

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ**

Сессия ИВТН-2008



COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES

IVTN-2008 Session

Сборник материалов
The Proceedings



Москва – 2008
Moscow - 2008

ИВТН.ru – электронные конференции
Информационно-Вычислительные Технологии в Науке

Главный организатор НВК "ВИСТ"
При поддержке Zenon N.S.P.

IVTN.ru – web conferences
Computer Applications in Science

Provided by NVK "VIST"
Supported by Zenon N.S.P.

Руководитель проекта ИВТН.ru *Габусу Полина*
Исполнительный секретарь ИВТН.ru *Воронина Наталья*

IVTN.ru Project Leader *Gabusu Paulina*
IVTN.ru Executive Secretary *Voronina Natalia*

Организационный комитет выражает благодарность всем участникам сессии ИВТН-2008
The Organizing committee thanks all of the participants of the IVTN-2008 session

В сборнике материалов сессии ИВТН-2008 представлены аннотации докладов, опубликованных на ИВТН.ru в 2008 году. К публикациям относятся доклады электронных конференций "Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных научных задач", автобиографическая статья Грибова Л.А., обзор Перекатова В.И., посвященный эталонам компьютерной науки в американском высшем образовании, а также материалы, опубликованные в рамках ИВТН-2008. В докладах обсуждаются научные исследования и разработки в указанных областях, а также информационные и компьютерные технологии, являющиеся важным инструментом для достижения научных результатов.

These proceedings of the IVTN-2008 session present annotations of the reports published at IVTN.ru in 2008. Publications include reports of web-conferences "Computer Applications in Scientific Researches", autobiographical article of Gribov L.A., the review of Perekatov V.I. devoted computer science standards in higher school of the U.S. and materials published within the framework of the IVTN-2008. The reports feature discussions of scientific researches and developments in the above areas and computer technologies as an important driver for scientific deliverables.

© НВК «ВИСТ»
© NVK «VIST»

Дорогие друзья!

Предлагаем Вашему вниманию сборник материалов сессии ИВТН-2008.

Сборник материалов ИВТН-2008 года содержит краткие сообщения, а также научные статьи и доклады, опубликованные авторами на страницах различных научных изданий, в сборниках материалов конференций, что позволит участникам проекта более подробно ознакомиться с результатами исследований в различных областях науки.

Оргкомитет благодарит всех участников конференции за предоставленные доклады и сообщения и выражает уверенность в том, что сессии ИВТН.ru и в дальнейшем будут такими же яркими и содержательными.

Организационный комитет ИВТН.ru

Проект ИВТН.ru объединяет более 1800 специалистов российских и зарубежных компаний – производителей оборудования, программного обеспечения, а также представителей организации, оказывающих финансовую, техническую, информационную и иную поддержку исследовательской деятельности.

При поддержке ИВТН.ru проводятся российские и международные научные мероприятия.

Dear Friends!

We bring forward proceedings of the Session IVTN-2008.

In addition to summaries, proceedings of the IVTN - 2008 contain scientific articles and reports published by the authors in various scientific publications, proceedings of conferences that will allow a detailed familiarization of the project participants with research deliverables in various fields of science.

The Organizing Committee would like to thank all the participants for the reports and statements provided and express confidence that IVTN.ru session will be not less outstanding and informative in the future.

IVTN.ru Organizational Committee

The project IVTN.ru includes over 1800 specialists of Russian and foreign companies engaged in hardware and software production and representatives of organizations rendering financial, technical, informational and other support for research activities.

With support from IVTN.ru the Russian and international scientific actions are carried out.

**ИВТН-2008
IVTN-2008**



**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В НАУКЕ**

COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

**Организаторы
Providers**

Конференции ИВТН-2008 организованы по инициативе НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2008 Conferences were initially organized by NVK "VIST" and supported by Scientific Centers and Institutes of Russian Academy of Sciences and Russian Academy of Medical Sciences.

<http://www.ivtn.ru>

САМ О СЕБЕ PERSONAL NARRATIVE

Грибов Л.А. Gribov L.A.

Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И. Вернадского

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Предлагаемая благосклонному вниманию коллег краткая справка о том, что мне удалось сделать, приурочена к тому времени, когда виновник, хотя и не достиг ещё мафусаиловых лет, но переступил средний возраст. Что такое средний возраст – в своё время точно определил член Политбюро А.П. Кириленко в обращении к застоному Генсеку по случаю 70-летия последнего. В биографических справках принято что-то писать о «герое». В данном случае автор этой справки вовремя вспомнил К. Пруткова и его глубокое замечание: «Что скажут о тебе другие, коли ты сам о себе ничего сказать не можешь?» Автор и решил, поэтому, написать о себе сам, так как вряд ли кто-нибудь лучше его самого знает, что являлось причиной появления той или иной работы, тем более что автор никогда не принадлежал к уже сложившейся научной школе и никогда, фактически, не имел научного руководителя. Как известно, и то, и другое часто на длительное время определяет тематику научных исследований даже достаточно крупных ученых. Автор, работавший в ряде научных направлений, имевших, на первый взгляд, мало общего, и самостоятельно без существенного внешнего воздействия выбравший эти направления, подчинялся, в основном, некоторому внутреннему чувству, которое иногда называют логикой научного развития. Именно поэтому авторский рассказ о последовательности научных поисков может оказаться интересным

The present short report is offered for the favourable attention of my colleagues, contains information of what I have succeeded to do and is confined to that time when the hero, though not having reached Methuselah's age, got over his middle age. What the middle age is, it was exactly specified by the member of the Politbureau A.P. Kirilenko addressing the stagnant General Secretary on the occasion of the 70th anniversary of the latter. In personal histories it is common practice to write something about a "hero". In this case, the author of this personal history timely remembered K. Prutkov and his profound remark - 'What will others tell about you if you can tell nothing about yourself?'

So, the author decided to write about himself personally because it is unlikely that anybody knows more than he about the causes of the appearance of one or another work, the more so as the author has never joined any developed scientific school and has never actually had any research supervisor. As is known, the both often define the area of researches of even leading scientists for a long time. The author working in some scientific areas (which at first glance had little in common) and choosing these areas by himself without any significant external influence has followed, generally, a certain internal sensation, which sometimes is called "the logic of scientific development". That is why, the author's story about the sequence of scientific inquiries can be of interest

Итак, начну рассказ «от первого лица».

Базовое естественно-научное образование я получил на физическом факультете Московского университета, куда поступил в сентябре 1951 г. и который окончил в декабре 1956 г. Интересно, что я, вопреки общей моде того времени, никогда не хотел специализироваться в области ядерной физики и сделал всё возможное, чтобы уйти с соответствующего отделения, когда без своего согласия (тогда его никто и не спрашивал) был на такое отделение зачислен. Это было не просто. Совсем вырваться всё же не удалось, и я попал на кафедру оптики, которая числилась в составе ядерного блока.

Лазерный бум был ещё впереди, и на кафедре оптики изучались главным образом спектры атомов и молекул. Это в дальнейшем и привело меня в «молекулярный мир». Занимался я экспериментом и ни о какой теории не помышлял, тем более, что теоретическая физика в тот период ассоциировалась опять-таки главным образом с ядерной.

В те далекие времена на физическом факультете был семестровый курс химии, что было, как я уже потом сообразил, абсолютно правильным. Тогда же мы с энтузиазмом пели: «Только физика – соль! Остальное всё – ноль!» Вполне возможно, что в наказание за юношеское недомыслие, Господь на всю жизнь связал меня именно с химией, а, точнее, с необъятным и в высшей степени интересным миром молекул. Курьёзно, что на экзамене по химии в конце первого семестра мне достался вопрос о комплексных соединениях. Я знал о них только то, что при записи их формул используются квадратные скобки. Так случилось, однако, что, когда в феврале 1957 г. я начал работать в Институте физической химии, то мне пришлось исследовать спектральными методами именно комплексные соединения платины!

То, что я кончал экспериментальную кафедру, имело большое значение: я на всю жизнь усвоил, во-первых, как надо эксперименты производить, а во-вторых, понял разницу между наблюдаемыми характеристиками и используемыми в различных теориях. Этим я всегда отличался от многих «чистых» теоретиков, которые нередко так любят теории и модели, что забывают о необходимости соответствия их практике!

Первая моя научная работа была выполнена и опубликована, когда я был ещё студентом. При этом делал её не на своей кафедре, а в лаборатории в то время ещё доцента И.А. Яковлева. Работа была посвящена изучению фазовых переходов в кристаллах. За неё я получил грамоту и премию МГУ. Наступило время дипломной работы. Мне было предложено попытаться зарегистрировать и изучить ИК спектры веществ, удерживающихся на сорбентах при хроматографическом анализе. После полугодовой работы я не сумел обнаружить ни одного спектра сорбируемого вещества. Кроме того, у меня вышел из строя прибор – ИКС–2. Обращения к руководителю ни к чему не привели. Надо было спасаться! Я обошел весь МГУ и нашел исправный ИКС–2 в Астрофизическом институте, где мне разрешили работать. Далее, я напрямую связался с химиками из Института физической химии АН СССР, которые дали мне довольно большое число разнообразных образцов. В-третьих, боясь, что в эксперименте вообще ничего не получится, я занялся теорией действия инфракрасных двухлучевых спектрометров и вообще действием следящих систем.

В результате всего этого искомые спектры обнаружались, а занятия собственно приборной частью привели к публикации моих первых совершенно самостоятельных работ. Таким образом, дипломная работа была выполнена мною,

фактически, без руководителя. Это «везение» продолжалось и дальше.

Много лет спустя я использовал свое знакомство с теорией следящих систем в учебнике «Основы физики» для того, чтобы объяснить, с одной стороны, физику прямохождения человека, а, с другой, неизбежность экономического провала социалистической системы.

Работая в области прикладной ИК спектроскопии, я довольно быстро почувствовал дискомфорт от того, что вижу я одно – положения полос поглощения и их интенсивности – , а вывод должен быть о другом – что же делается внутри молекулы или комплекса? Я понял, что для эффективного применения ИК спектроскопии как метода изучения строения и свойств молекул необходимо установить однозначную физическую связь между характеристиками, описывающими модель молекулы, и их, как теперь говорят, спектральными отображениями на классе измеряемых величин.

Эта связь устанавливается соответствующей теорией. Так я пришел к выводу о необходимости эту теорию знать и научиться делать соответствующие расчеты. Высший уровень теории в то время был изложен в классической двухтомной монографии М.В. Волькенштейна, М.А. Ельяшевича и Б.И. Степанова «Колебания молекул» (Изд. 1949 г.). Эта монография была отмечена Государственной премией (тогда Сталинской).

Все последующие отечественные спектроскописты–теоретики из этой книги выросли!

При изучении теории колебаний молекул я обнаружил, что если проблема расчёта частот колебаний разобрана достаточно хорошо, то теория интенсивностей полос поглощения в инфракрасных (ИК) спектрах и линий в спектрах комбинационного рассеяния, выглядит значительно хуже, особенно в смысле математического оформления. Я начал думать над тем как этот недостаток устранить. В результате в 1959 г. в ДАН СССР по представлению акад. А.Н. Теренина была опубликована моя статья, где впервые была приведена удобная для практических расчетов и общих исследований формула для интенсивностей полос в ИК спектрах. Эта формула оказалась очень удачной и иногда цитируется в монографической литературе как формула Грибова. Так началась моя работа в области теории колебательных спектров сложных молекул. В дальнейшем я получил целый ряд следствий из этой общей формулы. Одна за другой стали выходить из печати мои статьи по разным вопросам теории интенсивностей в ИК спектрах. В 1960 г. я решил оформить всё это в виде кандидатской диссертации. Писал я её 22 дня. При этом я не был в аспирантуре и не имел руководителя. Это последнее привело к тому, что мне никак не удавалось пристроить работу где-нибудь в Москве, несмотря на десяток публикаций в самом престижном журнале «Оптика и спектроскопия». Везде все «увядали», как только узнавали, что я, подобно кошке, хожу сам по себе.

В том же 1960 г. я написал письмо акад. А.Н. Теренину, где нахально изложил свой взгляд на то, что без теории не проживешь, что этим работам надо уделить внимание и т.д. Нормальный ученый с положением А.Н. Теренина в науке повесил бы мое письмо на гвоздик в комнате уединения. Академик А.Н. Теренин нормальным ученым, к счастью, не был. Он, поэтому, направил мое письмо в Минск, в то время Мекку теоретической молекулярной спектроскопии, где работали основатели и лидеры этой области науки – переехавшие из Ленинграда

академики АН БССР М.А. Ельяшевич и Б.И. Степанов, который был директором Института физики, теперь названного его именем. А.Н. Теренин не просто написал письмо М.А. Ельяшевичу, но и посоветовал ему «обратить внимание на этого молодого человека, у которого, кажется, есть будущее!». М.А. Ельяшевич потом много раз рассказывал мне об этом.

М.А. Ельяшевич пошел со всей перепиской к Б.И. Степанову, и они решили провести в феврале 1961 г. в узком кругу совещание по теории молекулярных спектров, куда пригласили и меня. Я привез с собой диссертацию и просил М.А. Ельяшевича её прочитать. М.А. Ельяшевича вопрос о том есть ли у меня руководитель или нет не волновал. Через два дня он сказал мне, что работа ему понравилась. Он даже сговорился с Б.И. Степановым, чтобы предзащиты вообще не устраивать, т.к. мне лишней раз приезжать в Минск трудно. Дальше всё пошло как по маслу, и в июне 1961 г. в Минске я диссертацию защитил. При этом выступавший оппонентом М.А. Ельяшевич в отзыве отметил, что поставил бы вопрос о защите сразу докторской, если бы было побольше примеров расчетов. С этого времени началась моя длительная научная и дружеская связь с минской школой теоретической спектроскопии, что сыграло в моей жизни колоссальную роль.

Вскоре после защиты диссертации я был приглашен читать лекции по теории колебательных спектров на кафедре оптики МГУ, что и делал несколько лет. Это оказалось для меня чрезвычайно полезным, т.к. заставило заниматься всей теорией, а не только тем её разделом, который посвящен интенсивностям полос и линий в молекулярных спектрах. Постепенно я переработал всю теорию.

В 1963 г. вышла из печати в издательстве АН СССР моя первая монография «Теория интенсивностей в ИК спектрах многоатомных молекул». Она, как и все последующие, была целиком построена на оригинальном материале и настолько «попала в точку», что уже через год с дополнениями была переведена и издана в США. До сих пор на неё ссылаются во всех монографиях, изданных в мире по теории молекулярных спектров. Успех монографии имел и то следствие, что меня пригласили с пленарным докладом на Гордоновские чтения в США, куда меня партбюро непустило. В 1967 г. мне было предложено выступить с пленарным докладом на Европейском конгрессе по молекулярной спектроскопии, что, благодаря вмешательству академика А.П. Виноградова, удалось. Это, конечно, было большой честью.

В 1963 г. проф. В.М. Чулановский – в то время глава ленинградских спектроскопистов–молекулярщиков – пригласил меня прочесть годовой цикл лекций по теории спектров на физическом факультете Ленинградского университета. Проф. В.М. Чулановский сам прослушал все лекции и рекомендовал обработать курс и издать в ЛГУ. В результате в 1965 г. появилась моя третья монография.

Ещё в 1964 г. я решил, что можно защищать докторскую диссертацию. С этой идеей я явился к Б.И. Степанову. Он отреагировал так: «Да Вы же только что кандидатскую защищали! Впрочем, кто сказал, что нужно ждать 10 лет? Что войдет в Вашу новую диссертацию?» Заручившись одобрением, я стал писать диссертацию, что и заняло у меня 18 дней. Может возникнуть сомнение в том, что сроки 22 и 18 дней нереальны. Всё зависит от того, что понимать под писанием. Я собирал диссертации

тогда, когда было несколько статей или, как в докторской, книг. Применялся метод «режь – клей», что и обеспечивало скорость. Введения, заключения и литобзоры меня никогда не затрудняли, хотя в моих собственных монографиях литобзоры вообще отсутствуют. В январе 1965 года я защитил докторскую диссертацию, снова в Минске. Мне было 31.5 лет.

Разумеется, не принадлежа к влиятельному клану, я своей активностью нажил себе сильных врагов. Не поддержки меня М.А. Ельяшевич и Б.И. Степанов, мне пришлось бы трудно.

В середине 60-тых годов авторам «Колебаний молекул» пришла в голову мысль подготовить новое издание, но осовремененное. Они просили меня сделать это. Я сказал, что времени прошло много и просто косметики недостаточно. Тогда они предложили мне стать соавтором нового издания с тем, чтобы я делал, что хочу. Я начал работу над книгой в середине 60-тых и занимался этим года три-четыре. Когда рукопись была готова, то мы все собрались в Минске, чтобы обсудить, что получилось. Здесь возникла совершенно необычная ситуация. Проводивший совещание Б.И. Степанов заявил, что получилась совершенно новая книга и что Грибов может её издать и один. Есть, однако, известная преемственность в идеях, плане и т.д. Предлагается отметить в предисловии особый вклад Грибова. Когда оно было написано, то тот же Б.И. Степанов, поддержанный сразу же М.А. Ельяшевичем и М.В. Волькенштейном, сказал, что предисловие подпишут только три классика, т.к. из-за весьма лестных слов в мой адрес, «Вам, Лев Александрович, такое предисловие подписывать неудобно!»

Я думаю, что в науке и научных публикациях это совершенно уникальный случай. Мне аналог неизвестен. Это предмет моей гордости в течение всей жизни и важнейший урок. Трое блестящих ученых, признанных классиков большой области науки, обладавших громадным научным авторитетом, этим актом как бы объявляли меня своим преемником и наследником и рекомендовали меня в этом качестве научной общественности. Интересно, что во втором издании «Колебаний молекул», общим объемом 700 стр., нет в тексте ни одной ссылки на работы других авторов, кроме перечисленных на титульном листе, поскольку всё, что там написано, было сделано ими, все формулы и вычислительные приемы были вполне оригинальными и в привлечении чужих работ для «заполнения дыр» или воздания должного первенству не было никакой необходимости.

Могу отметить, что второе издание «Колебаний молекул» в течение уже многих лет играет ту же роль, какую играло в свое время первое.

В этот же период и даже несколько ранее начали складываться и мои дружеские отношения с М.А. Ельяшевичем и Б.И. Степановым. По возрасту нас разделяло целое поколение. Учеником в обычном понимании этого слова ни у одного из них я не был. Я никогда не работал в руководимых ими коллективах, и они не подсказывали мне, чем надо заниматься. Но это были очень крупные личности, и они научили меня большему, чем науке – человеческим отношениям!

Очень рано я понял, что без широкого привлечения тогда ещё только что появившихся ЭВМ (я начал работать на ЭВМ «Стрела», которая имела «бешеную» скорость – 2500 операций в секунду!) ни о каких практических приложениях развиваемой, в частности и мною, теории не может быть и речи. Я

пользовался тогда программами проф. А.М. Богомолова, в дальнейшем известного ученого и ректора Саратовского университета. Я, однако, с самого начала выработал для себя некоторые общие принципы, которых неуклонно придерживался в дальнейшем. Принципы эти следующие: программное обеспечение должно быть максимально сервисным, чтобы пользоваться им могли физики, химики, биологи и др. т.е. исследователи, для которых важен результат, а не процесс его получения; всё, что позволяет делать теория должны «уметь» делать и программы; только то математическое оформление теории имеет право на существование, которое «удобно для ЭВМ»; все, что можно автоматизировать и делать без участия оператора, должно быть автоматизировано; каждый новый блок не должен «зачеркивать» предыдущие.

Такой взгляд на вещи привел к определенному стилю всех наших теоретических работ: сразу же за получением нового теоретического результата следовала стадия написания соответствующей программы и эффективность предлагаемого вычислительного приема проверялась «реакцией ЭВМ». Исследователь «воздействовал на ЭВМ», но и общение с ЭВМ и попытка создать универсальное и удобное программное обеспечение приводило к «обратной связи» ЭВМ – исследователь, заставляя создавать новые алгоритмы, искать взаимосвязи между этапами вычислений и т.д. Человек «учил» компьютер, но и компьютер «учил» человека. К счастью, при развитии этого направления я нашел прекрасного помощника, в дальнейшем доктора и профессора – В.А. Дементьева, – который и принял на себя труд создания программного комплекса.

Развитие теории колебательных спектров и параллельное создание сервисного программного обеспечения для ЭВМ полностью избавило отечественных ученых на многие годы от зависимости от состояния этой области науки в развитых странах. Более того, мы явно опережали мировой уровень. Опыт разработки специальных алгоритмов и комплекса взаимосвязанных программ, обеспечивающих при минимальном участии оператора возможность массовых расчетов ИК спектров сложных молекул произвольного строения был в дальнейшем обобщен в монографии «Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул» (1983 г.).

В феврале 1960 г. я перешел работать в Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского АН СССР. С этим институтом связана вся моя жизнь. В ГЕОХИ я впервые столкнулся с проблемами, выдвигаемыми аналитической химией. Вначале я принимал участие в решении довольно большого числа, но все же частных задач. Принципиально новое началось после моего сближения с ныне широко известным «мистером арсеназо» – профессором С.Б. Саввиным. Он обратил мое внимание на органические реагенты, действие которых основано на изменении электронного спектра в видимой или ближней ультрафиолетовой (УФ) области при комплексообразовании. К этому времени я уже был внутренне готов «расширить свой спектральный диапазон» от ИК до ультрафиолета и перейти от движения ядер к движению электронов.

У нас с С.Б. появился совместный аспирант – Э.Л. Кузин, – и в 1967 г. была опубликована первая в литературе работа, где теория спектров и квантовая химия были применены для решения «чисто аналитических» проблем. В дальнейшем такой подход был подхвачен и развит другими

исследователями. В результате квантовая химия и теория электронных спектров стали достаточно привычными методами в важном разделе аналитической химии.

Сотрудничество с С.Б. Саввиним продолжалось много лет. Это сотрудничество и «научная жадность» и привели к тому, что я «всерьез влез» в обширную область науки, которая и называется квантовой химией. Этому способствовало и мое участие как лектора в регулярно проводившихся в то время летних школах по квантовой химии и чтение в продолжении ряда лет по приглашению академика И.П. Алимарина курса лекций по квантовой химии на факультете повышения квалификации при Химическом факультете Московского университета. Как и лекции по теории спектров, такая преподавательская деятельность заставила взглянуть на всю область в целом и попытаться найти такие методические приемы и стиль изложения, которые позволили бы донести понятия, выводы и вычислительную сторону этого направления теоретической физики до аудитории, не обладавшей профессиональной общефизической и математической подготовкой. К собственным научным достижениям в квантовой химии я отношу, во-первых, детальное рассмотрение вопроса о внутримолекулярных влияниях и физических причинах воздействия удаленных от реакционных центров полярных заместителей на вероятность ион-молекулярных реакций протонирования и комплексообразования и, во-вторых, подход к анализу характера химических связей произвольного типа на универсальном языке электро-ядерных взаимодействий. Это позволило с одной и той же точки зрения дать наглядную картину физической природы не только простейших типов химических связей, но и весьма сложных, например, в ферроцене и фуллеренах.

Как опыт преподавания, так и полученные оригинальные научные результаты в дальнейшем вошли в написанные мною совместно с моей ученицей – проф. С.П. Муштаковой – учебник для вузов «Квантовая химия». Интересно, что проф. С.П. Муштакова – химик-аналитик по образованию – начала применять методы квантовой химии как раз для анализа строения и действия органических реагентов, но затем настолько «вошла во вкус», что поставила и много лет читает на химическом факультете Саратовского университета регулярный курс квантовой химии, сопровождающийся соответствующим практикумом.

В 1967 г. я был приглашен занять кафедру физики в Московской сельскохозяйственной Академии им. К.А. Тимирязева. Через год мне присвоили звание профессора. Замечу, что лабораторию в ГЕОХИ я получил лишь в 1977 г.

Основал кафедру и много лет возглавлял её очень известный физик – В.А. Михельсон. При нем кафедра почиталась второй после МГУ. К тому времени, когда я оказался заведующим, кафедра пришла в абсолютный упадок. Мне пришлось целиком сменить два состава (из первого уцелел лишь проф. В.А. Деметьев), подготовить и удержать целый ряд учеников, чтобы постепенно кафедра стала моим рабочим инструментом. Достаточно долгое время я пользовался полной поддержкой ректоров. Довольно рано я получил возможность заключать хоздоговора, в основном с «ящиками», что обеспечило, во-первых, финансовую независимость и, во-вторых, возможность найма сотрудников по моему усмотрению. Выделялось довольно много аспирантских единиц, которые я и занимал,

естественно, не выпускниками Сельхозакадемии. В результате образовалась структура, практически аналогичная наиболее эффективной структуре научных подразделений в развитых странах: постоянный состав лидеров или просто квалифицированных специалистов в отдельных направлениях и непрерывный проходящий поток аспирантов, стажеров и соискателей, подобно свежей крови омывавших «центральный орган» и не позволявший ему «заснуть». Возникшей в ТСХА научной базе я обязан по меньшей мере половиной всех результатов, которые я считаю своими достижениями. Об уровне кафедры как научного подразделения объективно свидетельствует тот факт, что в течение почти 20 лет мы проводили ежегодно Всесоюзные конференции по теории строения и спектров сложных систем, участие в которых считалось престижным и на которых в качестве приглашенных пленарных докладчиков выступали все ведущие в стране специалисты в области теории молекулярных спектров, квантовой химии и смежных наук. Стиль этих конференций, оказавшийся очень удачным, сейчас перенесен на конференции по молекулярному моделированию, которые также начали регулярно организовываться в последние годы в ГЕОХИ. К сожалению, после моего и моих сотрудников ухода с кафедры она быстро вернулась к исходному состоянию.

Работа на кафедре имела для меня ещё то значение, что направления научных исследований, темы для диссертаций и др. избирались только мною под воздействием того, что и называется логикой научного развития. Мне я никогда не следовал и «бежать в толпе» за лидерами никогда не стремился. Может быть поэтому группа окружавших меня ученых всегда занимала в науке свое место, причем не в ряду других, а несколько впереди. Могу сказать, что такой стиль работы вполне себя оправдал. Трудность здесь состоит в том, что для этого надо было иметь свои научные идеи, а не выуживать их со стороны путем заглядывания за забор!

