

KOMPYUTERLI MODELLESTIRIW TEXNOLOGIYASIN PAYDALANIW BOYINSHA METODIKALIQ PIKIRLER

M.Eshanov – *texnika ilimleriniń kandidati, docent*

D.Sarsenbaev – *magistrant*

Ájiniyaz atındaǵı Nókis mámleketlik pedagogikalıq instituti

A.Muxiyatdinova – *magistrant*

Ózbekstan milliy universiteti

Tayanch soʻzlar: gipoteza, adekvatlik, tizim, element, parametr, xarakteristika, detallashtirish, iyerxiya, konseptual, approksiyamasiya.

Ключевые слова: гипотеза, адекватность, система, элемент, параметр, характеристика, детализация, иерархия, концептуаль, аппроксимация.

Key words: hypothesis, adequacy, system, element, parameter, characteristic, detalization, hierarchy, conceptual, approximation.

Informaciyalıq texnologiyanın házirgi rawajlanıw dáwiri kompyuterli modellestiriw (KM) texnologiyasın qollanıw hám izertlew boyınsha hárqıylı pikirlerdiń payda bolıwına sebep bolmaqta. KM texnologiyasında tiykarınan tómendegi jumıslar ámelge asırıladı: konceptwal (abstrakt) modeldi jaratıw; stratifikaciyalaw (detallashtırıw); lokallashtırıw; modeldiń strukturasını qalıplestiriw; fakt maǵlıwmatlardı toplaw; maǵlıwmatlardı determinlestitiw; bólistiriw nızamların tańlaw; funkciyalardı approksiyamaciyalaw; gipotezalardı rawajlandırıw; matematikalıq modeldi dúziw; modellestiriw usılın hám quralın tańlaw; modeldiń adekvatlıǵın tekseriw; modeldi sazlaw; model menen tájiriye ótkeriwdi jobalastırıw; modellestiriw nátiyjelerin analiz etiw; modeldi ámelde qollanıw [4-7]. Usı jumslardıń dáslepki basqışların [8] maqalada talqıladıq, al qalǵn basqışların usı maqalada [8] maqalanıń dawamı sıpatında qaravmız.

Matematikalıq modeldi islep shıǵıwdıń maqseti: sistemanıń strukturasını hám islew principin anıqlaw, formalastırıw hám xarakteristikallaw; sistemanı analitik izertlew ushın islew processin sáwlelendiriw bolıp esaplanadı. Sistemalar hár qıylı túrlerde bolǵanlıqtan matematikalıq modellerdi jaratıwdıń ulıwmalastırılǵan usılı joq. Sondav bolsa da biz modellerdi islep shıǵıwdıń bazı bir usılların atap ótemiz. Konceptual model hám dáslepki ólshemli maǵlıwmatlar matematikalıq modeldi islep shıǵıw ushın tiykar boladı.

Sistemalar (obe'ktler) tómendegi túrlerge bólinedi: statikalıq hám dinamikalıq; strukturalı vaması programmalıq basqarılatuǵın; waqıtǵa bavlansılı ózgermevtuǵın vaması ózgermeli. Kiris tásirleri hám ishki xarakterı boyınsha tómendegi túrlerge bólinedi: úzliksiz hám úzlikli; sıızılı hám sıızılı emes; stacionar hám stacionar emes; determinlengen hám stoxastikalıq. Sistemalar belgili bir sapaları boyınsha formal sxemaları vaması matematikalıq usılları islep shıǵılǵan bolıwı múmkin. Bul sxemalar járdeminde sistemalarđıń islew procesin táriplew múmkin, gevpara jaǵdavlarda bolsa analitik nátiyvelerdi qollanıwdı ámelge asırıw múmkin. Sistemalarđıń islew processinde formal qurallar sıpatında belgili tiller hám imitaciyalıq modellestiriw sistemaları misal bola aladı. Bular: bólek - sıızılı agregatlar; stoxastikalıq tarmaqlar; ǵalabalıq xızmet kórsetiw sistemaları; úzliksiz determinlengen sistemalar; avtomatlar.

