**Содержание:**

|  |  |
| --- | --- |
| 1.Биография Леонарда Эйлера | Стр.2 |
| 2. Теория Графов | Стр.3-5 |
| 3.Нерешённая задача Леонарда Эйлера | Стр.6-8 |
| 4.Теория графов в химии | Стр.9-10 |
| 5.Использованная литература | Стр.11 |
|  |  |
|  |  |

|  |  |
| --- | --- |
|  | В 2007 году исполнилось 300 лет со дня рождения Леонарда Эйлера – одного из величайших математиков, работы которого оказали решающее влияние на развитие многих современных разделов математики.  Л. Эйлер был действительным членом Петербургской Академии наук, оказал большое влияние на развитие отечественной математической школы и в деле подготовки кадров ученых-математиков и педагогов в России.  Поражает своими размерами научное наследие ученого.  При жизни им опубликовано 530 книг и статей, а сейчас их известно уже более 800. |

Причем последние 12 лет своей жизни Эйлер тяжело болел, ослеп и, несмотря на тяжелый недуг, продолжал работать и творить.

Статистические подсчеты показывают, что Эйлер в среднем делал одно открытие в неделю.

Трудно найти математическую проблему, которая не была бы затронута в произведениях Эйлера.

Все математики последующих поколений так или иначе учились у Эйлера, и недаром известный французский ученый П.С. Лаплас сказал: "Читайте Эйлера, он – учитель всех нас".

Лагранж говорит: 'Если вы действительно любите математику, читайте Эйлера; изложение его сочинений отличается удивительною ясностью и точностью'. Действительно, изящество вычислений доведено у него до высшей степени. Кондорсе заключил свою речь в академии в память Эйлера следующими словами: 'Итак, Эйлер перестал жить и вычислять!' Жить, чтобы вычислять - каким это кажется скучным со стороны! Математика принято представлять себе сухим и глухим ко всему житейскому, к тому, что занимает обыкновенных людей.

С именем Эйлера, является задача о трех домиках и трех колодцах.

**ТЕОРИЯ ГРАФОВ**

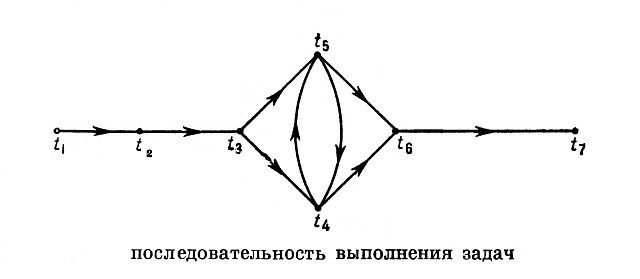
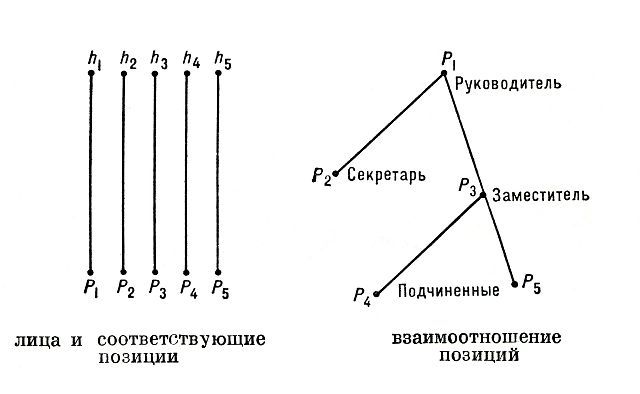
Одна из ветвей топологии. Графом называют геометрическую схему, представляющую собой систему линий, связывающих какие-то заданные точки. Точки называются вершинами, а связывающие их линии – ребрами (или дугами). Все задачи теории графов могут решаться как в графической, так и в матричной форме. В случае записи в матричной форме возможность передачи сообщения из данной вершины в другую обозначается единицей, а ее отсутствие – нулем.

