Левченков В.С., Левченков Д.В.

Описание симметрии одномерных фигур на основе степенных сумм координат точек

1. Введение

Симметрию молекулы можно описать, перечислив все элементы, входящие в группу точечной симметрии [1] этой молекулы. К ним относятся все те преобразования координат ее атомов, которые оставляют на месте по крайней мере одну точку (центр тяжести) молекулы, сохраняют расстояния между всеми парами атомов и совмещают молекулу с собой. Можно выделить преобразования двух типов:

1. Повороты на некоторый угол вокруг заданной оси,
2. Зеркальные отражения в определенных плоскостях.

Комбинации этих преобразований - зеркально-поворотные оси - оказываются весьма существенным характеристиками, использующимися при классификации молекул. Объекты, обладающие зеркально-поворотной осью некоторого порядка, называются *ахиральными*, в противном случае - *хиральными* [2,3]. Термин *хиральность* используется в настоящее время только качественно. Еще не разработаны адекватные методы количественной оценки хиральности (или, более общо, степени симметрии молекулы). Обычно применяемые методы, основанные на выделении симметричных фрагментов, не работают, если симметрия молекулы приблизительная и в точном смысле таких фрагментов нет (случай "почти " симметрии).

В этой ситуации представляется важным применение функционального (а не координатного) описания конфигурации атомов молекулы, что достигается использованием степенных сумм от координат атомов и выяснением особенностей поведения этих степенных сумм при наличии элементов симметрии у молекулы.

Мы изложим метод степенных сумм сначала для случая одномерных молекул, поскольку в этой ситуации он принимает наиболее простой вид. Двухмерный и трехмерный случаи мы рассмотрим в отдельной работе. Наше рассмотрение носит геометрический характер. Поэтому будем называть молекулу фигурой, а ее атомы точками.

2. Симметрия фигур с равноценными точками

Рассмотрим на оси R^1 систему из n несовпадающих точек (одномерную фигуру), координаты которых равны $x_1,\dots,x_n$. Будем считать, что точки наделены единичными массами, а начало координат совпадает с центром тяжести этой фигуры, т.е. полагаем выполненным условие

$$x_1+\dots+x_n=0. \tag{1}$$

В одномерном случае единственным элементом точечной симметрии является центр инверсии. Его наличие означает, что множество точек фигуры можно разбить на пары $\{i,\ j\}$ так, что для их координат выполнено $x_i=-x_j$. Не ограничивая общности, можно считать, что n=2k, (k>1), поскольку в противном случае наличие центра инверсии предполагает, что одна из точек совпадает с центром тяжести фигуры и не оказывает тем самым влияния на значения степенных сумм.

Степенной суммой s-ой степени от координат точек $x = (x_1,\dots,x_n)$ назовем полином $\Phi_s(x)$ вида

$$\Phi_s(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i^s, \qquad (s \geq 0). \tag{2}$$

Легко увидеть, что при выполнении (1) и наличии центра инверсии у фигуры все нечетные степенные суммы равны нулю.

Справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Равенство нулю n первых нечетных степенных сумм координат одномерной фигуры, содержащей n различных точек, является необходимым и достаточным условием наличия центра инверсии, то есть система равенств

$$\Phi_{2m-1}(x) = 0, \qquad \forall m = 1,\dots,n \tag{3}$$

эквивалентна соотношению

$$\forall i \;\; \exists j \qquad x_i = -x_j, \qquad (i, j = 1,\dots,n). \tag{4}$$