Моя докторская диссертация подводила некоторый итог моим теоретическим работам в области колебаний сложных молекул. После её защиты я, естественно, задал себе вопрос: а что дальше-то делать? Наиболее тематически близким был путь от сложных молекул к полимерам и кристаллам. Я этим и стал заниматься, вначале вместе с появившейся в это время моей аспиранткой – Т.С. Абиловой. Теория колебаний полимерных цепей в это время уже существовала. Но обладала двумя крупными недостатками. Во-первых, она была сформулирована только для бесконечно длинных регулярных цепей, что приводило к логическому разрыву при анализе конечных объектов и бесконечных. Напомню шутку: «Когда теоретика просят решить задачу об устойчивости стула на четырех ножках, то он довольно быстро приносит решения об устойчивости объекта на одной ножке и на бесконечном числе ножек, а всю остальную жизнь ищет ответ на изначально поставленный вопрос». Во-вторых, в теории ИК спектров полимеров не была решена задача об интенсивностях полос.

В результате целенаправленных исследований и использования свойств кронекевских произведений матриц и ранее развитого в теории ИК спектров сложных молекул подхода к вычислению интенсивностей отмеченные два недостатка существовавшей теории были устранены и появилась новая теория и расчетная схема достаточно замкнутая и пригодная как для работы с

олигомерами с учетом концевых групп, так и с длинными полимерными цепями, а также кристаллами и молекулами, находящимися на поверхности кристалла. В 1977 г., когда вся работа приобрела более или менее законченный вид и была «обкатана» на ЭВМ, вышла моя монография «Теория ИКС полимеров».

В дальнейшем необходимость усовершенствования некоторых математических аспектов этой теории привели, на мой взгляд, к очень интересному общему результату: было показано, что широко применяющаяся в теоретической физике теория возмущений в форме рядов является следствием метода вращений Якоби при малых углах поворотов. Была предложена новая формула, удобная для вычислений и адекватная решаемой задаче.

В разрабатываемом нами программном обеспечении появился достаточно эффективный «полимерный» блок, непосредственно связанный с базовой частью и позволяющий решать задачи о периодических структурах независимо от их длины. В результате был создан теоретический фундамент для применения ИК спектроскопии при изучении процессов роста цепей при полимеризации. К сожалению, после отъезда некоторых основных действующих лиц за границу работы в этом направлении прекратились и ряд математических моментов оказались незавершенными.

Все годы моей работы на кафедре продолжалось дальнейшее развитие как теории колебательных спектров, так и программного обеспечения.

Задача перехода к массовым расчетам с учетом «истории» изучения своего класса соединений в конкретной химической лаборатории требовала таких методов, которые позволяли бы при переходе к новому соединению в полной мере учесть уже накопленный опыт расчетов предшествующих. Это привело нас к созданию так называемого фрагментного метода расчета спектров молекул и формированию соответствующих банков параметров молекулярных моделей. Как метод, так и банк данных о параметрах были реализованы в форме специального программного обеспечения и оказались очень эффективными. Современный банк позволяет оперировать с молекулами, относящимися к самым разнообразным классам и содержащими не только типичные для органических соединений атомы, но и целый ряд важнейших гетероатомов. В результате, опираясь на относительно небольшое число молекул, можно, комбинируя их фрагменты, создавать практически неограниченное число структур и рассчитывать их свойства.

Проблема дальнейшего совершенствования программ, их тестирования и сравнения, когда работа производится в разных центрах, естественно потребовала такого издания, в котором содержались бы все необходимые исходные данные для абсолютно точного воспроизведения результатов ранее выполненных расчетов спектров сложных молекул произвольной структуры. Такой материал в мировой литературе отсутствовал.

Этот пробел был заполнен нами в трех монографиях «Интерпретированные колебательные спектры ...» (1986, 1987 и 1988 г.г., общий объем более 1300 стр.), вышедших в Изд. «Наука».

В 1967 г. ко мне обратился М.Е. Эляшберг – сейчас профессор и ведущий специалист в области экспертных систем для диагностики и исследования сложных соединений. Он просил меня поставить ему тему кандидатской диссертационной работы и быть её руководителем. Я в это время думал как раз о новых задачах и возможности привлечения к их

решению идей и методов таких областей как теория информации и др. В частности, хотелось формализовать типично спектральную задачу – структурно–групповой анализ.

Как это сделать – было совершенно неясно. Я предложил М.Е. Эляшбергу подумать об этом. Через некоторое время М.Е. пришел ко мне с предложением использовать для формализации задачи о структурно–групповом анализе аппарат дискретной математики – булевой алгебры. Первая работа в развитие этой идеи была опубликована нами в 1968 г. В 1970 г. в «J. Molec. Struct.» появилась наша большая статья о применении символической логики в спектрохимии. Прошло много лет, но до сих пор эта статья как основополагающая цитируется практически во всех монографиях о математизации химии, т.к. она явилась вообще одной из первых, наряду с опубликованными в это же время учеными из США и Японии, где было обращено внимание на эффективность методов дискретной математики в химии как науке, базирующейся на утверждениях «если ..., то ...», или «черных ящиках». Решение упомянутой задачи и последующие работы в том же направлении позволили мне выступить в 1971 г. на организованной акад. В.А. Коптюгом I-й Всесоюзной конференции с проблемным пленарным докладом «О возможности автоматизации исследования строения и свойств молекул по их спектрам». Это было началом целого нового направления – создания теории и действующих версий так называемых экспертных систем. Через полтора года в Портороше (Словения) я делал аналогичный пленарный доклад уже на I-й Международной конференции по компьютеризации химических исследований и обучения.

Это было международным признанием нашего первенства.

История развития теории и практической реализации экспертных систем была довольно длительной. Происходило становление совершенно новой области, где было много неясного даже и по постановке задач. Обдумывание этого выводило нередко на проблемы совершенно общего характера. Например, при формировании так называемых баз знаний возник вопрос о том, можно ли сформировать такой материал, который являлся бы совершенно объективным. Выяснилось, что достичь полной объективности нельзя в принципе, что и пришлось учитывать при разработке всей архитектуры системы. Более того, необъективность эта оказалась связанной не с недостатком наших знаний, а с фундаментальными особенностями самого процесса познания и построения обобщений – теорий, диктуемыми великим принципом дополнительности Н. Бора. Это стимулировало ряд моих работ, посвященных общей методологии исследований микромира, некоторые выводы из которых я использовал, в частности, при написании учебника для вузов «Основы физики».

В дальнейшем мои соображения составили содержание специальной главы коллективной монографии «Философия естественных наук» (2006 г.), рекомендованной в качестве учебного пособия для студентов и аспирантов.

Интересно отметить, что сам термин – экспертные системы – с самого начала не употреблялся. Лишь потом это направление выделилось в целом ряде наук, в частности, в медицине. Мы вовремя начали то, что «носило в воздухе!»

Сейчас экспертные системы «ушли в практику» и достигли по своим возможностям такого уровня, о

каком не подозревалось в начале пути. Громадную роль здесь сыграл теперь профессор М.Е. Эляшберг. Мне приятно, однако, что предыдущая, уже довольно развитая система, получила в зарубежных монографиях название «системы Грибова». Обобщение работ первого периода становления экспертных систем было дано в 1979 г. в моей с М.Е. Эляшбергом статье, которая была написана по инициативе редколлегии журнала «Crit. Rev. in Anal. Chem.» и которая полностью заняла целый выпуск журнала. Через год вышла наша монография «Молекулярный спектральный анализ и ЭВМ», построенная как и все остальные мои монографии, целиком на оригинальном материале.

В 1977 г. ко мне в аспирантуру ТСХА поступил В.И. Баранов. В это время для меня было ясно, что вслед за теорией колебательных спектров сложных молекул и созданием методов их расчета и теорией чисто электронных спектров должны последовать теория и методы расчетов электронно-колебательных спектров. Начать решение этой задачи и было рекомендовано В.И. Баранову, который в дальнейшем тоже стал профессором и лидером соответствующего направления в учении о спектрах и способах их расчета. С физической точки зрения все было ясным, но предстояло сообразить, откуда брать характеристики потенциальных поверхностей электронно-возбужденных состояний, как вычислять в разных приближениях различные матричные элементы, ввести в теорию переносимые параметры и др. Вся проблема в целом оказалась столь сложной, что и до сих пор есть чувство неудовлетворенности состоянием некоторых важных аспектов. Тем не менее, многое удалось сделать и довести методы вычисления тонкой структуры электронных полос поглощения и люминесценции в спектрах сложных молекул до степени более или менее рутинных операций. Как и всегда, все разрабатываемые вычислительные приемы создавались так, чтобы обеспечить полную взаимосвязь с ранее развитой теорией молекулярных спектров и уже существующим программным обеспечением. Итог работам в этом направлении был подведен в двух монографиях о теории и методах расчетов электронно-колебательных спектров многоатомных молекул, изданных в 1984 и 1997 г.г.

Уже неоднократно говорилось о том, что все работы по теории оптических молекулярных спектров проводились практически параллельно с созданием и развитием программных комплексов для ЭВМ. Можно сказать, что теория развивалась «под контролем ЭВМ». В результате появилось несколько версий программ, которые получили обозначение LEV. По своей алгоритмической базе, разнообразию решаемых задач и внутренним связям между отдельными блоками комплекс сейчас вряд ли имеет равные в мире. Принципиально важно, что комплекс легко достраивается, если в самой теории возникают новые возможности.

Так случилось, например, когда мы начали работы по созданию методов решения ангармонических задач. С самого начала ставилась цель создать пригодные для работы с достаточно крупными системами произвольной структуры вычислительные алгоритмы, удобные, к тому же, для программирования на ЭВМ. При этом было ясно, что традиционный основанный на использовании теории возмущений в форме рядов метод для реальных крупных систем непригоден. Исходная идея нового подхода была изложена мною в статье, опубликованной в 1971 г. Однако прорыв в этом

направлении произошел гораздо позже, когда в «игру вступил» теперь профессор, а ранее мой соискатель А.И. Павлючко. Именно ему принадлежит заслуга не просто реализации исходных идей, но создание уникального и сейчас наиболее мощного программного комплекса для решения ангармонических задач для достаточно крупных молекул. Проведение серии конкретных расчетов подтвердило эффективность развиваемого подхода и позволило сделать целый ряд интересных выводов о характере ангармонических колебаний и колебаний большой амплитуды сложных молекул. Тем самым подведена теоретическая база для внедрения в спектроскопическую практику обертоновой спектроскопии и спектроскопии высоковозбужденных колебательных состояний. Полученные результаты были также обобщены в монографии о методах решения ангармонических задач, опубликованной в издательстве «Наука» в 1998 г.

К сожалению, остались программно не реализованными также развитые с участием моего аспиранта М.Р. Расовского общие методы вычислений спектров, появляющихся в результате внутренних вращений в молекулах.

В целом результатом многолетних работ явилось создание пригодной для работы с крупными молекулами и проникнутой единой идеологией теории и методов расчета оптических спектров разной природы в диапазоне от далекой инфракрасной области до ближней ультрафиолетовой, т.е. во всем диапазоне, который обычно используется для спектроскопических исследований.

Создание эффективных вычислительных алгоритмов позволяет решать так называемые прямые спектральные задачи. Напомним, что под прямыми понимаются такие, когда по заданным моделям молекул, полимеров и кристаллов и их характеристикам вычисляются спектральные отображения, что и позволяет сопоставлять ненаблюдаемые непосредственно параметры моделей с экспериментом. При этом нет никаких ограничений на структуры систем и их размеры.

Более или менее полный итог наших теоретических работ был подведен в обширной (630 стр.) монографии, написанной совместно с проф. Orville-Thomas (но целиком по нашим материалам) по предложению издательства Wiley and Sons и изданной в Англии и США в 1988 г.

Возможность решения прямых задач позволяет решать и обратные, а именно определять внутренние характеристики микрообъектов по наблюдаемым спектрам разной природы и в разных спектральных диапазонах. Тем самым обеспечены условия массового изучения микромира на основе спектров и приемов молекулярного моделирования. Появление таких условий чрезвычайно важно в связи с резко возрастающим интересом к нанообъектам и соответствующим технологиям.

Очень важно, что в результате логически взаимосвязанных действий, в конечном счете направленных к одной цели – построению общей теории оптических молекулярных спектров – была выработана методология создания практически пригодных для количественного прогноза теорий и методов расчета свойств объектов микромира и установлена связь этой методологии с фундаментальным принципом познания – принципом дополнительности Н. Бора. Была в деталях осознана дополнительность математического оформления и модельного описания, что получило практическое

отражение как в общей теории спектров, так и в архитектуре и принципах работы экспертных систем. Моей величайшей гордостью является то, что работы этого цикла в 1999 г. были отмечены высшей научной наградой России – Государственной премией – с формулировкой: «За цикл работ по созданию теории и методов расчета оптических молекулярных спектров и разработку экспертной системы для идентификации и анализа сложных соединений». Вместе со мной эту премию получили мои ученики – главные деятели отдельных составляющих – доктора наук и профессора В.И. Баранов, В.А. Дементьев, М.Е. Эляшберг.

Большую роль в моем научном становлении сыграло то, что много лет мне пришлось преподавать общий курс физики. Простой пересказ сильно упрощенных учебников меня с самого начала не удовлетворял. Под воздействием собственно научной работы в достаточно широкой научной области и необходимости отбора материала и поиска методических приемов изложения сложных понятий студентам, я, во-первых, стал задумываться над вопросами о месте физики в системе естественно-научного знания и общечеловеческой культуре, о её методологии, о трансформации некоторых впервые открытых в физике законов на области, от физики далеких и т.д. Все это очень расширило мой кругозор и нашло отражение в учебнике «Основы физики» (совместно с Н.И. Прокофьевой), изданном в 1995 г. и переизданном в 1998 г. Кажется, впервые в нашей учебной литературе была сделана попытка представить физику как открытый предмет, выводы которого не только необходимы для развития техники, но помогают понять, например, общие законы развития общества, экономики и т.д.

Успехи в направлении развития теории и методов расчетов стационарных состояний и спектров дали возможность в последние годы поставить и решить задачу о расчетах спектров люминесценции с временным разрешением (пико и фемтосекундная спектроскопия). В результате была развита эффективная техника, впервые позволившая рассчитать на количественном уровне трехмерные спектры реальных достаточно сложных молекул в координатах интенсивность линии – волновое число – время. Удалось показать также, что спектры с временным разрешением могут быть использованы для количественных анализов индивидуальных веществ и малокомпонентных смесей без использования эталонов, т.е. образцов стандартного состава.

С проблемой безэталонных спектральных анализов мы встретились уже при работе над экспертными системами. В системах этих отсутствуют с самого начала сведения о спектрах большого числа индивидуальных веществ, как это принято в так называемых информационно-поисковых системах. Сравнимые с экспериментом спектры генерируются в самом процессе работы экспертной системы. Это и обеспечивает возможность проведения безэталонных качественных спектральных анализов.

Отказ от использования натуральных образцов стандартного состава при проведении спектральных анализов является задачей принципиальной важности для аналитической спектроскопии, особенно в тех случаях, когда не требуется высокая точность, но зато возникает громадное разнообразие анализируемых объектов. Такая ситуация как раз характерна для мониторинга окружающей среды. Нами была выдвинута идея о замене данных, получаемых при использовании натуральных эталонов

при проведении количественных анализов, математическими эталонами, т.е. теми величинами, которые непосредственно могут быть получены при расчетах вероятностей переходов между различными энергетическими уровнями сложной молекулы. Эта идея была реализована и предложен метод количественного спектрального анализа на основе стационарных спектров поглощения, в частности, для дистанционного контроля на базе лидарной техники. Оказалось, что для этого надо принципиально изменить как набор измеряемых характеристик, так и средства статистической обработки.

Полученные в этом направлении результаты также были обобщены в виде специальной монографии.

Молекулярные спектры возникают при переходах между уровнями энергии сложной системы. Поэтому создание методов расчета спектров подразумевает, во-первых, отбор наиболее удобных для решения различных задач молекулярных моделей, обладающих общностью, а, во-вторых, разработку способов решения квантовых уравнений для состояний всех таких моделей. Другими словами, решается несравненно более общая проблема, чем собственно спектроскопическая. Решение такой проблемы создает базу для перехода к задачам следующего уровня – описанию химических превращений. Наиболее простыми являются структурные изомер-изомерные превращения, которые могут возникать как в результате электромагнитных, так и температурных воздействий.

Впервые о теории таких превращений я задумался в 1985 г., а в 1986 г. вышла моя статья, где была приведена важная формула для соотношения между нормальными координатами двух сильно различающихся по структуре состояниями молекул. Вопрос этот уже возникал в теории электронно-колебательных спектров, т.к. потенциальные поверхности двух комбинирующих электронных состояний отличаются друг от друга. Отличия эти, однако, были невелики. Мне удалось решить задачу для произвольного случая. Долгое время этот результат не был востребован. Я вернулся к нему через 10 лет, когда «созрел» для «расширения» теории спектров до теории химических превращений. Существовавшее состояние теории химических превращений, инициируемых различными внешними воздействиями или происходящих спонтанно, меня не удовлетворяло по многим причинам. Например, до сих пор базовой является модель «перевала через барьер», предложенная несколько десятков лет назад. Главным недостатком модели является отсутствие временного фактора, хотя очевидно, что все химические превращения развиваются во времени. Кроме того, в рамках этой теории не описываются фотохимические реакции и целый ряд других молекулярных процессов.

Поэтому следующий шаг в развитии теории химических превращений требовал прежде всего создания таких физических моделей, которые позволили бы, исходя из небольшого числа первых базовых принципов и фундаментальных положений, получить выводы, согласующиеся как можно с большим числом важнейших общих закономерностей молекулярных процессов различной природы (спектральные, структурные превращения и др.), не прибегая при этом к заимствованию эмпирических результатов. Задачи компьютерного моделирования требовали также, чтобы были указаны способы количественного описания хода таких процессов.

Перечислим некоторые хорошо известные общие химические закономерности, описание которых на базе простой физической модели хотелось бы получить в первую очередь.

1. Существуют реакции структурной изомеризации, разложения и синтеза.
2. Все реакции можно разделить на быстрые (от долей секунды до часов) и медленные (сутки, месяцы, годы).
3. Реакции могут быть экзо- и эндотермическими.
4. Реакции инициируются нагреванием и фотовозбуждением.
5. Кинетические закономерности, проявляемые в спектрах и многих реакциях, описываются экспоненциальными функциями от матриц.
6. Для большого числа реакций выполняется уравнение Аррениуса. Нередко наблюдается эффект индукции реакции.
7. Реакции с участием сложных молекул осуществляются только на локальных реакционных центрах. В случае очень больших молекул снижается энергия активации реакции.
8. В реакциях могут существовать «безэнергетические» (без значительных внешних воздействий) и колебательные процессы.
9. Радикальные перестройки структур сложных молекул возможны только в результате последовательной структурной изомеризации. Эти же процессы обеспечивают передачу энергии и информации в молекулярном пространстве.
10. Молекулы могут перерабатывать информацию, заданную в нечетком виде.
11. При наблюдении быстро протекающих процессов обнаруживаются квантовые биения.
12. Все химические превращения удовлетворяют принципу близкодействия.

Ограничимся этими положениями.

Оказалось, что для получения аналогичных выводов «из первых принципов» достаточно исходить из следующих немногих базовых утверждений.

1. Локализованная в ограниченном пространстве совокупность атомов может находиться в стационарных состояниях, отвечающих структурным изомерным формам (долгоживущие состояния) или слабо связанным комплексам. Эти состояния характеризуются точками в пространстве, представленном в нормальных координатах.
2. При обычных оптических процессах переходы между такими точками не происходят.
3. Химическому превращению любого типа сопоставляется переход от одной точки к другой в пространстве состояний. Вероятность такого перехода максимальна при резонансе уровней энергий комбинирующих подструктур и определяется соответствующим матричным элементом их взаимодействия.
4. Любые процессы в ансамблях молекулярных систем развиваются во времени и описываются системой дифференциальных уравнений

$$\frac{dn}{dt} = P(t)n$$

где n – матрица-столбец заселённости состояний (уровней энергий) подсистем; $P(t)$ – матрица вероятностей переходов, элементы которой могут учитывать временные факторы резонансной передачи энергии или заселённости от одной подсистемы к другой. Кинетика процесса зависит от начальных условий.

Видно, что все базовые положения достаточно просты и наглядны. В частности, резонанс примечателен тем, что даже при очень малом коэффициенте связи можно полностью передать энергию одной подсистемы другой.

Вся теория, как и обычная теория ЛКАО, базируется на ЛК базисных функций, но уже электронно-колебательных, отвечающих комбинирующим состояниям молекулярной системы. При построении нужной ЛК и понадобилось упомянутое выше соотношение между нормальными координатами.

На основе достаточно разумных допущений удалось объединить в одной энергетической матрице электронно-колебательные состояния всех возможных изомерных состояний и, более того, первых стадий мономолекулярных реакций разложения и бимолекулярных реакций присоединения. Это позволило в рамках одного подхода описать как процессы внутри одной изомерной структуры, так и процессы химических изомер-изомерных и более сложных превращений и связать теорию с экспериментальными наблюдениями методом фемтосекундной спектроскопии.

Удалось также сформулировать ряд простых и наглядных правил химических превращений и предложить методы расчетов их вероятностей. Была выяснена физическая природа передачи сигналов и энергии внутри сложных молекулярных систем, объяснен механизм распознавания образов в молекулярном мире и др. Тем самым появилась перспектива выхода в область принципиально новых проблем, связанных с необычными внутримолекулярными процессами, с созданием молекулярных машин и устройств, молекулярных приемников и преобразователей информации и т.д. Сознывая высокую актуальность поставленных проблем, я решил обобщить уже первые результаты в виде монографии, опубликованной в 2001 г. Важно было показать связь нового подхода с ранее развитой теорией колебательных и электронно-колебательных состояний и спектров, преимущество вычислительных процедур, обосновать саму формулировку предлагаемой теории и т.д. Значительно более детальное изложение новой теории с учётом уже и результатов более поздних работ было дано в обширной монографии «Теория и методы расчётов молекулярных процессов», опубликованной в 2006 г. Большое участие в этих исследованиях принял В.И. Баранов – соавтор монографии. Конечно, многое осталось ещё не решённым, но я считал, что только в монографическом изложении, а не серией статей, новый подход можно донести до широких кругов исследователей.

В последние годы я в существенно переработанном виде подготовил 3-е издание монографии «Колебания молекул». Материал этой монографии также целиком оригинален и содержит много нового по сравнению с 2-ым.

Читатель, наверное, обратил внимание на непрерывное упоминание монографий. Написание их было принципом. Я всегда считал, что «сто зайцев

ещё не делают одного слона». Поэтому, когда было видно, что работы в определенном направлении приобретают более или менее полный вид и могут привести к общим рекомендациям – как решать колебательные задачи, электронно-колебательные, какова должна быть архитектура и алгоритмическая база экспертных систем и т.д. – производилась ревизия того, что стало известным и что еще надо сделать. Тогда начиналось целенаправленное «заполнение пустот» до тех пор, пока раздел не казался нам на данном этапе завершенным. Вот тогда все важнейшие результаты и обобщались в форме книги. Именно поэтому все наши монографии базировались лишь на оригинальных материалах и все вместе образуют изложенную во многих томах общую теорию и алгоритмы расчетов оптических молекулярных спектров сложных систем и теорию молекулярных процессов. При этом мы развивались достаточно независимо, обгоняя как по постановке проблем, так и по их исполнению работы других исследовательских групп.

Некоторые из моих работ находятся «в стороне» от генеральной линии, но представляются мне также достаточно интересными. Например, было дано квантовое обоснование феноменологического метода атом-атомных потенциалов. Это не было сделано за 40 лет использования метода, хотя он получил широкое распространение.

Было предложено новое уравнение для состояния реального газа, впервые позволившее связать результаты квантовых оценок характеристик молекулярных потенциалов с макроразведением газа. Решён ряд и других вопросов.

Разумеется, сделать все вышеописанное я бы не смог без помощи моих учеников и сотрудников, которым я глубоко благодарен. У меня защитилось более 60 аспирантов и соискателей. Десять моих учеников стали докторами наук и профессорами. Многие работают в ВУЗ'ах и передают наш опыт преподавания новым поколениям. Не все, конечно, были одинаковыми, но целый ряд были очень талантливыми и способными стать крупными учеными. Некоторых я потерял из-за существовавшего при советской власти крепостного права и прикрепления людей к месту жительства. Некоторые с готовыми докторскими работами уехали за границу. Рыба ищет, где глубже, а человек – где лучше, и я не в обиде.

Есть международное признание. Я уже упоминал, что первое приглашение сделать доклад на самом важном форуме спектроскопистов–молекулярщиков – Европейском конгрессе – я получил в 1967 г. Это был, если не ошибаюсь, всего второй случай, когда приглашались советские ученые. Я имел подобные приглашения трижды. В дальнейшем я много раз выступал с пленарными докладами на престижных научных собраниях, в том числе на Гордоновских чтениях в США. Я читал курсы лекций в Варшавском, Белградском, Лионском, Иерусалимском, Стамбульском и других университетах по их приглашениям.

В 1991 г. я был избран действительным членом Российской Академии естественных наук, где сейчас являюсь вице-президентом и председателем секции физики. В 1993 г. получил звание «Заслуженный деятель науки РФ». В 1997 г. я был избран членом-корреспондентом РАН. В 2003 г. я был избран почётным профессором Саратовского университета. Индекс цитирования моих работ довольно высок.

Читатели этого очерка могут счесть нескромным с моей стороны такое подчеркивание своих заслуг. В

свое оправдание сошлюсь на слова Г. Нельсона перед Трафальгарским сражением. В ответ на рекомендацию Харди – капитана флагманского корабля «Виктори» – не надевать парадный мундир со всеми орденами, чтобы не привлекать внимания снайперов вражеских кораблей, Нельсон ответил: «Я честно заслужил эти награды». Конечно, выстрел снайпера мне не грозит, но «злые языки страшнее пистолета!»

Не все, конечно, удалось дотянуть до желаемого уровня. Многие эффективные алгоритмы и вычислительные возможности не доведены до удовлетворительного по современным меркам состояния. Не все задуманные блоки введены в общий комплекс LEV. Обнаружились трудности там, где вначале не ожидалось. Так всегда бывает в науке: с покоренной вершины видны новые, «на которых еще не бывал».

Занятия наукой были для меня главными в жизни, но всегда интересовало и другое, особенно литература и история. Я много думал о судьбах своей страны, где «черт догадал меня родиться», но которую я очень люблю! Некоторые свои взгляды я изложил в серии статей, которые отношу к публицистическим. В 2002 г. я собрал их, многое добавил и изложил в специальной книге «Ума холодных наблюдений...».

