

化学中的数学方法课程建设探索

石文^{1,2,*}, 姜久兴^{1,2,*}

¹中山大学化学学院, 广州 510006

²中山大学绿色化学与分子工程研究院, 广州 510006

摘要: 当今化学研究的范式转移、多学科的交叉互融以及数字化、信息化、智能化技术的突飞猛进, 使得现代数学方法已经成为化学科学中实验工具、计算工具和知识信息的重要载体。而且, 在新形势下, 夯实化学背景学生的数学基础也高度契合面向国家战略的基础学科拔尖型、创新型人才的培养。化学中的数学方法是中山大学化学学院自2022年秋季学期新开设的面向化学类强基和拔尖计划二年级本科生的专业课程。结合化学专业学生的知识结构特点, 制定了教学内容, 并探索教学方式。学生的学习情况和反馈反映了他们对这门课程的兴趣及相关知识的掌握程度, 但同时也凸显了提升化学专业学生的基本数学能力的迫切性。此外, 我们也结合该课程开设以来遇到的问题, 提出了进一步优化和改进的方案。

关键词: 化学; 数学方法; 课程建设

中图分类号: G64; O6

Explorations in the Course Construction of Mathematical Techniques in Chemistry

Wen Shi^{1,2,*}, Jiuxing Jiang^{1,2,*}

¹ School of Chemistry, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510006, China.

² Institute of Green Chemistry and Molecular Engineering, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510006, China.

Abstract: Nowadays, the paradigm shift in chemical research, interdisciplinary integration, and the rapid advancement of digitalization, informatization, and intelligent technologies have made modern mathematical techniques essential tools for experimentation, computation, and information in the field of chemistry. Strengthening the mathematical foundation of students with a chemistry background is particularly relevant for cultivating top-notch and innovative talents in basic disciplines aligned with national strategic goals. The course "Mathematical Techniques in Chemistry", introduced by the School of Chemistry at Sun Yat-Sen University in September 2022, targets second-year undergraduates in the Chemical Strong Foundation Program and the Chemical Excellence Program. Based on the knowledge structure characteristics of chemistry students, we developed the course content and explored various teaching methods. Students' feedback indicates a strong interest in the course and a desire to master the relevant knowledge, while also highlighting the urgent need to improve basic mathematical skills. Furthermore, we propose plans for further optimization and improvement based on the challenges encountered since the course's inception.

Key Words: Chemistry; Mathematical techniques; Course construction

收稿: 2024-08-20; 录用: 2024-10-22; 网络发表: 2025-02-28

*通讯作者, Emails: shiw59@mail.sysu.edu.cn (石文); jiangjiux@mail.sysu.edu.cn (姜久兴)

基金资助: 中山大学教学质量工程入库建设项目

1 开设化学中的数学方法课程的必要性

现代化学科学是在原子或分子水平上, 研究物质的结构-性质关系、物质的变化规律等的学科, 从而指导人类合理地利用和改造物质。从化学学科的发展角度看, 著名化学家Löwdin教授曾强调, 基础研究就是研究物质理论的数学结构。近年, 伴随多学科间的交叉互融和化学研究的范式转变, 加之数字化、信息化、智能化技术的突飞猛进, 定量地理解化学问题、理性地设计目标物质、准确地预测结构-功能关系已经成为现代化学科学中最重要的一环, 这可以帮助我们更深刻地掌握化学问题的本质和规律, 提高理性认识水平, 加速新化合物和材料的研发和转化, 缩短研发周期、降低研发成本。在这一过程中, 数学则扮演了至关重要的作用(图1)。



图1 数学在化学科学中的应用

从面向国家战略的人才培养的角度看, 基础学科拔尖型、创新型人才的培养是推动国家科技创新、产业转型升级、支撑新质生产力不断发展、实现高水平科技自立自强的不竭动力。例如, 教育部在2020年起开展“强基计划”, 旨在选拔和培养有志于服务国家重大战略需求且基础学科拔尖的学生, 聚焦关键领域。数学在现代化学科学中的重要作用, 促使学生在学习和开展相关研究过程中需要掌握更多的现代数学知识和方法, 促使学生在利用和开发多种多样的新型数智化工具解决化学问题时, 理解背后的运作机制。因此, 在新形势下, 夯实化学背景学生的数学基础也高度契合新时代高质量人才培养需求。

