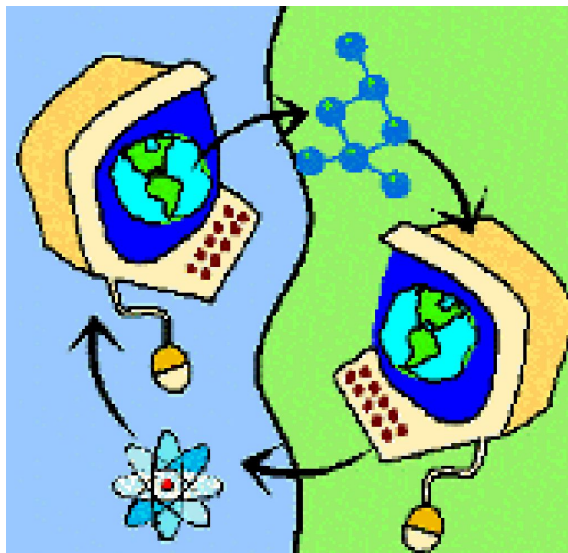


# С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии

## Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия



«Юные кибер-химики». Рисунок являлся эмблемой Десятой интернетовской конференции по компьютерной химии (<http://eccc.monmouth.edu>)

“The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of large parts of physics and the whole of chemistry are thus fully known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved”

[P.A.M. Dirac. Proc. Roy. Soc. (London) 1929, 123, 714].

П. А. М. Дирак – один из создателей современной теоретической науки в 1929 году писал, что **«фундаментальные законы, необходимые для математического описания большинства областей физики и всей химии уже полностью известны, и трудность состоит только в том, что применение этих законов приводит к уравнениям слишком сложным для решения»**.

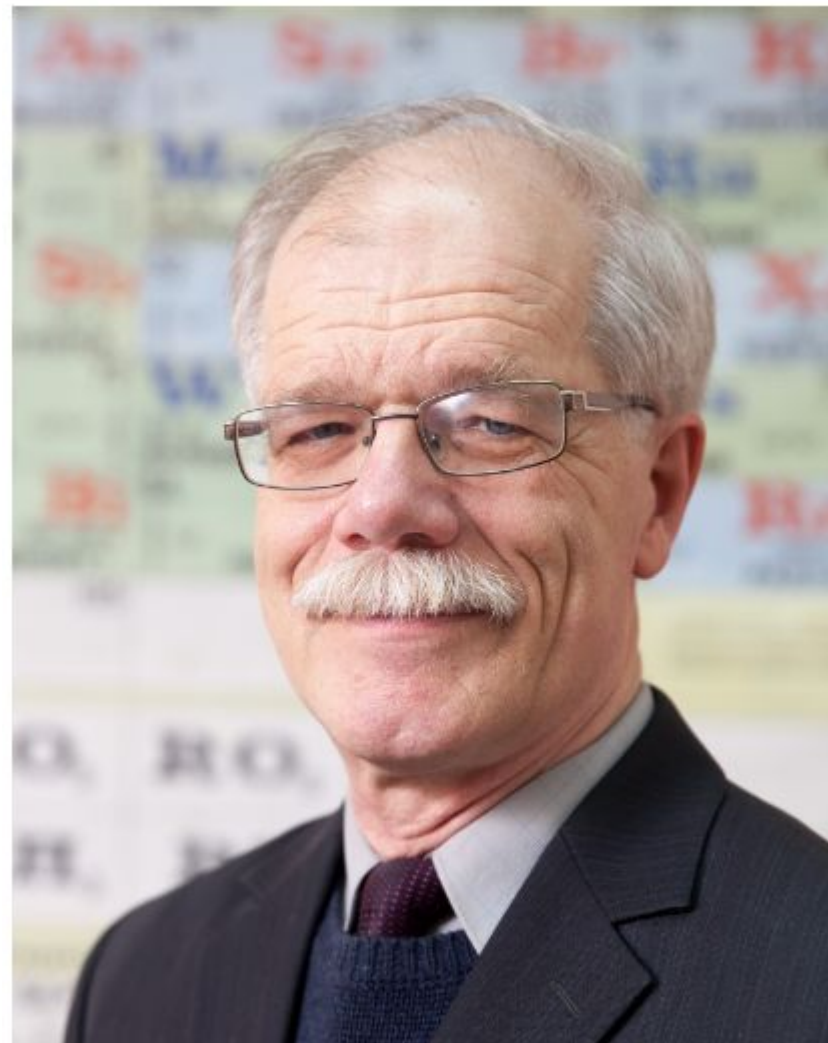
С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии  
Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

