УДК 519.17+51-73

Э.О. Душкина, С.К. Игнатов, А.Г. Разуваев

АНАЛИЗ ИНВАРИАНТОВ В ЗАДАЧЕ РАЗДЕЛЕНИЯ НЕИЗОМОРФНЫХ ОРГРАФОВ

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Институт информационных технологий, математики и механики

Использование инвариантов орграфов в задаче разделения ориентационных стереоизомеров кластеров воды $(H_2O)_n$. Метод базируется на теории групп и состоит в построении специальных функций (инвариантов), определенных на орграфах, задающих сетку водородных связей кластера $(H_2O)_n$ Предлагаемый метод проиллюстрирован построением схемы разделения стереоизомеров в гексагональной ячейке кристаллического льда $(H_2O)_6$. Анализ инвариантов может служить перспективным методом расчета энергий кластеров $(H_2O)_n$, что является актуальной проблемой в физике и химии атмосферы.

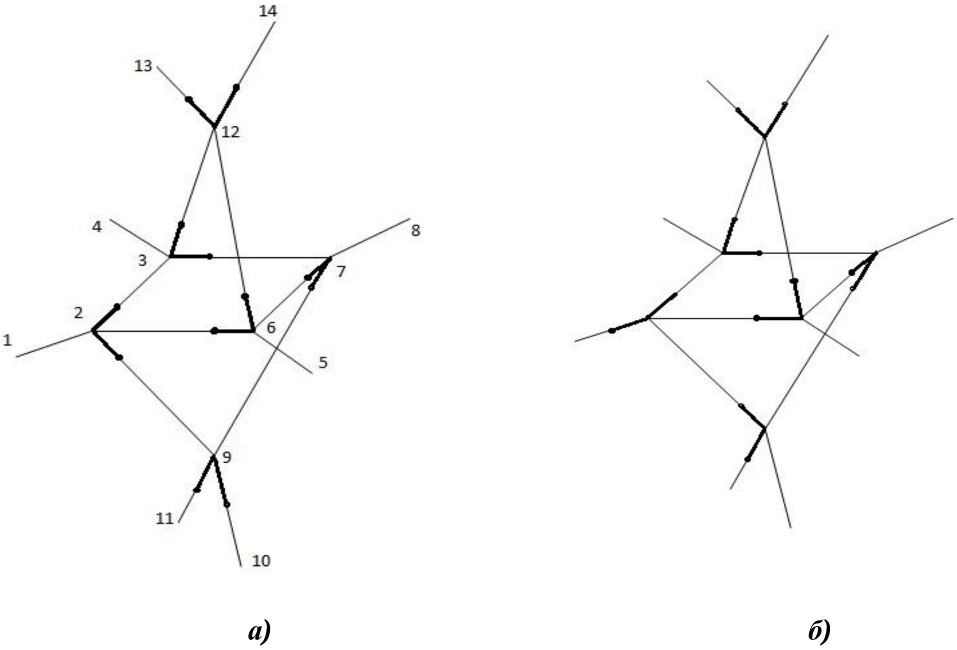
Ключевые слова: орграфы, группы симметрии, инварианты, стереоизомеры.

Введение

Работа является иллюстрацией применения теоретико-групповых методов в решении некоторых задач физики и химии атмосферы. В газовой (пары воды) или твердой фазе (лед) молекулы воды образуют кластеры $(H_2O)_n$ – структуры, где n молекул воды связаны между собой водородными связями. При данной сетке таких связей положение протонов на них может быть различным. Такие стереоизомеры обладают своими свойствами и особенностями взаимодействия с другими молекулами.

В статье на примере гексагонального кластера $(H_2O)_6$ с диэдральной группой симметрии D_4 кислородного остова показано, как введенные в [1] инварианты группы симметрии кластера могут быть использованы в задаче разделения стереоизомеров.

В данной статье рассматривается гексагональная структура кристалла льда $(H_2O)_6$, которая имеет различные ориентационные изомеры. Атомы кислорода находятся в вершинах бипирамиды, а водородные связи идут по ребрам бипирамиды (рис. 1, *а*).



