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. Причем 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 бесповторной 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

между единицами. Узлы могут представлять широкий спектр биологических единиц, от отдельных организмов до отдельных нейронов в мозге.

Примерами сетей (графов) в биологии служат также пищевые цепочки, которые представляют собой связную линейную структуру из звеньев, каждое из которых связано с соседними звеньями отношениями «пища — потребитель». В качестве звеньев цепи выступают группы организмов, например, конкретные биологические виды.

Филогенетическое дерево (эволюционное дерево, дерево жизни) — дерево, отражающее эволюционные взаимосвязи между различными видами или другими сущностями, имеющими общего предка.

Укоренённое дерево — дерево, содержащее выделенную вершину — корень. Укоренённое дерево можно считать ориентированным графом, поскольку на нём имеется естественная ориентация — от корня к листьям. Каждый узел укоренённого дерева отвечает последнему общему предку нижележащих листьев дерева.

Теоретически укоренённое дерево для генов рРНК (рибосомные рибонуклеиновые кислоты), показывает общее происхождение организмов всех трёх доменов: бактерии, археи, эукариоты.

Граф де Брёйна широко применяется в биоинформатике в задачах сборки генома. Сборка генома — процесс объединения большого количества коротких фрагментов ДНК (ридов) в одну или несколько длинных последовательностей (контигов и скаффолдов) в целях восстановления последовательностей ДНК хромосом, из которых возникли эти фрагменты в процессе секвенирования.

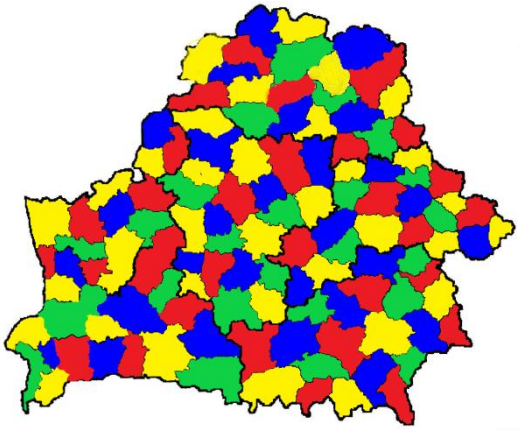
География. Графы можно использовать, изображая модели транспортных сетей, например, можно предложить студентам изобразить граф, который является моделью сети железных дорог Беларуси.

К числу самых известных задач теории графов относится «Теорема о четырёх красках» — утверждение о том, что всякую карту можно раскрасить четырьмя цветами так, чтобы любые две области, имеющие общий участок границы, были раскрашены в разные цвета.

Раскрашивая географическую карту естественно пользоваться по возможности меньшим количеством цветов, однако так, чтобы две территории, имеющие общую часть границы (не только общую точку), были окрашены по-разному. В 1852 году Фрэнсис Гутри, составляя карту графств Англии, обратил внимание, что для такой цели хватает четырёх красок. Точную формулировку гипотезы опубликовал Артур Кэли (1878). Доказать теорему долгое время не удавалось. Было предпринято множество попыток как ее доказательства, так и опровержения, поэтому задача получила название *проблемы четырёх красок*.

Теорема о четырёх красках была доказана в 1976 году К. Аппелем и В. Хакеном из Иллинойского университета. Это была первая крупная математическая теорема, доказанная с помощью компьютера. Изначально доказательство было принято не всеми математиками, поскольку его невозможно проверить вручную. В дальнейшем оно получило более широкое признание, хотя у некоторых долгое время оставались сомнения. Чтобы развеять оставшиеся сомнения, в 1997 году Робертсон, Сандерс, Сеймур и Томас опубликовали более простое доказательство, использующее аналогичные идеи, но по-прежнему проделанное с помощью компьютера. Кроме того, в 2005 году доказательство было проделано Д. Гонтиром с использованием специализированного программного обеспечения.

В качестве примера, рассмотрим карту районов Беларуси, раскрашенную с помощью четырех цветов.



Литература

1. Емеличев, В.А. Лекции по теории графов / В.А. Емеличев, О.И. Мельников, В.И. Сарванов, Р.И. Тышкевич. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. – 384 с.

2. 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.

ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ВЫСШЕЙ МАТЕМАТИКИ СТУДЕНТАМИ-БИОЛОГАМИ

Матейко О. М., Яблонская Н. Б.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Содержание математической подготовки студентов должно формироваться в соответствии с их специальностью, т.е. при рассмотрении конкретного материала математической дисциплины на первый план должна быть выдвинута идея его связи с будущей профессией.

Целесообразно, например, включать в учебный материал начальные элементы математического моделирования. Приводимые на лекциях и решаемые на практических занятиях задачи прикладного содержания должны носить обучающий характер, давать начальные практические сведения о применении математических методов в специальной области знаний. Даже простейшие задачи прикладного содержания способны привить исходные положения математической культуры и показать студентам роль и значение математики в исследованиях по их специальности. При решении данных задач на практических занятиях необходимо делать ссылки на соответствующие разделы или кратко повторять определения понятий, важных для построения математической модели.

В качестве примера математической модели, которую можно предложить при изучении высшей математики на биологическом факультете рассмотрим систему совместного существования двух популяций, которая называется системой «хищник-жертва». Считается, что популяции обитают в изолированной среде, которая обеспечивает всем необходимым только одну популяцию (жертвы). А вот особи второй популяции (хищники) питаются только особями первой популяции. В отличие от классической модели Лотки-Вольтерры, рассматривается более простая модель, доступная для понимания студентами-биологами первого курса, изучающими