Я прожил долгую жизнь в науке. Мне удалось кое-что сделать, удалось использовать почти все шансы, которые предоставила мне судьба. Никто не стоял за моей спиной, я сам создал условия для своей работы и воспользовался этим.

Feci quod potui, faciant meliora potentes!

Надеюсь, что удастся сделать кое-что ещё, если Господь позволит!

Индекс цитирования Citation Index

(по данным Science Citation Index of Institute for Scientific Information, Philadelphia, PA 19104, USA)

В разделе «Сам о себе» я писал о том, что мои работы вызывали интерес специалистов в соответствующих областях. Следствием этого были приглашения на разного рода конференции, причем с пленарными докладами, в Университеты и т.д. Это, так сказать, «качественные» признаки полезности изысканий автора для развития «своих» областей науки. Конечно, хочется иметь и «количественные» оценки. При всех своих недостатках, больше всего на такую оценку может претендовать индекс цитирования. Я им интересовался очень давно. Ниже приводятся данные о цитированиях по пятилетиям, начиная с 1959 г. Сведения до 1990 г. «вручную» собрала по моей просьбе одна из моих сотрудниц.

г.г.	Общее число ссылок	Работы, цитированные наибольшее число раз	Число ссылок
1959-1964	363	Успехи физ. наук, 1961, т. 75, с. 527.	240
1965-1969	113	Оптика и спектроскопия, 1968, т. 24, с.34.	24
1970-1974	307	Введение в теорию RAS. 1965. Доклады АН СССР, 1962, т. 145, с. 761. J. Molecular Structure, 1974, v. 22, p. 161.	35 31 30

1975-1979	570	CR ANC, 1979, v. 8, p. 111.	92
		J. Anal. Chem., 1977, v. 32, p. 1609.	73
		Ж. анал. химии, 1977, т. 32, с. 2025.	72
		Analyt. Chim., 1977, v. 95, p. 75.	45
1980-1984	446	Ж. анал. химии, 1978, т. 33, с. 586.	38
		J. Molecular Structure, 1980, v. 67, p. 1-28.	53
		Ж. структурной химии, 1979, т. 20, с. 890.	27
		Оптика и спектроскопия, 1981, т. 51, с. 627.	25
1985-1989	450	Ж. физической химии, 1980, т. 54, с. 2010.	24
		Theochem., 1986, v. 33, p. 1-23.	55
		Theochem., 1985, v. 23, p. 15.	41
1990	94	J. Molecular Structure, 1989, v. 198, p. 93.	27
		J. Molecular Structure, 1990, v. 224, p. 45.	18
		J. Molecular Structure, 1990, v. 216, p. 241.	13

Итого: за 1959-1990 г.г. индекс цитирования = 2343.

По уточнённым данным по списку цитирования www.Scientific.ru, основанному на базе данных Института информации (ISI), "Web of Science", полное число цитирований, начиная с 1986 г., составляет 2850, включая самоцитирования. На работы, опубликованные в последние 6 лет, имеется 150 ссылок.

Обращает на себя внимание «пик» цитирований в самом начале. Это вызвано большим интересом в то время к расчетам интенсивностей полос поглощения в ИКС. Только один обзор в журнале «Успехи физических наук» (1961, т. 75) дал 240 ссылок. Приглашение сделать пленарный доклад на Европейском конгрессе по молекулярной спектроскопии (Мадрид, 1967 г.) было не случайным.

Следующее существенное возрастание числа цитирований приходится на конец семидесятых годов. Это время начала работ по теории экспертных систем.

Конечно, цитируются в основном работы, опубликованные в международных журналах на английском языке. При этом многие из них были напечатаны в «Journal of Molecular Structure». Это хороший журнал. Я долгие годы был членом редколлегии этого журнала и, поэтому, считал необходимым печатать свои работы именно в нем. К тому же, в отличие, например, от «Physical Review», за публикации не надо было платить. В индексе цитирований не учитываются ссылки в монографиях. Между тем в них, как правило, ссылаются именно на наиболее фундаментальные работы и обобщения в виде также монографий. Таких цитирований может быть много. Например, в обширной монографии N.A.B. Gray, одного из ведущих деятелей знаменитого проекта DENDRAL в США, цитируются все опубликованные к этому времени наши работы (более 20) по экспертным системам и некоторые другие (N.A.B. Gray. Computer –Assisted Structure Elucidation. Wiley and Sons, 1986, 536 p.p.).

В монографии B.S. Galabov и T. Dudev "Vibrational Intensities" (Elsevier, 1996, 265 p.p.) имеется около 30 ссылок на наши работы.

Публикация монографий, как правило, «поглощает» оригинальные работы и, соответственно, уменьшает число ссылок. Например, никто сейчас не цитирует работы, составившие содержание книги L.A. Gribov. Intensity Theory for IRS of Polyatomic Molecules. C.B., N.-Y., 1964. Ссылки на нее, однако, есть практически во всех монографиях по теории спектров молекул. Не анализируются, разумеется, и ссылки в отечественных диссертациях. Между тем именно в них чаще всего упоминаются монографические обобщения, т.к. «входящие в науку» главным образом с помощью таких источников и обучаются.

Если принять, что только по молекулярной спектроскопии и близким проблемам защищалось в год в среднем 10 кандидатских диссертаций, и в них было всего по 5 ссылок на монографии автора, то за 40 лет получится 2000 ссылок.

В приведенном выше индексе цитирования не учтено самоцитирование. В моих статьях я почти всегда ссылаюсь на предшествующие свои же работы. Однако этим не злоупотребляю. Читатель мне поверит, по-видимому, что «самоцитироваться» хотя бы 1000 раз затруднительно!

Вызвано это не чрезмерной самовлюбленностью, а тем, что важнейшие работы опирались, как правило, не на чужие идеи и разработки, а на свои собственные, хотя бы немного опережавшие других исследователей, и в этом смысле самодостаточные. В оправдание приведу пример монографии «Колебания молекул» (Изд. 2, 1972 г.). В ее тексте вообще нет ни одной ссылки. В предисловии же просто приведен список всех оригинальных работ авторов, на основании которых и написана книга.

Я всегда излагал свой взгляд на вещи и свои подходы и методы вычислений и не особенно стремился «раздать всем сестрам по серьгам». Если я провожу в новой статье какую-нибудь свою же формулу без доказательства, то я должен сообщить читателю, где это доказательство он может найти. Самоцитирование становится естественным и неизбежным. Оно, кстати, в этом случае является, в известной степени, и показателем оригинальности исследований автора.

В заключение заметим, что и абсолютные цифры цитирований и сравнения на этой основе вкладов отдельных исследователей в развитие науки хотя и показательны, но не являются главными критериями. Индекс очень зависит от общего числа людей, работающих в данной области. Можно сказать, что это, в свою очередь, также есть показатель актуальности направления. Это верно, но лишь с оговорками. Большое число исследователей появляется тогда, когда явно обозначается прикладная сторона. На первых же этапах, даже при бесспорной фундаментальности результата, на него может обратить внимание лишь очень небольшой круг лиц. Этот начальный период иногда продолжается довольно долго.

Конечно, если индекс цитирования за десяток лет близок к нулю, то это означает, что ценность работ автора, если он «не закрыт», также к этому показателю приближается.

Заканчивая, прошу читателей обратить внимание на рисунки. Они отражают жизненные пути автора и его сверстников и заимствованы из статьи, написанной для «Золотого выпуска» (№ 200) «Journal of Molecular Structure».



**Диссертации,
МОНОГРАФИИ,
монографические статьи, учебники и
учебные пособия.**

List of Monographs

1. Л.А. Грибов.
Некоторые вопросы теории интенсивностей и поляризаций в инфракрасных спектрах поглощения основных колебаний многоатомных молекул.
Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (рукопись), 1961.
2. Л.А. Грибов.
Некоторые вопросы теории колебательных спектров многоатомных молекул.
Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук (рукопись), 1963.
3. Л.А. Грибов.
Теория интенсивностей в инфракрасных спектрах многоатомных молекул.
АН СССР, Москва, 1963, 154 с.
4. Lev A. Gribov.
Intensity theory for infrared spectra of polyatomic molecules.
Consultants bureau, New York, 1964, 113 p.
5. Л.А. Грибов.
Введение в теорию и расчет колебательных спектров многоатомных молекул.
Изд. ЛГУ, Ленинград, 1965, 123 с.
6. М.В. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов.
Колебания молекул.
Изд. 2, Наука, Главн. ред физ.-мат., Москва, 1972, 699 с.
7. Л.А. Грибов.
Введение в молекулярную спектроскопию.
Наука, Главная редакция физ.-мат. литературы, Москва, 1976, 400 с.
8. Л.А. Грибов.
Теория инфракрасных спектров полимеров.
Наука, Главная редакция физ.-мат. литературы, Москва, 1977, 240 с.
9. L.A. Gribov, M.E. Elyashberg.
Computer-aided identification of organic molecules by their molecular spectra.
Critical reviews in analytical chemistry, 1979, v. 8, N 2, p. 111-220.
10. L.A. Gribov, B.I. Szytapanov, M.A. Jeljasevics, M.V. Volkenstein.
Molekularezgesek.
Akademiai Kiado, Budapest, 1979, 676 p.
11. М.Е. Эляшберг, Л.А. Грибов, В.В. Серов.
Молекулярный спектральный анализ и ЭВМ.
Наука, Москва, 1980, 307 с.
12. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.
Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул.
Наука, Москва, 1981, 356 с.
13. В.И. Баранов, Ф.А. Савин, Л.А. Грибов.
Программа расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.
Наука, Москва, 1983, 192 с.
14. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, Б.К. Новосадов.
Методы расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул.
Наука, Москва, 1984, 325 с.
15. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, А.Т. Тодоровский.
Интерпретированные колебательные спектры алкенов, алкенов и производных бензола.
Наука, Москва, 1986, 495 с.
16. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев, О.В. Новоселова.
Интерпретированные колебательные спектры углеводородов с изолированными и сопряженными кратными связями.
Наука, Москва, 1987, 471 с.
17. Л.А. Грибов
Физическая химия. Современные проблемы.
Ред. Я.М. Колотыркин. Химия, Москва, 1987, с. 211-262.
18. М.Э. Эляшберг, Ю.З. Карасев, В.А. Дементьев, Л.А. Грибов.
Интерпретированные колебательные спектры углеводородов – производных циклогексана и циклопентана.
Наука, Москва, 1988, 375 с.
19. L.A. Gribov, W.J. Orville–Thomas.
Theory and methods of calculation of molecular spectra.
John Wiley and Sons, Chichester, New York, 1988, 636 p.
20. Л.А. Грибов, В.А. Дементьев.
Моделирование колебательных спектров сложных соединений на ЭВМ. Учебное пособие.
Наука, Главн. ред физ.-мат. лит., 1989, 158 с.
21. Математические методы и ЭВМ в аналитической химии. Серия: Проблемы аналитической химии.
Ред. Л.А. Грибов. Наука, Москва, 1989, 300 с.
22. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.
Основы физики. Учебник.
Высшая школа, Москва, 1992, 430 с.
23. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.
Основы физики изд. 2-ое, дополненное. Учебник для естественно–научных направлений ВУЗ'ов.
Наука–Физматлит, Москва, 1995, 552 с.
24. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, Д.Ю. Зеленцов.
Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. Теория и методы расчета.
Наука, Москва, 1997, 475 с.
25. Л.А. Грибов, А.И. Павлючко.
Вариационные методы решения ангармонических задач в теории колебательных спектров молекул.
Наука, Москва, 1998, 334 с.
26. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева.
Основы физики. Учебник для естественно–научных направлений ВУЗ'ов. Изд. 3-е.

- Гардарика, Москва, 1998, 557 с.
27. Л.А. Грибов, С.П. Муштакова.
Квантовая химия. Учебник для студентов химических и биологических специальностей ВУЗ'ов.
 28. Гардарика, Москва, 1999, 387 с.
Л.А. Грибов.
От теории спектров к теории химических превращений.
Изд. УРСС, Москва, 2001, 365 с.
 29. Л.А. Грибов, В.И. Баранов, М.Е. Эляшберг.
Безэталонный молекулярный спектральный анализ. Теоретические основы.
Изд. Эдиториал УРСС, Москва, 2002, 317 с.
 30. Л.А. Грибов.
Ума холодных наблюдений...
Ноосфера, Москва, 2002, 146 с.
 31. Л.А. Грибов.
Философия естественных наук.
Учебное пособие для вузов. Ред. С.А. Лебедев.
Глава 2. Принципы формирования научного знания на примере физики.
с. 35-83.
Москва, Фонд «Мир», 2006, 550 стр.
 32. Л.А. Грибов, В.И. Баранов.
Теория и методы расчета молекулярных процессов: спектры, химические превращения и молекулярная логика.
Изд. «КомКнига», Москва, 2006, 480 с.

Статьи к Юбилеям

1. Лев Александрович Грибов (к 60-летию со дня рождения).
Журнал прикладной спектроскопии, 1993, т. 58, № 5-6, с. 581-582.
2. Л.А. Грибову – 60 лет.
Журнал аналитической химии, 1993, т.48, № 5, с. 925-927.
3. Лев Александрович Грибов (к 60-летию со дня рождения).
Оптика и спектроскопия, 1993, т. 75, № 1, с. 219-220.
4. Льву Александровичу Грибову – 70 лет.
Журнал аналитической химии, 2003, т. 58, № 5, с. 551-553.
5. Юбилей члена-корреспондента РАН Л.А. Грибова.
Журнал структурной химии, 2003, т. 44, № 2, с. 380.
6. Члену-корреспонденту РАН Л.А. Грибову – 70 лет.
Журнал физической химии, 2003, т. 77, № 5, с. 959.
7. Лев Александрович Грибов.
Оптика и спектроскопия, 2003, т. 94, № 6, с. 1049-1050.
8. Члену-корреспонденту РАН Л.А. Грибову – 70 лет.
Вестник РАН, 2003, т. 73, № 4, с. 375.

<http://www.ivtn.ru/partners/geokhi/gribov.php>

СЕКЦИЯ 1

ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ

SECTION 1

GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE

ЭТАЛОНЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ НАУКИ В АМЕРИКАНСКОМ ВЫСШЕМ ОБРАЗОВАНИИ (1968 – 2001)

Перекатов В.И.

Московский физико-технический институт

В прошлом году в журнале Communications of the ACM 50, 5 (May 2007) был опубликован обзор руководства ACM и IEEE-CS по обучению компьютерной науке на стадии бакалавриата, выполненный Дэвидом Хеммендинджером. По существу, в его основательном последовательном анализе преследовалась та же цель, что и в представленной ниже моей статье (В.И.Перекатов «Стандарты компьютерной науки в американском высшем образовании». Высшее образование сегодня, 2003, №1,2), которая была опубликована четырьмя с половиной годами раньше. Разумеется, эти два независимых исследования существенно отличаются в подходах, методах и заключениях, но по моему мнению наиболее принципиальная разница состоит в том, что моя работа была начата как реакция на восшествие СС 2001 и его восприятие в нашей образовательной системе, в то время как публикацию прошлого года можно рассматривать как знак неизбежного завершения этой и предвестник новой эры. Быть может, именно это дает повод сопоставить ее с моей прелюдией

1. Введение

В течение многих лет американская высшая школа готовит специалистов, лидирующих в разработке компьютеров и компьютерных приложений. Она обеспечивает предпосылки для создания артефактов, повсеместно изучаемых на факультетах и кафедрах, связанных с этой тематикой. На государственном уровне в Соединенных Штатах нет единой легитимной основы для создания или поддержки образовательных стандартов в области компьютерных дисциплин, высшие учебные заведения формируют и усовершенствуют собственные руководства, обычно включающие учебный план и методические установки к его реализации - согласно академической традиции такой документ классифицируется как «курукилум». Ведется постоянная работа, сопровождаемая обнародованием коллективных и индивидуальных подходов к постановке образования, их обсуждением, совмещением или поляризацией точек зрения. Она протекает в децентрализованной среде, где в условиях быстрого прогресса предметной области до сих пор ставятся и решаются принципиальные проблемы, давно пройденные в устоявшихся секторах образования.

Естественно, что в такой обстановке для принятия практических решений на местах полезно иметь ориентиры. Ответственность за их формирование традиционно берут на себя ведущие

COMPUTER SCIENCE STANDARDS IN HIGHER SCHOOL OF THE U.S. (1968 – 2001)

Perekatov V.I.

Moscow Institute of Physics and Technology

Last year, a survey of the ACM and IEEE-CS guidelines for undergraduate CS education by David Hemmendinger was published in Commun. ACM 50, 5 (May. 2007). Actually, the objective of this thorough consecutive analysis is the same as in the article published in Russian four and a half years before (V.I.Perekatov. Computer Science Standards in Higher School of the U.S. The Higher Education To-Day, 2003, № 1, 2). Below presented is its English version. As a matter of course, the two independent investigations essentially differ in their approaches, methods and conclusions, but, in my opinion, the major difference is that my work has been initiated as a reaction to the СС 2001 accession and its acceptance by our education system, whereas D. Hemmendinger's publication could be taken as an omen of unavoidable end of this era and the forerunner of the new one. May be, this is what gives the reason to compare it with my prelude

профессиональные общества США, связанные с созданием и применением компьютеров, - Ассоциация компьютерной техники (Association for Computing Machinery, ACM) и Институт инженеров по электронике и электротехнике (Institute for Electronic and Electrical Engineers, IEEE). Они создают целевые группы (task forces), чтобы систематизировать накопленный опыт, выделить достойные решения, предложить свои и оформить их в виде документа, рекомендуемого в национальном масштабе как руководство к действию на определенный период времени.

Обзор этого процесса в статье ведется от 1965 года, когда ACM в рамках своего Комитета по образованию сформировала предварительную версию программы бакалавриата по компьютерной науке (an undergraduate program in computer science) [1]. В 1968 году журнал Communications of the ACM опубликовал Curriculum 68, ее окончательный вариант [2]. Главный акцент при этом делался на подготовку профессионалов, специализирующихся в компьютерном деле (majors), хотя некоторое внимание было уделено и компьютерному просвещению будущих специалистов других профилей (minors).

Бакалаврский цикл соответствует первому этапу высшего образования, обычно продолжающемуся четыре года с двумя учебными семестрами в год. Он особо значим тем, что формирует

профессиональных знания, совместно образующих представление о предметной области, которое становится основой компетенции. Здесь обычно присутствуют достаточно устоявшиеся темы и методики, вследствие чего программам, реализуемым в разных образовательных институтах, свойственно некоторое единообразие. Поэтому вполне реальна идея предложить некий унифицированный вариант постановки учебного процесса, разработанный признанными специалистами.

В первом курсе есть и глава, посвященная магистерским и докторским программам. Однако, последующие документы данной серии приводили на сей счет только беглые замечания.

Через десять лет после версии 1968 года ACM выпустила очередной документ – Curriculum '78 [3].

Вплоть до середины 80-х годов аналогичную работу с ориентацией на составление программ по компьютерной инженерии (computer engineering) независимо вел IEEE силами своего компьютерного общества IEEE-CS (Computer Society of the IEEE). С 1985 года, ACM и IEEE/CS работают в этом направлении совместно. В 1989 году их Объединенная целевая группа под председательством Питера Деннинга, известного специалиста в области программного обеспечения и педагога, выпустила развернутый доклад «Computing as a discipline» [4], который формулировал принципы преподавания дисциплины компьютеринг (computing), охватывающей компьютерную науку и компьютерную инженерию. Через два года вновь сформированная Объединенная целевая группа со ссылками на этот доклад опубликовала окончательную версию третьего документа серии – Computing Curricula 1991 (сокращенно CC 1991) [5]. Согласно преамбуле, он аккумулировал и идеи курсов, самостоятельно разработанных IEEE-CS в конце 70-х – начале 80-х годов.

В конце 1998 года профессиональные общества приступили к работе над серией документов Computing Curricula 2001 (CC 2001). К этому времени стало очевидно, что идея слияния компьютерной науки и компьютерной инженерии в рамках единой дисциплины компьютеринг не выдержала испытания временем, и в дальнейшем следует представлять это обширное академическое поле в системе курсов, где том компьютерной науки обобщит принципиальные аспекты остальных. (К настоящему времени выпущены предварительные или завершённые версии курсов компьютерной инженерии, компьютерной науки, информационных систем, информационных технологий, инженерии программного обеспечения). Питер Деннинг, за несколько лет перед этим возглавивший Отдел образования ACM, сыграл определяющую роль и на этот раз. Совместно с Карлом Чангом, вице-президентом образовательного подразделения IEEE-CS, он был назначен сопредседателем Объединенной целевой группы по компьютерной науке, завершившей свою работу выпуском доклада Computing Curricula 2001. Computer Science Volume [6], которому предшествовала публикация предварительных версий. (Санкт-Петербургский государственный университет опубликовал его тщательно выполненный перевод [7].) В дальнейшем сокращение CC 2001 будет обозначать именно Computer Science Volume.

Имеются некоторые сведения, свидетельствующие о различной степени влияния серии рекомендаций, выпущенных профессиональными обществами, на преподавание в высших учебных заведениях

(«институтах», согласно терминологии CC 2001). Однако, несомненно следующее. Более четырех десятилетий первоклассные специалисты, объединяющиеся под эгидой ACM и IEEE/CS, периодически ставили целью зафиксировать текущее и по возможности предусмотреть будущее состояние развивающейся предметной области в виде, способствующем постановке высшего специального образования. Существенно, что этот образ формировался в результате анализа и согласования идей и опыта, накопленного за прошедший период широким кругом авторитетных педагогов. В итоге предлагался вариант, по возможности приближенный к тому, что можно было бы рассматривать как доминирующую точку зрения, с которой соотносятся любые частные результаты (в статье [8] не без умысла упоминаются хорошо озвученные новаторские идеи, в присутствии которых создавался «официоз» Computing Curricula 1991). Можно полагать, что достигнутый компромисс всегда в целом характеризовал данную систему образования. Образно говоря, на основе местного фольклора складывалась большая академическая легенда, которая предлагалась как образец для дальнейшего самостоятельного творчества. Дело было общим, и признаком успеха становилось признание другой стороны.

Подобные соображения могут стимулировать комментарии к CC 2001 и последующим документам. Однако, в течение многих лет изучая и местами используя в преподавательской практике рекомендации профессиональных обществ, я стал видеть в них этапы единой, непрерывающейся работы, каждый из которых формируется на базе предшествующих и, в известной степени, является их следствием. Это живой негладкий процесс, который сопровождает драматическое развитие предметной области или, лучше сказать, является его частью, весьма зависимой от коллизий в своем окружении. Сам по себе, он может быть существенен для заинтересованных читателей не менее, чем представляемые на обозрение результаты текущего этапа.

Как и в предшествующих публикациях [9, 10], в этой статье, в основном, рассматривается академическая составляющая системы образования, непосредственно связанная с формированием структуры и содержания учебных программ. В каждом курсе присутствуют разделы или фрагменты, посвященные темам, которые образуют принципиальную базу этих решений. Из их состава я счел нужным выделить определение дисциплины, ее теоретические основания и роль программирования, которые представляются в главе 1. В главе 2 описывается композиция курсов первых двух курсов, ныне принятых за классику. Глава 3 посвящена третьему курсу, разработки которого во многом повлияли на работу целевой группы последнего курса, – ее результаты рассмотрены в главе 4. И, наконец, в Заключение дается обобщающий обзор этого процесса. Повсеместно в тексте курсив мой.

2. Принципиальные установки

2.1 Определение дисциплины

Разработка первого курса пришла на время, когда предполагаемая предметная область буквально складывалась на глазах, и в образовании еще осваивался факт создания компьютеров. Выбирая из трех вариантов названия дисциплины – computer science, information science и синтетического computer and information science,

авторы Curriculum 68 остановились на первом, сославшись на мнение Ньювелла, Парлиса и Симона, поясняющих, что «компьютерная наука» означает именно «изучение компьютеров и главных феноменов, которые их окружают» [11]. Тем не менее, в kurikulumе столь широкая, можно сказать – страшущая, формулировка уточнялась обозначением трех главных составляющих дисциплины:

1. Информационные структуры и процессы: структуры данных, языки программирования, модели вычислений.
2. Системы обработки информации: устройство компьютеров и организация вычислительного процесса, трансляторы и интерпретаторы, операционные системы, проблемно-ориентированные системы.
3. Методологии: численная математика, хранение и восстановление данных и управление файлами, символические вычисления, текстовые процессоры, компьютерная графика, моделирование, искусственный интеллект и другие.

Триада «информационные структуры – системы их обработки – методологии обработки» определенно ориентирована на полное представление недавно возникшей предметной области будущим профессионалам. Она обладает связностью, присущей единой дисциплине и допускающей дальнейшее уточнение ее содержания.

В следующем десятилетии массовое производство достаточно совершенных и доступных по цене компьютеров форсировало создание и широкое распространение электронных информационных технологий. Соответственно, одной из приоритетных задач образования была подготовка программистов. Возможно, это стало одной из определяющих причин, по которой ACM выпустила Curriculum'78, ассоциируемый критиками с бескомпромиссной идеей «компьютерная наука это программирование (Computer Science = Programming)». В статье Ралстона и Шо [12], энергично протестующей против «нематематической» подачи компьютерной науки очередным kurikulumом, замечалось: «*Принципы и теории* любой науки придают ей стройность и делают ее систематичной. Они и должны очертить kurikulum этой науки, ибо только таким путем можно сделать их основой для мастерского освоения фактов и инструментальной практики ученого».

В этом духе и постаралась сформулировать концепцию третьего kurikulumа Объединенная целевая группа под руководством Питера Деннинга, действующая на фоне массового воспроизведения все более совершенных вычислительных средств и чрезвычайно быстрого расширения их применений. Это, с одной стороны, обязывало обозначить в происходящем серьезные научные основания, как и подобает в высшем образовании, с другой – не упустить из вида наиболее существенные артефакты. Поэтому в своей хартии она выразила решительное намерение «представить описание компьютерной науки, которое выделяло бы фундаментальные проблемы», заметив далее, что «такое определение должно учитывать, что предметная область постоянно изменяется и все, что в нем говорится, есть не более чем мгновенный снимок процесса роста». Таким образом, ввиду определенного противостояния «фундаментальных проблем» и «мгновенного снимка процесса роста», подход был выбран непростой.