Зарождение Теории Графов в 18 в. связано с математическими головоломками, но особенно сильный толчок ее развитию был дан в 19 в. и главным образом в 20 в., когда обнаружились возможности ее практических приложений: для расчета радиоэлектронных схем, решения т.н. транспортных задач и др. С 50-х гг. Теория графов все шире используется в социальной психологии и социологии.

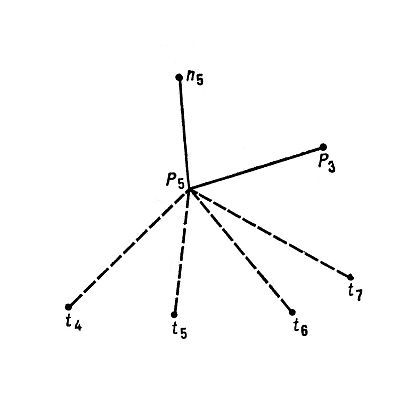
В области Теории Графов следует назвать работы Ф. Харри, Дж. Кемени, К. Фламента, Дж. Снелла, Дж. Френча, Р. Норманна, О. Ойзера, А. Бейвеласа, Р. Вейса и др. В СССР по Т. г. работают Φ. Μ. Бородкин и др.

Язык Теории графов хорошо приспособлен для анализа разного рода структур и передачи состояний. В соответствии с этим можно выделить следующие типы социологических и социально-психологических задач, решаемых с помощью Теории графов.

1. Формализация и построение общей структурной модели социального объекта на разных уровнях его сложности. Например, структурная схема организации, социограммы, сравнение систем родства в разных обществах, анализ ролевой структуры групп и т.д. Можно считать, что ролевая структура включает три компонента: лица, позиции (в упрощенном варианте - должности) и задачи, выполняемые в данной позиции. Каждая компонента может быть представлена в виде графа:



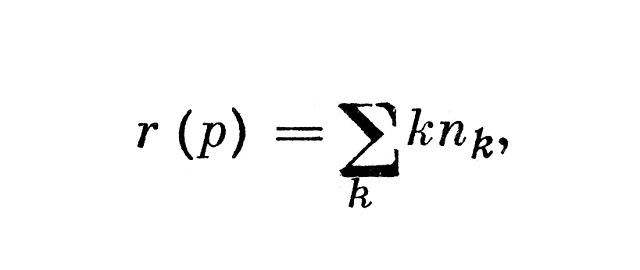
Можно совместить все три графа для всех позиций либо только для одной, и в результате мы получаем ясное представление о конкретной структуре к.-л. данной роли. Так, для роли позиции P5 имеем граф (рис.). Вплетение неформальных отношений в указанную формальную структуру значительно усложнит граф, но зато он будет более точной копией действительности.



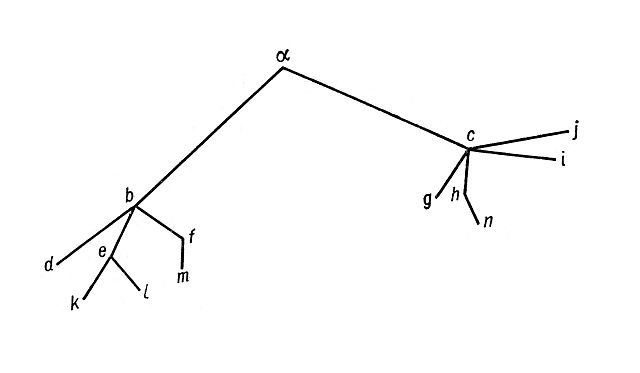
2) Анализ полученной модели, выделение в ней структурных единиц (подсистем) и изучение их связей. Таким способом могут быть выделены, напр., подсистемы в крупных организациях.

3) Изучение уровней структуры иерархических организаций: количество уровней, количество связей, идущих из одного уровня в другой и от одного лица к другому. На основании этого решаются задачи:

а) количеств. оценки веса (статуса) индивида в иерархической организации. Одним из возможных вариантов определения статуса является формула:



где r (р) - статус некоторого лица р, k - величина уровня субординации, определяемая как наименьшее количество шагов от данного лица к своему подчиненному, nk - количество лиц на данном уровне k. Напр., в организации, представленной след. графом:



вес а=1·2+2·7+3·4=28; 6=1·3+2·3=9 и т.д.