а) ***б)***

Рис. 1

Направление двух атомов водорода, связанных с одним кислородным центром (кислородом) может меняться. Для кристалла льда имеет место правило *Бернала-Фаулера:* в любую вершину степени четыре входит две дуги и выходит две дуги. Для элементарной ячейки может быть другое расположение атомов водорода, также удовлетворяющие правилу Бернала-Фаулера (рис. 1, *б*). Если структуру (a) нельзя перевести поворотами и отражениями в структуру (b) (рис. 1), то, по определению это два разных ориентационных изомера.

Физико-химические свойства ориентационно различных изомеров различны, поэтому актуальной является задача подсчета числа ориентационно различных изомеров.

Поставленная задача может быть решена в рамках перечисления орграфов, построенных на данном неориентированном графе.

Пусть γ есть неориентированный граф. Всюду далее считаем, что γ – связный граф без петель и кратных ребер, число которых m. Группу $\mathrm{Aut}\gamma$ всех автоморфизмов графа γ считаем известной, и пусть $G \subset \mathrm{Aut}\gamma$ ее некоторая подгруппа. Выбор подгруппы G диктуется постановкой решаемой задачи. Например, если граф γ задает некоторую молекулярную систему, то в качестве G обычно выступает точечная группа симметрии системы, которая, как правило, является собственной подгруппой группы $\mathrm{Aut}\gamma$. Всюду далее считаем, что группа G состоит из n элементов: $G=\{g_1,...,g_n\}$.

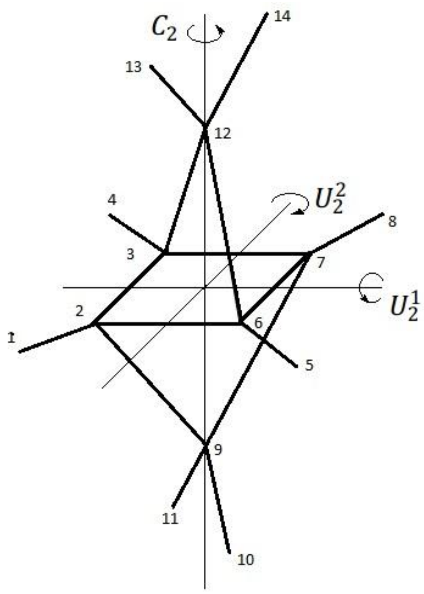


Рис. 2

Рассмотрим граф γ на рис. 2, который имеет m = 16 ребер и $\mathrm{Aut}\gamma$ – диэдральную подгруппу D_4 элементы которой есть повороты и отражения: G_2 – поворот вокруг вертикальной оси на угол π против часовой стрелки, U_2^1, U_2^2 – повороты вокруг горизонтальный осей на угол π, δ_1 и δ_2 – симметрия относительно двух вертикальных плоскостей, проходящих через вершины *2, 7* и *3, 6*, соответственно, $S_4^1 = U_2^1\delta_1$, $S_4^2 = U_2^1\delta_2$ – зеркально-поворотные оси, то есть $D_4 = \{E, C_2, U_2^1, U_2^2, \delta_1, \delta_2, S_4^1, S_4^2\}$

Элементы группы G можно задать в виде подстановок вершин графа γ:

$$E=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14\\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14\end{pmatrix};$$

$$C_2=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14\\ 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 & 9 & 11 & 10 & 12 & 14 & 13\end{pmatrix};$$

$$U_2^1=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14\\ 4 & 3 & 2 & 1 & 8 & 7 & 6 & 5 & 12 & 14 & 13 & 9 & 11 & 10\end{pmatrix};$$

$$U_2^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14 \\ 5 & 6 & 7 & 8 & 1 & 2 & 3 & 4 & 12 & 13 & 14 & 9 & 10 & 11 \end{pmatrix};$$

$$\delta_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14 \\ 1 & 2 & 6 & 5 & 4 & 3 & 7 & 8 & 9 & 11 & 10 & 12 & 13 & 14 \end{pmatrix};$$

