

КазНУ им аль-Фараби
Кафедра общей и неорганической химии

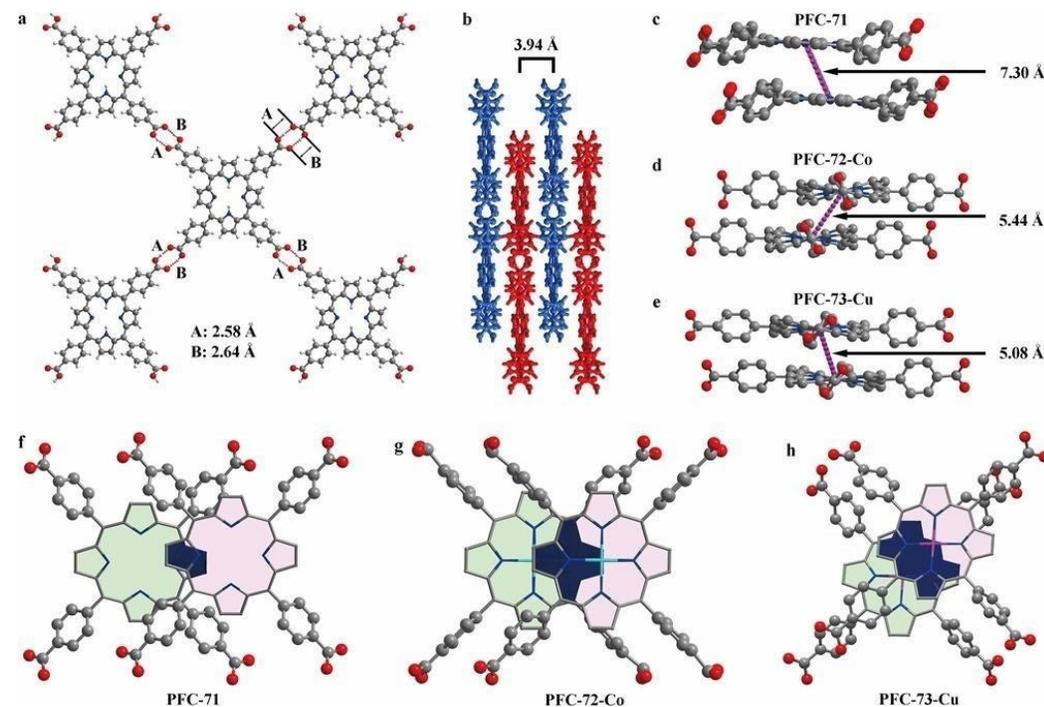
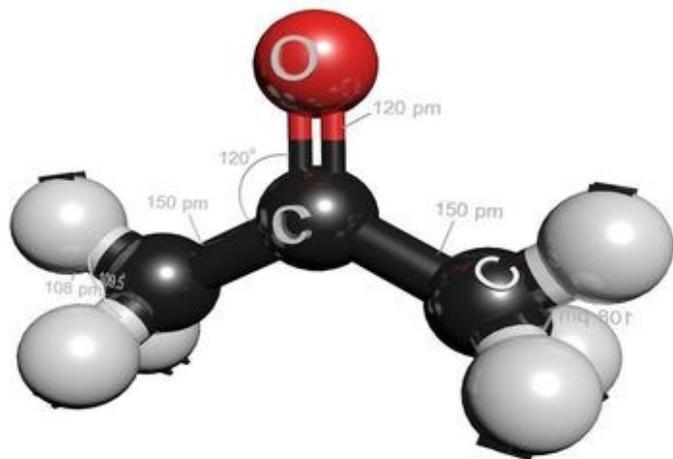
Методика компьютерного моделирования. Основные принципы моделирования

1 лекция

PhD Кеңес Қ.М.

Введение в компьютерное моделирование

- **Определение:** Компьютерное моделирование — это метод исследования и анализа сложных систем и явлений с использованием компьютерных программ для построения моделей.
- **Применение:** Научные исследования, проектирование новых материалов, химические процессы, климатические прогнозы.



Основные этапы моделирования

Постановка задачи: Определение системы и её параметров.

Построение математической модели: Описание системы через уравнения и законы физики, химии.

Разработка алгоритма: Создание программы, которая решает уравнения.

Проведение расчетов: Компьютерное выполнение моделирования.