然而, 化学专业的学生本科修读的数学类课程较有限, 大多数仅在大一学习高等数学课程, 然而, 在今天诸如线性代数、概率统计等现代数学知识的重要性已经远远超过高等数学中主要涉及的微积分。这为学生学习、理解和掌握现代数字化、信息化和智能化技术解决化学问题的方法带来了挑战。为此, 中山大学化学学院自2022年秋季学期新开设了面向化学类强基和拔尖计划二年级本科生的专业选修课程——化学中的数学方法。我们开设该课程的核心目标就是通过讲授在现代化学科学中最基本、最关键的现代数学方法, 使学生掌握这些基本数学原理、性质及在化学中的应用, 培养学生的数学逻辑推演和推导能力, 使学生学会运用数学思想描述、理解和解决化学问题, 为学生今后学习和从事化学及相关领域的科学研究打下坚实基础, 以基础学科拔尖型、创新型人才的培养赋能新质生产力发展。

2 化学中的数学方法课程介绍

2.1 课程基本情况和考核方式

化学中的数学方法课程2学分, 总计36学时, 其中包括34学时的教师讲授和2学时的学生小组汇

报,共18周完成全部教学内容。该课程的总成绩评定方式为期末考试成绩占总成绩的60%,平时成绩占总成绩的40%。其中期末闭卷考试考查全学期内容,题型为5道单项选择题、5道填空题和4道综合计算推导题,重视数学逻辑推演和推导能力。平时成绩包括5%课堂考勤、10%日常作业和25%学生课堂展示。

2.2 课程的主要内容

化学中的数学方法课程分五个教学章节,包括特殊函数、复数、数学算子、线性代数基础和概率统计基础(表1)。

表1 化学中的数学方法课程教学章节和主要教学内容

章节	主要内容	学时
特殊函数	周期函数、 δ 函数、Gaussian函数、Dirichlet函数	2
复数	复数和复数函数的运算、复数平面、复数的表示	2
数学算子	算子和算子函数的性质和运算、梯度算子、Laplace算子、算子的坐标变换	6
线性代数基础	线性方程组及其解、初等行变换、消元法、矩阵的性质及运算、初等矩阵、矩阵分解、分块矩阵、行列式的性质和运算、矩阵方程及其解、向量空间、基和基变换、行空间和列空间、线性变换	16
概率统计基础	随机变量及其分布、随机变量的数字特征、正态分布、Monte Carlo方法	8

在特殊函数章节,我们重点讲授了周期函数、 δ 函数、Gaussian函数和Dirichlet函数。这些内容基本在化学专业的高等数学课程中不会出现,但却会在物理化学等专业课程中有所涉及。因此,这部分的讲授为学生掌握物理化学相关知识点打下了基础,也是化学中的数学方法课程后续章节学习的重要出发点。

复数章节侧重讲授复数和复数函数的运算、复数的几何意义和复数的表示。这些内容为学生在大二下学期结构化学课程的学习提供帮助。

数学算子是一种符号化的数学运算或规则,它可将一个作用对象变换为另一个同类型的对象。在该章节,重点讲授算子和算子函数的性质和运算、算子的坐标变换、梯度算子和Laplace算子。其中,梯度算子和Laplace算子被广泛地应用于化学和化工中的基于梯度的优化算法中。

线性代数的应用涵盖了自然科学的各个方面,尤其是在数字化和信息化技术高速发展的今天,其重要性已远超高等数学课程中所讲授的微积分。然而,大多数化学院系却并未开设线性代数课程。因此,线性代数基础成为该课程最重要的教学模块之一。这一章节重点讲授线性方程组和矩阵方程的解、矩阵的性质和运算、行列式的性质和运算、向量空间。

