

Литература

1. Ланкин, Ю. П. Основы теории моделирования разнообразия экосистем биосферы на основе фундаментальных свойств живых систем / Ю. П. Ланкин, Н. С. Иванова, Т. Ф. Басканова // Современные проблемы науки и образования. – 2012. – №1; URL: <https://science-education.ru/ru/article/view?id=5144> (дата обращения: 04.02.2024).
2. Иванова, Н. С. Модель восстановительно-возрастной динамики лесов Зауральской холмисто-предгорной провинции / Н. С. Иванова, Г. П. Быстрой, С. А. Охотников, Е. С. Золотова // Современные проблемы науки и образования. – 2011. – №4; URL: <http://www.science-education.ru/98-4754> (дата обращения: 05.10.2011).

ДУЭТ «ВЫСШАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА» В УНИВЕРСИТЕТСКОЙ ПОДГОТОВКЕ СТУДЕНТОВ ХИМИКОВ Мартон М.В.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Для многих очевидно, что сегодня деятельность будущего химика немыслима без использования компьютера, применения основ информационных технологий и математической базы. В сегодняшних условиях глобальной информатизации общества конкурентоспособность выпускников современного вуза в значительной степени определяется их уровнем владения информационными технологиями и компьютерными средствами при решении профессиональных задач. Анализ физико-химических явлений и процессов в настоящее время невозможно представить без использования математических и компьютерных моделей, применения вычислительной техники для осуществления расчетов и визуализации изучаемых объектов. Математика и основы информационных технологий сегодня неразделимы, и правильная организация учебного процесса существенно повышает эффективность изучения и понимания каждой из этих дисциплин [1, 253]. Информационные технологии для студентов химиков актуальны и интересны тем, что многие профессиональные задачи моделируются и решаются с помощью математических моделей, реализуемых с помощью прикладных программ. На курсе основы информационных технологий появляется возможность повторить и закрепить изученный материал курса высшей математики, решать математические задачи уже другими методами и способами без бумаги и ручки.

В чем состоит общая схема преподавания математики и решения математических задач?

постановка задачи (что мы хотим изучить) и математическая формулировка составляющих проблему задач;

непосредственно вычислительный этап и получение ответа в математической форме;

интерпретация ответа в реальном мире и проверка его на достоверность.

Как мы решаем эту математическую задачу? Чаще всего мы это делаем вручную. Например, решаем систему линейных алгебраических уравнений, вычисляем неопределенный интеграл или находим предел функции, строим график функции, а зачем? Ведь большинство математических задач мы можем решить с использованием компьютера. Настоящая математика — это не только вычисления! Математика гораздо шире, чем просто вычисления. Ранее была только одна возможность — вычисление вручную, но с появлением компьютерных информационных технологий все давно изменилось. Сейчас можно смело сказать, что математика освободилась от вычислений, особенно это актуально для студентов химиков. Рутинную вычислительную работу с

успехом сейчас может выполнять компьютер, что позволяет большому числу студентов получить «доступ» к математике, сделать ее более понятной и наглядной [2].

Рассмотрим конкретный практический пример нахождения оптимального решения задачи – «Задача о диете», который иллюстрирует взаимосвязь химии, высшей математики и реализуется на курсе основы информационных технологий с помощью табличного процессора MS Excel.

Задача: Для поддержания нормальной жизнедеятельности человеку ежедневно необходимо потреблять не менее 118г белков, 56г жиров, 500г углеводов, 8г минеральных солей. Количество питательных веществ, содержащихся в 1 кг каждого вида потребляемых продуктов, а также цена 1кг каждого из этих продуктов представлены в таблице (Рис.1). Составить дневной рацион, содержащий не менее минимальной суточной нормы потребности человека в необходимых питательных веществах при минимальной общей стоимости потребляемых продуктов.

Питательные вещества	Содержание, г, питательных веществ в 1 кг продуктов						
	Мясо	Рыба	Молоко	Масло	Сыр	Крупа	Картоф
Белки	180	190	30	10	260	130	21
Жиры	20	3	40	865	310	30	2
Углеводы	–	–	50	6	20	650	200
Минеральные соли	9	10	7	12	60	20	10
Цена 1 кг продуктов, р.	1,8	1,0	0,28	3,4	2,9	0,5	0,1

Рис. 1

Решение:

Шаг 1: Записываем исходные данные задачи на новом листе MS Excel.