Анализ результатов: Интерпретация данных и их проверка.

Принципы моделирования

1. Абстракция и упрощение

•**Описание:** Моделирование использует упрощенные представления объектов и процессов, чтобы сфокусироваться на ключевых аспектах системы. Например, при моделировании крупной молекулы можно учитывать только основные элементы структуры, игнорируя второстепенные взаимодействия.

•**Пример:** Упрощение многокомпонентных молекул для изучения их реакционной способности.

2. Валидация и верификация моделей

•**Описание:** Модели должны быть проверены на соответствие реальным данным (валидация) и корректность их внутренней работы (верификация). Это помогает удостовериться, что модель отображает реальные процессы адекватно.

•**Пример:** Сравнение расчетных данных о скорости реакции с экспериментально полученными значениями.

3. Оценка точности и чувствительности

•**Описание:** Важно оценивать, насколько малые изменения параметров модели влияют на ее результаты. Это помогает понять, какие параметры являются ключевыми для точного предсказания.

•**Пример:** Анализ чувствительности модели кинетики реакции к температуре.

4. Баланс между точностью и вычислительной сложностью

•**Описание:** Компьютерное моделирование всегда требует балансировки между точностью результатов и доступными вычислительными ресурсами.

•**Пример:** Использование более простых моделей для предварительного анализа и более точных методов для окончательных расчетов.

Методы валидации моделей

1. Сравнение с экспериментальными данными

Описание: Один из самых надежных способов проверки модели — сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными. Если модель предсказывает результаты, которые совпадают с экспериментом, это свидетельствует о ее надежности.

Пример: Сравнение рассчитанной энергии связи молекулы с экспериментально измеренной энергией.

2. Анализ чувствительности

Описание: Проверка, как небольшие изменения во входных параметрах влияют на конечные результаты модели. Это помогает понять, какие параметры являются критически важными, и оценить стабильность модели.

Пример: Оценка влияния изменения температуры или давления на скорость химической реакции в модели.

3. Внешняя валидация (тестирование на других системах)

Описание: Проверка модели на системах или условиях, отличных от исходных, для оценки ее универсальности и предсказательной способности.

Пример: Применение модели кинетики реакции к другим, но похожим химическим системам.

4. Оценка статистических и прогнозных показателей

Описание: Применение статистических показателей, таких как среднеквадратичная ошибка или коэффициент детерминации, для количественной оценки точности модели.

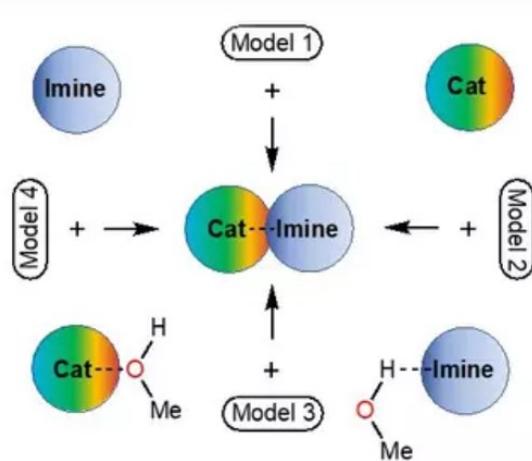
Пример: Использование R^2 для оценки соответствия расчетных данных экспериментальным значениям.

5. Ретроспективная проверка

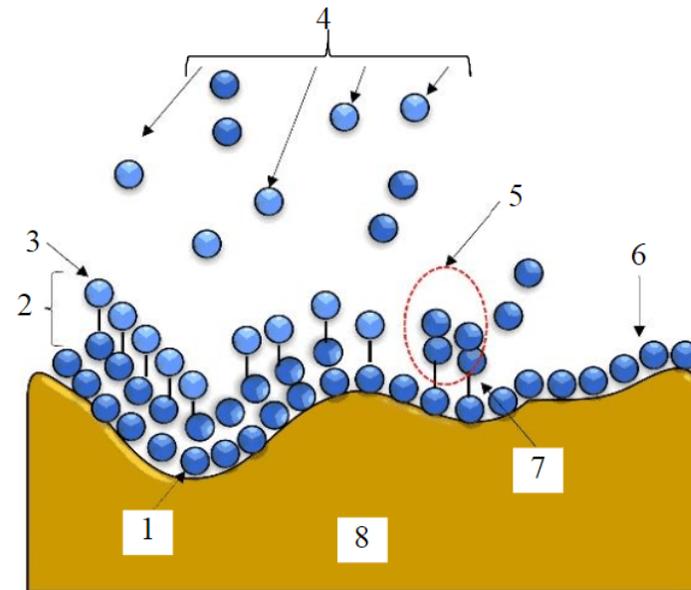
Описание: Модель проверяется на данных, которые уже известны, но не использовались при ее построении. Это позволяет оценить точность и предсказательность модели на независимых данных.