Доказательство. Необходимость очевидна. Докажем достаточность. Доказательство проведем методом математической индукции по числу точек фигуры. Для двух точек соответствующее утверждение следует из (1). Пусть для $2,\dots,n-1$ точек утверждение справедливо. Предположим, что для фигуры из n точек существует хотя бы один набор координат $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$, удовлетворяющий (3) и нарушающий (4). Можно считать, что никакие две точки этой фигуры несимметричны ($\forall i \;\; \forall j: \;\; x_i \neq -x_j$), так как иначе задача сводилась бы к рассмотрению уравнений (3) для n–1 или n–2 точек. Поскольку $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$ является решением системы (3), то оно является и решением следующей системы линейных уравнений:

$$\begin{cases} x_1 + \dots + \quad x_n = 0 \\ \bar{x}_1^2 x_1 + \dots + \quad \bar{x}_n^2 x_n = 0 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ \bar{x}_1^{2n-2} x_1 + \dots + \bar{x}_n^{2n-2} x_n = 0 \end{cases} \tag{5}$$

Определитель этой системы $\begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \bar{x}_1^2 & \dots & \bar{x}_n^2 \\ \dots & \dots & \dots \\ \bar{x}_1^{2n-2} & \dots & \bar{x}_n^{2n-2} \end{vmatrix}$

равен определителю Вандермонда [4], составленному из квадратов координат и, как известно, имеет значение $\prod_{1 \leq j < i \leq n} \left(\bar{x}_i^2 - \bar{x}_j^2\right)$. Он не равен нулю в соответствии с выбором $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$. Так как система (5) однородна, то отсюда следует, что $\bar{x}_1 = \dots \bar{x}_n = 0$. Полученное противоречие завершает доказательство.

Q.E.D.

Эта теорема позволяет определить, есть ли у системы точек на прямой центр инверсии или нет, не пользуясь попарным сравнением координат точек, а вычисляя n нечетных степенных сумм. Однако рассмотрение случаев $n=2$, 3, 4 показывает, что достаточно только $\left[\frac{n+1}{2}\right]$ уравнений. Особенно показательным является случай $n=4$.

Пример 1. Пусть координаты точек удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0 \\ x_1^3 + x_2^3 + x_3^3 + x_4^3 = 0 \end{cases} \tag{6}$$

Тогда

$$0 = -(x_2 + x_3 + x_4)^3 + x_2^3 + x_3^3 + x_4^3 =$$

$$= x_2^2 x_3 + x_2^2 x_4 + x_3^2 x_2 + x_3^2 x_4 + x_4^2 x_2 + x_4^2 x_3 + 2x_2 x_3 x_4 =$$

$$= (x_2 + x_3)(x_3 + x_4)(x_4 + x_2).$$

Возможны три случая:

1. $x_2 = -x_3$; подставляя это сотношение в (6), получим $x_1 = -x_4$;
2. $x_3 = -x_4$, что дает $x_1 = -x_2$;
3. $x_4 = -x_2$, значит $x_1 = -x_3$.

Таким образом, все решения системы (6) соответствуют наличию центра инверсии.

Следующая теорема распространяет это утверждение на любые n.

Теорема 2. Равенство нулю первых $\left[\frac{n+1}{2}\right]$ нечетных степенных сумм координат фигуры из n точек является необходимым и достаточным условием наличия в ней центра инверсии.

Доказательство. Пусть $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$ - координаты точек одномерной фигуры, и $a_s = \Phi_s(\bar{x})$ $(s = 1,\dots,n)$ - первые n значений степенных сумм для этой фигуры, причем $a_s=0$, если s нечетно. Рассмотрим систему из n уравнений:

$$\begin{cases} x_1 + \dots + x_n = a_1 \\ x_1^2 + \dots + x_n^2 = a_2 \\ x_1^3 + \dots + x_n^3 = a_3 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ x_1^n + \dots + x_n^n = a_n \end{cases} \tag{7}$$

Пусть $x_1,\dots,x_n$ - одно из решений этой системы, например, $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$. Рассмотрим новую фигуру, точки которой имеют координаты $-x_1,\dots,-x_n$. Заметим, что они также удовлетворяют системе (7). Однако решение системы вида (7) единственно с точностью до перестановки компонент x_i между собой (доказательство этого факта, опирающееся на свойства симметрических многочленов, помещено в приложении, см. теорему П1). Следовательно, $-x_1,\dots,-x_n$ есть некоторая перестановка $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$, то есть исходная фигура обладает центром инверсии.