概率统计是研究随机现象及其规律的一门数学学科,其所涉及的基本原理已广泛应用于数据分析、建模优化和实验设计等方面。在该模块,我们着重讲授了随机变量及其分布、随机变量的数字特征、正态分布和Monte Carlo方法。

2.3 课程讲义的形成

由于化学中的数学方法是新开设课程,因此目前没有与之相对应的教材和讲义。我们广泛收集、阅读并参考与上述教学章节相对应的近年出版的国内外优秀教材,如Lay教授等的《线性代数及其应用》,最终整理、编写形成了适合本门课程的教学讲义,共计700多页。并鼓励学生在学有余力的情况下,阅读教师推荐的书籍(表2)。此外,为了充分提升学生的学习兴趣 and 满足学生的求知欲望,在各个章节我们会引申介绍个别典型算法的数值实现,如梯度下降法、最小二乘法、Monte Carlo积分法。同时也会推荐学生阅读如数值方法^[1]、MATLAB程序^[2]的相关教材。在教学过程中,我们也随时根据课程进度和学生反馈不断优化教学内容和课程讲义。

表2 化学中的数学方法课程推荐参考书目表

章节	书名	作者	出版社	出版年
特殊函数	数学物理方法	顾樵(德)	科学出版社	2021
复数	-	-	-	-
数学算子	数学物理方法	顾樵(德)	科学出版社	2021
线性代数基础	线性代数	Steven J. Leon (美)	机械工业出版社	2012
	线性代数及其应用	David C. Lay (美), 等	机械工业出版社	2020
概率统计基础	概率论与数理统计	盛骤, 等	高等教育出版社	2021

3 化学中的数学方法课程介绍

3.1 重视数学基础与化学前沿应用紧密融合

与数学相关的课程普遍具有理论性强、知识点抽象等特点,若要理解并掌握这些知识点,训练、培养严密的数学逻辑推演和推导能力是必不可少的。因此,该课程的教学重视系统知识框架的来龙去脉,重视基础知识点的数学推导,摒弃机械性的概念记忆和背诵,摒弃科普化的宽泛介绍。并通过教师课堂推导、学生课后作业训练、期末闭卷考试等方式帮助学生理解重要数学知识点。以期末考试为例,没有需要背诵的概念题目,如名词解释题、问答题等,需要数学推导的题目占比达到100%。

同时,我们也非常重视将课堂讲授的重点与相应的化学前沿应用紧密结合。例如,在讲授到梯度算子时,我们会引申介绍在化学和化工中广泛应用的基于梯度的优化算法,如最速下降法和共轭梯度法,并向学生介绍与此相关的由北京大学鄂维南院士等提出的基于深度学习构造复杂体系势能面的方法。该方法基于第一性原理分子动力学获得的数据集,经由深度神经网络训练,可以获得具有从头算精度的多体势和原子间力^[3]。在介绍这些前沿进展的同时,我们还推荐学生阅读相关文献,深化对相关概念和思想的领悟,以帮助学生将理解基本数学知识和解决实际化学问题潜移默化地建立联系。

3.2 重视以学习者为中心的参与式教学方式

为了充分激发学生学习兴趣,积极调动主动思考相关前沿科学问题的热情,我们在课程教学过程中,尝试开展了一系列以学习者为中心的参与式教学活动,如课堂互动问答、课下讨论、习题解答、复习答疑、团队调研和小组汇报展示。最后一次课堂教学安排了一次小组报告展示,汇报题目见图2。全班同学自第二次课后便可在课代表的协助下自愿分成5组,每组抽取教师准备好的5个汇报题目,待每组题目确定后,各组便可开始在小组长的协调下分工、调研、讨论、整理和准备报告。此次课堂汇报展示成绩占总成绩的25%,每组展示成绩由教师、助教和所有听众学生给,取平均分。每组汇报展示时间共计18 min,其中包含3分钟机动提问时间,教师、助教和所有听众学生均可提问,鼓励学生积极主动地参与提问和讨论。