Пример: Проверка модели, предсказывающей каталитическую активность, на новой группе катализаторов.

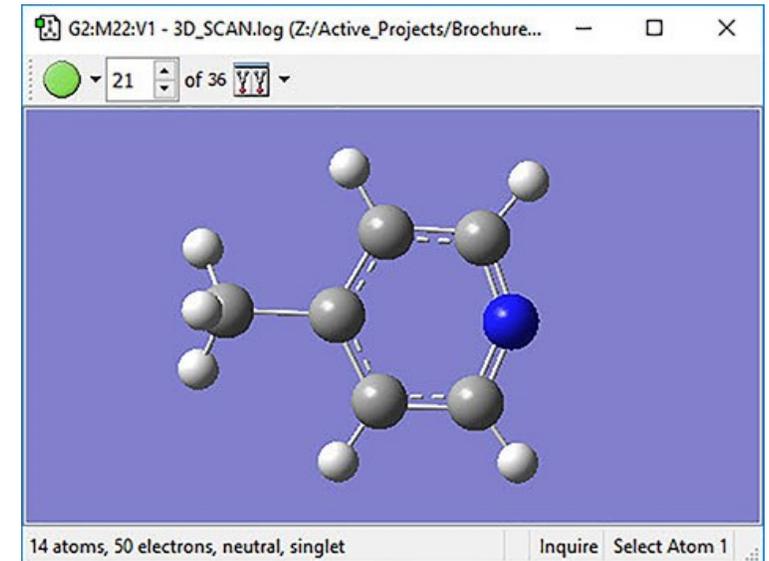
Компьютерное моделирование в химии



Рассмотренные авторами модели для определения активности катализаторов. Источник: Volotin et al. / Organic Chemistry Frontiers, 2022

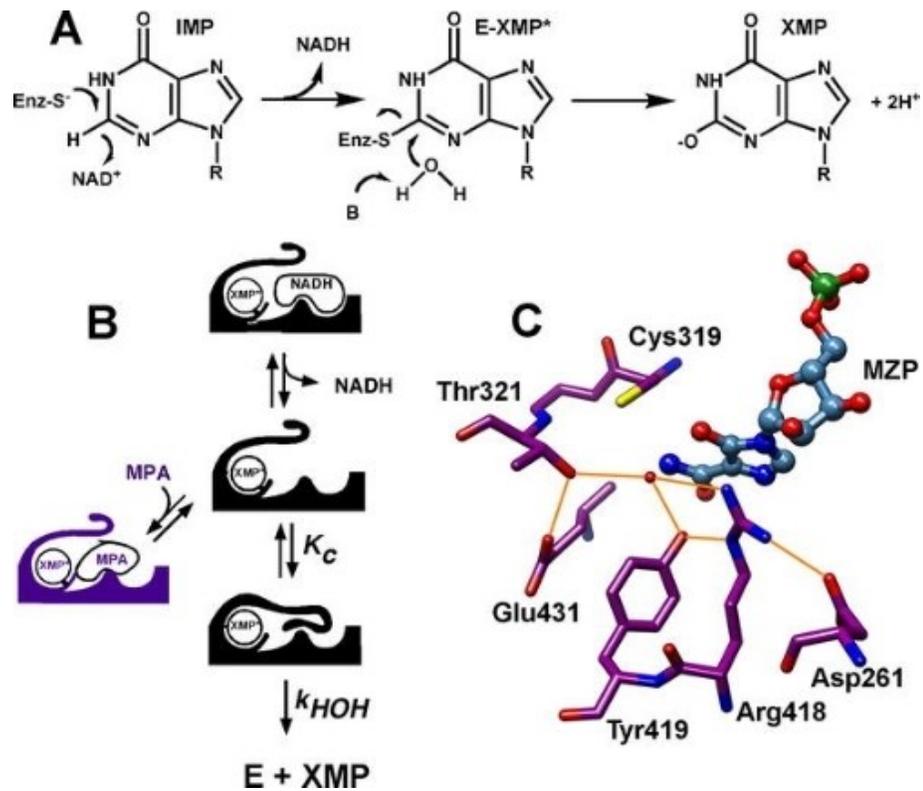


Многослойная, отталкивающаяся, перемешивающаяся адсорбция, спонтанное заполнение пор