Цель достигалась следующим путем. Характеристика дисциплины последовательно

выстраивалась из ее короткого определения, разделения на подобласти и детализации подобластей, чему был предпослан примечательный комментарий: «Мы относимся к этому как к «живому определению», которое может порой подвергаться ревизии, отражающей то, что здесь устоялось и что изменяется. Мы надеемся, что ревизии будут чаще всего подвергаться детали подобластей, время от времени – их список и только изредка – короткое определение.»

Определение компьютерной науки, приведенное в первом kurikulumе, упоминается в докладе, как один из возможных вариантов. Однако, принята была следующая формулировка: «Компьютинг есть систематическое освоение процессов, которые трансформируют информацию: их теории, анализа, проектирования, эффективности, реализации и применения. Для компьютеринга повсеместен фундаментальный вопрос - что может быть (эффективно) автоматизировано?». По существу, это можно рассматривать и как парафраз «главных феноменов, окружающих компьютеры», но, заметим, - здесь в центре оказываются не компьютеры, а «процессы, которые трансформируют информацию», что и шире, и подчеркивает приверженность научной стороне дела.

В качестве контекста, в котором формировалось описание дисциплины, были названы три парадигмы: *теория*, ассоциируемая с математикой и принятыми в математике методами постановки и решения задач, *абстракция* или моделирование возможных реализаций, позволяющее исследовать принципиальные качества объекта, исключив несущественные детали, *конструирование*, подразумевающее всю номенклатуру действий, связанных с выпуском реального продукта. При такой постановке исчезала принципиальная разница между компьютерной наукой и компьютерной инженерией - первая соотносилась с теорией и абстракцией, вторая – с абстракцией и конструированием, а вместе они образовывали «дисциплину компьютеринг».

На базе этих понятий определялся и состав подобластей. Они обособлялись в рамках дисциплины по четырем критериям: единству содержания и существенным проявлениям каждой из трех парадигм. В результате были выделены девять подобластей¹, к которым добавлялись «Социальные, этические и профессиональные аспекты». Соответственно, сформировалась «матрица определения» 9x3 (рис.1), где в одном измерении представлялись подобласти, а во втором – их теории, абстракции и конструирование. На последней стадии описания (в приложении) все подобласти довольно обстоятельно специфицировались по этим трем компонентам.

¹ Алгоритмы и структуры данных (AL), языки программирования (PL), архитектура (AR), численные методы и символические вычисления (NU), операционные системы (OS), инженерия программного обеспечения (SE), базы данных (DB), искусственный интеллект и робототехника (AI), взаимодействие «человек-компьютер» (HU).

	Теория	Абстракция	Конструирование
Алгоритмы и структуры данных			
Языки программирования			
Архитектура			
Численные методы и символические вычисления			
Операционные системы			
Инженерия программного обеспечения			
Базы данных			
Искусственный интеллект и робототехника			
Взаимодействие «человек-компьютер»			

Рис. 1. Computing Curricula 1991: матрица определения компьютерной науки

Отметим, что к сформированной конструкции буквально несколькими словами были добавлены соображения о «родственных группах (affinity groups)», проявляющих себя во всех подобластях и их компонентах, такие, например, как параллелизм или оценка производительности.

Несмотря на имидж «моментального снимка», данная работа выглядит на фоне остальных документов как искренняя попытка сформировать концепцию, определить принципиальные свойства, которые отличают компьютеринг в ряду других академических дисциплин. Тем не менее, целевая группа, в существенно измененном составе (без Деннинга и большей части его коллег – соавторов доклада «Computing as a discipline») подготовившая окончательный вариант третьего куррикулума [5], далеко не полностью использовала эти результаты.

На фоне тем, представленных в предшествующих куррикулумах ACM, добавленная тематика компьютерной инженерии проявила себя лишь в качестве небольшого расширения подобласти «Архитектура» и продвинутого курса по СБИС. Вне поля зрения остались некоторые, уже актуальные на ту пору направления, например, информационные системы. В результате, данный документ представляет предметную область в освоенных ACM рамках computer science. Возможно поэтому всеохватывающее «короткое определение» дисциплины в нем и не цитируется.

В окончательную версию куррикулума вошло только короткое, выдержанное в общих тонах введение «рабочих методологий» теории, абстракции и конструирования. Однако, дальше общих рекомендаций об их использовании в учебном процессе дело не пошло. В результате, матрица определения, представленная в предшествующем докладе, трансформировалась в линейный список подобластей. Но надо принять во внимание, что в числе критериев обособления подобласти были как раз составляющие теории, абстракции и конструирования, теперь выведенные из прямого рассмотрения. В отсутствие всяких «стяжек» оседала единая конструкция дисциплины. По этой причине, несмотря на ритуальные упоминания о трех парадигмах, математике и науке, подобласти были армированы «родственными группами», бегло упомянутыми в докладе. Теперь они были названы «рекуррентными концепциями», влияющими на принятие проектных решений в компьютерном деле,

такими как ассоциативное сопоставление (например, процесса и процессора, библиотечного объекта с символьной ссылкой на подпрограмму и тому подобное), производительность, эволюция, уровни абстракции, упорядочивание в пространстве, упорядочивание во времени и другими. Их внедрение в учебный материал не создавало особых проблем. В разных сочетаниях они присваивались тематическим модулям подобластей, «единицам знаний (knowledge units, KUs)», и, согласно тексту куррикулума, стали «большими идеями», унифицирующими построение курса или отдельной лекции и связывающими их элементы воедино. Возвращаясь к приведенному выше тезису Ралстона и Шо, можно заключить, что в транскрипции третьего куррикулума именно «рекуррентные концепции» заняли место принципов и теорий, которые придают стройность любой науке и систематизируют ее. Так уж обстоит дело.

В СС 2001 концептуальные разработки, сопутствующие выпуску третьего куррикулума, присутствуют лишь в форме коротких упоминаний, которые я бы назвал «ностальгическими». Получили развитие только номенклатура и состав тематических областей (areas). Теперь их четырнадцать: дискретные структуры (DS), основания программирования (PF), архитектура и организация (AR), операционные системы (OS), сетевой компьютеринг (NC), языки программирования (PL), взаимодействие «человек-компьютер» (HC), компьютеринг в графике и визуализации (GV), интеллектуальные системы (IS), управление информацией (IM), социальные и профессиональные проблемы (SP), инженерия программного обеспечения (SE), вычислительная наука и численные методы (CN). Содержание областей формировалось специальными «группами по знаниям (knowledge focus groups, KFGs)». Кроме того, были образованы «группы по педагогике (pedagogy focus groups, PFGs)», ответственные за обшие составляющие учебного процесса, прямо не связанные со спецификой областей.

Таким образом, в отсутствие определений, которым уделила столько внимания предшествующая целевая группа, приходится заключить, что в этот раз дисциплина рассматривается именно как совокупность четырнадцати тематических областей по приведенному выше списку.

2.2. Роль программирования

Надо сказать, что во всех документах серии так или иначе присутствует, а иногда становится доминирующей, тема соотношения титульной дисциплины и программирования. С ней связываются две проблемы. Первая, уже упоминаемая, проистекает из постулата, определяющего компьютерную науку как иное обозначение программирования. Вторая, методическая, касается подхода, устанавливающего заведомый приоритет программирования на начальных стадиях обучения (*programming-first*). Понятно, что вторая проблема может естественным образом возникнуть в контексте первой или стать одним из ее проявлений, так что порой их нелегко обособить.

В СС 2001 популярность подхода *programming-first* связывается с авторитетом первого и второго куррикулумов. Это нелишне прокомментировать.

В тексте Curriculum 68 действительно есть ошеломляющая фраза о том, что умение программировать является главной целью бакалавриата по компьютерной науке. Тем не менее, сразу добавляется, что оно представляет собой «важный побочный продукт» и может быть освоено при прохождении штатных курсов и исполнении автономных проектов во внеучебное время (летние каникулы, работа по совместительству и прочее.) В определении принципиальных составляющих предметной области программирование вовсе не упоминается.

Что касается Curriculum'78, то все верно – программирование является его лейтмотивом, относительно которого выстраивается большинство курсов, в первую очередь – вводных, а в перечне требований к студентам на первом месте значится именно умение написать корректную программу за приемлемое время и лишь затем – знание общих типов проблем, решаемых с использованием компьютеров.

Естественно, что этот подход вызвал довольно резкую критику буквально с начальных строк доклада первой группы Деннинга, представившего широкий подход к дисциплине, о котором говорилось в предыдущем разделе. Отправной тезис доклада утверждал, что «концентрация на программировании за счет других тем дает студентам ограниченное понимание дисциплины, тем самым усугубляя общий предрассудок, что компьютерная наука эквивалентна программированию». Программирование, как отдельная тема, там было отнесено к пререквизитам вводных курсов компьютеринга, формируемым еще в школе. На случай недостаточной подготовленности первокурсников предлагалось доводить навыки программирования до должного уровня перед вводными курсами или параллельно с ними.

Последующий за докладом третий куррикулум явно подошел к теме менее остро, введя ее с *понятия программирования* (что, вообще говоря, и верно). Программирование там трактуется как «целая совокупность видов деятельности, которые сопутствуют описанию, разработке и эффективной реализации алгоритмических решений хорошо специфицированных проблем». Подчеркивается, что суть понятия не должна упрощаться до кодирования на конкретном языке для машины с конкретной архитектурой – оно непременно подразумевает мастерское владение высоко стилизованными приемами, свойственными составлению программы на одном или нескольких языках. В то же время, не следует относить к программированию виды деятельности, связанные с методологией и

инженерией программного обеспечения, например, разработку спецификаций и сопровождение. Куррикулум констатирует многомерную роль программирования в учебном процессе – студенты создают программное обеспечение, проходя различные курсы, исследуют и изучают программы в лабораторных экспериментах, анализируют их в книгах и учебных пособиях, используют при профессиональных контактах. Навыки программирования накапливаются в каждом из этих видов деятельности, они должны усовершенствоваться в течение всего бакалаврского цикла.

Таким образом, тема программирования получила должное освещение, хотя, скажем, и несколько расплывчатое по отношению со сформировавшимися ранее позициями. В

практическом аспекте для первокурсников с недостаточными навыками программирования вне обязательной программы был определен курс «Введение в язык программирования (PR)».

Как бы завершая многолетние дебаты, группа Деннинга и Чанга определяет отношение к приоритету программирования в СС 2001 подчеркнуто беспристрастно – на равных правах приводятся его достоинства и недостатки. Тем не менее, примечательно, что список последних открывает отправной тезис доклада [4], приведенный выше. В числе других недостатков называются перенос теоретических тем на более поздний период, когда они теряют значимый интерес для заматеревших в программировании студентов, чрезмерный акцент на частностях конкретных языков программирования, скрывающих их алгоритмическую модель, преимущественное внимание кодированию в ущерб продуманному конструированию, анализу и тестированию программ, дискриминация студентов, ранее не освоивших навыков программирования и бонус тем из них, кто уже писал коды. И, наконец, приводится рекомендация, заслуживающая буквального цитирования: «Студентам полезно понять, что использование мощных и разнообразных приложений, возникших за последние годы, может стать исключительно важным инструментом решения проблем без применения классического программирования».

Доводы в пользу подхода *programming-first* сводятся к практической потребности приобщить студентов к навыкам программирования, необходимым для освоения последующих тем, исторической традицией формировать компьютерную науку как надстройку над обучением программированию и авторитетом первого и второго куррикулумов.

С моей точки зрения, сопоставление доводов «за» и «против» вполне определенно свидетельствует о предпочтениях авторов СС 2001. Тем не менее, им пришлось заключить, что, «хотя доклад, предшествующий выпуску СС 1991, настойчиво убеждал в пользу широкого введения в дисциплину, большинство институтов фокусируют их вводные циклы на программировании», а потому «модель *programming-first* в обозримом будущем останется доминирующей».

2.3 «Центральные интеллектуальные аспекты»

Вот выдержка из раздела СС 2001, посвященного вводной стадии обучения: «Когда мы берем компьютерную науку как дисциплину, то важно взглянуть дальше популярной концепции, рассматривающей ее в качестве инструмента, и осмыслить ее концептуальные основания. На каких принципах она стоит? Какие новые концепции

привносит она в сферу знаний?». Предполагается, что ответ на поставленные вопросы должна дать «вводная компьютерная наука», которая посвятит студентов в некоторые «центральные интеллектуальные аспекты» всей компьютерной науки. Приведен и их список, с которым можно ознакомиться по оригиналу.

Мне представилось интересным выделить теоретическую составляющую дисциплины, в первую очередь, - темы, представляемые через математику, такие как «алгоритмические концепции», с которых и начинается список. В этой связи надо напомнить, что замысел авторов доклада [4] представлять каждую область компьютеринга непременно в сопровождении мощной теории оказался неподъемным. Очевидно, целевая группа СС 2001 сочла более реальным подход первого куррикулума. В нем дискретная математика была введена в состав компьютерной науки, структура курсов которой представлялась в единой схеме пререквизитов¹ со структурой ассоциированных курсов математических кафедр². Соответственно, сейчас в разделе нового куррикулума, посвященном «математической строгости (mathematical rigor)», напоминает, что компьютерная наука зависит от математики во многих своих фундаментальных определениях, аксиомах, теоремах и методах доказательства, а потому надлежит включать математические концепции с самого начала обучения и потом, на старших курсах, использовать математику вводной стадии. На этом основании, спустя 23 года в куррикулум была возвращена дискретная математика в составе тематической области DS. Есть беглое упоминание и о «добавочной математике», в котором без комментариев приводится список дисциплин, большей частью присутствующих и в предыдущих куррикулумах (вводный курс, статистика, линейная алгебра, численные методы, теория чисел, геометрия, символическая логика).

Таким образом, сейчас парадигма «теории, корни которой в математике» реализуется, главным образом, за счет «интеллектуальных аспектов» двух областей – вновь узаконенной DS и ранее присутствующей AL. Согласно довольно распространенной педагогической практике, во вводной стадии обучения дискретная математика по существу представляется обособленно, в небольшой степени пересекаясь только с тематикой алгоритмов и совсем малой – цифровой логики; определенных рекомендаций по части использования дискретной и, тем более, «добавочной» математики в курсах следующих лет не приводится. Фрагменты модулей области AL в первый год фигурируют во всех рекомендуемых комбинациях вводных курсов, но на второй год неосвоенные темы области AL собираются в одном универсальном курсе и скопом приписываются всем вариантам следующей стадии обучения. Справедливости ради, надо сказать, что

¹ Каждый курс в куррикулумах вводится со ссылкой на курсы, которые следует предварительно пройти. Таким образом образуется схема (дерево) пререквизитов, демонстрирующая ход образовательного процесса в течение всех лет обучения.

² Во втором куррикулуме математика была заметно дискриминирована, что дало основание озаглавить упомянутую выше статью [11]: «Curriculum 78 – действительно ли компьютерная наука столь нематематична?».

отдельные элементы теории алгоритмов (распределенные, геометрические и криптографические алгоритмы) в малых дозах все же присутствуют и после вводной стадии. Определенно научный характер имеют большинство тем области интеллектуальных систем IS, являющейся своего рода доменом теории. Тем не менее, в целом можно заключить, что линия на развертывание тематики компьютерной науки из теоретических оснований так или иначе обозначена только во вводной стадии учебного процесса. Дальше она теряется, возможно потому, что процесс переходит в сферу артефактов, где изложению подлежат более ста крупных тем, заведомое большинство которых приходится на компьютерные технологии, в том числе – вошедшие в обиход совсем недавно. Даже целевым группам профессиональных обществ очень непросто ассоциировать все эти темы с теорией, не говоря уж об ординарных институтах с ограниченными возможностями. Да и сама теория там может еще не проявиться.

3. Вехи академической легенды

3.1 Классические композиции курсов

Авторы первых двух куррикулумов не предваряли результаты своей работы решительными хартиями. Вот, например, как деликатно звучит вступление к Curriculum 78: «Комитет надеется, что этот доклад в дальнейшем станет для преподавателей компьютерной науки поводом подумать об их программах и, как положено, поделиться своими размышлениями с другими. Если так и произойдет, то главная цель работы над этим руководством будет выполненной». Намерение было исполнено – куррикулум, как и его предшественник, стал педагогической классикой - вместе с сопутствующими критическими публикациями. Их популярность нетрудно было бы связать с тем обстоятельством, что в 60-х – 70-х годах основная часть представляющей интерес тематики еще могла быть охвачена единым набором курсов, возможно с небольшими вариациями. Однако, особо существенен тот факт, что обе целевые группы основали свои схемы пререквизитов на реальных идеях, уже опробованных их коллегами и поддерживаемых большинством из них.

Curriculum 68

Учебная программа первого куррикулума включает три уровня: базовый (B), промежуточный (I) и продвинутый (A). Базовые курсы обязательны. Промежуточные курсы подразделяются на обязательные и факультативные. Продвинутое курсы всегда рассматриваются как курсы по выбору. Часть дерева пререквизитов, включающая обязательные курсы, показана на рис.2. Корнем дерева пререквизитов определен базовый курс «B1.Введение в компьютеринг». В него включены блоки тем, которые соответствуют главным составляющим компьютерной науки, определенным в принципиальной части документа: 1. (составляющая информационных структур и процессов) алгоритмы, представление данных, программы и основы программирования, 2. (составляющая систем обработки информации) компьютеры, их организация и характеристики, 3. (составляющая методологий) обзор приложений, компьютерное решение целочисленных и нецелочисленных задач с использованием языка программирования. Далее, первые два блока развиваются курсом «B2.Компьютеры и программирование» (структура компьютера с точки зрения программиста, пишущего на ассемблере, программирование на ассемблере),

а третий – курсом В4, вводящим в численные методы (ветвь методологий завершается факультативами промежуточного уровня, посвященным численному анализу). Существенно, что непосредственно за корневым также следует

базовый курс дискретной математики В3 с темами, имеющими прямое отношение и к составляющей информационных структур (группы, графы), и к составляющей систем обработки информации (булева алгебра).

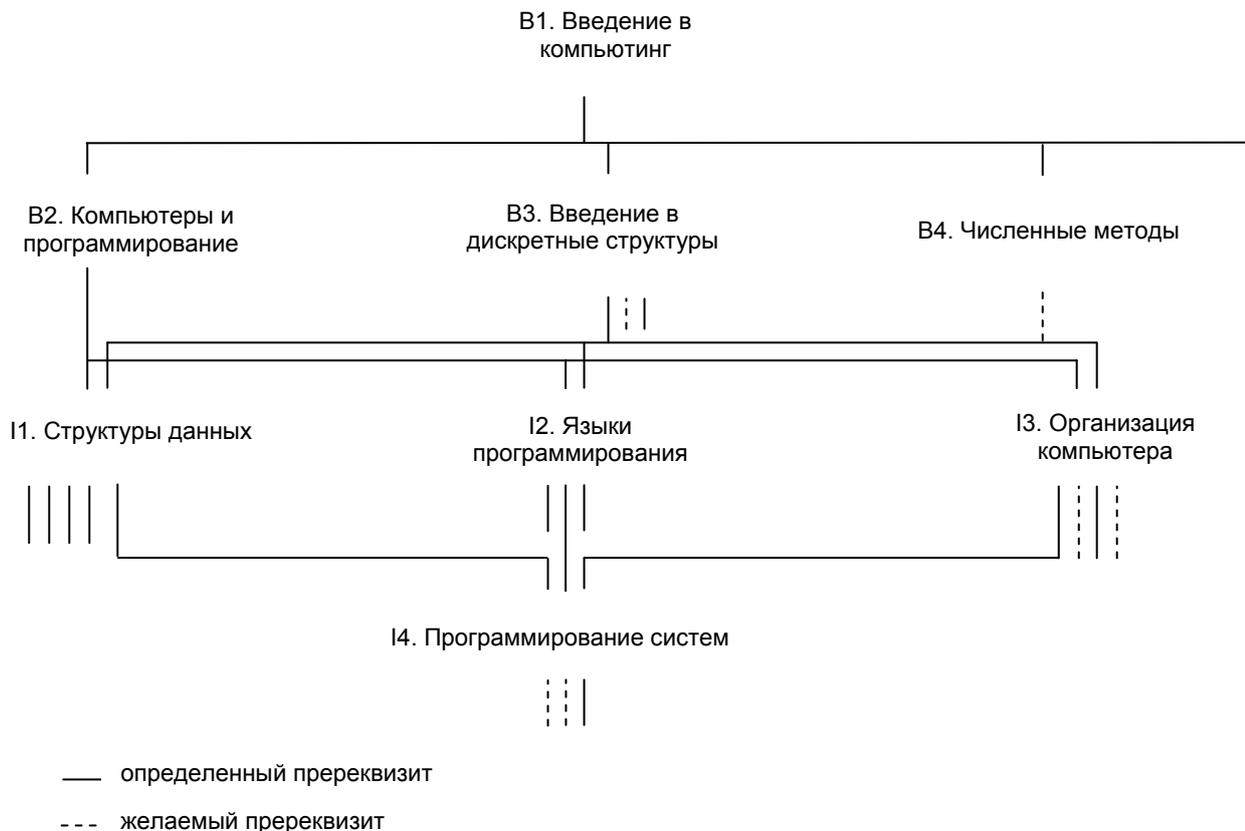


Рис.2. Curriculum 68: базовые курсы

Теоретический курс В3 совместно с курсом В2 являются пререквизитом для курсов промежуточного уровня «I1.Структуры данных» и «I2.Языки программирования», далее развивающих составляющую информационных структур и процессов, и курса «I3.Организация компьютера», посвященного аппаратуре. И, наконец, завершает обязательную иерархию курс «I4.Программирование систем», рассматривающий организацию программного обеспечения в вычислительных системах, поддерживающих много пользователей. По замыслу он совмещает концепции и методы, развитые в предыдущих курсах по структурам данных, языкам и организации компьютеров, рассматривая их роль при конструировании универсальной вычислительной системы.

Такой состав курсов¹ дает основания отметить широту подхода (параллельное представление принципиальных составляющих компьютерной науки), его углубленность (базирование специальных дисциплин на дискретную математику) и должное внимание к программированию (повсеместное присутствие в иерархии тем), что достигается как чередованием тем в одном курсе, так и продуманным сочетанием курсов.

Надо сказать, что уже в первом куррикулуме проявилось обстоятельство, принципиальное для

всей серии: разнообразие и постоянное расширение предметной области, отличие подходов к ее представлению, несовпадение местных условий не позволяют рекомендовать университетам единую учебную программу – даже применительно к первой академической стадии, бакалавриату, необходимо сформулировать несколько вариантов выбора или обеспечить предпосылки для альтернативных решений на местах. Поэтому под рубрикой «Области специализации» в куррикулуме приводится несколько комбинаций курсов, соответствующих определенным составляющим компьютерной науки. В каждом случае обязательная часть дополняется факультативами, несколькими курсами по выбору и математическими пререквизитами. Примечательно, что факультативы в основном нацелены на теоретическую поддержку специализаций.

Curriculum' 78

Во втором куррикулуме все курсы элементарного (базового) и промежуточного уровня являются обязательными (эта часть дерева пререквизитов показана на рис.3). Таким образом, при составлении конкретных учебных программ допускаются только вариации в составе продвинутых курсов, хотя никаких рекомендаций на этот счет не приводится. Эта жесткая схема некоторым образом ассоциируется с бескомпромиссной ориентацией на подход programming-first.

¹ Характеристика продвинутых курсов этой и последующих программ приводится в отдельном разделе статьи.

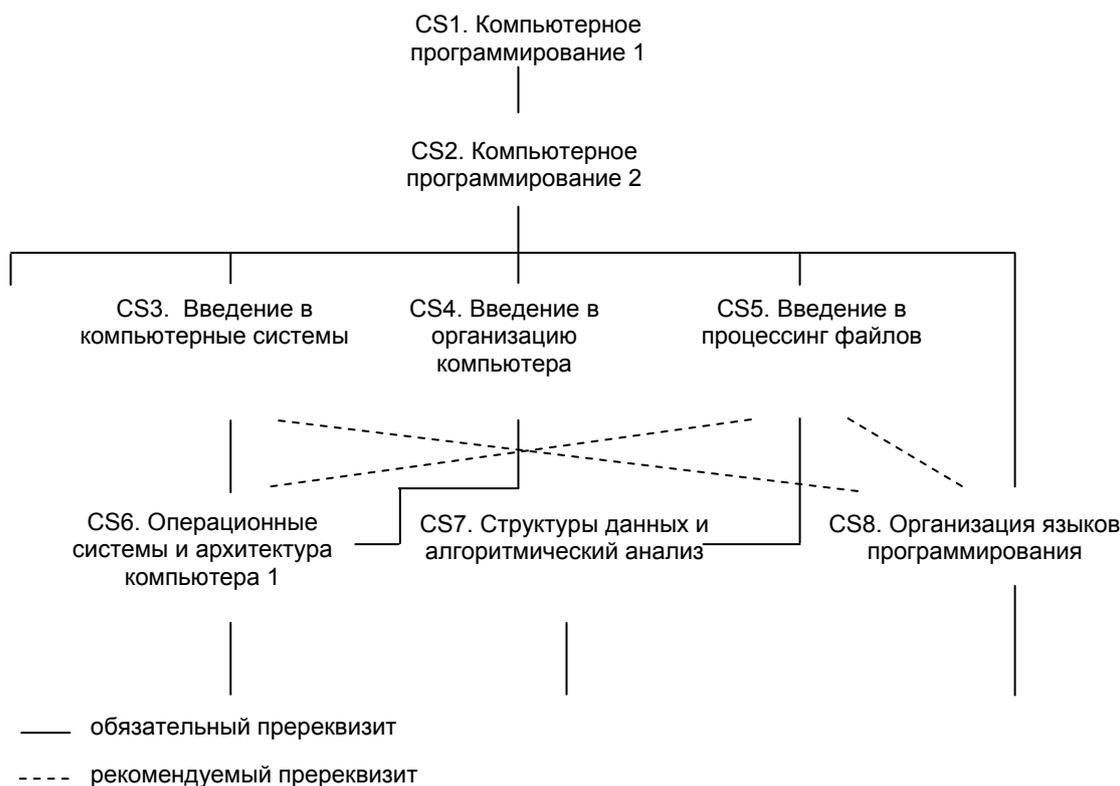


Рис.3. Curriculum 78: обязательные курсы

Соответственно принципиальной установке, дерево пререквизитов начинается двумя последовательными курсами элементарного уровня CS1, CS2, посвященными компьютерному программированию. Они перекрывают первый год обучения: первый курс включает темы, относящиеся, условно говоря, к индивидуальному программированию, второй – к конструированию более обширных программ командой программистов. Обучение ведется на основе определенного, явно не оговоренного, языка высокого уровня, причем запрещается вводить в эти курсы темы, относящиеся к «скрытым (esoteric)» свойствам избранного языка и каким-либо аспектам компьютеров.

