazovaniya: sbornik

materialov Vserossijskoj nauchno-prakticheskoy konferencii. – Ufa: Izd-vo Bashkirskogo instituta razvitiya obrazovaniya, 2004. – S. 94–95.

10. *Makarov S.E., Makarova I.D.* Osobennosti prepodavaniya informatiki na himicheskom fakul'tete OmGU // Metodika prepodavaniya matematicheskikh i estestvenno-nauchnykh disciplin: sovremennye problemy i tendencii razvitiya: sbornik materialov VIII Vserossijskoj nauchno-prakticheskoy konferencii. – Omsk: Izd-vo Omskogo gosudarstvennogo universiteta imeni F.M. Dostoevskogo, 2021. – S. 243–248.

11. *Goryaev S.S.* Pryamye i obratnye zadachi s elementami prognozirovaniya i problemnykh situacij // Sovremennye tekhnologii povysheniya kachestva professional'nogo obrazovaniya: materialy Nauchno-metodicheskoy konferencii. – Elista: Izd-vo Kalmyckogo gosudarstvennogo universiteta, 2008. – S. 100–101.

12. *Serebrennikov N.P., Solohin M.A.* Generaciya zadach i avtomatizaciya proverki ih vypolneniya na primere obrabotki rezul'tatov titrimetricheskogo analiza // Sovremennye informacionnye tekhnologii v obrazovanii, nauke i promyshlennosti: sbornik trudov XXVI Mezhdunarodnoj konferencii. – Moskva: Ekon-Inform, 2024. – S. 68–71.

13. *Chireev V.V., Solohin M.A.* Ispol'zovanie programmno produkta Jupyter notebook dlya resheniya zadach obshchej himii v ramkah realizacii mezhdisciplinarnoj integracii // Sovremennye informacionnye tekhnologii v obrazovanii, nauke i promyshlennosti: sbornik trudov XXVI Mezhdunarodnoj konferencii. – Moskva: Ekon-Inform, 2024. – S. 83–90.

14. *Burlyaeva E.V., Ganina N.V., Kuznecov A.S., Razlivinskaya S.V.* Integraciya disciplin informatiki i himii v celyah povysheniya kachestva obrazovaniya (na primere zadach na smeshenie rastvorov) // Informatizaciya obrazovaniya i nauki. – 2022. – № 4 (56). – S. 83–93.

15. *Burlyaeva E.V., Ganina N.V., Kuznecov A.S., Razlivinskaya S.V.* Reshenie zadach na smesi metallov pri izuchenii himicheskoy informatiki // Sovremennye informacionnye tekhnologii v obrazovanii, nauke i promyshlennosti: sbornik trudov XXVI Mezhdunarodnoj konferencii. – Moskva: Ekon-Inform, 2023. – S. 32–37.