Шаг 2: В ячейки (например, в столбец I) вводятся формулы для целевой функции и четырех ограничений (Рис. 2):

Задача о диете										
	продукты	мясо	рыба	молоко	масло	сыр	крупа	картофель		
Искомый объем										
продуктов, гр	0	0	0	0	0	0	0	0		
белки, гр	180	190	30	10	260	130	21		=СУММПРОИЗВ(B7:H7;\$B\$6:\$H\$6)	>= 118
жиры, гр	20	3	40	865	310	30	2		=СУММПРОИЗВ(B8:H8;\$B\$6:\$H\$6)	>= 56
Углеводы, гр			50	6	20	650	200		=СУММПРОИЗВ(B9:H9;\$B\$6:\$H\$6)	>= 500
Минеральные соли, гр	9	10	7	12	60	20	10		=СУММПРОИЗВ(B10:H10;\$B\$6:\$H\$6)	>= 8
Цена за 1кг продуктов, р.	1,8	1	0,28	3,4	2,9	0,5	0,1		=СУММПРОИЗВ(B11:H11;\$B6:\$H6)	→ min
									↑	
									целевая функция	

Рис.2

Шаг 3. После создания таблицы с исходными данными курсор устанавливается в ячейку (в данном примере I11), содержащую формулу для вычисления целевой функции.

Далее в меню **Данные** выбирается команда **Поиск решения**. Заполняем окно **Параметры поиска решения** (Рис.3):

Рис.3

Шаг 4. После заполнения всех полей окна «Поиск решения» нажимается кнопка **Параметры**. В этом окне можно определить параметры процесса решения: предельное время поиска решения, максимальное количество итераций, точность и т.п.

Шаг 5. Задав необходимые параметры в окне «Параметры», следует нажать на кнопку **Найти решение** для поиска решения задачи в окне «Параметры поиска решения». Если решение найдено, то на экран выводится окно с соответствующим сообщением. Выбираем **Результаты**, **Устойчивость**, **Пределы** и нажимаем **ОК**. Получаем итоговую таблицу с результатом! (Рис.4)

продукты	мясо	рыба	молоко	масло	сыр	круп	картофель			
Искомый объем продуктов, гр	0	0	0	0,033348194	0	0,905127	0			
белки, гр	180	190	30	10	260	130	21	118 >=	118	
жиры, гр	20	3	40	865	310	30	2	56 >=	56	
Углеводы, гр			50	6	20	650	200	588,5327 >=	500	
Минеральные соли, гр	9	10	7	12	60	20	10	18,50272 >=	8	
Цены за 1кг продуктов, р.	1,8	1	0,28	3,4	2,9	0,5	0,1	0,565947 →	min	
								↑	целевая функция	

Рис.4

Литература

1. Мартон, М. В. Интеграция математики и информатики для студентов гуманитарных направлений / М. В. Мартон // Методология и фил. преп. матем. и инф-ки: к 50-летию основания кафедры ОМиМ БГУ: материалы Междунар. науч.-практ. конф., Минск, 24-24 апреля 2015г. / Минск: Изд. Центр БГУ, 2015. – С. 252-255.
2. Моханова Л.Ю. Информационные технологии в современном математическом образовании // Профессиональное образование в России и зарубежом, 2017. – №4(28).
3. Коваленко, Н.С. Практикум по высшей математике для студентов химических специальностей: учеб.- метод. пособие / Н. С. Коваленко, М. Н. Василевич, В. И. Яшкин. – Минск: БГУ, 2021. – 279 с.

ПРИЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ ГРАФОВ К ЗАДАЧАМ ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ Матейко О. М., Яблонская Н. Б.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Теория графов – один из самых прикладных разделов математики. В виде графов можно изображать, например, схемы дорог и электрические цепи, географические карты и химические молекулы, отношения между разными объектами и людьми и т.д. Именно это привело к широкому использованию теории графов в физике и кибернетике, химии и биологии, экономике и других науках. При этом существует достаточно много примеров, иллюстрирующих применение теории графов в соответствующих областях знаний, и которые могут быть продемонстрированы в рамках соответствующих математических дисциплин.

Химия. В химии описание структур молекул и соединений, путей сложных реакций, правил фаз можно моделировать с помощью графов. Теория графов представляет собой математическую основу хемоинформатики (научной дисциплины на стыке химии, вычислительной математики и информатики), которая позволяет точно определить число теоретически возможных изомеров углеводородов и других органических соединений.

Одна из важных проблем в химии касается кодировки структуры химических соединений некоторым числом или набором чисел. При этом сделать кодировку надо так, чтобы этот набор чисел имел химический смысл, т.е. каждому набору чисел взаимно однозначно соответствовала бы определенная молекулярная структура. Числа, которыми кодируется структура молекулы, получили название топологических индексов.

Топологические индексы используются в компьютерной химии для решения широкого круга общих и специальных задач. К этим задачам относятся: поиск веществ с заранее заданными свойствами (поиск зависимостей типа «структура-свойство», «структура-фармакологическая активность»), первичная фильтрация структурной информации для неповторной генерации молекулярных графов заданного типа, предварительное сравнение молекулярных графов при их тестировании на изоморфизм и ряд других.

Биология. Сложные биологические системы могут быть представлены и проанализированы, как вычислимые сети. Например, экосистемы могут быть смоделированы как сети взаимодействующих видов, или белок может быть смоделирован как сеть аминокислот. Если расщеплять белок дальше, аминокислоты могут быть представлены в виде сети связанных атомов, таких, как углерод, азот и кислород. Вершины и ребра являются основными компонентами сети. Узлы представляют собой единицы в сети, в то время как ребра являются взаимодействием