Согласно названию, компьютерам посвящены два из трех параллельных курсов элементарного уровня, следующих за вводной парой, – это «CS3. Введение в компьютерные системы» и «CS4. Введение в организацию компьютера». Однако, и здесь приоритет программирования налицо: первый из них целиком посвящен ассемблерному программированию, а второй, более основательный, представляет набор сведений о логических элементах, аппаратном представлении данных, узлах, архитектуре и исполнении вычислительного процесса, в достаточной мере формирующий представление программиста (того времени) о машине, с которой он имеет дело. И проходить этот курс рекомендуется на реальной мини- или микрокомпьютерной системе, то есть такой, на которой можно воочию сопоставить программу с аппаратной базой. Содержание третьего курса этого блока – «CS5. Введение в процессинг файлов» – вполне соответствует названию.

Операционные системы в подаче курса «CS6. Операционные системы и компьютерная архитектура» представляются студентам на промежуточном уровне в завершающем блоке

обязательных курсов бакалавриата. Очень показательным, что только в его составе им также надлежит пройти: 1) ключевой теоретический курс «CS7. Структуры данных и алгоритмический анализ», который в предыдущем курсе был в числе первых, и 2) курс «CS8. Организация языков программирования», позволяющий ознакомиться с обобщающей, принципиальной характеристикой языков программирования после двух-трех лет практического конструирования программ.

При общей оценке учебной программы второго курса можно отметить следующее обстоятельство. Несмотря на свою приверженность серьезно оспариваемой концепции, он, в целом, не дает оснований для упреков в упрощенном представлении предмета. В обязательной части схемы пререквизитов появились совершенно новые курсы или курсы, развернутые из отдельных тем предшествующей программы, такие как системы файлов и операционные системы. Но наиболее примечательным, на мой взгляд, достоинством является построение курсов, переплетающих разноплановые темы в русле общей идеи. В этом смысле особенно показательны курс элементарного уровня по файлам (методы последовательного доступа к данным, типичные для файлов абстрактные структуры данных, их физическое представление), промежуточного уровня по структурам данных и алгоритмам (графы, конструирование и анализ алгоритмов, организация памяти, проектирование систем), продвинутого уровня по алгоритмам (численный анализ, системное программирование, искусственный интеллект). Можно заключить, что, принципиально ориентируя учебную программу на подготовку программистов, Curriculum 78 дает пример того, как в пределах одного курса продемонстрировать широту и

абстрактную подоплеку основных проблем, свойственных их деятельности.

2.2 Опыт модульного конструирования (Computing Curricula 1991)

Выше уже отмечались некоторые отличия между установками третьего куррикулума и предшествующего доклада. Это вполне объяснимо. Семь ученых, подготовивших доклад, формировали свое представление дисциплины на уровне идей, будучи до некоторой степени свободными от ограничений, которые накладывает реализация. Только двое из них вошли в существенно расширенную целевую группу, выпустившую окончательный документ. Ее участники в большой степени зависели от реальных обстоятельств и несли большую ответственность – именно их документ должен был рекомендоваться для внедрения в институтах. Задача осложнялась тем, что широта предметной области и отличие подходов к ее представлению уже не позволяли сформировать учебную программу в виде единой системы курсов или ее ограниченных вариаций, как это делалось в первых двух куррикулумах. Поэтому было принято действительно радикальное в этой практике решение – предложить педагогам набор тематических модулей, обязательных для изучения в течение бакалавриата, предоставив им по своему усмотрению выстроить из этого материала учебные программы.

Несмотря на почтительные упоминания о предшествующем докладе, составители CC 1991 по существу взяли из него только один принципиальный результат – представление дисциплины в виде совокупности подобластей, в составе которых с атрибутами (лекционным временем, пререквизитами, рекуррентными концепциями, составляющими темами) и были введены тематические модули, в общей сложности 55. Разработка областей и модулей по компонентам теории, абстракции и конструирования отсутствовала – да и вряд ли целевая группа могла за установленный срок подготовить ее вариант, согласованный у себя и в основном приемлемый для институтов. В частности, о теории конкретно сказано лишь следующее: “Студент впервые встречается с теорией во вводном курсе математики. Далее теоретический материал возникает при изучении алгоритмов (теория сложности), архитектуры (логика) и языков программирования (формальные грамматики и автоматы)”. Эта тематика перекрывается всего шестью модулями, что несопоставимо с внушительным списком теоретических тем, приведенных в приложении к предшествующему докладу. Остальные единицы знаний я бы отнес к общей категории “представления артефактов” в широком ее толковании – от принципиальных решений в области программного обеспечения до элементарных аппаратных схем.

Чтобы облегчить работу на местах, в приложении к куррикулуму были приведены двенадцать «реализаций» (примеров), соответствующих наиболее типичным классам институтов, целям обучения и принципиальным подходам к представлению дисциплины. В их числе, например, уже по отдельности иллюстрируются подходы, которые в ранних куррикулумах учитывались в рамках единой программы. Рассматривая эту сторону дела, надо иметь в виду, что курсы, в совокупности образующие любую из эталонных программ, составлялись из *одного и того же набора единиц знаний*. Таким образом, отличия достигались

только за счет различного распределения единиц знаний между курсами и годами обучения. Приняв это во внимание, можно взять несколько достаточно показательных примеров, начав с программы, ориентированной на подготовку профессионалов по компьютерной инженерии (Implementation A. Computer Engineering).

Первый год обучения отводится курсу «Введение в компьютеринг 1,2», который дает представление об “алгоритмическом решении проблем” в различных подобластях компьютеринга. Это своего рода обзор, в котором представлены единицы знаний из подобластей AL, HU, NU, PL, SE, SP. Заметим, что в списке, знакомящем будущих инженеров с проблематикой профессии, совершенно отсутствуют темы, связанные с аппаратурой (AR). Они появляются *во второй год обучения* в составе курса «Введение в компьютерную инженерию», в котором представляются цифровые элементы и базовые устройства, а также – методы формального представления цифровых систем. Другая принципиальная тема этого года – алгоритмы и структуры данных (с небольшой добавкой тем искусственного интеллекта) включающая почти все единицы знаний подобласти AL, в том числе упомянутые выше теоретические. Программное обеспечение представлено группой единиц знаний, развивающих тематику подобласти SE. В *третий год обучения* предлагаются курсы, напрямую ассоциированные с основными подобластями компьютеринга: SE (с сопутствующими темами SP), PL (монокурс), OS (с малым и чисто ознакомительным представлением тем DB и HU), AR (организация машины на ассемблерном уровне, организация памяти, интерфейсы и коммуникация, альтернативные архитектуры). Особняком стоит комбинированный курс «Системы программного обеспечения», посвященный “стратегиям и концепциям, прилагаемым в контексте вопросов, связанных с проектированием и реализацией программных систем”. Он включает темы из единиц знаний AL, DB, HU, PL, SE. О *четвертом годе обучения* сообщается лишь то, что он формирует основательный опыт проектирования в области компьютерной инженерии.

В представлении целей и специфики данной программы совершенно отсутствует мотивировка ее принадлежности к сфере компьютерной инженерии. Тем более озадачивает тот факт, что на протяжении трех лет бакалавриата она с мизерными отличиями совпадает с программой по компьютерной науке (Implementation D. Computer Science). Правда, к обоим реализациям (инженерия и наука) приложены списки курсов по выбору, рассчитанные на четвертый год. Но они также совпадают в 14 позициях из 18, причем комментируются лишь несколькими строками.

Приняв это за данность, можно попытаться сопоставить три программы, следующие различным подходам к представлению компьютерной науки: обобщенному (Implementation D. Computer Science), широкому (Implementation E. Computer Science. Breadth-First), углубленному (Implementation F. Computer Science. Theoretical Emphasis). Но и здесь налицо решения, определенно нуждающиеся в пояснениях.

1. Как отмечалось выше, “аппаратные” темы подобласти AR появляются в программе по компьютерной инженерии (Implementation A) только на второй год, в то же время в реализациях компьютерной науки E и F они

довольно основательно представлены уже на первом курсе.

2. В первый год обучения тематика алгоритмов и структур данных, традиционно рассматриваемая как принципиальная основа компьютерной науки, в реализациях А (фактически совпадающей с D) и Е представлена в существенно большем объеме, чем в реализации F, рассчитанной на углубленное изучение теории; это, в частности, относится и к чисто теоретическим темам подобласти AL, которые даются в программе по компьютерной инженерии и программе Breadth-First, на год раньше, чем в реализации F.
3. Ориентированная на теорию реализация F во второй год обучения представляет только две единицы знаний области AR и практически полный набор единиц знаний AL, в результате чего студенты на целый год совершенно отключаются от тем, связанных с программным обеспечением.

Приведены только выборочные примеры. Однако, в целом можно предположить, что подобного рода конструкции, снабженные беглыми и очень общими комментариями, не способствовали энтузиазму тех, кому предстояло приняться за конструирование собственных программ из стандартных модулей с *непременным условием использовать их все*. По всей видимости они уступали продуманным учебным программам предшествующих куррикулумов, действительно достойным практического признания. Вряд ли, например, ориентация Curriculum'78 на программирование, столь решительно опровергаемая в докладе, могла стать поводом для неприятия со стороны, как говорится, «широкой педагогической общественности». В усредненном университетском контексте она более доступна для реализации, чем идеи breadth и depth, в этот раз поставленные на пьедестал. Впрочем, нет сомнений и в том, что на местах, по ходу усовершенствования учебного процесса, эти идеи принимались во внимание и вплетались в его ткань, трансформируясь в наиболее приемлемые для педагогической практики варианты.

3.3 Продвинутое и дополнительные курсы

Курсы этой категории предлагаются студентам на завершающей стадии обучения. Их можно отнести к двум группам, одна из которых предполагает более развернутое или глубокое освещение ранее пройденных тем обязательного списка, другая – дополнительные, специальные темы, имеющие перспективу в предстоящей студентам профессиональной карьере.

Рассматривая состав завершающих курсов всех трех куррикулумов, нетрудно прийти к выводу, что он вполне естественным образом определялся как динамикой фактического развития различных составляющих дисциплины, так и отношением к ним авторов учебных программ – факторами, не всегда находящимися в согласии. Вот показательный пример. В «широком» Curriculum 68, наряду с наличием в базовом цикле тем, относящихся к архитектуре компьютеров, в заключение бакалавриата предлагается курс «A2. Продвинутое организация компьютера», углубляющий тематику и демонстрирующий новые примеры ее развития. В «программистском» Curriculum'78 эти темы также даются в продвинутом комбинированном курсе «CS10. Операционные системы и компьютерная архитектура», однако, они составляют всего 15%

общего объема. И, наконец, в Computing Curricula 1991 архитектурные новации уже присутствуют в обязательной единице знаний «AR7: Альтернативные архитектуры (1. Сопоставления, 2. CISC, RISC, 3. Параллельные архитектуры, 4. Сильно-связанные структуры)». Приблизительно по этой же схеме переходят в последующий куррикулум курсы инженерии программного обеспечения, искусственного интеллекта, баз данных и численных методов. Но по отношению к ним отсутствует некоторая дискриминация, предпринятая в Curriculum'78 по отношению к архитектуре, напротив, - тематика этих подобластей, находящихся в непрерывном развитии, соответственно расширяется и в продвинутых курсах второго, и в обязательных курсах третьего куррикулума. Более того, для подобластей SE, AI, DB и NU в третьем куррикулуме введены также продвинутые курсы и лаборатории. Они уже рассчитаны на последующее освоение программ магистрата.

В принципе, переход утвердившей свою актуальность тематики из продвинутых в обязательные курсы – процесс совершенно органичный. В этом смысле особняком стоит тематика, с которой ассоциируются теоретические составляющие компьютерной науки – 1. теория вычислений и 2. теория языков и методы компиляции. С формальных позиций для нее справедлива та же картина миграции. Однако, существенно следующее обстоятельство: во всех куррикулумах содержание курсов, относящихся к каждой из этих двух линий, достаточно близко. Его можно объяснить, например, традиционным консерватизмом в представлении теории, ее отставанием от развития артефактов и малым влиянием на этот процесс. Но можно предположить и то, что утверждение теории на обязательном или продвинутом уровне и передача теоретических курсов между ними менее зависела от объективных причин, чем от отношения очередной целевой группы к этой тематике. Поэтому в Curriculum'78 ее можно с достаточным основанием отнести к числу дополнительных материалов, а в Computing Curricula 1991, где она представлена обязательными единицами знаний AL и PL, углубленный курс Theory of Computation следует считать продвинутым. Подобного рода пример являет собой и компьютерная графика. Соответствующий продвинутый курс появился уже в первом куррикулуме, во втором эту тематику вообще исключили, в третьем снова ввели в составе продвинутых курсов, а в куррикулуме 2001-года, минув стадию одной из обязательных тем (или группы тем), сразу выделили для нее отдельную подобласть.

Вообще надо отметить, что авторы последнего куррикулума достаточно решительно ввели в обязательную и продвинутое часть своих программ актуальные темы, которые заслуживали большего внимания уже в куррикулуме 1991-го года и даже 1978-го года. Но это материал следующего раздела

4. Последний куррикулум

4.1 Фактор преемственности

Закрепляя традицию начинать документ, подготовленный целевой группой, с ее хартии, составители CS 2001 выразили намерение, рассмотрев предшествующий куррикулум, «создать переработанную и расширенную версию 2001 года, которая соответствовала бы последним достижениям компьютерных технологий в

прошедшем десятилетии и выдержала испытание временем в следующем десятилетии». Сравнив это с хартией первой целевой группы Деннинга, можно заметить, что о выделении фундаментальных проблем здесь уже не упоминается – в сущности, предлагается просто заменить прежний мгновенный снимок процесса роста новым.

Положившись, в основном, на третий куррикулум, новая целевая группа сочла за долг определить те из его установок, которые, согласно хартии, надлежит переработать и расширить. Для этого был организован собственный опрос педагогической общественности, который продемонстрировал поощряющее единодушие – 98% опрошенных поддержали концепцию подготовки видоизмененной версии СС 1991. Тем не менее, было отмечено что «среди *некоторых* преподавателей компьютерной науки сложилось ощущение, что СС 1991, не оказал такого влияния, как его предшественники. Хотя он, несомненно, и более детален, институты *иногда* находят его более трудным для адаптации, чем Curriculum 78». Среди замечаний, списки которых в различных версиях готовящегося документа отличаются, наиболее существенны, на мой взгляд, два: 1) Наряду с единицами знаний, следует привести описание курсов, по примеру доселе популярного Curriculum 78, 2) Необходимо точное определение обязательного минимального объема знаний, оставляющего время для различных сочетаний продвинутых курсов по усмотрению институтов.

Кроме того, в одной из предварительных версий СС 2001 (Ironman Draft) упоминалось пожелание «описать побольше типовых программ, рассчитанных на различную природу образовательных ресурсов, систем и требований в академических департаментах, действующих в мире». Взяв в расчет и первое из приведенных выше замечаний, можно заключить, что опрошенных не удовлетворили в полной мере примеры типовых курсов, данные в приложении к СС 1991.

4.2 Общее построение учебной программы

Согласно традиционной структуре бакалавриата СС 2001 рекомендует распределение учебной программы между тремя следующими друг за другом (с возможными пересечениями) последовательностями курсов – вводными, промежуточными и продвинутыми. Понятно, что в отсутствие связующих формулировок по типу доклада [4] авторам нового куррикулума надлежало каким-то образом объединить совокупность тематических областей в составе единой академической дисциплины и ее учебного процесса. Применительно к вводной последовательности упор был сделан на сложившуюся практику преподавания компьютерной науки. Не предлагая собственной модели для вводных курсов, куррикулум описывает шесть подходов, «достигших, как чувствует целевая группа, уровня успеха, позволяющего им стать моделями для наилучшего практического внедрения». В качестве свидетельства истинного успеха был определен тот факт, что модель воплотили не только его создатели, но и другие последователи. С этой точки зрения предпочтительные варианты могли бы выбираться и по статистическим данным. Однако, ими стали как раз те, которые оспаривались, утверждались или просто упоминались при формировании предыдущего куррикулума. Здесь налицо и преэминентность, и мирное завершение давнего спора.

Приоритет программирования на сей раз представлен тремя парадигмами – императивной (Imperative-first), объектно-ориентированной (Objects-first) и функциональной (Functional-first). Явно акцентируется объектно-ориентированное программирование, которое признается центральным в требованиях куррикулума. Фактически, отношение к нему и определяет выбор между двумя основными вариантами обобщенной концепции programming-first – императивным и объектным: «Одни говорят, что студентам, начавшим с императивной модели, будет более трудно воспринять объектный подход, другие полагают, что студенты, изначально освоившие объектно-ориентированный язык, с унынием отнесутся к обучению работе в отсутствии свойств, придающих мощь объектно-ориентированному программированию.» Чтобы облегчить выбор, рекомендуется в императивной модели также использовать объектно-ориентированный язык для примеров и упражнений. При этом разница в подходах сводится только к тому, что преподавать сначала – «фоновые» императивные аспекты этого языка, такие как выражения, структуры управления, процедуры, функции, или, наоборот, его принципиальные свойства.

Для реализации обеих моделей предложены две схемы вводной последовательности курсов: традиционная двухсеместровая и перспективная – трехсеместровая, позволяющая дать более широкое представление о « фундаментальных концепциях программирования». В последнем случае разница между императивной и объектной моделями также достигается перестановкой тем: первая из них в третьем семестре предполагает курс «Структуры данных и алгоритмы», в то время как вторая – «Алгоритмы и структуры данных»...

Особняком стоит модель, акцентирующая парадигму функционального программирования. Это выбор, который позволяет: 1. начав обучение с простого функционального языка, обычно неведомого большинству студентов, нивелировать разницу их программистского опыта, 2. уменьшить значение синтаксиса в пользу принципиальных понятий, 3. естественным образом ввести на ранней стадии обучения, такие важные идеи, как рекурсия, связанные структуры данных и функции. Здесь предлагается только двухсеместровая схема, где во втором семестре «добираются» и объекты, и алгоритмы.

Приведенные свойства функционального подхода приобретают законченность в подходе *алгоритмическом*, также рассчитанном на два семестра. В этом варианте базовые алгоритмические концепции и конструкции осваиваются на бумаге с помощью псевдокода, не реализованного на компьютере. Таким же образом развивается способность вести или, по крайней мере, начинать отладку проверкой алгоритма, а не вылавливанием ошибок в исполняемой программе. Сэкономленное в отсутствие компьютерной практики время может быть использовано на дополнительные теоретические темы. Таким образом, сначала следует теория, и лишь потом – непременно объектно-ориентированное программирование (второй семестр), то есть теория почти полгода не выглядит для деловых студентов как лишней довесок к полезным знаниям. Более десяти лет бурную реакцию вызвала созвучная этим идеям статья Э. Дейкстры «О жестокости истинного обучения компьютерной науке» [13]. Возможно, не без ее влияния в СС 1991 и был иллюстрирован

подход depth-first (theoretical emphasis). На сей раз ассоциации более очевидны, так же как и заинтересованность целевой группы в этой теме – алгоритмический подход сопровождается наиболее подробным комментарием.

Широкий подход предполагает в начале обучения представить студентам «целый ряд интересных и важных тем из разных областей, а не погружать их немедленно в детали одной специфической области». В большинстве реализаций такой модели с этой целью формируется один общий курс, после которого студенты, осознавшие широту будущей профессии, смогут выбрать по вкусу любую из вводных последовательностей категории programming-first, предлагаемых в данном институте. Другой вариант (ранее не опробованный) рассчитан на удлиненную вводную последовательность широкого подхода. В обоих случаях первая стадия обучения занимает три семестра.

Подход, определяющий *приоритет аппаратуры*, предполагает, что компьютерная наука вводится в течение двух семестров путем поэтапного, с увеличением сложности, представления аппаратных элементов компьютера, после чего только во втором семестре рассматривается программирование на языке высокого уровня (естественно, объектно-ориентированном). Такая альтернатива может подойти студентам, предпочитающим особенности реализации абстракциям.

Отдав должное опыту педагогов при формировании вводной стадии учебной программы, составители куррикула решили выстроить промежуточную стадию «вокруг абстрактных тем, которые пронизывают (*матричный синдром?*) всю дисциплину». В связи с этим приводится следующая цитата из статьи Мери Шо – авторитетного педагога, чье мнение было в поле зрения и предшествующих целевых групп: «Давайте организуем курсы вокруг идей, а не вокруг артефактов. Это поможет сделать объекты изучения ясными и для студентов, и для преподавателей. Инженерные школы не учат термодинамике. А вот два из опорных курсов по программному обеспечению – «конструирование компиляторов» и «операционные системы» – есть не что иное, как динозавры из породы системных артефактов».

Упомянув (надо сказать, совершенно без последствий) «пронизывающие темы» периода СС 1991 – теорию, абстракции, конструирование и, в параллель, рекуррентные концепции – целевая группа сформировала собственные обобщающие подходы к промежуточной стадии обучения. Декларируется, что первый из них – традиционный (a traditional topic-based approach) – прямо рассчитан на представление тематических областей по схеме «для одной области – один курс», второй – сжатый (a compressed approach) – предназначен для институтов с ограниченными ресурсами, которым необходимо уменьшить число промежуточных курсов, третий (a systems-based approach) должен подготовить студентов к разработке компьютерных систем высокого качества, а замыкает этот список подход, опирающийся на веб-технологии (a web-based approach). В такой трактовке, абстрактными темами, «пронизывающими идеями» промежуточной стадии обучения (во всяком случае – частью этих тем и идей) становятся: 1. «динозавры из породы системных артефактов», 2. ограниченность ресурсов в малых колледжах, 3. необходимость подготовки квалифицированных разработчиков систем и 4. проникновение Интернет-технологий в учебный

процесс. Если следовать параллелям, избранным Мери Шо, то вряд все это ли можно отнести все это к термодинамике.

Куррикулум устанавливает, что при некоторых условиях для подхода вводной стадии может быть подобрана пара из подходов промежуточной стадии. Таким образом, в идеале выбор может быть сделан из 24(6x4)-х вариантов представления дисциплины. Это в два раза выше числа примерных вариантов в СС 1991, то есть, приведенное в Ironman Draft и исключенное из окончательного документа пожелание педагогов «описать побольше типовых программ» было выполнено именно таким образом. Одна из групп, ориентированных на педагогику (PFGs), составила список продвинутых курсов, пока не опубликовав их содержание. Курсы разбиты на блоки, имеющие имена тематических областей, первый курс каждого блока, как правило, имеет то же название, что и область (возможно, с добавлением Advanced), а несколько курсов блока поименованы так же, как и модули области. На этом основании не всегда просто заключить, в чем состоит замысел.

4.3 Основа знаний (body of knowledge)

Под этим названием в куррикулуме представлена обширная таблица, в которой приводится содержание каждой тематической области с точностью до модулей (достаточно подробное описание всей структуры приведено в приложении А к куррикулуму). В связи с тем, что «компьютерная наука расширилась до такой степени, что дальше невозможно добавлять новые темы, не исключая другие» было решено ввести в состав области только самое минимальное число обязательных модулей, выбранных на основании всеобщего консенсуса, – этим занялась одна из групп по педагогике. Каждый обязательный модуль характеризовался минимальным количеством лекционных часов, необходимых для его представления. Обязательные модули всех областей в совокупности образовали «ядро компьютеринга (computing core)». Кроме того, в состав области были введены модули по выбору (elective units), варьируя которые институты или отдельные студенты могли бы реализовать свои образовательные приоритеты. Для них в основном тексте документа и приложения А время не задано.

Сравнительное отношение целевых групп к тематике учебной программы, я расположил в Таблице 1 данные о распределении минимального времени, которое выделялось обязательным темам в куррикулах 1991-го и 2001-го годов. Время в ней дается в лекционных часах. Пунктирными линиями обособлены группы областей, которые рассматриваются в дальнейших комментариях. Выше двойной черты перечислены области, которым отведены заведомо большие ресурсы времени.

В общем, содержание программы сформировано вполне в духе хартии СС 2001, утверждающей преемственность по отношению к предшествующему куррикулуму в сочетании с обучением последним достижениям технологий. Соответственно, в программе присутствуют как буквенные фрагменты из СС 1991, так и некоторые нововведения, добавляемые в прежний материал или оформленные отдельно. Эта тенденция отражается и в составе областей: часть из них имеет прежние названия (хотя темы могут частично измениться), другие, ранее присутствующие, получили новые обозначения в связи с расширением тематики (в таблице они обозначены двойными именами и/или буквенными индексами, заданными через дефис),

третьи – введены впервые. Изменения в программе связаны не только с последними достижениями технологий, ее композиция перестраивалась или дополнялась и по соображениям идейным. В первую очередь это относится к модулям теоретического блока, следующего в таблице после упраздненного факультатива PR.

Таблица 1. Сравнительные данные о распределении учебного времени между тематическими областями в куррикулах 1991-го и 2001-го годов

	1991	2001
PR.Введение в язык программирования (факультатив)		12
1. DS.Дискретные структуры		43
PF.Основания программирования		38
AL.Алгоритмы и структуры данных - Алгоритмы и сложность	47	33
2. PL.Языки программирования	46	21
3. SE.Инженерия программного обеспечения	44	31
4. AR.Архитектура – Архитектура и организация	59	36
OS.Операционные системы	31	18
5. AI.Искусственный интеллект –		
IS.Интеллектуальные системы	9	10
DB.Базы данных – IM.Управление информацией	9	10
HU-HC.Взаимодействие человек-компьютер	8	8
6. NU.Численный и символический компьютеринг	7	
CN.Вычислительная наука и численные методы по выбору		
7. NC.Сетевой компьютеринг		15
GV.Графический и визуальный компьютеринг		3
8. SP.Социальные и профессиональные проблемы	11	16
Всего	283	280

4.3.1 Теоретический блок

Дискретная математика была вновь включена в тематику компьютерной науки после длительного перерыва. У области DS (DS1. Функции, отношения и множества, DS2.Базовая логика, DS3.Методы доказательства, DS4.Основы вычислений, DS5.Графы и деревья, DS6.Дискретная вероятность) нет аналога в предыдущем куррикулуме, хотя в разделе «Математика» там приводится практически тот же список тем. Надо отметить, что и в Curriculum 68 дискретная математика представлялась тематикой модулей DS1, DS2 и DS5. Таким образом, через 23 года было решено, что к этому достаточно

добавить введение методов доказательства, основ вычислений и понятия дискретной вероятности.