Modellestiriw usılın tańlaw. Analitikalıq modelleri islep shıǵılǵan sistemanı hár qıylı analitik vaması imitaciyalıq usıllar menen ámelde qollanıw múmkin. Analiz etiwdiń analitik usılları járdeminde modeldi tolıq izertlew múmkin. Gevpara jaǵdavlarda analitik modeler optimallashtırıwdıń matematikalıq usıllarınan paydalanıw imkánıyatın beredi. Analitik usıllardı paydalanıw ushın matematikalıq modeldi óz ara analitikalıq bavlansılar kórinisine keltiriw gerek, bunda sistema parametrleri hám sırtqı tásirler menen onıń xarakteristikaları arasındaǵı bavlansılar anıq analitikalıq kóriniste bolıwı gerek. Biraq bul iudá ápiwawı sistemalar ushın islep shıǵılıwı múmkin. Analitik usıllardı quramalı sistemalarǵa paydalanıw ushın faktorlardıń anıqlıq dáreiesi joqarı bolıwı gerek. Sol sebepli analitik usıllar sistemanı baslanǵısh iuwıq baxalaw processinde isletiledi. Sebebi bunda sistemanıń anıq modeli

ushın informacıva ietispewshiligi bolıwı múmkin. Kóplegen jaǵdavlarda quramalı sistemalarǵı parallel processlerdi analiz etiw ushın paydalanıw múmkin. Gevpara modellerde másele anıq matematikalıq usıllar menen analitik sheshilmewi múmkin. Olardı izertlew ushın sanlı usıllardan paydalanamız. Bundav usıllar matematikalıq modeli teńlemeler sisteması kórinisindegi sistemalarǵa qollanıladı hám olardı sheshiwge sanlı usıllar qollanıladı.

Imitaciyalıq usıllar. Imitaciyalıq modellestiriw sistemalarıda izertlewdiń universal usılı bolıp, olardıń xarakteristikaların baxalaw imkánıyatın beredi. Bul usılda sistema - originaldıń dinamikalıq processleri abstrakt modeldegi processler menen almasırladı. Biraq bul almasırtıwdaǵı ayırım ámeller muǵdarı hám waqıt izbe-izlikleri arasındaǵı bavlansılar sistema originaldaǵı bavlansılarǵa sávkess keliwı kerek. Sol sebepli imitaciyalıq modellestiriw usılı algoritmik vaması operacion modellestiriw dep atalıwı múmkin. Imitaciyalaw processinde (original menen táiriwbe ótkeriw sıyaqlı) ayırım hádiwselelerdi hám jaǵdavlardı vaması shıǵıw tásirlerin ólshew menen sistemanıń xarakteristikalarınıń sapasın esaplaw imkánıyatın beredi. Imitaciyalıq modellestiriwde bolıp atırǵan processlerdi detallashtırıw arqalı úyreniw hám izertlew imkánıyatı bar. Esaplaw texnikası imkánshiliklerinen paydalanılıp, sistemanıń basqarıw algoritmin jáne onıń islewin sınap kóriw múmkin. Analitik usılda izertlewshi modellerdi imitaciyalıq usıllar járdeminde analiz etiliwı múmkin. Bunıń nátiyvesinde modellestiriwde quramalı sistemalarıda izertlew tiykarǵı usıllardan biri bolıp tabıladı.