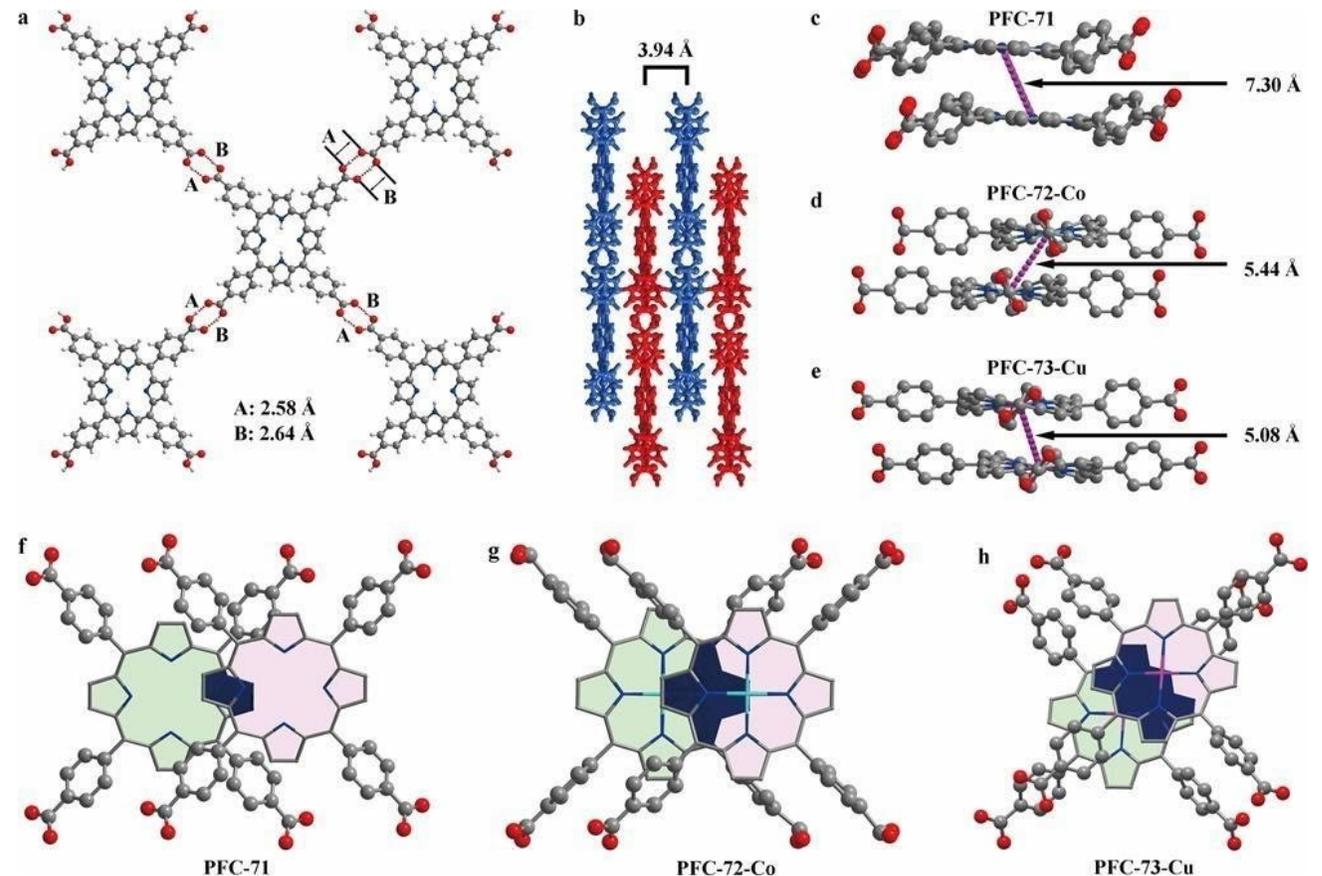


Моделирование молекулы / Gaussian view

Компьютерное моделирование в химии



Каталитический механизм IMPDH. А) Биохимическая реакция; В) Конформационные превращения IMPDH; С) Структура каталитического центра белка



Модели материалов для улавливания из воздуха углекислого газа и его преобразования в CO

Программы для моделирования

Gaussian

Описание: Популярное ПО для квантово-химических расчетов, используется для исследования электронной структуры молекул.