Лектор: **Зеленцов Сергей Васильевич**

Доктор химических наук,  
профессор кафедры физической химии  
ННГУ

E-mail: [zelentsov@chem.unn.ru](mailto:zelentsov@chem.unn.ru)

Комната 304 НИИХ ННГУ (5 корп.)



# С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии

## Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

Список рекомендованной литературы ко всему курсу лекций:

1. **С.В. Зеленцов**, Математические методы в химии. Учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород, Нижегородский госуниверситет, 2017. - 102с.
2. **Jensen F.** Introduction to computational chemistry. 2nd ed. – Chichester:John Wiley & Sons Ltd, 2007. – 599p.
3. **Rogers D.W.** Computational chemistry using the PC/ 3rd ed. – Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2003. – 349p.
4. **Young D. C.** Computational chemistry: A practical guide for applying techniques to real-world problems. – New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto: John Wiley & Sons, Inc. 2001. – 408p.
5. **Джонсон К.** Численные методы в химии/ Пер. с англ. – М.: Мир, 1983. – 504с.
6. **Батунер Л.М., Позин М.Е.**, Математические методы в химической технике. – Л.: Химия, 1971. – 824с.
7. **Бунге М.** Философия физики/ Пер. с англ. 2-е изд. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 320с.

С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии  
Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

**Математическая (компьютерная) химия изучает химические явления с помощью математики. Предметом исследования математики являются количественные отношения, характеризующие материальные и идеальные объекты, а также их пространственную и временную протяженность.**

Идеальные объекты, являющиеся отражениями количественных отношений, представляют собой **математические модели**. Они бывают *нескольких уровней*. Чем больше абстрактность модели, тем более она утрачивает связь с породившими ее количественными отношениями (отражает их менее подробно), но и к тем большему числу однородных объектов она применима, и тем выше ее математический уровень.

Наивысшей

абстрактностью обладают логические законы, применение которых характерно для всех математических

# С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии

## Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

Основой для построения моделей и изучения их взаимосвязи с породившими их объективными количественными отношениями служит понятие **изоморфизма** моделей и количественных отношений объектов и явлений.

***Изоморфизм отражения приводит к тому, что пространственно-временные отношения между химическими объектами моделируемого объекта будут отражаться в пространственно-временных отношениях между объектами математической модели.***

В большинстве случаев в молекуле в качестве ее составной части можно выделить атом и химическую связь, причем атом и молекула соотносятся, как «часть и целое». В математических теориях в химии, описывающих атомы и молекулы, обязательно наличие объектов, относящихся к атомам и молекулам, причем они также будут соотноситься, как «часть и целое». В качестве примера можно назвать широко используемое в квантовой химии утверждение о том, что волновую функцию молекулы можно представить в виде суммы волновых функций атомов. Поскольку для решения химических задач чаще всего важны именно структурные и временные характеристики молекул, составляющих их атомов и фрагментов из атомов, то изучение пространственных свойств при помощи анализа вкладов, вносимых атомами, молекулами и их фрагментами, можно считать продуктивным и фундаментальным методом исследования в химии.

# С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии

## Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

Последние двадцать лет ознаменовались **бурным развитием компьютеров** и связанных с ними **информационных технологий**. Компьютерные методы стали или становятся инструментами исследования в науке. В наши дни применение компьютеров в химии стало одним из бурно развивающихся ее разделов. Иногда говорят о появлении **нового раздела химической науки – химической информатики**. Широкое применение компьютеров позволяет значительно ускорить развитие химии.