Modellestiriw quralların tańlaw. Modellestiriw usılı tańlap alıńǵannan kevin esaplaw texnikası járdeminde modeldi izertlew ushın texnikalıq hám programmalıq qurallar tańlanadı. Programmalıq qurallar sıpatında proceduraǵa vaması mashqalaǵa mólsherlengen algoritmik tiller tańlap alınıadı, avtomatlastırılǵan sistemalarından da paydalanıwǵa boladı. Modellerdi izertlew ushın universal vaması qanıgelestirilgen esaplaw sistemalarınan paydalanıw múmkin. Universal esaplaw sistemaları járdeminde analitikalıq modellestiriwdi ámelge asırıw ushın texnikalıq qurallarǵa avırısha talaplar qoyılmavdı. Al imitaciyalıq modellestiriwde paydalanılatuǵın universal esaplaw sistemalarına qoyılatuǵın talaplar úlken kólemde operativ xarakterde boladı. Sebebi, táiriwbe ótkeriwde element parametrlerine tınımsız qatnas jasaladı. Sonlıqtan olardıń hámmesi operativ vadtı saqlanıwı múmkin. Hár bir táiriwbe statikalıq modellestiriwde belgili mashına waqtın ıvelevdi, sonlıqtan modellestiriw procesi ushın joqarı ónimdarlıqqa iye bolǵan esaplaw texnikasınan paydalanıw gerek.

Algoritmik tiller. Programmalıq modeller jaratıw ushın joqarı dárejeli universal proceduraǵa mólsherlengen algoritmik tillerdi paydalanıw gerek. esaplaw sistemaların imitaciyalıq modellestiriw ushın algoritmik tillerden paydalanamız. Ulıwmalıq maqsetke mólsherlengen tillerde imitaciyalıq modellerdi jaratıwda maǵlıwmatlardı qayta islew máselelerinde programmalastırıwǵa tán bolmaǵan bir qatar qıvınshılıqlar boladı. Bul qıvınshılıqlar imitaciyalıq modellestiriwde algoritmlarǵe tán bolǵan eki qásiyetke baylanıslı.

Birinshi: quramalı sistemalarıda process parallel algoritmlardan ibarat bolıp, hár bir waqıt momentinde birden

artıq bolǵan ózgerislerler qatnasadı. Parallel algoritmlerdi programmalaştırıw qıyınshılıqlarınıń sebebi algoritmlik tiller tivkarınan izbe-iz processlerdi jazıwǵa mólsherlengen. Joqarı dáreiedegi tillerde parallel processlerdi programmalıq imitaciya etiw psevdoparallellikti shólkemlestiriwdi talap etedi. Al bul programmalaştırıw tarawında quramalı másele bolıp tabıladı.

Ekinshi: modellestiriw processinde kólemli, aprior baxalanıwı qıyın bolǵan maǵlıwmatlardı qayta islew talap etiledi. Bul process imitacialıq modellerdiń dinamikalıq xarakterge iye ekenliginen kelip shıǵıp, sistemadaǵı ulıwmalıq processlerdi úyreniwdi talap etedi. Bunday algoritmlerdi programmalaştırıwda tivkarǵı itibar operativ yadtı dinamikalıq bólistiriwge qaratılǵan boladı.

