установок»; 0431-2 – специальность «Химическая технология материалов современной энергетики»). Рассмотрение проведено в системе 3-х показателей вступительных испытаний (ПВИ): ЕГЭр – результаты ЕГЭ по русскому языку, ЕГЭм – по математике, ЕГЭф – по физике. Статистическое моделирование проведено в системе Statistica.

На основе корреляционного анализа ПВИ методом главных компонент бала построена факторная модель ПВИ, в рамках которой были получены новые факторные показатели. Факторные нагрузки первоначальных ПВИ разделились по факторам следующим образом: фактор 1 – фактор физико-математических знаний студентов (Ффм) характеризуется положительной корреляционной связью с ЕГЭм и ЕГЭф; фактор 2 – фактор гуманитарных знаний студентов (Фг) характеризуется положительной корреляционной связью с ЕГЭр.

В построенном 2-х мерном факторном пространстве {Ффм, Фг} проведен кластерный анализ учебных групп ФТИ по их групповым средним. В результате кластеризации было получено разбиение 12 групп на 5 кластеров: К1– группы 0А33, 0432; К2 – 0А32, 0А34, 0В31, 0431; К3 – 0731, 0732; К4 – 0А35, 0Д31; К5 – 0А31, 0Б31. Согласно дисперсионному анализу кластеры групп студентов различаются высоко значимо по фактору Ффм (уровень значимости $p \approx 0{,}00001 < 0{,}0005$) и сильно значимо по Фг (на уровне значимости $0{,}0005 < p \approx 0{,}003 < 0{,}005$). Анализируя кластерные средние, можно сделать вывод, что группы кластера К1 имеют высокие знания по техническим предметам и средние по гуманитарным; К2 – средние знания по всем предметам; К3 – высокие знания по всем предметам; К4 – средние по техническим и низкие по гуманитарным; К5 – низкие по техническим и средние по гуманитарным.

Построенные факторная и кластерная модели образовательного пространства на примере ЕГЭ могут быть применены при проведении мониторинга вступительных испытаний и текущей успеваемости студентов вузов [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конкурс 2013 года [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://abiturient.tpu.ru/navigation/how/konkursyi-proshlyix-let. – 29.04.2015
2. Терехина Л.И. Применение факторного подхода кластеризации результатов мониторинговой оценки знаний по математике в вузе // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 1; URL: www.science-education.ru/121-18605. – 29.04.2015.

ФОРМИРОВАНИЕ НАВЫКОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА МЛАДШИХ КУРСАХ ТЕХНИЧЕСКОГО ВУЗА

Е.И. Подберезина, Э.Н. Подскребко, Е.Н. Некряч
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: pei@tpu.ru

Процесс изучения курса математического анализа в техническом вузе представляет собой разработку и создание банка важнейших математических моделей, в первую очередь предназначенных для решения задач дисциплин естественнонаучного и технического цикла. Такими моделями являются классы функций, например, элементарные, имеющие предел, непрерывные, дифференцируемые, интегрируемые.

Построение математической модели начинается с формирования основополагающего понятия, которому, как правило, предшествует решение конкретных практических задач с последующим абстрагированием от их конкретного содержания и выявления общего, присущего им математического смысла. Так появляются, например, понятия предела, производной, интеграла. Они характеризуются высокой степенью абстрактности, значительной информационной емкостью, обеспечивающей универсальность их применения.

Основополагающее свойство функции является системообразующим в процессе построения классов функций.

Остановимся более подробно на формировании класса функций, имеющих конечный предел в данной точке: $\lim_{x \to x_0} f(x) = A$. Определение предела – это различные представления стремления $f(x) \to A$ при $x \to x_0$.

С физической точки зрения понятие предела характеризует поведение функции в точке x_0, выявляя в нем причинную обусловленность моделируемого ею процесса. Это обстоятельство позволяет понять, что предел функции может быть определен только в предельной точке x_0 множества X, на котором задана функция.