Q.E.D.

3. Симметрия фигур с нагруженными точками

Перейдем теперь к случаю, когда кроме координаты, точке сопоставлена еще одна характеристика, например, масса этой точки. Это могут быть и другие характеристики, например, заряд атома, магнитный момент, спин и т.д. Тем самым, мы не требуем, чтобы значения характеристики были положительными. В дальнейшем для определенности, будем называть рассматриваемую величину массой. Таким образом, каждая точка фигуры описывается парой (x_i, m_i), $m_i \neq 0$, $i = 1,\dots,n$. В такой ситуации наличие центра инверсии в точке O, выбранной так, что выполнено $\sum_{i=1}^{n} m_i x_i = 0$, означает справедливость соотношения $\forall i\ \exists j:\ x_i = -x_j$ и $m_i = m_j$. Степенной суммой порядка s назовем выражение $\Psi_s(x) = \sum_{i=1}^{n} m_i x_i^s$. Как и ранее, будем полагать, что координаты точек не совпадают друг с другом.

Так же как и для случая равноценных точек, имеет место следующая теорема.

Теорема 3. Равенство нулю n последовательных нечетных степенных сумм координат $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$ одномерной фигуры, содержащей n точек, нагруженных массами $m_1,\dots,m_n$ является необходимым и достаточным условием наличия у нее центра инверсии, то есть справедливо

$$\Psi_{2s-1}(x) = 0 \quad \forall s = 1,\dots,n \qquad \Leftrightarrow \qquad \forall i\ \exists j:\ x_i = -x_j \ \text{ и } \ m_i = m_j \tag{8}$$

Доказательство. Рассмотрим систему уравнений

$$\begin{cases} m_1 x_1 + \dots + m_n x_n = 0 \\ m_1 x_1^3 + \dots + m_n x_n^3 = 0 \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ m_1 x_1^{2n-1} + \dots + m_n x_n^{2n-1} = 0 \end{cases} \tag{9}$$

Пусть у этой системы существует несимметричное решение $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$. Как и при доказательстве теоремы 1, будем считать, что в нем нет ни одной симметрично расположенной пары точек $\{i,j\}$, у которой $x_i = -x_j$. В противном случае, задача сводится к рассмотрению фигуры из n–1 или n–2 точек. Тогда $\bar{x}_1,\dots,\bar{x}_n$ является решением следующей системы линейных уравнений, содержащих только четные степенные суммы:

$$\begin{pmatrix} m_1 & \dots & m_n \\ m_1\bar{x}_1^2 & \dots & m_n\bar{x}_n^2 \\ \dots & \dots & \dots \\ m_1\bar{x}_1^{2n-2} & \dots & m_n\bar{x}_n^{2n-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = 0 \qquad (10)$$

Определитель этой системы равен

$$m_1 \dots m_n \begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots \\ \bar{x}_1^{2n-2} & \dots & \bar{x}_n^{2n-2} \end{vmatrix}$$

и не обращается в нуль в силу нашего соглашения. Отсюда $\bar{x}_1 = \ldots = \bar{x}_n = 0$.

Полученное противоречие показывает, что точки фигуры расположены симметрично относительно начала координат O.

Докажем теперь, что в симметрично расположенных точках массы совпадают. Всего имеется $\tilde{n} = [n/2]$ симметрично расположенных пар точек. Обозначим положительные координаты точек из каждой пары через $\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_{\tilde{n}}$ (отметим, что в силу построения, их значения попарно несовпадают), и пусть разности масс в парах равны $\Delta m_1, \ldots, \Delta m_{\tilde{n}}$. Для них имеем систему уравнений, включающих только нечетные степенные суммы:

$$\begin{cases} \Delta m_1 \tilde{x}_1 + \ldots + \Delta m_{\tilde{n}} \tilde{x}_{\tilde{n}} = 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \Delta m_1 \tilde{x}_1^{2\tilde{n}-1} + \ldots + \Delta m_{\tilde{n}} \tilde{x}_{\tilde{n}}^{2\tilde{n}-1} = 0 \end{cases}$$