Modellestiriw tilleri. Imitacialıq modellestiriwde keń klasstaǵı modellerge tán bolǵan máseleler payda boladı. Bunda psevdoparallel algoritmlerdiń orınlanıwı shólkemlestiriledi, vad dinamikalıq bólistiriledi, model waqıtı menen ámeler orınlanadı, tosınnanlı processler imitaciya etiledi hám basqa operaciylar ádettegidev orınlanadı. Máselelerdiń sheshimin tabıw hám izertlew ushın arawlı problemalıq qurallar (programmalıq sistemalar). waǵnıv modellestiriw tilleri bar. Házirgi dáwirde 500 den artıq modellestiriw tilleri belgili. Mashinada modellerdi jaratıw procesin ápiwayılaştırıw hám tezlestiriw háreketi imitacialıq modellerdi programma-aştırıwdıń avtomatlastırılǵan sistemalarına alıp keledi. Izertlewshiniń miynetin ieñillestiretuǵın nárses avtomatlastırılǵan programmalıq qurallar bolıp esaplanadı. Programma avtomat túrde qandayda bir formal sxema tivkarında jaratıladı. Formal sxema izertlewshi tárepinen beriledi. Bul sistema prametrleri, sırtqı tásirler hám islew xarakterine bqlanışlı islep shıǵıladı. Mashinada ótkerilgen tájirivbe nátiweleri tivkarında shıǵıw maǵlıwmatları esaplanadı hám baspaǵa shıǵarıladı, qosımsha alınǵan nátiweler bolsa, olar izertlewshi kórsetpesi boyınsha alınıadı. Bunday sistemalar avtomatlastırılǵan universal imitacialıq modeller yamasa imitacialıq programmalar generatori dep ataladı. Modellestiriwdiń programmalıq hám texnikalıq quralları bir neshe kriterivalardı esapqa alǵan halda tańlap alınıadı. Bunıń zárúriy shártlerinen biri-konceptual hám matematikalıq modeldi jaratıw ushın qurallar jetkilikli hám tolıq bolıwı kerek. Modellestiriw tilin tańlaǵannan kevin programmalıq model islep shıǵıladı. Bul process tómendegilerdi óz ishine aladı: algoritmdı islep shıǵıw, kiris maǵlıwmatların formallastırıw, programmanı dúziw hám tekseriw. Bul júdá za'ru'rli kóp miynet talap etiwshi process bolıp, basqa programmalaştırıw jumslarınan ózgeshe boladı.

Adekvatlıqdı tekseriw hám modeldi sazlaw. Modeldiń sistemaǵa adekvatlıǵın tekseriw izertlenip atırǵan sistema menen modeldiń ólshemleriniń sáykesligin hám sistemaǵa teń baxalıǵın analiz etiwden ibarat. Biraq model sistemanı tolıq sáwlelendiriwı shárt emes, sebebi onı jaratıw bizge kerek bolmay qaladı. Adekvatlıq sırtqı sharavatlardı hám islew rejimlerin ózertirgende bazibir tosınnanlı faktorlardı esapqa almaw sebepli ózgeredi. Sırtqı ortalıqtıń tásirleri sistemanıń strukturasındaǵı geypara anıqsızlıqlar, apprakcimaciya, inerpolicaciya hám gipotezalar model menen sistema arasındaǵı sáykesliktiń azayıwına alıp keledi. Joqarıda avtıp ótilgen faktorlar sebepli modellestiriw nátiweleri reallıqtan azǵana bolsa da ózgeshe boladı. Original xarakteristika γ_n menen model xarakteristikası γ_m arasında parq boladı. Olar bir-birine iacın bolsa model sistema-original menen adekvat dep ataladı, eger ózgeris ruxsat berilgen itimallıqtan úlken bolsa, bul kriteriyanı ámelivatta pıdalanıw geypara sebeplerge baylanışlı qıyınshılıqlarǵa alıp keledi. Modeldiń adekvatlıǵı tekserilmese modellestiriw nátiweleri tivkarında naduris sheshimler alınıwı mümkün. Ámeliyatta adekvatlıqtı baxalaw eks-

pertler analizi bovinsha ámelge asırıladı. Adekvatlıqtı tekseriwdiń tómendegi túrleri bar:

- elementler modelin tekseriw;
- sırtqı tásirlerdi tekseriw;
- sistemanıń konceptual modelin tekseriw;
- formal hám matematikalıq modelin tekseriw;
- shıǵıs xarakteristikasınıń ólshew hám esaplaw usılların tekseriw;
- dasturiy modeldi tekseriw.

Modeldi sazlaw. Adekvatlıqdı tekseriw nátiweleri bovinsha model menen sistema - original arasındaǵı parq úlken bolsa, modeldi sazlaw zárúr boladı. Bunda golabal, lokal hám parametrik ózgerisler kiritiliwı mümkün. Golabal ózgerislerde konceptual yamasa matematikalıq modeldegi qátelikler anıqlanadı. Bunday qáteliklerdi saplastırıw jańa modeldi islep shıǵıwǵa alıp keledi. Lokal ózgerisler bolsa geypara parametrlardi anıqlaw yamasa algoritmlerdi ózgeritiw menen baylanışlı. Parametrik ózgerislerler-modeldegi geypara arawlı parametrlardi ózgeritiw degendi ańlatadı.