б) определение лидера группы. Лидер характеризуется обычно большей по сравнению с другими связанностью с остальными членами группы. Как и в предыдущей задаче, здесь также могут быть использованы различные способы для выделения лидера.

Наиболее простой способ дается формулой: r=Σdxy/Σdqx, т.е. частное от деления суммы всех дистанций каждого до всех других на сумму дистанций данного индивида до всех других.

4) Анализ эффективности деятельности данной системы, куда входят также такие задачи, как поиски оптимальной структуры организации, повышение сплоченности группы, анализ социальной системы с точки зрения ее устойчивости; исследование потоков информации (передачи сообщений при решении задач, влияние членов группы друг на друга в процессе сплачивания группы); при помощи Т. г. решают проблему нахождения оптимальной коммуникационной сети.

В применении к Теории графов , так же как к любому математическому аппарату, верно утверждение, что основные принципы решения задачи задаются, содержательной теорией (в данном случае социологией).

***Задача***: Три соседа имеют три общих колодца. Можно ли провести непересекающиеся дорожки от каждого дома к каждому колодцу. Дорожки не могут проходить через колодцы и домики (рис.1).

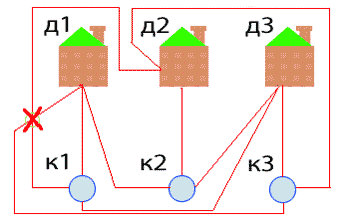


Рис. 1. К задаче о домиках и колодцах.

Для решения этой задачи воспользуемся теоремой, доказанной Эйлером в 1752 году, которая является одной из основных в теории графов. Первая работа по теории графов принадлежит Леонарду Эйлеру (1736 год), хотя термин «граф» впервые ввел в 1936 году венгерский математик Денеш Кениг. Графами были названы схемы, состоящие из точек и соединяющих эти точки отрезков прямых или кривых.

Теорема. Если многоугольник разбит на конечное число многоугольников так, что любые два многоугольника разбиения или не имеют общих точек, или имеют общие вершины, или имеют общие ребра, то имеет место равенство

**В - Р + Г = 1, (\*)**

где В - общее число вершин, Р - общее число ребер, Г - число многоугольников (граней).

Доказательство. Докажем, что равенство не изменится, если в каком-нибудь многоугольнике данного разбиения провести диагональ (рис. 2, а).

а) б)

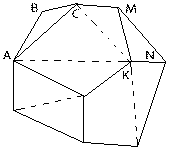
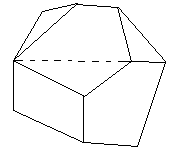


Рис.2

Действительно, после проведения такой диагонали в новом разбиении будет В вершин, Р+1 ребер и количество многоугольников увеличится на единицу. Следовательно, имеем

**В - (Р + 1) + (Г+1) = В – Р + Г.**

Пользуясь этим свойством, проведем диагонали, разбивающие входящие многоугольники на треугольники, и для полученного разбиения покажем выполнимость соотношения .

Для этого будем последовательно убирать внешние ребра, уменьшая количество треугольников. При этом возможны два случая:

для удаления треугольника ABC требуется снять два ребра, в нашем случае AB и BC;

для удаления треугольника MKN требуется снять одно ребро, в нашем случае MN.

В обоих случаях равенство не изменится. Например, в первом случае после удаления треугольника граф будет состоять из В-1 вершин, Р-2 ребер и Г-1 многоугольника:

**(В - 1) - (Р + 2) + (Г -1) = В – Р + Г.**

Таким образом, удаление одного треугольника не меняет равенства .

Продолжая этот процесс удаления треугольников, в конце концов, мы придем к разбиению, состоящему из одного треугольника. Для такого разбиения В = 3, Р = 3, Г = 1 и, следовательно,

B - Р + Г= 1.

