

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

Кафедра неорганічної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи

“ _____ ” _____ 2019 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

СУЧАСНІ КОМП'ЮТЕРНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ

рівень вищої освіти бакалавр

галузь знань 10 Природничі науки

напрямок підготовки 102 Хімія

освітня програма освітня-професійна програма “Хімія”

вид дисципліни за вибором

факультет хімічний

2019 / 2020 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету
від _____ 2019 року, протокол № _____

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Калугін Олег Миколайович, к.х.н., професор кафедри неорганічної хімії, декан хімічного факультету,

Іванов Володимир Венедиктович, д.х.н., професор кафедри хімічного матеріалознавства,

Коробов Олександр Ісаакович, д.х.н., професор кафедри хімічного матеріалознавства.

Програму схвалено на засіданні кафедри неорганічної хімії
протокол від _____ 2019 року, № _____

В. о. завідувача кафедри неорганічної хімії

_____ / І.М. В'юник/
(підпис)

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства;
протокол від _____ 2019 року, № _____.

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

_____ /О.І. Коробов/
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету;
протокол від _____ 2019 року № _____.

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ Єфімов П. В.
(підпис) (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Сучасні комп'ютерні методи в хімії» складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки «бакалавра» спеціальності 102 Хімія

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни.

Надання студентам знань з використання статистичних, хемометричних, та інших математичних методів обробки масивів хімічних (експериментальних) і теоретичних даних. Зокрема надати студентам знання про чисельні методи вирішення фізико-хімічних задач, що виникають при дослідженні хімічних речовин, явищ та процесів з використанням комп'ютерів; описати сучасні можливості розрахункової хімії при вирішенні задач QSAR та хімічної кінетики: методи розрахунків активності (зокрема біологічної) молекул, регресійні методи оцінки активності, дискримінацію кінетичних механізмів, особливості кінетики каталітичних реакцій, нелінійні режими в хімічних реагуючих системах.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни:

Основними завданнями вивчення дисципліни є знайомство студентів із комп'ютерними технологіями для розв'язання типових навчальних та наукових задач; оволодіння доступними програмними засобами для розв'язання прикладних хімічних задач.

1.3. Кількість кредитів: 9

1.4. Загальна кількість годин: 270

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
4-й	4-й
Семестр	
8-й	8-й
Лекції	
32 год.	12 год.
Практичні, семінарські заняття	
не передбачено	
Лабораторні заняття	
64 год.	12 год.
Самостійна робота	
174 год.	246 год.
Індивідуальні завдання	
не передбачено	

1.6. Заплановані результати навчання.

Знати: основні математичні концепції і методи, що мають безпосереднє застосування в сучасній хімії при дослідженні хімічних властивостей речовин та їх перетворень; основні теоретичні положення QSAR, аналізу кінетичних механізмів хімічних реакцій, кінетики каталітичних реакцій; володіти інформацією про наявне загальне та

спеціалізоване програмне забезпечення, яке може бути використано при вирішенні розрахункових задач в цих галузях.

Вміти: використовувати загальне та спеціалізоване програмне забезпечення та математичні методи, зокрема чисельне диференціювання, інтегрування, методи оптимізації та інтерполяцію даних при вирішенні фізико-хімічних задач, для побудови аддитивних схем, класифікації та розпізнавання образів, аналізу кінетичних механізмів хімічних реакцій, розрахунку основних параметрів каталітичних реакцій, дослідження нелінійних режимів в хімічних системах.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Теоретичний матеріал (частина 1)

Тема 1. Елементи математичної статистики і теорії похибок.

Випадкова величина, математичне чекання, дисперсія і середнє квадратичне відхилення. Закони розподілу випадкових величин. Рівномірний розподіл; нормальний розподіл (Гауса-Лапласа), правило “трьох сигм”. Типи похибок: систематичні, випадкові і промахи; абсолютні і відносні; помилки обчислень і округлень. Систематичні похибки: джерела і їх усунення, помилки непрямих вимірів. Приклади: зважування, готування розчинів, визначення фізико-хімічних величин (електрометричне і спектроскопічне). Випадкові похибки: кількісні характеристики, похибки непрямих вимірів. Статистична обробка результатів кількісних вимірювань.

Тема 2. Лінійний метод найменших квадратів та його застосування в регресійному аналізі.

Подібність та відмінність кореляційного та регресійного аналізу. Елементи кореляційного аналізу. Постановка задачі регресійного аналізу. Припущення й алгоритм оцінювання параметрів регресії за методом найменших квадратів. Властивості оцінок МНК. Зважений ЛМНК, критерії застосування.