### Причины появления вычислительной химии.

(1) Получение новой химической информации при помощи экспериментальных методов в химии становится все более сложным и дорогим. Одной из альтернатив служит проведение **математического моделирования химических процессов**.

(2) Характерной особенностью современного этапа развития химии является уход от изучения свойств веществ и химических реакций только одним методом. Применение нескольких методов одновременно необходимо для обеспечения **системности научных исследований**, увеличения степени достоверности их результатов. Вручную обработка разнородных экспериментальных данных весьма затруднительна и часто невозможна.

# С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии

## Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

(3) Объекты современной химии в большинстве случаев являются **короткоживущими частицами**, присутствующими в реагирующих системах в незначительных количествах. В ходе химических реакций они быстро появляются и исчезают; часто их обнаружение является чрезвычайно сложным и непрямым.

(4) Некоторые химические эксперименты провести **невозможно** или **нерационально**. Математическое моделирование облегчает проведение таких объектов (астрономическая химия, взрывчатые вещества и химия взрыва), ядовитые вещества, ... .

(5) **Беспрецедентное развитие компьютеров** в последние 20 лет привело к значительному увеличению их мощности и возможностей. Как сами компьютеры, так и вычислительное время стали достаточно дешевыми, а вычисления, которые они могут провести в ограниченный временной промежуток, становятся все более сложными и объемными. Это позволяет использовать для математического моделирования достаточно сложные модели и методы расчетов, что приводит к более надежным результатам

С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии  
Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия

**Условия успешного применения вычислительной (компьютерной) химии:**

**Компьютерная химия** может успешно использоваться тогда, когда математическая теория химического явления достаточно хорошо разработана, и ею можно "автоматически" пользоваться для решения разнообразных химических задач. Действительно, во многих разделах химии имеются задачи, для которых в настоящее время разработаны методы решения, и, применяя их к решению новых химических задач, можно получать **новую химическую информацию**.

В математическую и компьютерную химию часто включают также **изучение информационных потоков в химии**, получение необходимой информации за наименьшее время, представление информации в наиболее приемлемом для химика виде, создание баз данных и баз знаний. Информационная составляющая компьютерной химии приобретает все большее значение.

Другой составляющей компьютерной химии является разработка методов **представления химических моделей средствами компьютерной графики**.

Следующая составляющая – **методологическая**. При большом разнообразии математических методов и программных продуктов методологически правильный их выбор является непростой задачей.

И, наконец, нельзя не упомянуть о роли математической и компьютерной химии в **образовании**.



## Лекция 2. **Линейная корреляция**

В результате эксперимента получают наборы количественных величин. Одной из главных задач первичной математической обработки количественных экспериментальных данных является установление вида и надежности зависимостей между количественными величинами из разных наборов.

Примем, что изменение измеряемой величины в повторных измерениях является случайным событием. В этом случае для их обработки можно воспользоваться методами теории вероятности и математической статистики.

Часто результаты эксперимента выражают в виде зависимости между величиной  $x$  из одного набора экспериментальных данных и величиной  $y_x$  из другого набора экспериментальных данных, причем номера величин  $x$  и  $y_x$  в соответствующих наборах совпадают. Графическое изображение на плоскости пар  $(x, y_x)$  с последующим соединением их отрезками прямых линий называют эмпирической линией регрессии  $y$  по  $x$ . По этой ломаной линии можно попытаться определить вид функциональной зависимости  $y_x = f(x)$ , около графика которой с наименьшими отклонениями группируются точки  $(x, y_x)$ . Такую линию называют теоретической линией регрессии или просто линией регрессии  $y$  по  $x$ . Зависимость  $y_x = f(x)$ , соответствующая линии регрессии, называется уравнением регрессии  $y$  по  $x$ , или, иначе говоря, корреляционной зависимостью между  $y$  и  $x$ . Поскольку значения  $x$  и  $y_x$  являются результатами эксперимента, то регрессию можно определить не только величиной для  $y$  по  $x$ , но и  $x_y$  по  $y$ , т.е.  $x_y = j(y)$ .

С.В. Зеленцов. Вычислительные методы в химии  
Лекция 1. Что такое вычислительная (компьютерная) химия