$$\delta_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14 \\ 8 & 7 & 3 & 4 & 5 & 6 & 2 & 1 & 9 & 10 & 11 & 12 & 14 & 13 \end{pmatrix};$$

$$S_4^1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14 \\ 4 & 3 & 7 & 8 & 1 & 2 & 6 & 5 & 12 & 13 & 14 & 9 & 11 & 10 \end{pmatrix};$$

$$S_4^2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 & 14 \\ 5 & 6 & 2 & 1 & 8 & 7 & 3 & 4 & 12 & 14 & 13 & 9 & 10 & 11 \end{pmatrix}.$$

Пусть (i, j) – ребро, соединяющее i и j. Так как граф неориентированный, то $(i, j) = (j, i)$. Представление каждого $g \in G$ подстановкой вершин определяет действие G на ребра графа $g(i, j) = (g(i), g(j))$.

Каждому ребру (i, j) приписываем символ b_{ij} и ориентацию ребер на γ определяем по правилу $b_{ij} = +1$, если ориентация ребра (дуга) направлена от i к j и $b_{ij} = -1$ в противном случае. Очевидно $b_{ij} = -b_{ji}$. Все m дуг b_{ij}, где $i < j$, выбранных в любой последовательности, будем обозначать $X_1, \ldots, X_m$.

Зададим на γ некоторую фиксированную ориентацию ребер (рис. 3), удовлетворяющую правилу Бернала-Фаулера.

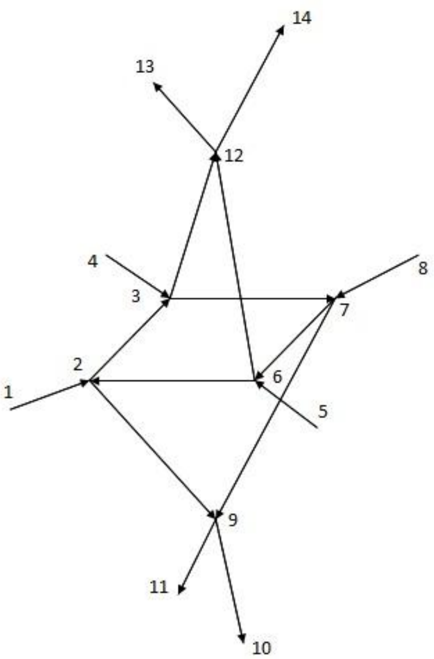


Рис. 3

Для нашего примера зададим ориентацию: $X_1 = b_{23}$, $X_2 = b_{37}$, $X_3 = b_{76}$, $X_4 = b_{62}$, $X_5 = b_{29}$, $X_6 = b_{79}$, $X_7 = b_{6,12}$, $X_8 = b_{3,12}$, $X_9 = b_{9,10}$, $X_{10} = b_{9,11}$, $X_{11} = b_{12,13}$, $X_{12} = b_{12,14}$, $X_{13} = b_{12}$, $X_{14} = b_{43}$, $X_{15} = b_{87}$, $X_{16} = b_{56}$. Если $b_{ij} = X_k$, то $b_{ji} = -X_k$.

Тогда элементам группы G будут отвечать следующие подстановки на множестве ребер:

$$E = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \end{pmatrix};$$

$$C_2 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ X_3 & X_4 & X_1 & X_2 & X_6 & X_5 & X_8 & X_7 & X_{10} & X_9 & X_{12} & X_{11} & X_{15} & X_{16} & X_{13} & X_{14} \end{pmatrix};$$

$$U_2^1 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ -X_1 & -X_4 & -X_3 & -X_2 & X_8 & X_7 & X_6 & X_5 & X_{12} & X_{11} & X_{10} & X_9 & X_{14} & X_{13} & X_{16} & X_{15} \end{pmatrix};$$

$$U_2^2 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ -X_3 & -X_2 & -X_1 & -X_4 & X_7 & X_8 & X_5 & X_6 & X_{11} & X_{12} & X_9 & X_{10} & X_{16} & X_{15} & X_{14} & X_{13} \end{pmatrix};$$