Тема 3. Інтерполяція даних і наближення функцій.

Постановка задачі. Критерії методу рішення (ЛМНК або класична інтерполяція). Поліноміальна інтерполяція: програмна реалізація, схема Горнера; апроксимаційна теорема Вейерштраса, глобальний інтерполянт, базис Лагранжевих поліномів. Кусочна інтерполяція, інтерполяція кубічним сплайном.

Тема 4. Чисельне диференціювання.

Різницеві відношення. Похибка апроксимації різницеvими відношеннями. Некоректність операції чисельного диференціювання.

Тема 5. Ряди Фур'є й інтегральні перетворення Фур'є.

Дискретне і неперервне перетворення Фур'є. Швидке Фур'є-перетворення. Приклади використання Фур'є перетворення: експериментальні спектри і часові кореляційні функції, структурний фактор і функція радіального розподілу.

Тема 6. Методи оптимізації.

Постановка задачі: фізико-хімічна і математична. Класифікація методів оптимізації. Методи одновимірної оптимізації (мінімізації). Методи багатовимірної мінімізації і нелінійний метод найменших квадратів. Формальна задача нелінійної регресії, переформулювання її в задачу багатовимірної оптимізації: геометрична й аналітична інтерпретація, приклади постановки задач у реальних дослідницьких задачах (наприкладі електрометричних і спектроскопічних). Ітераційні методи оптимізації (мінімізації). метод параболоїдів (Ньютона-Канторовича). Критерії закінчення мінімізації, необхідні і достатні умови глобального мінімізатора. Статистична оцінка параметрів нелінійної регресії. Труднощі і

модифікації методу параболоїдів. Алгоритм методу параболоїдів. Методи без обчислення похідних: метод багатогранника що деформується. Геометрична інтерпретація.

Особливості застосування методів багатомірної нелінійної мінімізації при дослідженні розчинів електролітів. Розрахунок рівноважного складу у випадку симетричних електролітів. Несиметричні, змішані і складно асоційовані електроліти і їх природні й антропогенні аналоги (морська вода, стічні води, технологічні електроліти та інш.). Розрахунок рівноважного складу в несиметричних електролітах, метод Брінклі.

Особливості застосування методів багатомірної нелінійної мінімізації при обробці спектроскопічних даних.

Тема 7. (факультативна). Чисельне інтегрування..

Класифікація типів функцій що інтегруються. Найпростіші формули чисельного інтегрування. Квадратурні формули інтерполяційного типу. Формули Ньютона-Котеса. Адаптивні квадратурні алгоритми. Метод Гауса обчислення визначених інтегралів.

Розділ 2. Теоретичний матеріал (частина 2)

Тема 8. Напівемпіричні методи квантової хімії.

Класифікація методів. Метод нульового диференційного перекриття. Методи двохатомного диференційного перекриття (MNDO, AM1, PM3, RM1).

Тема 9. Мета та методи розрахунків активності (зокрема біологічної) молекул.

Дескрипторний метод опису молекулярної структури. Топологічні, електронні, геометричні та фізико-хімічні дескриптори. Регресійні методи оцінки активності. Адитивні схеми, модель Хенча та метод порівнювального аналізу молекулярних полів (CoMFA). Неповний метод найменших квадратів (PLS). Метод найменших модулів (LAD).

Тема 10. Основи теорії класифікації та розпізнавання образів.

Статистичні основи класифікації. Побудова дискримінаційних функцій. Логістична регресія.

Тема 11. Будова білку.

Візуалізація високомолекулярних сполук (білки, ліпіди, ДНК). Моделювання взаємодії білку із низькомолекулярними речовинами (докінг).

Тема 12. Різноманіття задач хімічної кінетики та комп'ютерних методів їх вирішення.

Спільні риси та різноманіття задач хімічної кінетики. Пряма та обернена задачі хімічної кінетики. Особливості їх постановки та вирішення у випадку гетерогенного та ферментативного каталізу. Особливості перебігу хімічних реакцій у проточних реакторах.

Тема 13. Аналіз кінетичних механізмів гетерогенних хімічних реакцій.

Основні підходи до аналізу гетерогенно-каталітичних реакцій. Кінетичні методи Монте Карло. Загальні основи. Простий модельний приклад: окиснення CO на поверхні платини. Алгоритм та аналіз результатів. Основні напрямки деталізації простої моделі. Розрахункова складність задачі.

Тема 14. Особливості кінетики ферментативних реакцій.

Рівняння Міхаеліса – Ментень. Інгибування ферментативних реакцій надлишком субстрату. Три основні кінетичні схеми такого інгибування. Вибір адекватної схеми. конкурентне та неконкурентне інгибування сторонніми речовинами.