Область PF можно рассматривать как своего рода замену прежнего факультатива PR, призванного дать непосвященным студентам первое представление о программировании на языке высокого уровня. Однако, при ее формировании совершенно очевидно преследовалось намерение «в каждом случае сводить к минимуму несовершенства подхода programming-first, акцентируя концепции алгоритмов и принятия решений, а не превратности языкового синтаксиса». Соответственно, в нее собраны были также собраны темы из областей AL, PL и SE предшествующего куррикулума.

Некоторые перемены в тематике алгоритмов характеризуются изменением названия «Алгоритмы и структуры данных» на «Алгоритмы и сложность». В последнем куррикулуме из прежней области AL во вновь образованную область PF перешла часть тем, связанных с представлением основ программирования, а в область PL – темы абстрактных типов данных. С другой стороны, некоторые темы теории автоматов, ранее ассоциированные в составе области PL с представлением регулярных выражений и контекстно-свободных грамматик, теперь даются в области AL. В результате, в ней в обязательном порядке последовательно представляются базовый алгоритмический анализ, алгоритмические стратегии, фундаментальные компьютерные алгоритмы, распределенные алгоритмы и вводится понятие вычислимости. В факультативной части "чистая" тематика алгоритмов представляется продвинутым алгоритмическим анализом и особо значимыми видами алгоритмов – криптографическими, геометрическими, параллельными, а ее вычислительные аспекты – классами сложности P, NP и теорией автоматов.

4.3.2 Языки программирования

С введением в программу области PF, представляющей основы программирования на примерах, область PL была сведена к абстракциям, в составе ее модулей вообще не упоминаются конкретные языки. Состояние этой тематики проявилось в приоритетах. В частности, бывшая общая тема программных парадигм в окончательной версии CC 2001 представлена отдельными вариантами, избранными для вводной стадии обучения – объектно-ориентированным и функциональным (императивный вариант «спущен» в PF).

Преимущество по отношению к CC 1991 заметна в составе обязательных модулей, четыре из которых напрямую взяты из предыдущего куррикулума: обзор языков программирования, виртуальные машины, описания и типы, введение в трансляцию. Новые обязательные модули - абстрактные механизмы и объектно-ориентированное (с наибольшим количеством учебных часов) ранее отсутствовали и фигурировали на уровне вводных понятий о парадигмах программирования. Модули по выбору в основном расширяют представление тем в обязательных модулях (системы типов, системы трансляции, функциональное программирование), хотя есть и нововведение – конструирование языков программирования.

4.3.3 Инженерия программного обеспечения

Можно заключить, что содержание этой области стало более практичным и тематически обширным. Фундаментальные концепции решения проблем переместилось в PF, а формальные методы – в курсы по выбору. В обязательных модулях

сохранилась тематика разработки программного обеспечения, требований и спецификации, проверки правильности. Составляющие модуля, связанного с процессом разработки, трансформировались в группу независимых модулей – в основном обязательных. Среди них есть и новинки, такие как обязательные модули управления программными проектами и использования APIs. Другой элемент этой группы – надежность программного обеспечения – был введен в курсы по выбору. В их составе есть тематика, значимая во многих проектах – компонентно-базированный компьютеринг и разработка специализированных систем).

4.3.4 “Системные динозавры”

Образ, выбранный Мери Шо, навел меня на мысль о раскопках среди курсов системного подхода (промежуточной стадии обучения). В ее реплике упоминались операционные системы и трансляторы. Оказалось, что в списке системно-ориентированных курсов они следуют непосредственно после курса компьютерной архитектуры, что обязывало исследовать состояние и этой, «смежной», тематики. Как оказалось – совсем не напрасно. Почти все обязательные модули области AR в основном сохранили прежние наименования и содержание. Исключением являются модуль функциональной организации с обобщенными темами потоковой обработки (pipelining) и параллелизма на уровне команд и уточняющий его модуль по выбору с темами сопряженных архитектурных решений, таких как предсказание перехода, предварительная выборка, спекулятивное исполнение, multithreading. Второй модуль по выбору – архитектура сетей и распределенных систем – вводит в курс дела в самом общем приближении.

Впечатление архаичности складывается и при сопоставлении содержания области операционных систем OS в обеих куррикулах. Ее прежний состав полностью сохранился, однако, приблизительно половина тем перешла в модули по выбору. Список последних замыкают «нововведения» – отказоустойчивость и оценка системной производительности, выдержанные на уровне общих понятий. Впрочем, самым последним следует скриптинг.

Что касается трансляторов, то они уже упоминались выше в составе области языков программирования, в целом не попавшей в поле зрения Мери Шо.

4.3.5 Информационные технологии

В предыдущем куррикуле содержание областей, собранных в этой группе, формировалось довольно единообразно. В каждом случае это были два модуля, один из которых в общем характеризовал тематику, другой – несколько детализировал наиболее значимые технологии, проблемы или методы. Похоже выглядит сейчас обязательная часть областей. Однако, названия модулей по выбору в СС 2001 выглядят достаточно актуально. В частности, в тематике интеллектуальных систем значатся агенты, процессинг естественных языков, нейронные сети, искусственный интеллект в системах планирования, в области управления информацией заметно расширены темы проектирования реляционных баз данных, появились модули обработки транзакций, гипертекста и гипермедиа, мультимедийной информации, цифровых библиотек, тематика взаимодействия “человек-компьютер” расширена модулями разработки связанного с ней программного обеспечения, графических интерфейсов, мультимедийных систем, коллаборативных систем.

4.3.6 Вычислительная наука

В учебных программах всех куррикулов присутствовали численные методы: в первом – в числе обязательных курсов, в двух последующих – в курсах по выбору, и, наконец, в СС 1991 – опять в составе обязательных модулей с минимальным общим временем. Сейчас эта тематика перешла в область вычислительной науки (computational science), выступающей в академической сфере и под другими наименованиями (scientific computing, physical computing, и тому подобное). Это самостоятельная дисциплина, возникшая и уже широко представленная в американском высшем образовании, в связи с актуальностью и перспективой совместного выполнения крупномасштабных научных проектов специалистами различных профилей – учеными-прикладниками, математиками, системными интеграторами, программистами. Академический статус вычислительной науки был и остается поводом для дискуссий, среди которых неизменно присутствует точка зрения, которая отводит ей роль наконец появившейся и единственно достойной научной основы всего компьютерного дела. Возможно, именно по этой причине тематика опять выведена из числа обязательных и представлена только модулями по выбору.

4.3.7 Нововведения

Спустя тридцать лет после опубликования статьи Серфа и Кана, инициировавшей широчайшее распространение протокольного стека TCP/IP, в куррикуле, наконец, обособилась сетевая тематика. В качестве обязательных для освоения модулей определены понятие сетевого компьютеринга, коммуникационные и сетевые технологии, проблемы безопасности и вводное представление web; модули по выбору представлены web-приложениями, управлением сетью, сжатием, мультимедийными технологиями, беспроводным и мобильным компьютерингом. Важность новой тематики подчеркивается тем, что для обязательных модулей отведено относительно большое время, а их число почти совпадает с числом модулей по выбору. Тем не менее, имея довольно длительный опыт чтения лекций по вычислительным сетям, я бы за курс с такими параметрами не взялся – тематика эклектична и связно изложить все, что вынесено только в обязательную часть, за отведенное время было бы очень непросто.

Отдельная область выделена, наконец, и для графики, объединенной с визуализацией. Но это действительно пробный ввод с двумя обязательными модулями общей продолжительностью в три часа. Впрочем, как и в большинстве областей нижней части таблицы к ним добавлена большая группа модулей по выбору (9), в основном перекрывающих данную тематику, но не снабженных определенными временными ресурсами.

4.3.8 Социальные и профессиональные проблемы

По сравнению с прошлым вариантом эта область заметно прибавила и по части отведенного времени, и по количеству модулей, причем большая их часть – обязательные. Это свидетельство серьезного отношения к тематике. К прежнему набору, включающему исторический и социальный контекст, профессиональную ответственность, риск в компьютерных системах и интеллектуальную собственность прибавился ряд актуальных сейчас тем (собственность и гражданские свободы, компьютерные преступления) и даже общие философские основания.

4.3.9 Обобщение

В итоговой оценке сопоставление тематического наполнения двух курсов приводит к следующим заключениям:

1. По сравнению с предыдущим курсом тематика компьютерной науки в СС 2001 пополнилась пятью областями, две из которых (основания программирования и дискретная математика) введены из-за переосмысления теоретического блока, две других (сетевой компьютеринг и графика) - ввиду несомненной значимости соответствующих технологий, а одна (вычислительная наука), определенная без обязательных модулей, - как бы авансом.
2. В основном сохранились прежние приоритеты. Фавориты СС 1991 (теория, языки, инженерия программного обеспечения, архитектура, операционные системы) и сейчас получили основную часть лекционного времени, выделенного для *core computing*, в то время как областям из прежней номенклатуры, перечисленным в таблице под двойной чертой, опять выделена его малая часть.
3. С появлением в числе специальных дисциплин дискретной математики заметно возросла доля теории. Области AL сейчас отводятся меньше часов, но надо учитывать, что алгоритмы преподаются и в составе вновь образованной области PF.
4. Новые тематические компоненты введены за счет откровенной дискриминации четырех "реальных" областей из состава фаворитов - PL, SE, AR, OS. (Менее всего она коснулась области SE, к тому же ее тематика определена как отдельное направление компьютеринга, отданное для проработки параллельной целевой группе.)
5. Очевидной новацией курса является широкая номенклатура модулей по выбору, введенных в области с малым лимитом обязательного времени, большинство которых связаны с информационными технологиями.

В результате всех мероприятий «самое минимальное число обязательных модулей, выбранных на основании общего консенсуса», увеличилось всего на 8 (теперь их стало 63), а выделенное им время (около 280 часов) фактически не изменилось. Если положить, что общий лимит учебного времени остался прежним, то мало изменилось и время, оставленное для тематики, которая не охвачена обязательными модулями, - в СС 2001 она дается в модулях по выбору и «различных сочетаниях продвинутых курсов по усмотрению институтов» (всего около 200 часов по весьма приблизительной оценке). Учитывая расширение компьютерной науки, не раз упоминаемое в курсе как фактор драматический, можно заключить, что целевая группа почти не дрогнула.

4.4 Курсы

При знакомстве с содержанием курсов вполне естественен интерес к тому, в какой степени они соответствуют выбранным концепциям. Здесь весьма существенна форма, согласно которой описывается каждый курс. В принципе, она предусматривает назначение курса (коротко), его пререквизиты, тематический план (*syllabus*), в котором буквально цитируются фрагменты из состава используемых модулей, список этих модулей с указанием временных параметров, и, наконец, заметки, поясняющие идеологию курса. При

просмотре приложения В выяснилось, что соответствие тематического плана модулям в ряде случаев нарушается, а пояснения к большей части курсов нелегко увязываются с предшествующими компонентами описания или вообще отсутствуют. Поэтому, сопоставляя замысел с исполнением, я решил ассоциировать курсы только с одной, хоть и не детальной, но достаточно показательной характеристикой - составом модулей. Вот некоторые наблюдения.

В реализации *вводных курсов* обособляется дискретная математика. Для всех подходов, кроме широкого, предлагается два варианта - интенсивный, при котором тематическая область DS проходится за один семестр, и расширенный до двух семестров, в котором она несколько дополняется темами, иллюстрирующими применение математических методов в теории алгоритмов и цифровой логике. Кроме того, в порядке исключения модули области DS встраиваются в трехсеместровый вариант широкого подхода.

Каждая из остальных двухсеместровых последовательностей состоит из двух курсов - по одному на семестр, которые строятся только из обязательных модулей (иногда безадресным указанием *Elective topics* предлагается добавлять модули по выбору). В их составе с очень малым исключением представлена вся обязательная тематика областей PF, AL, PL и SE. Кроме того, понемногу вводятся обязательные модули области AR и совсем в малом числе - областей GV, OS и SP. Всего в первый год используется в программе около четверти модулей, описанных в основе знаний. Из такого набора и формировались конструкции различных подходов вводного цикла.

Существенно, что в первом семестре около трети, а во втором - половины, использованных модулей являются общими для всех подходов (в этих группах представлены все перечисленные выше области за исключением AR, GV и OS), причем для всех, кроме одного, модулей из каждой группы разница во времени преподавания не превышает два часа. Фактически, это единый тематический каркас - его оформление и позволяет судить о принципе реализации подходов. Особенности, которые относительно уверенно можно связать с концепциями подходов состоят в том, что 1) тематика модуля «PL6. Объектно-ориентированное программирование» при объектном и императивном подходах вводится в первом семестре в объеме 8 и 4 часа (из 10), соответственно, при остальных подходах - во втором; 2) модуль «AL1. Базовый алгоритмический анализ» при функциональном и алгоритмическом подходах вводится в первом семестре, а при остальных - во втором; 3) только в курсах функционального подхода (первый семестр) присутствуют фрагменты модуля «PL7. Функциональное программирование», 4) аппаратный подход обеспечивается частичным введением в первом семестре четырех модулей области AR. Это, пожалуй, и все, ибо остальное, по крайней мере, нуждается в объяснении. Вот только некоторые вопросы.

По каким соображениям:

модуль алгоритмических стратегий указан в четырех подходах (причем, в трех, включая аппаратный, - в первом семестре), но отсутствует в императивном; модуль введения в трансляцию присутствует при императивном подходе, но не задан в курсах двух других подходов, рассчитанных на приоритет программирования (хотя и задан при алгоритмическом подходе);

в реализации функционального подхода, предполагающей восемьдесят часов лекционного времени, только четыре часа непосредственно посвящены тематике функционального программирования, сосредоточенной в модуле PL7, причем три оставшихся часа этого модуля в дальнейшем нигде не фигурируют; модуль рекурсии при аппаратном подходе (и еще трех подходах) представлен в первом семестре, причем – в полном объеме, а при императивном – во втором; модуль эволюции программного обеспечения задан только при алгоритмическом подходе; тематика архитектуры (представление данных и организация машины на ассемблерном уровне) в первый год введена не только при аппаратном, но и при императивном подходе, в то же время она отсутствует при объектном подходе; второй курс аппаратного подхода, представляющий компьютер, основан на идее подъема сверху вниз - «от битов до иерархии языков высокого уровня», однако, нормы ее реализации предполагают непреходящий экскурс в операционные системы, чего в данном случае не сделано; тематика операционных систем (модуль параллельности) присутствует только при функциональном подходе, а тематика взаимодействия человек-компьютер (вводный модуль) – объектном подходе? Трехсеместровый вариант императивного подхода, предполагающий три следующих один за другим курса, отличается от двухсеместрового введением тематики алгоритмических стратегий, операционных систем, взаимодействия «человек-компьютер», сетевого компьютерного и управления информацией (базы данных), более широким представлением инженерии программного обеспечения в купе с социальными и профессиональными проблемами. В третий курс вводного цикла переходят с первого года обучения теоретические темы областей PF, AL и некоторые темы области SE. Ими заполняется последний семестр и в трехсеместровой последовательности курсов объектного подхода. Нововведений здесь заметно меньше, чем при императивном: появился модуль из области архитектуры (машинное представление данных), модуль систем трансляции и, частично, модуль профессиональной и этической ответственности – ни в каких других вариантах вводного цикла он не присутствует, и эксклюзивная ассоциация темы ответственности именно с объектным программированием несколько смущает. Вопросы возникают и при сопоставлении трехсеместровых последовательностей императивного подхода и широкого подхода в его экспериментальной версии, где темы области DS интегрированы в состав каждого из трех последовательных курсов, занимая более четверти общего времени. Надо сказать, что они выглядят там столь же обособленно, как и в отдельном математическом курсе двухсеместровой реализации – выяснить взгляд составителей на их связь с остальными темами из приведенных в куррикулуме описаний невозможно. Остальное содержание курсов широкого подхода (то есть, все модули из тематических областей, отличных от DS) очень близко к содержанию последовательности императивного подхода – в их составе задано 27 совпадающих типов модулей при общем количестве, соответственно, 29 и 34. Таким образом, императивный подход дает более развернутое видение предметной области, представляющее

(помимо совпадающих тем) алгоритмические стратегии, графику, базы данных, эволюцию программного обеспечения, интеллектуальную собственность и еще некоторые фрагменты областей SE и SP, тогда как широкий подход, ограниченный во временных ресурсах, отличается только темами цифровой логики и введением в интеллектуальные системы. Можно было бы поискать специфику в распределении тем по семестрам, однако, оказалось, что императивный подход представляет ряд тематических областей (OS, NC, HC, AR) на семестр или два раньше, чем подход Breadth-first.

Куррикулум почти не включает материал, связывающий учебные процессы в высшем образовании и школе, поэтому вводная стадия самодостаточна, за редким исключением она описывается без каких-либо ссылок на предысторию. В то же время, *промежуточная стадия* строится на основе, заложенной вводными курсами, а, следовательно, каждая предлагаемая для реализации совокупность вводных и промежуточных курсов должна обладать смысловым и методическим единством, к которому обязывает педагогика. Предшествующие рекомендации так или иначе это обеспечивали. В первых двух куррикулах вводная и промежуточные стадии бакалавриата были органично вплетены в общую структуру дерева пререквизитов, которую рекомендовали составители для реализации, а демонстрационные учебные программы третьего куррикула вообще не разделялись на стадии – они складывались столбиками из обязательных единиц знаний, отнесенных к каждому из четырех лет обучения. Но последний куррикулум предложил решительное новшество – в конкретных случаях единая программа – должна формироваться последовательным выстраиванием двух комбинаций курсов, сформированных разными группами по педагогике на основе выбранных ими подходов.

Из-за проблем, которые могут возникнуть при такой постановке дела, в куррикулуме оговорены меры, которые помогут соединить комбинации, взятые из вводного и промежуточного циклов. Однако, даже с учетом оговорок, предложенная в приложении В, совокупность курсов не обеспечивает непереносимое свойство любого варианта учебной программы – полное представление обязательных модулей основы знаний (кстати говоря, определенной особой группой по педагогике). Проконтролировать все варианты, наверное, было непросто, и по моим подсчетам около трети обязательных модулей оказываются не пройденными полностью хотя бы в одной комбинации вводных и промежуточных курсов. Есть свидетельства того, что эта проблема повлияла на композицию курсов и в некоторых случаях обусловила заметную простоту решений, например, «перекрытие» определенной тематики одним курсом, общим для всех или большинства подходов промежуточной стадии, но не одинаково им свойственным. Возможно, тем же отчасти руководствовались и составители «двуцветных» курсов, в которых немалые группы модулей из двух областей объединяются без убеждающей мотивации или при полном ее отсутствии.

На фоне этих обстоятельств реализация подходов промежуточной стадии выглядит следующим образом.

Курсы *традиционного подхода* прямо соответствуют тематическим областям, связанным с артефактами и их окружением (AR, OS, NC, IS, IM, SP), хотя есть и один курс, объединяющий темы областей HC и SE.

По неизвестной причине дискриминирована графика, вводимая только двумя обязательными модулями. В описаниях курсов приводится список модулей соответствующей области, предваряемый цитированием их тематики из приложения А. Большинство курсов, включая комбинированный, описано без завершающих заметок, но при столь прямолинейном подходе в этом нет необходимости. *Сжатый подход* отличается наименьшим числом курсов. Это его сугубо формальное свойство, ибо мотивы, по которым отбиралась тематика, в куррикулуме не приводятся, а определить их по описаниям нет возможности - в составе курсов значится и однородный курс «CS220. Компьютерная архитектура», полностью исчерпывающий обязательную тематику области AR, и курс CS292, в котором упакованы модули пяти областей (он не поддерживается реквизитами и не сопровождается комментариями).

В рамках сжатого подхода особенно естественна реализация «пронизывающих (cutting across) идей», обеспечивающих принципиальное соединение составляющих тем. В этом смысле интересна титульная тема курса «CS226. Операционные системы и компьютерные сети», которая, в принципе, дает повод продемонстрировать общность и специфику методов управления локальными и распределенными ресурсами. Местами эти идеи обозначаются в заметках к курсу, но вряд ли они в полной мере соответствуют содержанию приписанных модулей. Более перспективен курс «CS262. Управление информацией и знаниями» объединяющий обособленные темы (баз данных, интеллектуальных систем, телекоммуникации, графики) общей проблемой представления и обработки информации. Но этого все же мало, чтобы уверенно ассоциировать данный набор курсов с компактным образом компьютерной науки.

Согласно тексту куррикулума, *системный подход* был введен, чтобы подготовить студентов к разработке компьютерных систем высокого качества. Понятно, что столь общая установка требует уточнения, которое, как и в предыдущем случае, отсутствует, а потому определенно судить о замысле можно только по составу и содержанию курсов. Под первыми номерами в этой группе значатся общие для всех подходов курсы по алгоритмам и компьютерной архитектуре. Еще один курс, построенный в традиционном стиле (то-есть очищенный от всяких системных инсинуаций) – это «Трансляция с языков программирования». Есть курс по операционным системам и курс по интеллектуальным системам - те же, что и при традиционном подходе. Первый сопровождается ранее упомянутым курсом CS226, который совпадает с ним по темам, занимающим половину общего учебного времени. Имеет аналог в номенклатуре традиционного подхода и курс по управлению информацией, эта пара включает по семь одинаковых модулей из области IM, в том числе – все обязательные. Некоторые отличия здесь достигаются за счет нескольких модулей по выбору, в первом случае акцентирующих тематику баз данных, во втором – типов информации и манипуляций с информацией; к курсу системного подхода также добавлены несколько обязательных модулей по социальным темам.

Особое место в этом ряду занимают, на мой взгляд, только два курса. Один из них, CS255, сочетает тематику геометрических алгоритмов, взаимодействия «человек-компьютер», компьютерной графики (семь полных модулей), мультимедийной

информации и интерфейсов APs. Требования к студентам, прошедшим курс, действительно соответствуют профессиональному уровню системной разработки. Столь же уместным в контексте подхода представляется и курс «CS291. Разработка программного обеспечения и программирование систем», приобщающий студентов, прошедших программирование во вводной стадии, к проектированию больших программных систем. Заметки в его описании освещают проблему разносторонне и убедительно, но, судя по составу модулей, это не что иное как курс по инженерии программного обеспечения с акцентом на взаимодействие «человек-компьютер», и эта двуцветная композиция все же вызывает определенное беспокойство за достаточность изобразительных средств.

Предлагаемая реализация *веб-подхода* примечательна тем, что ни один из курсов, кроме универсального CS221, не сопровождается заметками, объясняющими его суть; соответственно, характеристика курса по составу модулей здесь становится не выбором, но неизбежностью. Тем более странно, что в состав курсов не включен CS226, который, судя по заметкам, «стимулирует размышления студентов о влиянии web на операционные системы». Среди возможных причин есть и такая. Несложный расчет показывает, что, при введении CS226 (совместно с всепригодным монокурсом по архитектуре CS220) понадобилось бы по меньшей мере еще два курса, чтобы пройти тематику областей OS и NC (и, в общей сложности, четыре курса – тематику областей OS, NC, AR). Вместо этого были составлены два двуцветных курса за малым исключением исчерпывающих области AR и OS: один из них, «CS221. Архитектура и операционные системы», совершенно не касается сетевых тем, а второй, «CS222. Архитектуры в сетях и коммуникации», включает весь их скромный набор в области AR (всего 5-6 часов из 40 в составе курса). К этому добавлен монокурс области NC из состава традиционного подхода. В результате, в выбранном варианте те же области проходятся всего тремя курсами. Подобные выкладки – всего лишь предположение, но, по-моему, они вполне естественны при комбинационном конструировании. Последний набор завершается монокурсом по взаимодействию «человек-компьютер», курсом по графике и мультимедиа из номенклатуры системного подхода и непрокомментированным комбинированным курсом, завершающим набор сжатого подхода. На каком основании все это рассматривается как реализация веб-подхода в компьютерной науке остается загадкой.

5. Заключение. Точка зрения на процесс

На мой взгляд, давняя формулировка, без обиняков отождествившая зарождающуюся дисциплину с «изучением компьютеров и главных феноменов, которые их окружают» была прозорлива¹ и ближе других подошла к сути образовательного процесса, очерченного в последующих куррикулумах, включая и СС 2001.

Несмотря на несомненную значимость всех материалов куррикулума, для практикующих педагогов наибольший интерес представляют

¹ В [4], где впервые было сказано о «мгновенном снимке процесса роста», это короткое определение дисциплины выделяется среди прочих как «хорошая стартовая точка» для новых формулировок.

рекомендуемые учебные курсы: их структура и содержание в основном и определяет степень соответствия образовательного процесса текущему состоянию предметной области и перспективам ее развития. Устоявшимся академическим дисциплинам, связанным с созданием и применением определенных технологий, свойственны хорошо развитые теоретические основания, вспомним тезис Мери Шо: «инженерные школы не учат проектированию бойлеров, они учат термодинамике». Однако, знакомство с серией курсов, выпущенных, начиная с 1968 года, наводит на мысль, что во все времена ключевой проблемой композиции курсов было специфическое свойство компьютерной науки – очевидный разрыв между ее теоретической составляющей и описанием многочисленных артефактов, созданных в результате конструкторской деятельности.

Суть в том, что невероятно быстрое развитие и внедрение компьютерных технологий во многих случаях не потребовало «использования теории, базирующейся на математике и предполагающей определение объектов изучения, формулировку теорем, устанавливающих соотношения между ними, доказательства правильности соотношений и интерпретацию результатов», как это декларируется в докладе, предваряющем СС 1991. В самом деле, трудно, например, оспаривать тот факт, что кристаллы микросхем создаются благодаря достижениям физики твердого тела с ее математическим аппаратом, но их архитектура формируется разработчиками на основании конъюнктурных стимулов, опыта пройденных проектов и конструкторских находок, подтвержденных компьютерным моделированием. Можно привести много примеров подобного рода. Сейчас уже привычно, что дискретная математика, теория алгоритмов, теория автоматов, формальные грамматики и другие штатные теоретические атрибуты компьютерной науки, со скромным достоинством присутствующие среди фундаментальных дисциплин, далеко не всегда принципиальны для генерации компьютерных артефактов, которые стремительно и с большой выгодой для создателей проникают во все сферы жизни.