Model menen tájirivbe ótkeriw. Strategiyalıq ioba. Islep shıǵılǵan modeldi izertlew arqalı modellestiriw maqsetine erisedi. Izertlewde tájirivbe ótkeriw nátiwesinde modeldiń parametrleriniń hár qıvlı baxaları ushın sistemanıń shıǵıw xarakteristikaları anıqlanadı. Tájirivbelerdi ótkeriw belgili ioba tivkarında alıp barıladı. Basqarılatuǵın ózgeriwshilerdiń hár biri ushın ótkerilgen tájirivbeler baxalanadı. Máselen basqarılatuǵın parametrlar sanı 5 bolsa, hár bir parametr 3 tájirivbeden baxaǵa iye bolsa, tájirivbeler sanı 243 ge teń boladı. Esaplaw hám waqıt resursları shegaralanǵan halda mümkün bolǵan barlıq tájirivbelerdi ótkeriw mümkün emes. Demek parametrlardiń belgili bir toparın tańlaw hám tájirivbeler sanın qısartıw máselesi payda boladı. Bul process **strategiyalıq joybarlaw** dep ataladı.

Taktikalıq ioba. Imitacialıq modellestiriwdiń nátiwelerin statistikalıq isenimliliǵı támiyinlengen halda tájirivbe ótkeriw waqtın kemeytiw usılları taktikalıq ioybarlaw dep ataladı. Tájirivbede alınǵan maǵlıwmatlar waqıt bovinsha qaraladı, waǵnıv bul belgili bir xarakteristikalarǵı ólshew nátiweleri bolıp tabıladı. Xarakteristikalarǵı ólshew qatarın qandavda bir stoxastik izbe-izlilikten alınǵan shamalar sıpatında qaraw mümkün. Eger bul izbe-izlik stoxastikalıq bolsa, onıń ortasha ma'nisi waqıtqa baylanışlı bolmaydı. Al stacionar iaǵdavda onıń baxası waqıt qatarınıń ortasha ma'nisine teń boladı.

Modellestiriw nátiwelerin analiz etiw. Imitacialıq tájirivbe nátiwelerin qayta islew. Statistikalıq modellestiriwde imitacialıq tájirivbe ótkeriwde hár bir shıǵıw xarakteristikası baxaları ólshenedi. Bul tańlap alıw nátiwelerin keleside analiz etiw hám qollanıw ushın isletiledi. Shıǵıw xarakteristikaları kóbinese tosınnanlı shamalar yamasa funkciyalar bolǵanlıǵı ushın olar matematikalıq kútiliw, dispersiya hám korrelvacion momentlerdi esaplaw ushın isletiledi. Stoxastik xarakteristikalar ushın salıstırmalı chastotalar gistogrammasın waǵnıv bólistiriwdiń empirik tiǵızlıǵın qaraw mümkün. Xarakteristikalar mümkün bolǵan baxalar oblastında intervallarǵa bólinedi. Tájirivbe waqtında ólshemler nátiwesinde xarakteristikalar hár bir intervalda anıqlanadı hám barlıq ólshewler sanı esaplanadı. Tájirivbe tawsılǵannan kevin hár bir interval ushın xarakteristika sanlarınń ólshewlerdiń ulıwma sanına hám interval uzınlıǵına qatnası esaplanadı. Dúzilgen gistogramma ushın qandavda bir bólistiriliw nizamlıǵın tańlap alıw mümkün.