Тема 15. Нелінійні режими в хімічних реагуючих системах.

Динамічна поведінка хімічних систем. Умови виникнення нелінійних режимів. Фазова траєкторія, фазовий портрет. Головні ізокліни системи. Стационарні стани. Лінеаризація системи рівнянь, характеристичне рівняння. Класифікація особливих точок фазового портрету. Схема аналізу динамічної системи.

Розділ 3. Лабораторні заняття (частина 1)

Тема 16. Розрахунок систематичних похибок непрямих вимірів.

Тема 17. Застосування ЛМНК та зваженого ЛМНК в регресійному аналізі.

Тема 18. Інтерполяція даних за допомогою ЛМНК.

Тема 19. Інтерполяція даних за формулою Лагранжа.

Тема 20. Чисельне диференціювання та інтегрування.

Тема 21. Застосування методу Ньютона першого для розрахунку рівноважного складу 1-1 електроліту з врахуванням коефіцієнтів активності.

Тема 22. Застосування методів оптимізації для знаходження мінімуму функції багатьох змінних (на прикладі абстрактних математичних, електрометричних або спектроскопічних задач).

Розділ 4. Лабораторні заняття (частина 2)

Тема 23. Знайомство з комп'ютерними програмами проблематики QSAR (CDKDescUI, PADel, DRAGON). Оптимізація геометрії біологічно-активних сполук методами напівемпіричної квантової хімії (програми Gamess, Avogadro). Кореляція біологічної активності із структурними параметрами молекули.

Тема 24. Регресійний аналіз в описі хімічних та біохімічних властивостей. *Online* Інтернет ресурси. Тестування отриманих регресійних рівнянь. Процедура *Leave-one-out*.

Тема 25. Знайомство з статистичними методами класифікації. Класифікатори алергічної активності молекул. Побудова дискримінаційних та логістичних функцій. Тестування отриманих класифікаційних функцій. Критерії якості класифікації.

Тема 26. Докінг. Візуалізація білкових молекул. (комп'ютерні програми Jmol, PyMol) Взаємодія ліганду з білками (програми MGLTools, Vina).

Тема 27. Аналіз кінетичних механізмів хімічних реакцій.

Тема 28. Розрахункові методи в кінетиці гетерогенних реакцій.

Тема 29. Розрахункові методи в кінетиці ферментативних реакцій.

Тема 30. Комп'ютерне дослідження нелінійних режимів хімічних реагуючих систем.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
л		п	лаб.	інд.	с. р.	л		п	лаб.	інд.	с. р.	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Теоретичний матеріал (частина 1)												
Разом за розділом 1	62	16				46	70	6				64
Розділ 2. Теоретичний матеріал (частина 2)												
Разом за розділом 2	62	16				46	70	6				64
Розділ 3. Лабораторні заняття (частина 1)												
Разом за розділом 3	73	-		32		41	65			6		59
Розділ 4. Лабораторні заняття (частина 2)												
Разом за розділом 4	73	-		32		41	65			6		59
Усього годин	270	32		64		174	270	12		12		246

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		ден.	заоч.
16	Розрахунок систематичних похибок непрямих вимірів.	4	1
17	Застосування ЛМНК та зваженого ЛМНК в регресійному аналізі.	4	1
18	Інтерполяція даних за допомогою ЛМНК.	4	1
19	Інтерполяція даних за формулою Лагранжа.	4	0
20	Чисельне диференціювання та інтегрування.	4	0
21	Застосування методу Ньютона першого порядку для розрахунку рівноважного складу 1-1 електроліту з урахуванням коефіцієнтів активності.	4	0
22	Застосування методів оптимізації для знаходження мінімуму функції багатьох змінних (на прикладі абстрактних математичних, електрометричних або спектроскопічних задач).	8	3
23	Знайомство з комп'ютерними програмами проблематики QSAR (CDKDescUI, PAdel, DRAGON). Оптимізація геометрії біологічно-активних сполук методами напівемпіричної квантової хімії (програми Gamess, Avogadro). Кореляція біологічної активності із структурними параметрами молекули.	4	1
24	Регресійний аналіз в описі хімічних та біохімічних властивостей. <i>Online</i> Інтернет ресурси. Тестування отриманих регресійних рівнянь. Процедура <i>Leave-one-out</i> .	4	0
25	Знайомство з статистичними методами класифікації. Класифікатори алергічної активності молекул. Побудова дискримінаційних та логістичних функцій. Тестування отриманих класифікаційних функцій. Критерії якості класифікації.	4	1
26	Докінг. Візуалізація білкових молекул. (комп'ютерні програми Jmol, Rymol) Взаємодія ліганду з білком (програми MGLTools, Vina).	4	1
27	Аналіз кінетичних механізмів хімічних реакцій	4	1
28	Розрахункові методи в кінетиці гетерогенних реакцій	4	0
29	Розрахункові методи в кінетиці ферментативних реакцій.	4	1
30	Комп'ютерне дослідження нелінійних режимів хімічних реагуючих систем	4	1
	Разом:	64	12