$$\delta_1 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ -X_4 & -X_3 & -X_2 & -X_1 & X_5 & X_6 & X_8 & X_7 & X_{10} & X_9 & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{16} & X_{15} & X_{14} \end{pmatrix};$$

$$\delta_2 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ -X_2 & -X_1 & -X_4 & -X_3 & X_6 & X_5 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{12} & X_{11} & X_{15} & X_{14} & X_{13} & X_{16} \end{pmatrix};$$

$$S_4^1 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ X_2 & X_3 & X_4 & X_1 & X_8 & X_7 & X_5 & X_6 & X_{11} & X_{12} & X_{10} & X_9 & X_{14} & X_{15} & X_{16} & X_{13} \end{pmatrix};$$

$$S_4^2 = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 & X_5 & X_6 & X_7 & X_8 & X_9 & X_{10} & X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} & X_{15} & X_{16} \\ X_4 & X_1 & X_2 & X_3 & X_7 & X_8 & X_6 & X_5 & X_{12} & X_{11} & X_9 & X_{10} & X_{16} & X_{13} & X_{14} & X_{15} \end{pmatrix}.$$

Задания всех подстановок запишем в табл. 1.

Таблица 1

Действие группы $G = D_4$ на дуги орграфа								
	E	C_2	U_2^1	U_2^2	δ_1	δ_2	S_4^1	S_4^2
X_1	X_1	X_3	$-X_1$	$-X_3$	$-X_4$	$-X_2$	X_2	X_4
X_2	X_2	X_4	$-X_4$	$-X_2$	$-X_3$	$-X_1$	X_3	X_1
X_3	X_3	X_1	$-X_3$	$-X_1$	$-X_2$	$-X_4$	X_4	X_2
X_4	X_4	X_2	$-X_2$	$-X_4$	$-X_1$	$-X_3$	X_1	X_3
X_5	X_5	X_6	X_8	X_7	X_5	X_6	X_8	X_7
X_6	X_6	X_5	X_7	X_8	X_6	X_5	X_7	X_8
X_7	X_7	X_8	X_6	X_5	X_8	X_7	X_5	X_6
X_8	X_8	X_7	X_5	X_6	X_7	X_8	X_6	X_5
X_9	X_9	X_{10}	X_{12}	X_{11}	X_{10}	X_9	X_{11}	X_{12}
X_{10}	X_{10}	X_9	X_{11}	X_{12}	X_9	X_{10}	X_{12}	X_{11}
X_{11}	X_{11}	X_{12}	X_{10}	X_9	X_{11}	X_{12}	X_{10}	X_9
X_{12}	X_{12}	X_{11}	X_9	X_{10}	X_{12}	X_{11}	X_9	X_{10}
X_{13}	X_{13}	X_{15}	X_{14}	X_{16}	X_{13}	X_{15}	X_{14}	X_{16}
X_{14}	X_{14}	X_{16}	X_{13}	X_{15}	X_{16}	X_{14}	X_{15}	X_{13}
X_{15}	X_{15}	X_{13}	X_{16}	X_{14}	X_{15}	X_{13}	X_{16}	X_{14}
X_{16}	X_{16}	X_{14}	X_{15}	X_{13}	X_{14}	X_{16}	X_{13}	X_{15}

Произвольный орграф Γ на γ записываем в виде $\Gamma(X_1, \ldots, X_m)$, а задание конкретного орграфа состоит в присвоении *переменным* X_k, конкретных значений ± 1. Последнее приводит к записи конкретного орграфа в виде вектора-строки с компонентами ± 1.

Пусть Ψ есть некоторое множество орграфов, определенных на данном γ. От Ψ требуем условия: если Γ ∈ Ψ, то $g\Gamma \in \Psi$, то есть G действует на Ψ. Для каждого $\Gamma_\alpha \in \Psi$ определена орбита: $\Gamma_\alpha = \{g_1(\Gamma_\alpha), \ldots, g_n(\Gamma_\alpha)\}$ и $\Psi = \Psi_1 \cup \ldots \cup \Psi_s$. По определению каждая орбита – множество орграфов изоморфных относительно группы G, а s – число неизоморфных орграфов в Ψ.