Xarakteristikalarınń sistema parametrlerine baylanışlıǵın anıqlaw. Statikalıq modellestiriw nátiweleri bovinsha sistema xarakteristikaların onıń parametrleri hám sırtqı tásirlerge baylanışın anıqlaw mümkün. Onıń ushın korrelvaciyalıq, dispervciyalıq hám regressiyalıq usıllardan pıdalanamız. Korrelvaciyalıq usıl járdeminde eki hám odan artıq tosınnanlı shamalar arasındaǵı baylanıştıń bar

ekenligin tabıw múmkin. Eger korrelvacıva koeficienti absolyut ma'nisi boyınsha 1 ge teń bolsa, analiz qılınıp atırǵan shamalar arasında sıızıqlı bavlınıs bar ekenin ańlatadı. Eger 0 ga teń bolsa, bavlınısıw bolmavdı. Korrelvacıva koeficientiniń aralıq baxaları sıızıqlı korrelvacıva bar ekenin ańlatadı. Dispercıvalıq analizdı shıǵıw xarakteristikaların baxalarına hár qıvly faktorlardıń salıstırmalı tásirin anıqlaw ushın paydalanıw múmkin. Bunda avırım komponentalardıń analiz qılınıp atırǵan xarakteristikaǵa tásir etiw dárejesi tuwrısında iuwmaq shıǵarıw múmkin. Eger tájiriwbedegi hámme faktorlar belgili bolsa, ol jaǵdayda xarakteristikalar hám faktorlar arasındaǵı analitik bavlınısıwdı tabıw múmkin. Onıń ushın regrecıvalıq analiz usıllarınan paydalanamız. Tabılǵan bavlınıs empirik model dep ataladı. Regrecion analizde erikli hám eriksiz ózgeriwshiler arasındaǵı sávkesslik tańlap alınadı. tájiriwbe maǵlıwmatları tiykarında tańlap alınǵan parametrlar esaplanadı hám tájiriwbe maǵlıwmatların model menen approksimaciya

etiw sapası baxalanadı. Eger sapası qanıqtırmasa, basqa bavlınıs tańlap alınadı hám procedura tákirarlanadı. Modellestiriw nátiweleri analiz etiledi, bul modeldiń parametrlarin anıqlastırıwǵa járdem beredi. Nátiwede conceptual modeldiń baslanǵısh kórinisi ózgeriwi múmkin. Bunnan xarakteristika hám parametrlar arasındaǵı funkcional bavlınısıwdı anıqlawǵa boladı hám sistemaniń analitik modeli iaratıladı.

Modellestiriw nátiwelerinen paydalanıw. Modellestiriw nátiweleri sistemaniń islew qábileti haqqında sheshim qabıllaw, eń jaqsı variantın tańlaw yamasa sistemani optimallastırıw ushın isletiledi. Biz bunnan aldınǵı usı problemaǵa bavlınısı [8] hám búgini maqalanı birgelikte qarasaq matematikalıq hám kompyuterli modellestiriw texnologiyası boyınsha derlik barlıq máselelerdi táriplegen bolamız. biraq qandav da bir ob'ekttiń haqıwıw modelin dúzgende basqa da modellestiriwshiniń ózi dúzete alatuǵın qosımsha kemshilikler payda bolıwı múmkin.

Адебиетлар

1. Цвиркун А.Д., Акинфиев В.К., Филиппов В.А. Имитационное моделирование в задачах структуры сложных систем. [Текст]: оптимизационно-имитационный подход. Отв. Ред. В.Н.Бурков – М.: «Наука», 1985. (Ин-т проблем управления).
2. Ивахненко А.Г. Моделирование сложных систем по экспериментальным данным. -М.: «Радио и связь». 1997.
3. Камилов М.М. Эргашев А.К. Математик моделлаштириш. ТАТУ. -Тошкент: 2007.
4. Математическое моделирование. Проблемы и результаты [Текст]: монография/ Отв. Ред. изд. О.М.Белоцерковский, В.А.Гушин. -М.: «Наука», 2003.
5. Методы Математического моделирования и вычислительной диагностики [Текст] : сб. трудов/Под ред. А.Н.Тихонова, А.А.Самарского. – М.: МГУ, 1990.
6. Максимей, И.В. Имитационное моделирование на ЭВМ [Текст] : Монография. /И.В.Максимей. –М.: Радио и связь, 1988.
7. Эксперимент. Модель. Теория. Москва-Берлин: «Наука» 1982. Под ред. Дж. Эндрюса и Р. Маклоуна.
8. Eshanov M.A., Ametov B., Muxiyatdinova A. Matematikalıq ha'm kompyuterli modellestiriw texnologiyası boyınsha ilimiy-metodikalıq pikirler. //“Ilm hám jámiyet” №1 2021.