Значит, равенство имеет место и для исходного разбиения, откуда окончательно получаем, что для данного разбиения многоугольника справедливо соотношение .

Заметим, что соотношение Эйлера не зависит от формы многоугольников. Многоугольники можно деформировать, увеличивать, уменьшать или даже искривлять их стороны, лишь бы при этом не происходило разрывов сторон. Соотношение Эйлера при этом не изменится.

*Приступим теперь к решению задачи о трех домиках и трех колодцах.*

Решение. Предположим, что это можно сделать. Отметим домики точками Д1, Д2, Д3, а колодцы - точками К1, К2, К3 (рис. 1). Каждую точку-домик соединим с каждой точкой-колодцем. Получим девять ребер, которые попарно не пересекаются.

Эти ребра образуют на плоскости многоугольник, разделенный на более мелкие многоугольники. Поэтому для этого разбиения должно выполняться соотношение Эйлера В - Р + Г= 1.

Добавим к рассматриваемым граням еще одну - внешнюю часть плоскости по отношению к многоугольнику. Тогда соотношение Эйлера примет вид В - Р + Г = 2, причем В = 6 и Р = 9.

Следовательно, Г = 5. Каждая из пяти граней имеет, по крайней мере, четыре ребра, поскольку, по условию задачи, ни одна из дорожек не должна непосредственно соединять два дома или два колодца. Так как каждое ребро лежит ровно в двух гранях, то количество ребер должно быть не меньше (5•4)/2 = 10, что противоречит условию, по которому их число равно 9.

Полученное противоречие показывает, что ответ в задаче отрицателен ***- нельзя провести непересекающиеся дорожки от каждого домика к каждому коло***

***Теория Графов в химии***

Применение теории графов на построении и анализе различных классов химических и химико-технологических графов, которые называются также топология, моделями, т.е. моделями, учитывающими только характер связи вершин. Дуги (ребра) и вершины этих графов отображают химический и химическо-технологический понятия, явления, процессы или объекты и соответственно качественной и количественной взаимосвязи либо определенные отношения между ними.

Теоретические задачи. Химические графы дают возможность прогнозировать химические превращения, пояснять сущность и систематизировать некоторые основные понятия химии: структуру, конфигурацию, конфирмации, квантовомеханическую и статистико-механическую взаимодействия молекул, изомерию и др. К химическим графам относятся молекулярные, двудольные и сигнальные графы кинетических уравнений реакций. Молекулярные графы, применяемые в стереохимии и структурной топологии, химии кластеров, полимеров и др., представляют собой неориентированные графы, отображающие строение молекул . Вершины и ребра этих графов отвечают соответствующим атомам и химическим связям между ними.

В стереохимии орг. в-в наиболее часто используют молекулярные деревья - остовные деревья молекулярных графов, которые содержат только все вершины, соответствующие атомам Составление наборов молекулярных деревьев и установление их изоморфизма позволяют определять молекулярные структуры и находить полное число изомеров алканов, алкенов и алкинов. Молекулярные графы дают возможность сводить задачи, связанные с кодированием, номенклатурой и структурными особенностями (разветвленность, цикличность и т.п.) молекул различных соединений, к анализу и сопоставлению чисто математических признаков и свойств молекулярных графов и их деревьев, а также соответствующих им матриц. Для выявления количества корреляций между строением молекул и физико-химическими (в т.ч. фармакологическими) свойствами соединений разработано более 20 т. наз. Топологических индексов молекул (Винера, Балабана, Хосойи, Плата, Рандича и др.), которые определяют с помощью матриц и числовых характеристик молекулярных деревьев. Напр., индекс Винера W = (m3 + m)/6, где т-число вершин, отвечающих атомам С, коррелирует с молекулярными объемами и рефракциями, энтальпиями образования, вязкостью, поверхностным натяжением, хроматографическими константами соединений , октановыми числами углеводородов и даже физиол. активностью лекарственных препаратов. Важными параметрами молекулярных графов, используемыми для определения таутомерных форм данного вещества и их реакционной способности, а также при классификации аминокислот, нуклеиновых кислот, углеводов и др. сложных природных соединений, являются средняя и полная (Н)информационная емкости. Анализ молекулярных графов полимеров, вершины которых отвечают мономерным звеньям, а ребра-химическими связям между ними, позволяет объяснить, например: эффекты исключенного объема, приводящие к качеств. изменениям прогнозируемых свойств полимеров. С применением Теории графов и принципов искусственного интеллекта разработано программное обеспечение информационно-поисковых систем в химии, а также автоматизированных систем идентификации молекулярных структур и рационального планирования органического синтеза. Для практической реализации на ЭВМ операций выбора рациональных путей хим. превращений на основе ретросинтетического и синтонного принципов используют многоуровневые разветвленные графы поиска вариантов решений, вершины которых соответствуют молекулярным графам реагентов и продуктов, а дуги изображают превращения.