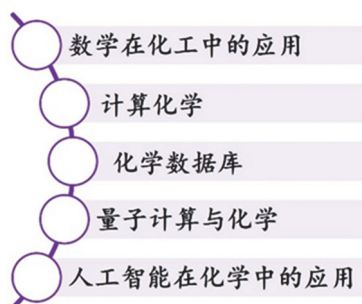


图2 小组报告展示题目

我们建议学生根据这些题目选择一个符合主题的点切入即可，并聚焦主题的知识性、学术性和科学性。在小组同学讲解到数学在化工中的应用时，在介绍到化工中的优化问题时，如怎样获得设备参数、工艺变量和经济效益、环境效益等之间的关系，学生很自然地联系起课上教师讲授的基于梯度的优化算法、Lagrange待定乘子法和在概率统计基础里讲授的Monte Carlo方法，并在汇报中简要回顾了相关知识点。在同学讲解化学数据库中的分子结构的数学表达形式时，如连接表和邻接矩阵，学生很自然地回顾起课上教师讲授的与其相关知识点，如矩阵的性质、网络和图。我们发现通过这种教学方式，学生可以更容易地掌握课上涉及的核心知识点，更深化对抽象理论知识的具象化认识，更深刻地领悟数学在化学科学中的重要作用。

3.3 重视课程思政在教学建设中的引领作用

近年，我国一大批优秀的科学家聚焦解决我国“卡脖子”难题，勇攀科技高峰，在他们身上不仅体现出上下求索的科学精神和攻坚克难的拼搏精神，更体现出矢志报国的爱国情怀。因此，在进行每一章节的教学时，穿插介绍我国科研工作者在相关领域取得的重要成就，可以有效地调动学生对科学的学习兴趣，有助于知识体系的丰富和延拓，帮助学生深化对知识点的理解，而且对学生养成高尚的人格素养，培养自强不息努力奋斗的人生态度，厚植爱国信念和建立报效国家的人生追求具有重要意义。

在讲授到复数和数学算子的性质和运算时，我们为学生介绍了与其相关的量子计算及其在化学中的应用，并重点介绍了近年来我国的科研工作者在该领域取得的重大成就。例如，2020年中国科学技术大学潘建伟院士团队成功构建了76个光子的量子计算原型机“九章”，其对算法高斯玻色采样的计算速度比当时世界最快的超算快100万亿倍，这一突破使我国成为世界第二个实现“量子优越性”的国家^[4]。

4 学生学习情况反馈、作业与成绩情况

化学中的数学方法课程自2022年秋季学期开设以来，至今已经讲授了两次，学生总体反馈情况良好。在2023年秋季学期评教得分占比学院全部课程前2.63%，占比学校全部课程前13.3%，修读该课程的25名化学类强基和拔尖计划学生参与了评教(表3)。虽然该课程是一门仅面向强基和拔尖计划学生开设的专业选修课，但从选课人数来看，两学期的选课人数均超过了强基和拔尖计划学生总人数的65%，说明了学生对学习该门课程、夯实数学基础具有较高兴趣。尽管在实际教学中已充分考虑了化学专业学生数学基础薄弱的特点，并机动删减了部分较难的教学内容，但学生依然反馈课堂讲授部分内容、课后作业和期末考试难度较大，这凸显了培养和提升化学专业学生的基本数学能力，以适应现代化学科学发展的必要性和紧迫性。此外，从学生的成绩情况也可以反映出数学能力有待提升(图3)。以期末考试成绩为例，虽然修读该课程的学生均为强基和拔尖计划学生，但2022和2023年秋季学期学生的期末成绩的均值分别为79分和78分，分数达到90分以上的学生分别仅为4人和2人。

由于该课程是新开设课程，至今讲授了两次，并且在开设课程前我们并不确定化学背景的学生学习该课程的兴趣，以及其背景是否能够适应该课程中所涉及到的知识点和教学内容，因此先向强基和拔尖计划学生开设，以作为对该门课程建设的尝试和探索。今后，随着我们教学实践的不断深入，对教学内容和方式的不断优化，并考虑学生的学习兴趣 and 接受程度，可以考虑面向全部化学专业二年级本科生开放选课。