Возьмем орграф Γ_1, которому отвечает вектор-строка [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1], то есть Γ_1=[1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]. Действие G на ребра γ определяет действие G на дугах орграфа: $g\Gamma(X_1,...,X_m) = \Gamma(g(X_1),...,g(X_m))$. Согласно заданию группы G как подстановок $E, C_2, U_2^1, U_2^2, \delta_1, \delta_2, S_4^1, S_4^2$ на вершинах γ и введенным обозначениям для дуг орграфа $\Gamma(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_{16})$, действие G на Γ будет определено таблицей 1. То есть

$E\Gamma_1$ = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$C_2\Gamma_1$ = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$U_2^1\Gamma_1$ = [-1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$U_2^2\Gamma_1$ = [-1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$\delta_1\Gamma_1$ = [-1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$\delta_2\Gamma_1$ = [-1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$S_4^1\Gamma_1$ = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];

$S_4^2\Gamma_1$ = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1].

Следовательно, орграфу Γ_1 отвечает орбита длины 2.

Далее берется другая комбинация, которая не встречалась в ранее найденных орграфах. В процессе работы был разработан алгоритм нахождения всех неизоморфных орграфов и реализован в виде компьютерной программы. В результате работы программа выдает файл со списком всех неизоморфных орграфов.

Итог: 27 ориентационных изомеров.

Γ_1 = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1];
Γ_2 = [1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1];
Γ_3 = [-1, -1, -1, -1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1];
Γ_4 = [-1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1];
Γ_5 = [-1, -1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, -1, 1, 1, 1];
Γ_6 = [-1, -1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, 1];
Γ_7 = [1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_8 = [1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_9 = [1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{10} = [-1, -1, -1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{11} = [-1, -1, 1, 1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{12} = [1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{13} = [1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{14} = [1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, 1, -1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{15} = [1, 1, 1, 1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, -1, 1, 1];
Γ_{16} = [1, 1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, 1, -1, 1];
Γ_{17} = [1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1];
Γ_{18} = [-1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1];
Γ_{19} = [-1, 1, -1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1];
Γ_{20} = [-1, 1, 1, 1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1];
Γ_{21} = [-1, 1, -1, 1, 1, 1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, -1, 1, -1, 1];
Γ_{22} = [1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, 1];
Γ_{23} = [1, 1, 1, 1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, 1];
Γ_{24} = [-1, -1, -1, -1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, 1];
Γ_{25} = [1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, -1, -1, 1];
Γ_{26} = [1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, 1];
Γ_{27} = [1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, -1]

Все найденные ориентационные изомеры изображены на рис. 4.