5. Завдання для самостійної роботи

Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	
	ден.	заоч.
Тема 1 та 16. Застосування математичної статистики та теорії похибок для аналізу результатів фізико-хімічних вимірювань	12	17
Тема 2 та 17. Матричне представлення ЛМНК	13	17
Тема 3 та 18 та 19. Застосування методів інтерполяції у спектроскопії	19	24
Тема 4 та 20. Застосування чисельного диференціювання в квантово-хімічних розрахунках	13	17
Тема 5. Особливості застосування Фур'є перетворення в дифракційних методах дослідження рідин	7	10
Тема 6 та 21 та 22. Розрахунок рівноважного складу електролітного розчину за допомогою методів оптимізації	19	34
Тема 7. Чисельне інтегрування в молекулярно-динамічному моделюванні та спектроскопії	4	4
Тема 8 та 23. Напівемпіричні методи квантової хімії. Оптимізація геометрії. Кореляція біологічної активності із структурними параметрами молекули	10	15
Тема 9 та 24. Регресійний аналіз в описі фізико-хімічних та біохімічних властивостей	10	15

Тема 10 та 25. Основи теорії класифікації та розпізнавання образів	11	15
Тема 11 та 26. Докінг. Взаємодія ліганду з білком	11	16
Тема 12 та 27. Задачі хімічної кінетики та комп'ютерні методи їх вирішення.	11	15
Тема 13 та 28. Основні підходи до аналізу кінетичних механізмів хімічних реакцій.	11	15
Тема 14 та 29. Особливості кінетики гетерогенних та ферментативних реакцій .	11	16
Тема 15 та 30. Нелінійні режими в сучасній хімії та хімічній технології.	12	16
Разом:	174	246

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

7. Методи контролю

Виконання контрольних робіт. Семестровий екзамен (письмова робота).

8. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточний контроль																Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума	
Розділ 1	Розділ 2	Розділ 3						Розділ 4										
Теми 1-7	Теми 8-15	Т 16	Т 17	Т 18	Т 19	Т 20	Т 21	Т 22	Т 23	Т 24	Т 25	Т 26	Т 27	Т 28	Т 29	Т 30	40	100
К/Р - 10 балів	Поточний контроль								Поточний контроль									
	3	3	3	3	3	4	6	3	3	3	3	3	3	3	4			
	Разом: 25								Разом: 25									

1. Студент допускається до підсумкового семестрового контролю (екзамену) за умови виконання та оформлення всіх лабораторних робіт та написання кожної модульної контрольної роботи на оцінку не меншу 2.5 балів.
2. Якщо студент без поважних причин несвоєчасно виконав та оформив лабораторну роботу чи модульну контрольну роботу, оцінка за роботу знижується на 25%. Терміни оформлення лабораторних і виконання модульних контрольних робіт визначаються викладачами, які ведуть лабораторні заняття.
3. Студент допускається до семестрового підсумкового контролю за умови, якщо за результатами поточного контролю та виконання модульних контрольних робіт він набрав не менше 30 балів.
4. Екзамен вважається зданим, якщо студент одержав за нього оцінку не меншу 15 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка для чотирирівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно
70-89	добре
50-69	задовільно
1-49	незадовільно