Откровенно говоря, это пока не создавало драматических проблем нигде, кроме институтов с их обязывающей традицией подводить теоретический базис под конкретные материи. Поэтому, в связи с определенным дефицитом оснований для формирования научно-мотивированных курсов, расчет неизменно делался на принятые или приемлемые в педагогической среде «пронизывающие идеи», которыми следует объединить артефакты в единой системе знаний. С точки зрения композиции курсов они оказались на одном структурном уровне с теорией и, соответственно, возникла возможность использования различных комбинаций в учебной программе: в первом курсе теорию расположили во вводных курсах (и дополнили в продвинутых), а остальные выстраивались относительно триады «информационные структуры – системы их обработки – методологии обработки», во втором – парадигмой стало программирование, а теоретические курсы были отнесены на конец бакалаврского цикла. В общем, это давало методическую основу для творческой работы целевых групп над своими программами. По существу, они очень профессионально обобщили идеи и методы преподавания, сложившиеся в

институтах, и рекомендовали вполне реальные решения. Два первых курса пользовались заслуженным успехом.

При подготовке третьего курса, СС 1991, была сделана попытка предложить высшему образованию более совершенный, идеализированный образ академической дисциплины компьютеринг, в частности, утвердить связующую роль теории в основных компонентах дисциплины – определении, парадигмах, тематике. Однако, это намерение предстояло исполнить в обстановке, когда ускоряющийся технологический прогресс поставил перед образованием более земную задачу – что именно выбрать для рассказа о всем происходящем в предметной области. В итоге, высокие амбиции частью сошли на-нет, частью вылились в необязывающие декларации. В отсутствие основательного принципа построения курсов, целевая группа приняла решение вообще не включать их описания в основной текст курсов, а ограничиться представлением обязательных для изучения тем, упакованных в модули. В этот «мгновенный снимок процесса роста» без труда включалась и традиционная тематика компьютерной науки, преобладающая в местных курсах, и новые домены предметной области, который мы соотносим с информационными технологиями. Из готового материала на местах предлагалось сформировать совокупность курсов, следуя собственным предпочтениям, но для примера в приложении приводились комбинации модулей, реализующих основной набор подходов (пронизывающих идей), практикуемых институтами. Некоторые из них (в том числе, посвященные в теоретические глубины) утверждали педагогические приоритеты, другие (компактные программы для небольших колледжей) – исходили из жизненной необходимости. О качестве этих конструкций здесь уже было сказано.

В работе над последним курсом идеализм был решительно отвергнут. В нем отсутствуют обобщающие определения и парадигмы, а академическое представление широчайшей предметной области приводится к соответствию с установившейся практикой преподавания и возможностями институтов. При этом существенно прибавила тематика учебной программы (мгновенный снимок), в основном, за счет модулей по выбору. Но принципиальным свойством было объявлено то, что в программу, соответственно пожеланиям практиков, вернулись рекомендации курсов. Как и в примерах СС 1991, их разработка велась в обстановке идейной неопределенности, обязывающей к выбору лучших сочетаний теоретического блока с «пронизывающими идеями», число которых за десять лет возросло. Поэтому единственным способом решить задачу, избежав разногласий, было составление рекомендаций, которые учитывали бы все основные варианты, реально используемые институтами. Весьма немаловажно и то обстоятельство, что для большей эффективности формирование тематического наполнения и структуры курсов поручалось разным группам. Группы первой категории были образованы по числу тематических областей, определенных для всей дисциплины основной целевой группой, и укомплектованы специалистами соответствующих направлений. Получив совершенно понятную задачу, они, как водится, принялись за дело, не всегда оглядываясь на смежников, и профессионально с ним справились: «основа знаний (body of knowledge)», в которой приводятся (в составе

модулей) темы, рекомендуемые для включения в учебный процесс, - действительно может быть полезным ориентиром для педагогов. Однако, группам, ответственным за курсы, пришлось имитировать «пронизывающие идеи», складывая курсы из модулей, отлитых без учета этой перспективы. Возможно, при выборе методики работы над СС 2001 имелись в виду другие условия исполнения, например, постоянное творческое взаимодействие всех участников, но, похоже, оно не было достигнуто.

При чтении последнего куррикулума профессиональных обществ меня не оставляло впечатление, что процесс его разработки во многом определялся служебным долгом – неминуемой обязанностью выпустить к установленному сроку документ, который бы всех устраивал. Это можно расценивать как кризис жанра. Возвращаясь к определению компьютерной науки, приведенному в первой главе, можно предположить и то, что данное качество для нее в принципе не может быть задан эталон учебной программы в терминах курсов. Примечательно, что Мери Шо, критиковавшая отдельные документы серии и в прошлом, уже в период, когда велась работа над СС 2001, заявила [14]: «Профессиональным обществам следует воздержаться от диктующих куррикулумов. В течение последних 30 лет стало очевидно, что творческие, новаторские куррикулумы исходят от отдельных колледжей и университетов, а не от обширных комитетов, члены которых имеют разные и противоречивые интересы.» Цитата настораживает, ибо у нас уже появляются научные публикации и организационные инициативы, идеи которых мотивируются и продавливаются авторитетом СС 2001. При этом бывает, что вне видения остаются все обстоятельства, о которых шла речь выше, – возможно, они и не до конца осознаются. Я счел бы свою задачу выполненной, если бы эта статья каким-либо образом способствовала осторожности в оценках и решениях. По поводу выпуска «диктующих куррикулумов» можно заметить следующее. После знакомства с СС 2001 и предысторией его создания приходит мысль, что профессиональным обществам и в самом деле пришло время по новому взглянуть на установившиеся в этой деятельности традиции. Мне представляется, что в ней все же есть функции, и очень важные, которые могут выполнить только центральные организации, с их большими возможностями и авторитетом. Объединяя в своей структуре образование с компьютерной индустрией и пользователями ее продукции, профессиональные общества в состоянии обеспечить действительно объективную, всестороннюю оценку педагогических новаций. Им проще достоверно сопоставить новшества с общим уровнем образования, достигнутым в национальном масштабе в определенный период времени. В рамках этих функций ими может быть собран, систематизирован и рекомендован для использования в педагогической работе весьма полезный материал, в том числе и

того типа, который был представлен в последнем куррикулуме, например, темы, которые за прошедший период стали актуальны и/или получили развитие, освоенные университетами курсы или их фрагменты, которые дают серьезную теоретическую основу новым артефактам, показывают принципиальную связь организационно независимых технологических направлений и тенденции их совместного развития. Словом, все то, что принесет пользу дальнейшему естественному формированию этой дисциплины в университетской среде.

Литература

1. Association for Computing Machinery, Curriculum Committee on Computer Science. An undergraduate program in computer science – preliminary recommendations. Comm. ACM, 8, 9 (Sept. 1965)
2. Curriculum 68. Recommendations for Academic Programs in Computer Science. Comm. of the ACM, 11, 3 (March 1968)
3. Curriculum'78. Recommendations for the Undergraduate Program in Computer Science. Comm. of the ACM, 22, 3 (March 1979)
4. Computing Curricula 1991. Report of the ACM/IEEE-CS Joint Task Force. IEEE Computer Society Press, 1991
5. Report "Computing as a Discipline". Comm. of the ACM, 32, 1 (January 1989)
6. Санкт-Петербургский государственный университет. Рекомендации по преподаванию информатики в университетах. С.-Петербург, 2002
7. Computing Curricula 2001. Computer Science Volume.
<http://www.acm.org/education/cc2001/final>
8. Перекатов В. Компьютинг как предмет высшего образования: эволюция идей. Технология программирования. 1996. Т.1. N1.
9. Перекатов В.И. Компьютерные дисциплины в представлении профессиональных обществ США: веки академической легенды. Информационные технологии и вычислительные системы. 2002. N1.
10. Перекатов В.И. Компьютерные дисциплины в представлении профессиональных обществ США: последний куррикулум?. Информационные технологии и вычислительные системы. 2002. N4.
11. Newell A., Perlis A.J., and Simon A.H. What is Computer Science? (Letter to Editor). Science 157, 3795 (22 Sept. 1967)
12. Ralstone A., Shaw M. Curriculum 78 – Is Computer Science Really that Unmathematical?. Comm. Of the ACM, 23, 2 (February 1980)
13. Dijkstra E.J. On the Cruelty of Really Teaching Computer Science. Comm. of the ACM, 32, 12 (January 1989)
14. Shaw M. Software Engineering Education: A Roadmap. Future of Software Engineering. Limerik Ireland, ICSE-2000

СЕКЦИЯ 2**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ
ВЫЧИСЛЕНИЯ)****SECTION 2****COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL
COMPUTATION)****КОМПЬЮТЕРНАЯ ВОПРОСНО-ОТВЕТНАЯ
СИСТЕМА СМЫСЛОВОГО АНАЛИЗА ТЕКСТА****Богатов Н.М., Родоманов Р.Р.**

Кубанский государственный университет

Создана вопросно-ответная система (ВОС), способная обмениваться информацией между человеком и компьютерной диалоговой системой. В экзаменуемом вопросно-ответном диалоге система активна (задает вопросы), а пользователь пассивен (отвечает). Анализатор ответов в ВОС проверяет правильность ответа обучаемого на соответствие с ожидаемым. В случае неточного или неправильного ответа человека, ВОС задает наводящий вопрос, который указывает на пропущенную истину или неправильно написанное слово

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1142>**COMPUTER QUESTION-ANSWER SYSTEM OF THE
SEMANTIC ANALYSIS OF THE TEXT****Bogatov N.M., Rodomanov R.R.**

Kuban State University

The question-answer system (QAS), capable to communicate between the person and computer dialogue system, is created. In examined question-answer dialogue the system is active (asks questions), and the user is passive (answers). The analyzer of answers in QAS checks correctness of the answer trained on conformity with expected. In case of the inexact or wrong answer of the person, QAS sets a leading question which specifies the missed true or incorrectly written word

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1142**ПОИСК В БАЗАХ ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ
СИСТЕМ ПО ХИМИЧЕСКИ ХАРАКТЕРИСТИЧНЫМ
ФРАГМЕНТАМ****Аникин Н.А., Кузьминский М.Б., Бобриков В.В.,
Мускатин А.Ю., Медкович А.С.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Для обеспечения возможности нахождения в БД всех молекул-конформеров, имеющих произвольно заданную сложную трехмерную группировку атомов с системой межмолекулярных водородных связей, разработана и реализована в виде программы, оригинальная система поиска соответствующих молекулярных объектов. Данная система ориентирована на работу со сложной молекулярной структурой биомолекул (вторичная, третичная и четвертичная структура протеинов, двойная спираль ДНК) и специфических супрамолекулярных структур

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1146>**SEARCH IN DATABASES OF MOLECULAR SYSTEMS
ON CHEMICALLY CHARACTERISTIC FRAGMENTS****Anikin N.A., Kuzminskiy M.B., Bobrikov V.V.,
Muskatin A.Yu., Mendkovich A.S.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

To provide possibility of finding in the database of all molecules (conformers) having an arbitrarily assigned complex three-dimensional arrangement of atoms with the system of intermolecular hydrogen bonds, a unique system for search of the relevant molecular objects has been developed and implemented in the form of a program. This system is oriented towards the work with the complex molecular structure of biomolecules (secondary, tertiary and quaternary structure of proteins, duplex DNA) and specific supramolecular structures

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1146

СЕКЦИЯ 3

МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

SECTION 3

COMPUTER SIMULATION

**АНАЛИЗ ДИНАМИКИ ОТКАЗОВ НА РАЗЛИЧНЫХ
СТАДИЯХ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ
ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ****Михеев О.В., Шевченко М.В., Габусу П.А.**
ЗАО НВК «ВИСТ»

На основе данных о динамике отказов сложных систем исследованы диапазоны их устойчивого функционирования, проведена оценка пределов реализации целостных характеристик сложных систем, соответствующих их стабильной работе. Показано что, комплексная оценка динамики отказов сложной системы может быть проведена путем сопоставления результатов иерархии моделей роста накопленного числа отказов и распределения Пуассона, как определяющего диапазон формирования целостных характеристик системы в функции от числа отказов

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1151>**THE ANALYSIS OF DYNAMICS OF REFUSALS AT
VARIOUS STAGES OF DIFFICULT TECHNICAL
SYSTEMS FUNCTIONING****Mikheyev O.V., Shevchenko M.V., Gabusu P.A.**
ZAO NVK «VIST»

According to the data about dynamics of refusals of difficult systems ranges of their steady functioning are investigated, the estimation of limits of realization of complete characteristics of the difficult systems corresponding to their stable work is made. It is shown that, the complex estimation of dynamics of refusals of difficult system can be made by comparison of results of hierarchy of models of growth of the saved up number of refusals and Poisson distribution, as defining a range of formation of complete characteristics of system at functions from number of refusals

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1151**ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ
ВОДОРОДА. II. ОРТОГОНАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ
МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА****Островский Н.В.**

Вятский государственный университет

За основу данной модели взята структура, предложенная Нильсом Бором и включающая движение электронов вокруг оси, проходящей через ядра. Наряду с этим модель включает модифицированное уравнение электростатического взаимодействия, экспериментальное уравнение для вычисления поправки к полной энергии спаренных электронов, специальную функцию для нахождения квантованного радиуса орбиты электрона. Энергия диссоциации молекулы водорода, вычисленная в рамках данной модели, отличается от экспериментально определённого значения на 4 % отн

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1139>**DYNAMICAL MODEL OF THE HYDROGEN
MOLECULE. II. ORTHOGONAL MODEL OF THE
HYDROGEN MOLECULE****Ostrovskiy N.V.**

Vyatka State University

As a basis of this model the structure of molecule offered by N. Bohr is taken: two electrons on one orbit rotate around the imagined axis connecting two protons. The model include the modified equation of electrostatic interaction, the experimental equation for calculation of the amendment to full energy of coupled electrons, special function for a finding the value of radius of an electron orbit too. Calculation of disassociation energy of the hydrogen molecule gives value, that differs from experimentally certain value on 4 % relative

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1139**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КЛАСТЕРА ДЛЯ
КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
МАКРОМОЛЕКУЛ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО****Столяров Д.С., Рабинович А.Л.**

Петрозаводский государственный университет

Описан вычислительный кластер, организованный на базе существующей сети рабочих станций. Кластер использован для проведения компьютерных экспериментов с макромолекулами цепного строения методом Монте-Карло

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1129>**A CLUSTER FOR COMPUTER SIMULATIONS OF
MACROMOLECULES (MONTE CARLO METHOD)****Stolyarov D.S., Rabinovich A.L.**

Petrozavodsk State University

A cluster for parallel calculations organized from the cluster of workstations is described. The cluster was used for computer experiments with chain macromolecules by the Monte Carlo method

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1129

**К ВОПРОСУ ОБ ОГРАНИЧЕННОСТИ
ПОГРЕШНОСТЕЙ ИЗМЕРЕНИЯ ИЛИ
МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Дементьев В.А.

Институт геохимии и аналитической химии
им.В.И.Вернадского РАН

Предлагается считать, что физические измерения следуют закону: В условиях, когда физическая величина стабильна, когда устранены систематические ошибки, случайные погрешности измерений всегда ограничены. Предпринята попытка показать, что это может быть объяснено на основе фундаментальных физических законов. Сделан ряд выводов общего характера, имеющих важное практическое значение для оценки точности прогноза поведения сложных физических моделей

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1123>

**ON THE PRINCIPLE OF BOUNDING OF ERRORS OF
MEASUREMENTS AND MODELING**

Dementiev V.A.

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

A law has been suggested that physical measurements yield results with restricted errors only. As a consequence we have a certainty about restricted errors of physical and computational modeling of any complexity

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1123

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СИТУАЦИЙ
ПЕРЕВОЗОК НА ОСНОВЕ НОВОГО РАСШИРЕНИЯ
СЕТЕЙ ПЕТРИ – КВАЗИДВУНАПРАВЛЕННОСТИ
ДУГ И ПЕРЕХОДОВ**

Панченко С.В.

Украинская государственная академия транспорта

В докладе изложена грамматика ситуационных дискретно-динамических квазидвухнаправленных сетей Петри, включающая новые дополнения синтаксиса и семантики языка моделирования технологических процессов на городском, ведомственном, железнодорожном транспорте и метрополитене. К таким процессам можно отнести диспетчерское управление параметрами движения подвижных единиц (ПЕ) рельсового транспорта на полигонах железных дорог и маршрутной транспортной сети городов, организационного управления процессом перевозок и др

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1150>

**DESIGN OF DYNAMIC SITUATIONS OF
TRANSPORTATIONS ON THE BASIS OF A NEW
EXPANSION OF PETRI NETWORKS –
QUASIBIDIRECTION ARCS AND TRANSITIONS**

Panchenko S.V.

Ukrainian State Academy of Transport

Grammar of the situation discretely-dynamic quasibidirection Petri networks Petri is expounded in the lecture, including new additions of syntax and semantics of simulation language of technological processes on a public, department, railway transport and underground passage. To such processes it is possible to deliver controller's management by the parameters of motion of mobile units (MU) of rail transport on the grounds of railways and rout transporting network of cities, organizational process control of transportations and other

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1150

**НЕНАСЫЩЕННЫЕ ЦЕПИ ЛИПИДОВ БИОМЕМБРАН
– СТРУКТУРА, СВОЙСТВА, ФУНКЦИИ:
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Рабинович А.Л.

Институт биологии Карельского научного центра РАН

Рассмотрены проблемы установления связей между микроструктурой, свойствами и функциями углеводородных цепей липидов разной степени ненасыщенности. Для изучения свойств совокупности углеводородных цепей использовано компьютерное моделирование методами Монте-Карло и молекулярной динамики

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1128>

**UNSATURATED CHAINS OF BIOMEMBRANE LIPIDS –
STRUCTURE, PROPERTIES, FUNCTIONS:
COMPUTER SIMULATIONS**

Rabinovich A.L.

Karelian Research Centre of Russian Academy of
Sciences

The problems of interfacing between the microstructure, properties and functions of various unsaturated lipid hydrocarbon chains are considered. To study the properties of some hydrocarbon chains Monte Carlo and molecular dynamics computer simulations were used

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1128

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТЕЙ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ В БЕЗЭТАЛОННОМ МОЛЕКУЛЯРНОМ АНАЛИЗЕ С ПОМОЩЬЮ ИМИТАЦИОННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕДУР**Дементьев В.А.**

Институт геохимии и аналитической химии им.В.И.Вернадского РАН

Предложена общая вычислительная процедура оценивания точности прогноза при использовании многомерной модели сложного явления. Работоспособность процедуры проверена на примере молекулярного безэталонного анализа

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1124>**ASSESSMENT OF PROGNOSIS ERRORS IN THE NON-ETALON MOLECULAR ANALYSIS BY MEANS OF IMITATION COMPUTES PROCEDURES****Dementiev V.A.**

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry of Russian Academy of Sciences

A common procedure of computer evaluation of prognosis errors is proposed. The procedure was applied to the case of molecular non-etalon analysis

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1124**ПОИСК НОВЫХ СВОЙСТВ ИЗВЕСТНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ С ПРИВЛЕЧЕНИЕМ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ ХИМИИ, МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И МНОГОМЕРНОЙ СТАТИСТИКИ****Погребняк А.В., Погребняк Л.В., Вотинцев Н.П.**
Пятигорская государственная фармацевтическая академия

Методом многомерной статистики с использованием электронных и геометрических дескрипторов молекулярной структуры осуществлен прогноз новых видов биологической активности для шести известных лекарственных препаратов: дибунола, пропосола, клопидогреля, триметоприма, кислоты ацетилсалициловой и метилурацила. Результаты прогноза подтверждены фармакологическими экспериментами и могут служить основанием для изменения показаний к применению указанных препаратов

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1117>**THE SEARCH FOR NEW PROPERTIES OF WELL-KNOWN MEDICINAL PRODUCTS USING THE QUANTUM CHEMISTRY METHODS, MOLECULAR MODELING AND MULTIVARIATE STATISTICS****Pogrebnyak A.V., Pogrebnyak L.V., Votintsev N.P.**
Pyatigorsk State Pharmaceutical Academy

Using the multivariate statistical method with application of electronic and geometric descriptors of the molecular structure, a prediction of new types of bioactivity for the six well-known medicinal preparations - dibunol, propofol, clopidogrel, trimethoprim, acetosalicylic acid and methyluracil has been performed. The results of this prediction were confirmed by pharmacological experiments and can provide a basis for the change of indications for the specified preparations

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1117**ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ВЫНУЖДЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ТРУБОПРОВОДА С ВНУТРЕННИМ ДАВЛЕНИЕМ****Хакимов А.Г., Шакирьянов М.М.**

Институт механики уфимского научного центра РАН

Рассматриваются нелинейные вынужденные колебания трубы и заключенной в ней жидкости относительно горизонтальной оси, проходящей через опоры. В статическом состоянии труба изогнута под действием собственного веса и находится под действием внутреннего давления. Коэффициент упругости опор и деформации трубы, связанные с ее выходом из плоскости изгиба, считаются малыми, поэтому изогнутая ось трубопровода является плоской кривой. Амплитуды углов поворота трубы при наличии сопротивления с течением времени уменьшаются. При заданной частоте изменения внутреннего давления наблюдается увеличение амплитуды изгибных колебаний трубы с учетом и без учета сил сопротивления

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1131>**SPATIAL FORCED VIBRATIONS OF THE PIPELINE WITH THE INTERNAL PRESSURE****Khakimov A.G., Shakiryaynov M.M.**

Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian Academy of Sciences

The non-linear forced vibrations of the tube and the liquid contained in it in relation to the horizontal axis passing through the supports are being considered. In the static condition, the pipe is bent under its own weight and is under the influence of the internal pressure. The elastic coefficient of the supports and pipe deformation associated with its going away from the plane of bending are considered to be insignificant, so, the bent axis of the pipeline forms a plane curve. The amplitudes of angles of the pipe bend decrease in course of time if resistance is available. In case of the preset frequency of change of the internal pressure, the increase of the amplitude of pipe bending vibrations with and without regard to resistance forces is observed

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1131

**РАЗРАБОТКА СТРУКТУРНОЙ КЛАССИФИКАЦИИ
БЕЛКОВ, СОДЕРЖАЩИХ ABCD-ЕДИНИЦЫ**

Гордеев А.Б., Ефимов А.В.
Институт белка РАН

Создан удобный для использования WEB-сайт с иерархически организованной базой данных белков. В основу классификации белков положены структурные деревья. Нами обработано только два структурных дерева: дерево, содержащее β -белки с abcd-единицами и $(\alpha+\beta)$ -белки с abCd-единицами. База данных, организованная в виде XML-файлов, размещена на сайте <http://strees.protres.ru> и включает в себя 1212 белков и доменов, составляющих более 3000 PDB-файлов

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1118>

**ELABORATION OF STRUCTURAL CLASSIFICATION
OF PROTEINS CONTAINING ABCD-UNITS**

Gordeev A.B., Efimov A.V.

Institute of Protein Research of Russian Academy of Sciences

A user-friendly WEB-site with a hierarchically organized protein database has been made. Structure trees form a basis for protein classification. We have handled only two structure trees - the tree containing β -proteins with abcd-units and $(\alpha+\beta)$ -proteins with abCd-units. The database arranged in the form of XML-files is available at <http://strees.protres.ru> and contains 1,212 proteins and domains comprising more than 3,000 PDB files

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1118

**РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ КРУГОВОРОТА
РАДИОЦЕЗИЯ В ЭКОСИСТЕМЕ ДУБРАВЫ В
КВАЗИРАВНОВЕСНОМ СОСТОЯНИИ**

Мамихин С.В., Манахов Д.В.

Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова

Для изучения механизма поведения ^{137}Cs в экосистеме лиственного леса была разработана модель его посуточной динамики в компонентах древостоя и почве дубравы. Модель точечная, состоит из 10 блоков, воспроизводящих метеорологические условия, поступление солнечной радиации, гидрологический и температурный режимы почвы, динамику запасов C (с шагом 1 час), K и ^{137}Cs (с шагом 1 сутки) в растительности и почве. С помощью данной модели рассчитано распределение содержания и величины годовых потоков ^{137}Cs между компонентами древостоя и почвой в квазиравновесном состоянии

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1122>

**CALCULATION OF PARAMETERS OF A TURNOVER
OF RADIOCAESIUM IN AN ECOSYSTEM OF AN OAK
FOREST IN A QUASI-EQUILIBRIUM CONDITION**

Mamihin S.V., Manahov D.V.

M.V.Lomonosov Moscow State University

For study of the mechanism of ^{137}Cs behaviour in deciduous forest ecosystem the model of its daily dynamics in components of a stand and soil in oak forest was designed. The model is dot, consists of 10 blocks reproducing meteorological conditions, entering of solar radiation, hydrological and temperature regims of a soil, dynamics of C reserves (with a step 1 hour), K and ^{137}Cs (with a step 1 day) in vegetation and soil. With the help of this model distribution of the content and year flows of ^{137}Cs in components of a stand and soil are calculated for quasi-equilibrium condition

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1122

**РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА РАСЧЁТА ПРОФИЛЕЙ
СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ
НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ МЕТОДОВ КМ/ММ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Калиман И.А., Московский А.А.

Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова

Работа посвящена реализации метода, позволяющего эффективно рассчитывать профили свободной энергии химических реакций, а также его применению для исследования реакции переноса протона в канале грамицидина А. Реализованная схема позволяет проводить моделирование с применением комбинированных методов квантовой/молекулярной механики, используя двухуровневое распараллеливание вычислений, что делает её очень хорошим инструментом при исследовании, например, ферментативных реакций

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1119>

**A NEW IMPLEMENTATION OF FREE ENERGY
PROFILES CALCULATION METHOD USING HYBRID
QM/MM MOLECULAR DYNAMICS SCHEME**

Kaliman I.A., Moskovsky A.A.