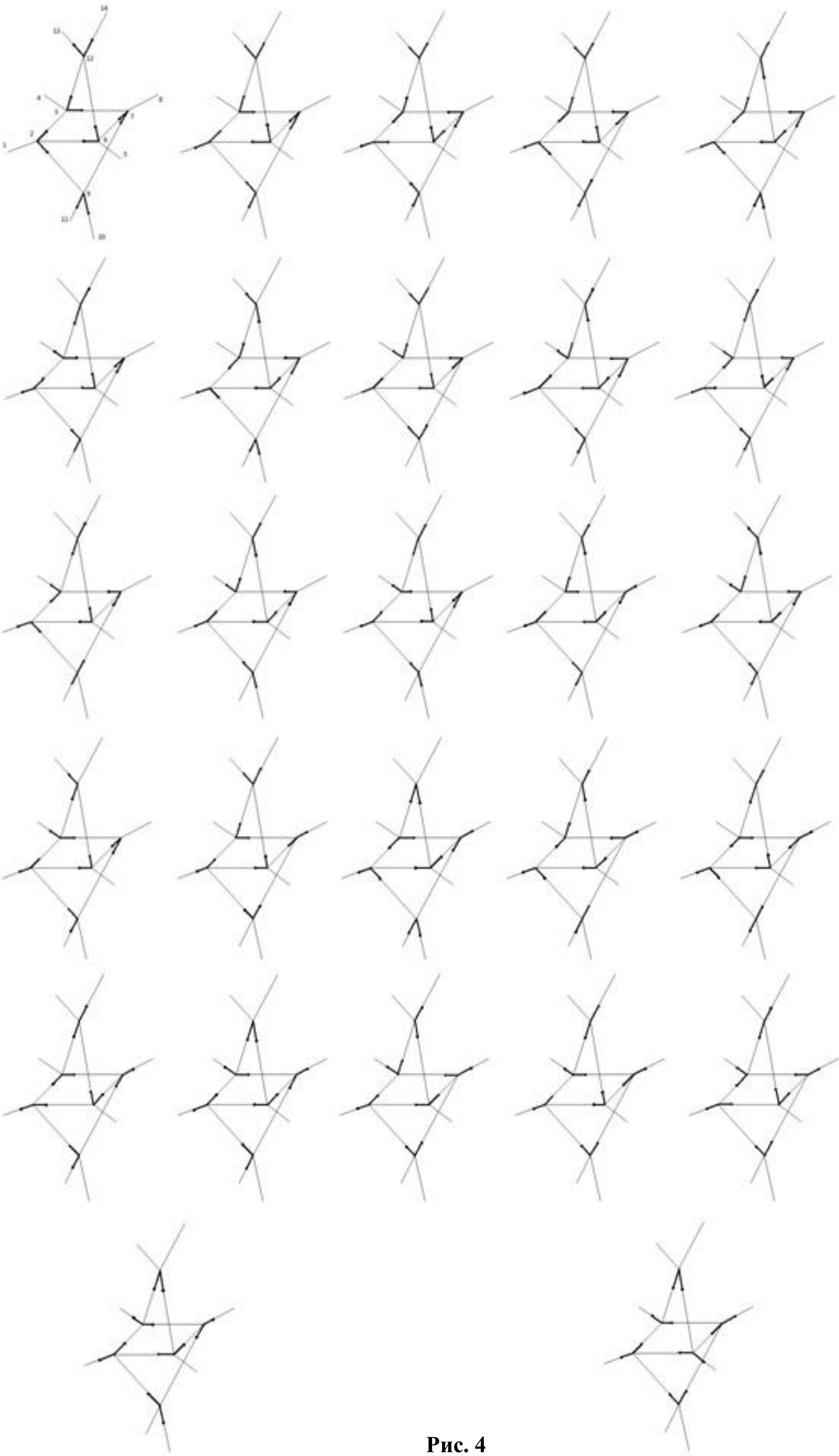


Рис. 4

Для произвольного орграфа $\Gamma(X_1,...,X_m)\in\Psi$ определим функции $J=J(X_1,...,X_m)$ как суммы:

$$J_i=\sum_{g\in G}g(x_i),\quad J_{ij}=\sum_{g\in G}g(x_i)g(x_j),$$
$$J_{ijk}=\sum_{g\in G}g(x_i)g(x_j)g(x_k),...,\quad J_{ijk...l}=\sum_{g\in G}g(x_i)g(x_j)g(x_k),...,g(x_l), \tag{1}$$

которые являются полилинейными функциями своих аргументов. Инварианты J_i, J_{ij}, J_{ijk}, и так далее будем называть инвариантами 1, 2, 3-го и т. д. порядков.

Каждая функция из (1) преобразуется по единичному представлению группы G: $gJ(X_1,...,X_m)=J(g(X_1),...,g(X_m))=J(X_1,...,X_m)$. Саму систему (1) назовем системой полилинейных инвариантов.

Инварианты (1) – легко вычислимые функции. Для их вычисления применяется табл. 1.