Для решения многомерных задач анализа и оптимизации химико-технологических систем (ХТС) используют следующие химико-технологические графы : потоковые, информационно-потоковые, сигнальные и графы надежности. Для изучения в хим. физике возмущений в системах, состоящих из большого числа частиц, используют т. наз. диаграммы Фейнмана-графы, вершины которых отвечают элементарным взаимодействиям физических частиц, ребра их путям после столкновений. В частности, эти графы позволяют исследовать механизмы колебательных реакций и определять устойчивость реакционных систем.Материальные потоковые графы отображают изменения расходов в-в в ХТС.Тепловые потоковые графы отображают балансы теплоты в ХТС; вершины графов соответствуют аппаратам, в которых изменяются расходы теплоты физических потоков, и, кроме того, источникам и стокам тепловой энергии системы; дуги отвечают физическим и фиктивным (физ.-хим. превращения энергии в аппаратах) тепловым потокам, а веса дуг равны энтальпиям потоков. Материальные и тепловые графы используют для составления программ автоматизированной разработки алгоритмов решения систем уравнений материальных и тепловых балансов сложных ХТС. Информационно-потоковые графы отображают логико-информационную структуру систем уравнений мат. моделей ХТС; применяются для составления оптимальных алгоритмов расчета этих систем. Двудольный информационный граф неориентированный или ориентированный граф, вершины которого отвечают соотв. уравнениям fl -f6 и переменным q1 – V, а ветви отображают их взаимосвязь. Информационный граф – орграф, изображающий порядок решения уравнений; вершины графа отвечают этим уравнениям, источникам и приемникам информации ХТС, а ветви-информац. переменным. Сигнальные графы соответствуют линейным системам уравнений математических моделей химико-технологических процессов и систем. Графы надежности применяют для расчета различных показателей надежности Х.

*Использованная литература*:

1.Берж К., Т. г. и ее применение, перевод с французского, М., 1962;

2.Кемени Дж., Снелл Дж., Томпсон Дж., Введение в конечную математику, пер. с англ., 2 изд., М., 1963;

3.Ope О., Графы и их применение, пер. с англ., М., 1965;

4. Белых О. В., Беляев Э. В., Возможности применения Т. г. в социологии, в сб.: Человек и общество, вып. 1, [Л.], 1966;

5. Количественные методы в социологических исследованиях, М., 1966; Беляев Э. В., Проблемы социологических измерения, "ВФ", 1967, No 7; Bavelas. Communication patterns in task oriented groups, в кн. Lerner D., Lass well H., Policy sciences, Stanford, 1951;

6.Кemeny J. G., Snell J., Mathematical models in the social sciences, N. Y., 1962; Filament C., Applications of graph theory to group structure, N. Y., 1963; Оeser Ο. Α., Harаrу F., Role structures and description in terms of graph theory, в кн.: Вiddle В., Thomas E. J., Role theory: concepts and research, N. Y., 1966. Э. Беляев. Ленинград.