9. Рекомендована (базова) література

1. Калугин О.Н. *Математические методы неорганической химии. Методические указания по курсу.* Харьков 2006, 67 с.
2. Иванов В.В., Слета Л.А., Расчетные методы прогноза биологической активности органических соединений. Харьков: ЧП Азамаев В.Р., 2003.– 76 с.
3. Young D.C. *Computational Chemistry*, Wiley Interscience, New York, 2001. 370 p.
4. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И. Кинетика химических реакций. Москва, МГУ, 1995.
5. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И. Кинетика химических реакций. Москва, МГУ, 1995.
6. Воронин А.И., Ошеров В.И. Динамика молекулярных реакций. М.: Наука, 1990.
7. Уманский С.Я.. Лекции по теории элементарного акта химических превращений в газовой фазе. М.: МГУ, 2001.
8. Воробьев А.Х. Лекции по теории элементарного акта в конденсированной фазе. М.: МГУ, 2000.
9. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.
10. Гарел Д., Гарел О. Колебательные химические реакции. – Пер. с англ. – М.: Мир, 1986.
11. Киперман С.Л. Основы химической кинетики в гетерогенном катализе. – М.: Химия, 1979.
12. Практическая химическая кинетика / Под ред. М. Я. Мельникова. – М.: изд-во МГУ, 2006.
13. Варфоломеев С.Д., Гуревич К.Г. Биокинетика. – М.: Гранд, 1999.
14. В. В. Иванов, Л. А. Слета. Квантовая химия. Харьков: “Фолио”, 2007, 443 с.
15. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиоров Н.С., Топологические индексы в органической химии // *Успехи химии.*–1988.–Т. **57**, № 3.– С.337-365.
16. Раевский О.А., Дескрипторы молекулярной структуры в компьютерном дизайне биологически активных веществ // *Успехи химии.*–1999.–Т. **68**, №6. – С. 555-575.
17. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ, М.”Финансы и статистика”, 1989, 213 с.
18. G. Turrel. *Mathematics for Chemistry and Physics.*- Elsevier 2002. -424 p.
19. *Математическая статистика: Учебник* / В.М. Иванов, В.Н. Калинина, Л.А. Наумова и др. - М.: Высш. школа, 1981. - 371с.
20. *Справочник по прикладной статистике* в 2-х т., под ред. Э. Ллойда, У. Ледермана, Ю. Н. Тюрина. - М.: Финансы и статистика, 1989.- 1990.
21. Ю.Н. Тюрин, А.А. Макаров. (под ред. Фигурнова). *Анализ данных на компьютере.* -М.: Фин. и стат-ка, 1995. -384с.
22. Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Модлер. *Машинные методы математических вычислений.* М.: Мир, 1980. -280с.
23. Д.В. Хеерман. *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.* М.: Наука, 1990.- 176с.
24. В.Н. Романенко, В.Г. Орлов, Г.В. Микитина. *Книга для начинающего исследователя-химика.* Л. Химия, 1987. - 280с.
25. Дж. Бендат, А. Пирсол. *Прикладной анализ случайных данных.* М.: Мир, 1989.- 540с.
26. Линник Ю.В. *Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений.* - М., Физматизд., 1962. - 349с.
27. Демиденко Е.З. *Линейная и нелинейная регрессии.* - М.: Финансы и статистика, 1981. - 304с.
28. А.А. Самарский, А.В. Гулин. *Численные методы.* -М.: Наука, 1989, 432с.

29. К. Эберт, Х. Эдерер. *Компьютеры. Применение в химии.* - М.: Мир, 1988.-416с.
30. У.И. Зангвилл. *Нелинейное программирование. Единый подход.* -М.: Сов. радио, 1973.- 312с.
31. Дж. Ортега, В. Рейнболдт. *Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными.* - М.: Мир, 1975, - 560с.
32. Д. Химмельблау. *Прикладное нелинейное программирование.* М.: Мир, 1975.- 534с.
33. И.В. Бейко, Б.Н. Бублик, П.Н. Зинько. *Методы и алгоритмы решения задач оптимизации.* - Киев: Вища школа, 1983.-12с.
34. Фиакко, Г. Мак-Кормик. *Нелинейное программирование. Методы последовательной безусловной минимизации.* М.: Мир, 1972.- 240с.
35. Демидович Б.П., Марон И.А. *Основы вычислительной математики.* -М.: Наука, 1970.- 664с.
36. Васильев Ф.П. *Численные методы решения экстремальных задач.* -М.: Наука, 1988.- 552 с.

Критерії оцінювання навчальних досягнень студентів з дисципліни «Сучасні комп'ютерні методи в хімії»

Знання студентів оцінюється за наступними критеріями:

– «відмінно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент міцно засвоїв теоретичний матеріал, всебічно орієнтується в усіх основних темах курсу: відповідь побудовано логічно; дано переконливі відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми;

– «добре» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент добре засвоїв теоретичний матеріал та орієнтується в усіх основних темах курсу: відповідь побудовано логічно; дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми, при цьому можуть бути похибки у логіці викладу;

– «задовільно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент в основному засвоїв теоретичний матеріал, але орієнтується не в усіх основних темах курсу: відповідь побудовано не досить логічно; не дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми;

– «незадовільно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент не засвоїв теоретичний матеріал, не орієнтується у більшості основних тем курсу: не орієнтується в рекомендованій літературі.