Далее представлены инварианты, необходимые для дальнейшего решения задачи.

$$J_5\sum_{g\in G}g(X_1)=X_5+X_6+X_6+X_5+X_7+X_8+X_8+X_7,$$
$$J_{21}=2(X_1X_2+X_1X_4+X_2X_3+X_3X_4),$$
$$J_{31}=4(X_1X_3+X_2X_4),$$
$$J_{61}=X_6X_1+X_5X_3-X_5X_2-X_6X_4-X_8X_3-X_7X_1+X_7X_2+X_8X_4,$$
$$J_{91}=X_9X_1+X_{10}X_3-X_9X_2-X_{10}X_4-X_{11}X_3-X_{12}X_1+X_{11}X_2+X_{12}X_4,$$
$$J_{65}=4(X_5X_6+X_7X_8),$$
$$J_{11,5}=2(X_{11}X_5+X_{12}X_6+X_9X_7+X_{10}X_8),$$
$$J_{921}=2(X_9X_2X_1+X_{10}X_4X_3+X_{11}X_2X_3+X_{12}X_1X_4),$$
$$J_{951}=X_9X_5X_1+X_{10}X_6X_3-X_9X_6X_2-X_{10}X_5X_4-X_{11}X_7X_3-X_{12}X_8X_1+X_{11}X_8X_2+X_{12}X_7X_4.$$

Ссылаясь на найденные ориентационные изомеры, вычислим значения инвариантов на заданных 27 орграфах. Эти значения представлены в виде табл. 2, где представлены значения инвариантов на $\Gamma_1-\Gamma_{27}$.

Таблица 2

	J_5	J_{21}	J_{31}	J_{61}	J_{91}	J_{65}	$J_{11,5}$	J_{921}	J_{951}
Γ_1	8								
Γ_2	4	8	8	8	0	0	0	4	4
Γ_3	4	8	8	8	0	0	0	4	-4
Γ_4	4	0	-8	-8					
Γ_5	4	0	0	0	0				
Γ_6	4	0	0	0	-4				
Γ_7	0	0	0	-4					
Γ_8	0	0	-8	-8	-4	-4	8		
Γ_9	0	8	8	8	8	-8	0	0	8
Γ_{10}	0	8	8	8	8	-8	0	0	-8
Γ_{11}	0	0	-8	-8	4	4	-8		
Γ_{12}	0	0	-8	-8	4	4	0		
Γ_{13}	0	8	8	8	8	-8	8		
Γ_{14}	0	0	-8	-8	-4	-4	0		
Γ_{15}	0	8	8	8	8	-8	-8		
Γ_{16}	0	8	8	8	8	8			
Γ_{17}	0	0	0	4	-4				
Γ_{18}	0	0	0	4	0	0	0	-8	
Γ_{19}	0	0	0	4	0	0	0	8	

Окончание табл. 2

Γ_{20}	0	0	0	4	4				
Γ_{21}	0	-8							
Γ_{22}	-4	0	-8						
Γ_{23}	-4	8	8	8	0	0	0	-4	4
Γ_{24}	-4	8	8	8	0	0	0	-4	-4
Γ_{25}	-4	0	8	8	-4				
Γ_{26}	-4	0	8	8	0				
Γ_{27}	-8								

Система инвариантов называется полной относительно действия группы G на Ψ, если для любой пары $\Gamma_i \not\cong \Gamma_j$ из Ψ найдется такая функция J из этой системы, что $J(\Gamma_i) \neq J(\Gamma_j)$.

В результате решения поставленной задачи для конкретного примера (рис. 1) было найдено 27 ориентационных изомеров, которые разделяются с помощью системы инвариантов, состоящей из одного инварианта 1-го порядка, шести инвариантов 2-го порядка и двух инвариантов 3-го порядка. Процедура разделения представлена на рис. 5.