Наиболее общим определением предела функции в точке является определение на языке окрестностей, характеризующее его геометрический смысл и являющееся основанием удобного для практического применения определения предела на языке $\varepsilon - \delta$: $\lim_{x \to x_0} f(x) = A \Leftrightarrow \forall \varepsilon > 0 \ \exists \delta(\varepsilon) > 0 \ \forall x$: $x \in X \cap 0 < |x - x_0| < \delta(\varepsilon) \Rightarrow | f(x) - A| < \varepsilon$. С помощью этого определения доказательство равенства $\lim_{x \to x_0} f(x) = A$ сводится к установлению эквивалентности двух неравенств.

Наконец, третье определение предела функции «на языке последовательностей» (по Гейне): $\lim_{x \to x_0} f(x) = A \Leftrightarrow \forall \{x_n\}: \ x_n \neq x_0, \ x_n \to x_0 \ \ f(x_n) \to A$. Определение предела по Гейне используется как в доказательствах, так и в нахождении пределов и приближенных вычислениях.

Как и любое математическое высказывание, понятие предела является логической формой, позволяющей работать с ним по правилам математической логики, например, строить его отрицание. Множество всех функций, имеющих конечный предел в точке x_0, с арифметическими операциями над функциями, композициями и сравнением функций с помощью соответствующих теорем предельного перехода образуют целый класс функций, имеющих конечный предел в точке x_0 со своей операционной системой.

Выделяя в этом классе подмножество постоянных функций и бесконечно малых функций, можно определить его структуру: каждая функция этого класса представима в виде суммы постоянной функции и бесконечно малой функции. Это свойство указывает на определяющую роль бесконечно малых функций в понятии предела и является характеристическим свойством функции, имеющей конечный предел в точке.

Аналогичным образом определяется класс бесконечно больших в точке x_0 функций со своей операционной системой и устанавливается его связь со множеством функций, бесконечно малых в точке x_0. Таким же образом формируются классы функций, имеющих конечный и бесконечный пределы на бесконечности с соответствующей операционной системой.

Добротное освоение азов математического моделирования станет залогом успешного решения практических задач в различных областях будущей профессиональной деятельности.

РАЗРАБОТКА ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ВЫСКОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕСКА МОДЕЛИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ

А.С. Попов, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: asptomsktpu@gmail.com

В настоящее время вопрос о необходимости создания новых материалов, с заранее заданными свойствами, становится наиболее популярным. Несмотря на высокие достижения в области создания наноматериалов и обычных сплавов, задачи расчета перед экспериментом остаются выгодными как экономически, так и во временном плане. Цель настоящей работы – провести исследование методов расчета новых материалов, их существующую реализацию в виде программных продуктов, а также сформировать идеи по созданию высокопроизводительного программного комплекса по расчету свойств новых материалов на основе неэмпирических вычислений (не требующих предварительных экспериментальных данных).

Среди множества методов, позволяющих реализовать вычисления атомных структур, наиболее выделяются методы расчетов из первых принципов (Ab Initio) и методы молекулярной динамики. Вышеупомянутые методы могут использоваться как по отдельности (что приведет к потере точности или увеличению времени расчета соответственно), так и совместно. Выполненный в ходе исследования анализ литературы показал, что наиболее часто используется метод расчетов из первых принципов, а именно теория функционала плотности, где электроны описываются не по отдельности, как единичные, без учета корреляционных эффектов (методы Хартри), а как некий функционал, зависимый от выбранных параметров. Обобщенная схема, включающая в себя вышеупомянутые методы, приведена на рисунке 1. Таким образом, перед тем, как приступить к одному из методов Ab Initio, можно воспользоваться методами молекулярной динамики, полуэмпирическими методами или же взять готовые экспериментальные данные, содержащие геометрические параметры кристаллической решетки (можно пропустить этот шаг, если воспользовался, к примеру, расчетами геометрических параметров решетки с помощью псевдопотенциала). На следующем шаге производится расчет одним из методов и, после проверок, получается результат. В практическом плане полученный результат интересен тем, что на его основе можно рассчитать прочность [1], электронную структуру [2], оптические свойства [3], границы формирования зерен [4], теплопроводность, упругость [5] и многое другое. Таким образом, не приступая к эксперименту, при наличии соответствующего программного комплекса, можно вычислить интересующие свойства материалов с высокой точностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.