表3 化学中的数学方法课程学生评教情况。

学期	选课人数	强基和拔尖计划学生总人数	评教得分	院系课程百分比/%	全校课程百分比/%
2022年秋季学期	31	31	97.30	51.88	71.91
2023年秋季学期	25	38	99.29	2.63	13.3

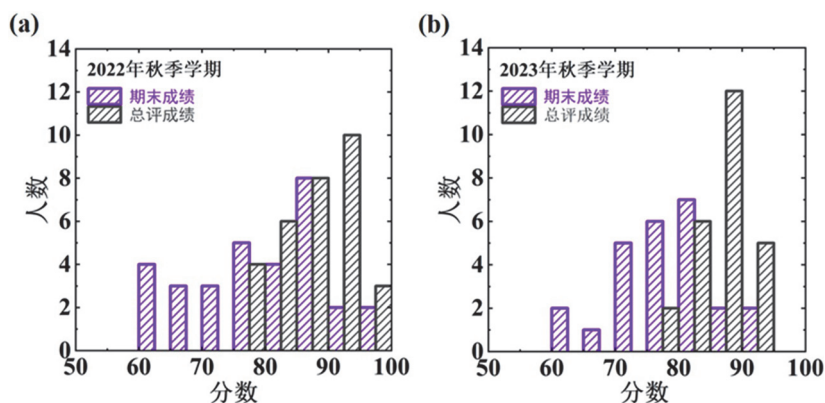


图3 化学中的数学方法课程学生期末成绩和总评成绩情况

5 总结与展望

为适应现代化学科学数字化、信息化、智能化的发展趋势，使学生掌握其中最基本、最关键的现代数学方法，并学会运用数学思想描述、理解和解决化学问题，中山大学化学学院自2022年秋季学期新开设了面向化学类强基和拔尖计划二年级本科生的专业课程——化学中的数学方法。我们结合化学专业学生的特点，制定教学内容，并探索不同教学方式。学生反馈表明了学习该门课程的兴趣，但同时也显示出提升化学专业学生基本数学能力的紧迫性。

在教学实践中，我们也不可避免地遇到了一些问题。如有限的学时容量与丰富的课程内容的矛盾。由于许多知识点间的衔接紧密，这使得我们在教学中讲授这些知识点时，很难做出取舍，再加上化学背景学生接受这些新数学知识的能力的不确定性和差异性，使得课堂教学的详略安排难以把控。针对这一点，我们拟进一步在实际教学中优化教学内容和容量，并尝试增加课堂与学生的提问互动，增加课后作业反馈环节，以更全面清楚地了解学生的学习掌握情况。

此外，也存在学生学习数学方法原理与实践应用的矛盾。如有学生在学习了相关知识点后，并不清楚这些数学方法在实践中可以运用于何处。因此，该课程拟在今后针对每个教学模块中最具代表性的数学方法，尝试引入科学计算技术(如数值算法和程序实现)，教授学生探索解决化学科学中的数据分析、建模优化等基本问题。比如在讲授完矩阵代数章节，可以尝试教授学生编写基于线性最小二乘拟合的优化算法的程序，以教会学生在处理数据分析问题时，如何最小化预测数据与实际数据，以达到全局最优的目标。

参 考 文 献

- [1] Greenbaum, A.; Chartier, T. P. 数值方法: 设计、分析和算法实现. 北京: 机械工业出版社, 2021.
- [2] 胡晓冬, 董辰辉. MATLAB: 从入门到精通. 北京: 人民邮电出版社, 2024.
- [3] Zhang, L. F.; Han, J. Q.; Wan, H.; Car, R.; E, W. N. *Phys. Rev. Lett.* **2018**, *120*, 143001.
- [4] Zhong, H.-S.; Wang, H.; Deng, Y.-H.; Chen, M.-C.; Peng, L.-C.; Luo, Y.-H.; Qin, J.; Wu, D.; Ding, X.; Hu, Y.; *et al. Science* **2020**, *370* (6523), 1460.