Применение: Химическая кинетика, спектральные характеристики, термодинамика.

VASP (Vienna Ab initio Simulation Package)

Описание: Программа для моделирования твердых тел, основывается на плотностно-функциональном подходе (DFT).

Применение: Изучение кристаллических структур, свойств материалов.

Другие программы (ORCA, CP2K, GROMACS)

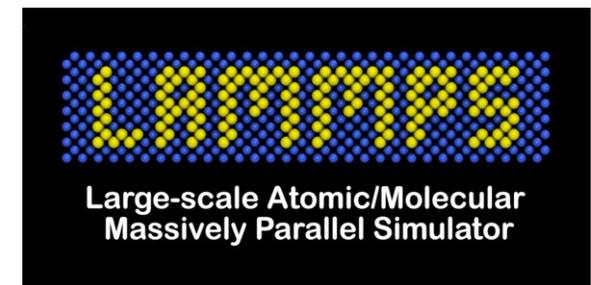
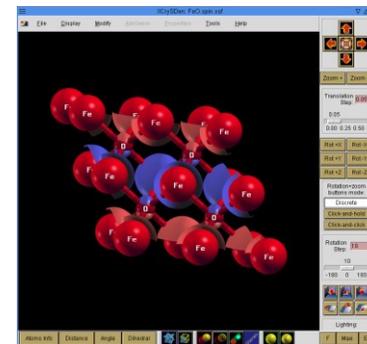
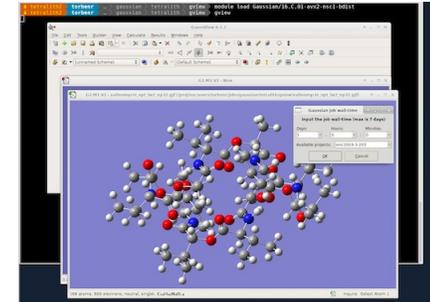
Описание: Специализированные инструменты для различных задач, от квантовой химии до биомолекулярного моделирования.

Применение: Биомолекулы, фармацевтика, материалы.

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

Описание: Программа для моделирования молекулярной динамики, хорошо работает на многопроцессорных системах.

Применение: Полимерные системы, жидкости, твердые тела.



Этические аспекты моделирования

1. Ответственность при использовании моделей

Описание: Модели — это упрощенные представления реальности, и важно понимать их ограничения и возможности.

Пример: Неуместное использование модели для предсказания опасных свойств веществ.

2. Прозрачность и воспроизводимость

Описание: Обязательность документирования всех параметров и методов, чтобы другие могли воспроизвести и проверить модель.

Пример: Публикация методов и данных для полной репликации расчетов.

3. Этическое использование данных

Описание: Обеспечение корректного использования данных, например, получение доступа к экспериментальным данным с соблюдением прав интеллектуальной собственности.

4. Ограничение возможных предвзятостей

Описание: Необходимо избегать предвзятых подходов при моделировании, чтобы результат не искажал реальность.

Пример: Выбор параметров, которые только подтверждают нужный результат.

Заключение и перспективы

1. Основные выводы

- Компьютерное моделирование — мощный инструмент, позволяющий предсказать и объяснить химические явления.
- Модели требуют тщательной настройки, проверки и понимания их ограничений.

2. Перспективы развития

- Новые методы моделирования: Развитие более точных и комплексных моделей, включающих мультифизические процессы.
- Искусственный интеллект и машинное обучение: Применение ИИ для повышения точности и скорости расчетов.
- Синергия с экспериментом: Углубление взаимодействия с экспериментальными методами для создания гибридных моделей.

3. Важность компетентного использования

- Обучение специалистов, которые умеют правильно выбирать и интерпретировать модели, остается приоритетом для точной науки.