M.V.Lomonosov Moscow State University

This work is devoted to implementation of a method which allows calculation of free energy profiles of chemical reactions with high parallel efficiency. The realized method was applied to research of proton transport in the Gramicidin A channel. The implemented scheme allows utilization of hybrid QM/MM methods for potential energy surface calculations, using efficient two-level parallelization, which makes the method a valuable tool for studying of enzymatic reactions

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1119

СЕКЦИЯ 4

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

SECTION 4

VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ЗАСЕЛЕНИЯ ГЕНОМА ЧЕЛОВЕКА МОБИЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ**Дадашев С.Я., Гришаева Т.М.**

Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

Сделана попытка выявить последовательность заселения генома человека (ПЗГЧ) представителями основных семейств мобильных элементов (МЭ), относящихся к транспозонам и ретротранспозонам. Установлена относительная длительность транспозиционной активности изученных субсемейств МЭ. Показано 90%-ное совпадение результатов, полученных двумя независимыми методами: сравнением уровня дивергенции субсемейств МЭ и анализом инсерций одних субсемейств в копии других

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1125>

THE ORDER OF HUMAN GENOME INVASION BY MOBILE ELEMENTS**Dadashev S.Ya., Grishaeva T.M.**

V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian Academy of Sciences

An attempt to detect the sequencing of population of human genomes by representatives of the major families of mobile elements relating to transposons and retrotransposons has been made. The relative duration of the transposition activity for the studied subfamilies of mobile elements has been determined. The 90 per cent coincidence of the results obtained using the two independent methods (comparison of the divergence level of the mobile elements' subfamilies and the analysis of insertions of some subfamilies into copies of other subfamilies) has been revealed

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1125

ЭВОЛЮЦИЯ ПСЕВДОЩЕЛЕВОГО СОСТОЯНИЯ В СЛАБО ЛЕГИРОВАННЫХ АЛЮМИНИЕМ ВТСП-МОНОКРИСТАЛЛАХ $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\Delta}$ **Вовк Р.В., Гулатис И.Л., Оболенский М.А., Завгородний А.А., Самойлов А.В.**

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В настоящей работе исследовано влияние слабого легирования алюминиием на проводимость в базисной плоскости ВТСП-монокристаллов $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$. Установлено, что избыточная проводимость $\Delta\sigma(T)$ монокристаллов $YBa_2Cu_{3-y}Al_yO_{7-\delta}$ в широком интервале температур $T_f < T < T^*$ подчиняется экспоненциальной температурной зависимости. При этом описание избыточной проводимости посредством соотношения $\Delta\sigma \sim (1-T/T^*) \exp(\Delta^*_{ab}/T)$ может быть интерпретировано в терминах теории среднего поля, где T^* представлена, как среднеполевая температура сверхпроводящего перехода, а температурная зависимость псевдощели удовлетворительно описывается в рамках теории кроссовера БКШ-БЭК. Допирование монокристаллов $YBaCuO$ малыми добавками алюминия до $y \approx 0.05$ приводит к эффекту расширения температурного интервала реализации ПЩ-режима, тем самым, сужая область линейной зависимости $\rho(T)$ в аб-плоскости

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1147>

EVOLUTION OF PSEUDOGAP STATE IN SLIGHTLY DOPED BY ALUMINIUM $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\Delta}$ SINGLE CRYSTALS**Vovk R.V., Gulatis I.L., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Samoylov A.V.**

V.N.Karazin Kharkov National University

In present work the temperature dependence of the ab-plane conductivity of $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ single crystals with the system of the unidirectional twin boundaries was investigated. The excess conductivity $\Delta\sigma(T)$ for the $YBa_2Cu_{3-y}Al_yO_{7-\delta}$ single crystals shows exponential dependence in the wide temperature range $T_f < T < T^*$. In addition ratio $\Delta\sigma \sim (1-T/T^*) \exp(\Delta^*_{ab}/T)$ can be interpreted in the mean field theory, where T^* represents as mean field temperature of superconducting transition and temperature dependence of the pseudogap can be described satisfactorily in term of crossover BSC-BEK theory. Al-doped $YBaCuO$ single crystals show the wider temperature range of PA realization but linear part of $\rho(T)$ in ab-plane becomes narrower

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1147

СЕКЦИЯ 5

ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ

SECTION 5

DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS

ГРАФЕНЫ ГЕТЕРОГЕННОГО СОСТАВА

Свечников А.Б.

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Определение равновесных геометрических параметров графенов гетерогенного состава выполнено с использованием полумпирических квантово-химических методов расчета. Показано, что для наночастиц графена с высокой симметрией характерны куполообразные формы. Все изученные структуры обладают высокой стабильностью с энергиями связи порядка 6-7 эВ/атом

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1145>

HETEROGENEOUS GRAPHENES

Svechnikov A.B.

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

A semi-empirical quantum-chemical study of the equilibrium geometrical parameters of the most stable graphenes with the heterogeneous structure has been made. It was shown, that graphene nanoparticles with high symmetry had dome-shaped forms. Every studied structure was highly stable with binding energy about 6-7 eV/atom

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1145

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ 2,4,5-ТРИАЛКИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНОВ

Кузнецов В.В., Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В.

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Целью настоящей работы является теоретическое исследование маршрутов конформационной изомеризации молекул индивидуальных стереоизомеров 2,4,5-триметил- и 2,4-диметил-5-изопропил-1,3,2-диоксаборинанов 1 и 2 с помощью неэмпирических (RHF//STO-3G и 3-21G) методов в рамках пакета HyperChem

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1144>

THE CONFORMATIONAL ANALYSIS OF 2,4,5-TRIALKYL-1,3,2-DIOXABORINANS

Kuznetsov V.V., Valiahmetova O.U., Bochkor S.A., Kuznecov V.V.

Ufa State Technical Oil University

The purpose of the present work is the theoretical research of the routes of conformational isomerization of molecules of individual stereoisomers of 2,4,5-trimethyl- and 2,4-dimethyl-5-isopropyl-1,3,2-dioxaborinans 1 and 2 using the ab initio methods (RHF//STO-3G and 3-21G) within the frame of the HyperChem packet

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1144

ПОПЕРЕЧНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\Delta}$ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КИСЛОРОДА

Вовк Р.В., Гулатис И.Л., Оболенский М.А., Завгородний А.А., Панченко С.В.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В работе исследованы температурные зависимости поперечной проводимости монокристаллов $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ с различным содержанием кислорода. Установлено, что в случае соединения $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, в отличие от $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, при увеличении дефицита кислорода происходит усиление процессов локализации носителей, которое сопровождается переходом от ПЩ-режима к режиму прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка

<http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper.php?p=1148>

TRANSVERSE CONDUCTIVITY IN $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\Delta}$ SINGLE CRYSTALS WITH A DIFFERENT OXYGEN CONTENT

Vovk R.V., Gulatis I.L., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A., Panchenko S.V.

V.N.Karazin Kharkov National University

The temperature dependences of transversal electro-resistance of $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals with different oxygen content have been investigated. It is shown that in the case of the connection $\text{Ho}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, unlike $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, at the increase of deficit of oxygen there is strengthening of processes of localization of carriers, which is accompanied by transition from the PG regime to the variable-range-hopping regime

http://www.ivtn.ru/2008/confs/enter/paper_e.php?p=1148

**РАСЧЕТ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
АЛКИЛПРОИЗВОДНЫХ АДАМАНТАНА**

Зауэр Е.А.

Волгоградский государственный технический
университет

С помощью полуэмпирических квантово-химических методов PM3, MINDO, AM1 и MNDO, входящих в пакет программ MOPAC, рассчитаны энтальпии образования алкилпроизводных адамантана. Сравнение вычисленных значений с экспериментальными данными для тестовых соединений показало, что наибольшая корреляция наблюдается при использовании метода PM3, с помощью которого были рассчитаны энтальпии образования одиннадцати алкилпроизводных адамантана

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1120>

**CALCULATION OF THERMOCHEMICAL
CHARACTERISTICS OF ALKYL DERIVATIVES
ADAMANTANE**

Sauer E.A.

Volgograd State Technical University

By means of semi-empirical quantum chemical methods PM3, MINDO, AM1 and MNDO, entering into software package MOPAC, are calculated heats of formation of alkyl derivatives adamantane. Comparison of the calculated values with experimental data for test connections has shown, that the greatest correlation is observed at use of method PM3 by means of which have been calculated enthalpy of formations of eleven of alkyl derivatives adamantane

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1120

**СРАВНИТЕЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ УРОВНЯ
АПОПТОЗА В НЕЙРОСЕКРЕТОРНЫХ ЦЕНТРАХ
HER2/NEU МЫШЕЙ В ОНТОГЕНЕЗЕ С ПОМОЩЬЮ
ДВУХ НЕЗАВИСИМЫХ МЕТОДОВ**

**Бажанова Е.Д., Степанова И.А., Макарова К.А.,
Белостоцкая Г.Б., Попович И.Г.**

Институт эволюционной физиологии и биохимии
им.И.М.Сеченова РАН

На срезах гипоталамической области мозга трансгенных мышей со сверхэкспрессией her2 определяли количество апоптозных клеток с помощью (TUNEL) и окраски бромидом этидия (люминесцентная микроскопия). Уровень апоптоза повышался у старых мышей дикого типа, в отличие от мышей her2+/+. Т.о, сверхэкспрессия her2 активирует механизмы, предупреждающие апоптоз нейронов при старении. При этом не выявлено принципиальных отличий между использованными методиками определения апоптоза. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 08-04-00032а)

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1121>

**THE COMPARATIVE DETECTION OF APOPTOSIS IN
NEUROSECRETORY CENTERS OF HER2/NEU MICE
IN ONTOGENESIS BY TWO INDEPENDENT METHODS**

**Bazhanova E.D., Stepanova I.A., Makarova K.A.,
Belostotskaya G.B., Popovich I.G.**

I.M.Sechenov Institute for Evolutional Physiology and
Biochemistry of Russian Academy of Sciences

The number of apoptosis cells was determined on hypothalamus sections of transgenic mice with her2 overexpression using TUNEL and coloring with ethidium bromide (luminescence microscopy). The apoptosis level increased in old mice of wild type in contrast to mice with her2+/+overexpression. Therefore, the her2 overexpression activates mechanisms preventing neuronal apoptosis when aging. At that, no vital differences were detected among the used methods of apoptosis determination. The work was carried out under the auspices of the Russian Foundation for Basic Research (Project 08-04-00032a)

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1121

**СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МЕЙОТИЧЕСКИХ
КОГЕЗИНОВ STAG3 В СРАВНЕНИИ С ИХ
МИТОТИЧЕСКИМИ ПАРАЛОГАМИ SCC3/STAG1**

Гришаева Т.М., Дадашев С.Я., Богданов Ю.Ф.

Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

Проведено сравнение in silico специфичных для мейоза белков-компонентов когезина (STAG3) четырех видов млекопитающих с их митотическими паралогами STAG1 тех же видов, а также с компонентами SCC3/STAG1 когезинового комплекса дрожжей, дрозофилы, арабидопсиса и рыбы Danio. Показано, что функциональный домен STAG/ IRR1 у митотических и мейотических форм белков сходен. За его пределами, однако, выявлены различия, обусловленные взаимодействием когезинов в мейозе с белками синаптомембранного комплекса

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1126>

**STRUCTURAL PECULIARITIES OF MEIOTIC
COHESINS STAG3 COMPARED WITH THEIR MITOTIC
PARALOGS SCC3/STAG1**

Grishaeva T.M., Dadashev S.Ya., Bogdanov Yu.F.

V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian
Academy of Sciences

An in silico comparison of proteins specific for meiosis - cohesion components (STAG3) for four mammal species with their mitotic paralogs (STAG1) of the same species as well as with SCC3/STAG1 components of the cohesin complex of yeast, drosophila, Arabidopsis and Danio fish has been performed. It was shown that the functional STAG/ IRR1 domain of mitotic and meiotic proteins is similar. However, beyond its limits, some differences caused by the interaction of cohesins in meiosis with proteins of the synaptonemal complex have been detected

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1126

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОМПЛЕКСОВ «3,6-ДИ-(2,5-ДИМЕТИЛПИРАЗОЛ-1-
ИЛ)-1,2,4,5-ТЕТРАЗИН -РАСТВОРИТЕЛЬ»**

**Ившина Н.Н., Потемкин В.А., Афонькина Е.С.,
Русинов Г.Л., Ишметова Р.И., Чарушин В.Н.**

Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
УрО РАН

Проведено теоретическое исследование колебательных характеристик комплексов «реагент-растворитель». Моделирование комплексов проводилось в рамках метода молекулярной механики с учетом влияния среды, а расчет спектральных характеристик методом РМЗ. Для всех комплексов «реагент-растворитель» имеются экспериментальные данные. В результате сопоставления экспериментальных и расчетных спектров реагента и растворителей со спектрами комплекса определено смещение полос, характеризующих колебания связей, принимающих участие в комплексообразовании

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1141>

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 3-(ПАРА-ХЛОРБЕНЗОЛА)-
1,2,4,5-ТЕТРАЗИНА С ЦИКЛООКТИНОМ В
ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАСТВОРИТЕЛЯ**

**Афонькина Е.С., Потемкин В.А., Гришина М.А.,
Ившина Н.Н.**

Челябинский государственный университет

Проведено теоретическое исследование реакции взаимодействия 3-(пара-хлорбензола)-1,2,4,5-тетразина с циклооктином в различных растворителях. Из данных, полученных экспериментально [1], видно, что относительная константа скорости зависит от растворителя. Найдена зависимость натурального логарифма константы скорости с геометрическими характеристиками молекулы растворителя и полной энергией сольватации молекулы 3-(пара-хлорбензола)-1,2,4,5-тетразина

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1140>

**THEORETICAL STUDY OF THE SPECTRAL
CHARACTERISTICS IN SYSTEM «3,6-BIS-(2,5-
DIMETHILPIRAZOL-1-YL)-1,2,4,5-TETRAZINE -
SOLVENT»**

**Ivshina N.N., Potemkin V.A., Afonkina E.S., Rusinov
G.L., Ishmetova R.I., Charushin V.N.**

Institute of Organic Synthesis Ural Division of RAS

Theoretical study of spectral characteristics of «reagent-solvent» complexes were performed. The complexes modelling were carried out with taking into account the solvents influence. The vibrations of the reagent, solvents and their complexes were calculated within PM3 approach. The experimental data for all considered structures were obtained. Comparison of the experimental and computed spectral characteristics of the reagent and solvents involved in intermolecular interactions was fulfilled. The bonds taking part in the complexes formation were determined

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1141

**A THEORETICAL STUDY OF THE INTERACTION OF
THE 3-(PARA-CHLOROPHENYL)-1,2,4,5-TETRAZINE
WITH CYCLOOCTYNE IN DEPENDENCE ON THE
SOLVENT**

**Afon'kina E.S., Potemkin V.A., Grishina M.A., Ivshina
N.N.**

Chelyabinsk State University

A theoretical study of the interaction of the 3-(para-chlorophenyl)-1,2,4,5-tetrazine with cyclooctyne in different solvents was carried out. It was found experimentally [1] that the rate constants of the reaction depend on the solvents. The relationship between a solvent structure and the rate constant of the reaction was determined. Also the correlation of the rate constant of the reaction with full solvation energy was found

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1140

СЕКЦИЯ 7

ОПТИМАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ, ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

SECTION 7

OPTIMUM PROCEDURES AND DESIGN OF EXPERIMENTS

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВТ-МЕТОДОВ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ РЕСТРУКТУРИЗАЦИИ ПРЕДПРИЯТИЙ

Вовк О.С.

Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

USING OF IT-METHODS FOR OPTIMIZATION OF RESTRUCTURING PROCESSES OF ENTERPRISES

Vovk O.S.

V.N.Karazin Kharkov National University

Рассмотрены особенности процессов реструктуризации предприятий в Украине. Проанализированы основные факторы, которые влияют на процессы реструктуризации в условиях экономики переходного периода. Приведен перечень мероприятий по поддержке государством процессов реструктуризации в реальном секторе экономики. При этом подчеркивается важная роль ВТ-методов, которые не только позволяют проанализировать экономическую ситуацию для каждого конкретного случая с учетом сколь угодно большого числа различных факторов и параметров, но и во много раз уменьшают время, необходимое для этого

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1149>

The features of privatization processes of enterprises in Ukraine are investigated. Basic factors which influence on the processes of restructuring in the conditions of economy of transitional period are analyzed. The lists of actions on support by the state of privatization processes in the real sector of economy are itemized. In this case IT-methods have very important role. IT-methods allow analyzing an economic situation for every concrete case with an account very large number of different factors and parameters and minimize time necessary for it

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1149

О ПОСТРОЕНИИ МАТРИЦ ПЛАНИРУЕМЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ В ПЛП-ПОИСКЕ ПРИ ОТСУТСТВИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ОГРАНИЧЕНИЙ НА ВАРЬИРУЕМЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Статников И.Н., Фирсов Г.И.

Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

ON THE CONSTRUCTION OF THE MATRICES OF THE PLANNED EXPERIMENTS IN THE PLP- SEARCH IN THE ABSENCE OF FUNCTIONAL LIMITATIONS TO THE VARIED PARAMETERS

Statnikov I.N., Firsov G.I.

A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research
Institute of Russian Academy of Sciences

Рассмотрены различные варианты построения матриц планируемых экспериментов (МПЭ). Проведен анализ соотношения времени расчета по заранее рассчитанным числам q (вариант 1), и временем, затраченным на построение такой же МПЭ, когда числа q рассчитывались в ходе реализации самой программы (вариант 2). Показано, что при постоянном значении числа варьируемых параметров J с ростом величины числа строк МПЭ N_0 эффективность варианта 1 растет, а при постоянном значении N_0 эта эффективность с ростом J снижается

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1127>

In the report are examined the diverse variants of the construction of the matrices of the planned experiments (MPE). Is carried out the analysis of the relationship of the time of calculation according to previously calculated numbers q (version 1), and by the time, spent on the construction by the same MPE, when numbers q were calculated in the course of the implementation of program itself (version 2). It is shown that the effectiveness of version 1 grows with the constant value of the number of varied parameters J with an increase in number value of lines MPE N_0 , and this effectiveness with increase of J is reduced with constant value of N_0

http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper_e.php?p=1127

**МАТЕРИАЛЫ, ОПУБЛИКОВАННЫЕ В РАМКАХ
ИВТН-2008**

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА ПОДДЕРЖКИ ФОРМИРОВАНИЯ ФОРМ НАГРУЗКИ КАФЕДРЫ НА УЧЕБНЫЙ ГОД (АС ПФФ) Войтович А.Ю., Королев А.С.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Целью работы является проектирование и разработка автоматизированной системы формирования форм нагрузки кафедры на учебный год. Данная система должна функционировать за счет выполнения набора запросов SQL к нескольким базам данных, спроектированным в программах Sybase Power Designer, Microsoft Access и Microsoft Excel. Базы данных содержат информацию о преподавателях и читаемых ими курсах, информацию об учебных планах кафедры на текущий год и данные о нагрузке кафедры, формируемые в деканатах университета

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1136>

ИНТЕГРАЦИЯ СЕРВЕРА ПРИЛОЖЕНИЙ АРАСНЕ ТОМСАТ С WEB-СЕРВЕРОМ АРАСНЕ HTTP SERVER Резулов А.А., Королев А.С.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Целью работы является обеспечение функционирования клиент-серверной системы поддержки проектирования профилей среды открытых систем (АСПП профилей СОС) в режиме круглосуточного удаленного доступа. Данная система должна работать на базе сервера приложений Apache Tomcat в среде Web-сервера Apache HTTP Server, развернутого на кафедре информационных систем. Таким образом, основной задачей является интеграция Web-сервера Apache HTTP Server и сервера приложений Apache Tomcat, осуществляемая при помощи коннекторов Coyote/JK2

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1135>

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНОГО ЗНАЧЕНИЯ КОМПЛЕКСНОГО ПАРАМЕТРА ММПИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ РАССЕЯНИЯ Куликов С.П., Волошанюк А.В., Воронина Н.Ю., Сафиулина А.А.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Представлены алгоритмы нахождения оптимального параметра ММПИ в случае, когда конфигурация спектральной области - произвольный комплексный отрезок или треугольник. Рассматривается применение алгоритмов поиска параметра в задачах рассеяния, в частности таких, как стационарная скалярная задача рассеяния электромагнитных волн Е-поляризации на прозрачном однородном прямоугольном в сечении бесконечном цилиндре и задача рассеяния и поглощения плоской электромагнитной волны на неоднородном цилиндре с двумя несимметричными костными включениями

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1143>

КЛАССИФИКАЦИЯ НА ОСНОВЕ НЕЧЕТКОГО ЛОГИЧЕСКОГО ВЫВОДА Чуйко А.В., Королев А.С.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

В докладе описывается программа, выполняющая классификацию на основе нечеткого логического вывода. В качестве нечеткого классификатора используется система нечеткого логического вывода типа Сугено. Классам решений соответствуют термы выходной переменной. Наименование класса задается как элемент терм-множества выходной переменной

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1133>

КЛАССИЧЕСКИЙ И КВАНТОВЫЙ ПОДХОДЫ К ПРОБЛЕМЕ СОЗНАНИЯ Королев А.С.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Важной задачей на пути построения квантовой модели сознания является выделение атомов сознания, т.е. нечто простого и далее неделимого. Можно ли говорить о том, что существуют некие элементарные атомы мысли, сознания, дальше которых оно не делится? Ответ д.ф.-м.н. И. Воловича: да, такие атомы сознания существуют, это — натуральные числа. Числа 1,2,3,...и являются атомами сознания (впрочем, истинно неделимыми являются простые числа). Здесь нужно иметь в виду, что понятие натурального числа является обманчиво простым. Нужно различать пять, скажем, конкретных предметов, и абстрактное понятие числа 5. Изучая свойства натуральных чисел, мы изучаем свойства атомов сознания

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1137>

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЧТИ – ПЕРИОДОВ В ЭМПИРИЧЕСКИХ ДАННЫХ С ТРЕНДОМ**Кузьмин В.И., Гадзаов А.Ф.**

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

При решении задачи о разделении движений, когда уравнения для опорной траектории не известны, требуется определить тренд, а затем выявить скрытые периодичности в данных, полученных после его исключения. Обычно тренды выделяют построением линии регрессии, а для выявления скрытых периодичностей используют преобразование Фурье, либо аппроксимацию эмпирического ряда рекуррентными уравнениями (метод Бокса-Дженкинса). При этом исходным эмпирическим данным навязывается некоторая система функций с фиксированной структурой. Для нелинейных систем такие функции часто являются противоречащими их свойствам. Рассмотрен метод исключения тренда для выделения колебаний относительно постоянного уровня. Полученные в результате исключения тренда колебания обрабатываются методом Альтера - Джонсона. Это позволяет получить полный набор почти-периодов, как минимумов функции Альтера - Джонсона, без навязывания данным некоторой фиксированной функциональной зависимости

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1138>**НЕЧЕТКИЕ ЗАПРОСЫ К РЕЛЯЦИОННЫМ БАЗАМ ДАННЫХ****Исаев Д.В., Королев А.С.**

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Целью работы является проектирование и разработка автоматизированной системы нечетких запросов к реляционным базам данных, позволяющей осуществлять манипулирование хранимыми данными, используя лингвистические понятия типа «Большой», «Средний», «Высокий», «Низкий», «Старый», «Молодой» и т.п. Система должна устанавливаться и работать в среде любой реляционной СУБД

<http://www.ivtn.ru/2008/conf/enter/paper.php?p=1132>

СОДЕРЖАНИЕ**CONTENTS****ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В НАУКЕ****COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE**

АВТОБИОГРАФИЧЕСКАЯ СТАТЬЯ ГРИБОВА Л.А. «САМ О СЕБЕ» К ЮБИЛЕЮ УЧЕНОГО	6
СЕКЦИЯ 1 Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке SECTION 1 General problems and prospects of computer applications in science	18
СЕКЦИЯ 2 Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления) SECTION 2 Computing and computing management (networks and parallel computation)	37
СЕКЦИЯ 3 Моделирование, численные эксперименты SECTION 3 Computer simulation	38
СЕКЦИЯ 4 Визуализация в научных исследованиях SECTION 4 Visualization in scientific researches	42
СЕКЦИЯ 5 Обработка данных, базы данных, анализ данных SECTION 5 Data processing, databases and data analysis	43
СЕКЦИЯ 7 Оптимальные методы, планирование эксперимента SECTION 7 Optimum procedures and design of experiments	46
МАТЕРИАЛЫ, ОПУБЛИКОВАННЫЕ В РАМКАХ ИВТН-2008	47

ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2009

Для принятия участия в работе конференции заполните и направьте, пожалуйста, в оргкомитет ИВТН.ru форму заявки. Тезисы и/или расширенный доклад перешлите по адресу: org@ivtn.ru

Вы можете заполнить эту форму на сайте по адресу: <http://www.ivtn.ru/application.html>

Фамилия:	
Имя-Отчество:	
Организация:	
Подразделение: (факультет, отдел, лаборатория)	
Должность:	
Ученая степень:	
Телефон:	
Факс:	
E-mail:	
URL:	
Страна:	
Индекс:	
Почтовый адрес:	
Название доклада на русском языке:	
* Название доклада на английском языке:	
Соавторы:	
Тезисы доклада (имя файла):	
Расширенный доклад (имя файла):	
Краткая аннотация: на русском языке (не более 500 символов)	
* Краткая аннотация: на английском языке (не более 500 символов)	

* Если у Вас возникнут трудности с переводом, оставьте в данном поле сообщение "трудности с переводом".
Наши переводчики решат эту проблему.

Координаты организационного комитета: Тел./Факс: +7 495 995-8017, E-mail: org@ivtn.ru

IVTN-2009 APPLICATION FORM

For participating in conference you have to send the filled application form to IVTN.ru Organizing Committee.

Your theses and/or enlarged report please send by E-mail: org@ivtn.ru.

You can also fill the application form on web-site: http://www.ivtn.ru/application_e.html

Surname:	
Name:	
Company/Organization:	
Department:	
Job position:	
Scientific degree:	
Phone:	
Fax:	
E-mail:	
URL:	
Country:	
Zip/Postal Code:	
Postal address:	
* Title of the report: (in Russian)	
Title of the report: (in English)	
Co-authors:	
Theses of the report: (file name)	
Enlarged report: (file name)	
*Short abstract in Russian (no more than 500 symbols)	
Short abstract in English: (no more than 500 symbols)	

* If you will have some difficulties with translation, put in this field the message "difficulties with translation". Our translators will decide this problem.

Organizational committee coordinates: Tel./Fax: +7 495 995-8017, E-mail: org@ivtn.ru

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ
Сессия ИВТН-2008**

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES
IVTN-2008 Session**

Сборник материалов
The Proceedings

Ответственные за выпуск

Компьютерная верстка: *Воронина Н., Куприна Ю.*

Перевод: *Воронина Н.*

Дизайн обложки: *Котельников Д.*

Редактор: *Габусу П.*

Editorial board

Make-up: *Voronina N., Kuprina Yu.*

Translators: *Voronina N.*

Design: *Kotelnikov D.*

Editor: *Gabusu P.*