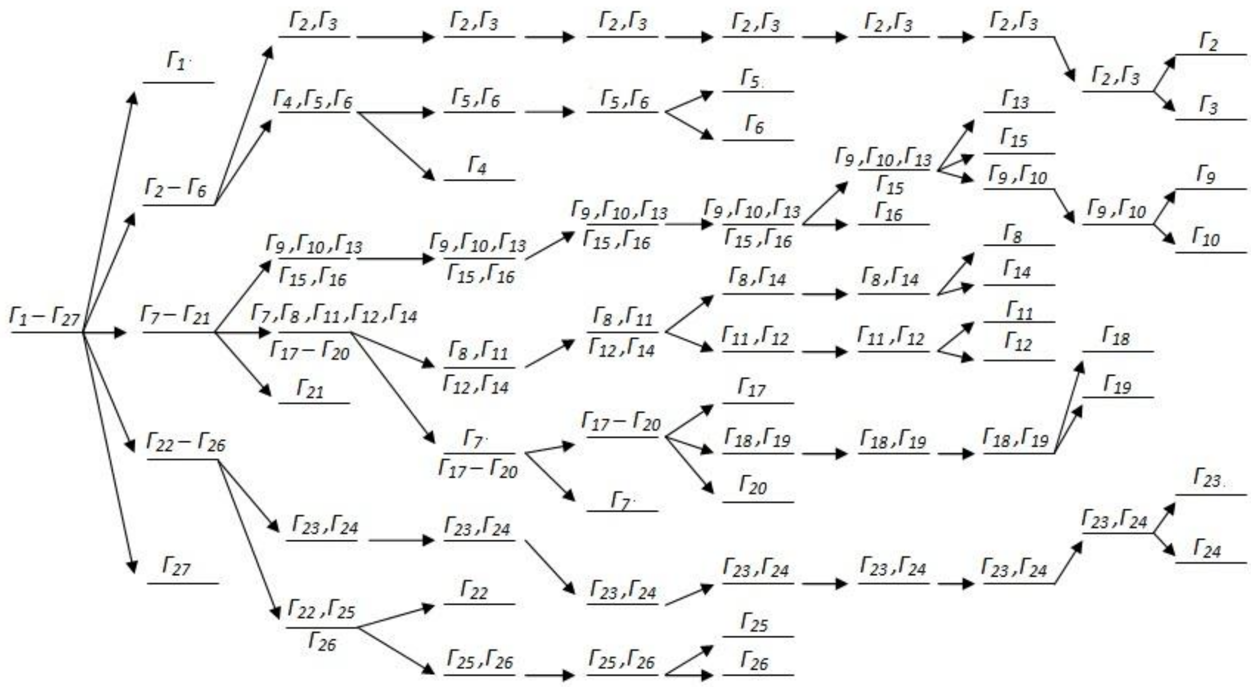


Рис. 5

Библиографический список

1. **Jer-Lai Kuo.** Singer: On the use of graph invariants for efficiently generating hydrogen bond topologies and predicting physical properties of water clusters and ice / Jer-Lai Kuo, James V. Coe, J. Sherwin // Journal of chemical physics. – 2001. – № 6.
2. **Разуваев, А. Г.** Полнота системы полилинейных инвариантов орграфов / А. Г. Разуваев, С. К. Игнатов // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. – 2010. – №3(1). – С. 148–153.

Дата поступления
в редакцию 26.10.2015

E.O. Dushkina, S.K. Ignatov, A.G. Razuvaev

AN ANALYSIS OF THE INVARIANTS IN THE TASK OF SEPARATION OF NONISOMORFIC ORIENTED GRAPHS

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod,
Institute of Information Technology, Mathematics and Mechanics

Purpose: To describe the method of invariants of graphs in the task of separation of orientational stereoisomers of water clusters $(H_2O)_n$.
Design/methodology/approach: The usage of The method is based on the theory of groups and consists of building up special functions (invariants), determined by digraphs defining the network of cluster hydrogen bonds$(H_2O)_n$. The suggested method is illustrated by building up the scheme of separation of stereoisomers in a hexagonal cell of crystalline ice $(H_2O)_6$.
Findings: The solution for the problem is important for the study of physical and chemical interaction processes of ice crystal molecules which are located in the upper atmosphere.
Research/limitations/implications: The analysis of invariants may serve as a promising method of calculating the energy clusters $(H_2O)_n$, which is the burning problem in the physics and chemistry of the atmosphere.
Originality/value: It is the first time when the usage of invariants was examined in the problem of nonisomorphic oriented graph partition.

Key words: oriented graphs, symmetry groups, invariants, stereoisomers.