РЕЗЮМЕ. Maqolada kompyuter modellastirish texnologiyalari va modellastirish jarayonida qo'llaniladigan ilmiy-uslubiy tushunchalarning dolzarbligi tahlil qilinadi.

РЕЗЮМЕ. В статье анализируется актуальность технологий компьютерного моделирования и научно-методические концепций, используемые в процессе моделирования.

SUMMARY. This article is analyzed the relevance of computer modeling technologies and scientific methodological concepts used in the modeling system.

МОДЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ ПАРАМЕТРА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ Si₂ZnS ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

М.К.Хаккулов – старший преподаватель

Белорусско-Узбекский межотраслевой институт прикладных технических квалификаций

Tayanch so'zlar: молекуляр механика усули, ярим эмпирик квант кимёвий усул, кремнийнинг зарурий тавсифларини хисоблаш, тугун, заряд холати, кластер, кремний.

Ключевые слова: метод молекулярной механики, полуэмпирический квантово-химический метод, расчеты необходимых характеристик узла, зарядовое состояние, кластер, кремний.

Key words: molecular mechanics method, semiempirical quantum chemical method, calculation of bond parameters, charge condition, cluster, silicon.

Введение. Использование квант механических расчетов для предсказания геометрического строения, энергии, термодинамических характеристик и др. для известных и предполагаемых молекул является, в настоящее время, одним из важных и быстроразвивающихся методов химических исследований. Особую ценность этот метод приобретает в случае предсказания свойств неизвестных соединений, синтез которых может являться достаточно сложной процедурой, требующей больших затрат времени и материальных ресурсов исследователей. К тому же, на современном этапе развития компьютерной техники и создания высокопроизводительных и универсальных программ для квантовой химии, существует возможность расчета химических свойств соединений с очень высокой точностью и надежностью [1-2].

Квантовая механика позволяют получить достаточно точное математическое описание любых экспериментально наблюдаемых молекулярных взаимодействий. Однако для реализации этих возможностей необходимо располагать достаточно мощными ЭВМ и достаточно точными вычислительными методами. За последние годы в этих областях был достигнут значительный прогресс. Быстрое развитие вычислительной техники и программного обеспечения наряду с разра-

боткой эффективных и точных полуэмпирических и неэмпирических (ab initio) вариантов расчетов позволили, в настоящее время, сделать квантовую химию одним из наиболее важных инструментов физико-химических исследований [3-5].

В основе современной квантовой химии лежит уравнение Шредингера для стационарных состояний. Обычно используют адиабатическое приближение (приближение Борна-Оппенгеймера), согласно которому ядра неподвижны и можно решать уравнения только для движения электронов. Однако даже в этом случае точно решить уравнение Шредингера можно только для одноэлектронных систем. Поэтому в квантовомеханических расчетах используют различные приближенные методы, наиболее распространенным из которых является метод самосогласованного поля (ССП) или метод Хартри-Фока. Для систем, подобных водородному атому, возможно точное аналитическое решение уравнения Шредингера. Для систем с малым количеством электронов, типа гелия, “многоэлектронная” проблема может быть решена более или менее точно (в настоящее время нерелятивистская энергия стандартного состояния гелия известна с точностью до пятнадцатого знака). В общем случае - электронные системы нельзя