Определитель этой системы является определителем Вандермонда

$$\tilde{x}_1 \ldots \tilde{x}_{\tilde{n}} \begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots \\ \tilde{x}_1^{2\tilde{n}-2} & \dots & \tilde{x}_{\tilde{n}}^{2\tilde{n}-2} \end{vmatrix}$$

и не равен нулю из-за попарного несовпадения $\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_{\tilde{n}}$. Следовательно, $\Delta m_1 = \ldots = \Delta m_{\tilde{n}} = 0$.

Q.E.D.

Итак, мы получили критерий наличия центра инверсии и для случая точек, нагруженных массами. Отметим, что нахождение центра инверсии в случае равноценных точек требует решения $\left[\frac{n+1}{2}\right]$ уравнений, а в случае нагруженных точек n уравнений.

4. Единственность задания точек фигуры значениями степенных сумм

Для одномерной фигуры с равноценными точками мы уже видели, что она однозначно задается значениями степенных сумм порядков $1,\ldots,n$ (теорема П1 в Приложении), причем этот факт был существенным образом использован при доказательстве критерия наличия центра инверсии (см. теорему 2).

Для фигур с нагруженными точками также имеет место подобное утверждение (см. теорему П2 в Приложении).

Таким образом, *одномерная фигура однозначно задается конечным набором степенных сумм координат; при этом обращение нечетных сумм в нуль приводит к наличию центра инверсии, а четные суммы позволяют найти значения координат точек фигуры.* Иначе говоря, четные суммы координат отвечают за величину удаления точек фигуры от начала координат, а нечетные за симметрию.

Рассмотрим теперь случай, когда не все нечетные суммы обращаются в нуль, то есть центра инверсии у фигуры не имеется. Эти суммы обладают следующими очевидными свойствами.

1. При стремлении несимметричной фигуры к симметричной все нечетные степенные суммы стремятся к нулю.

2. При инверсии несимметричной фигуры относительно начала координат нечетные суммы меняют знак. Таким образом, *энантиомеры*, то есть две фигуры, получаемые друг из друга отражением, отличаются знаками нечетных сумм, четные же суммы у них совпадают. В силу однозначного представления фигуры набором степенных сумм верно и обратное: если у двух фигур совпадают значения четных сумм, а нечетные различаются лишь знаком, то это энантиомеры.

3. Чем выше порядок степенной суммы, тем больший вклад в них дают точки фигуры, находящиеся далеко от центра тяжести. Таким образом, суммы различных порядков аккумулируют информацию о распределении точек по степени удаления от начала координат.

Эти свойства нечетных сумм позволяют сделать вывод о том, что их значения могут служить мерой несимметричности одномерной фигуры. С этой целью введем следующие понятия.

Пусть точки одномерной фигуры имеют одинаковую массу и различные координаты. Назовем *индексом ассиметрии* (или *хиральности*) совокупность значений $\left[\frac{n+1}{2}\right]$ нечетных степенных сумм, вычисленных по координатам фигуры при условии, что начало координат выбрано в центре инерции.

Аналогично, для одномерной фигуры с точками ненулевой массы, не имеющими совпадающих между собой координат, *индексом ассиметрии (хиральности)* назовем совокупность значений первых n нечетных степенных сумм.

Отметим, что в случае n=1 индекс асимметрии по определению равен 0. Для точек, имеющих одинаковую массу, этот индекс равен 0 и при n=2, так как фигура, состоящая из двух одинаковых точек, симметрична.

Приведем примеры вычисления индекса асимметрии.

Пример 2. Пусть на прямой последовательно расположены три одинаковые точки x, y, z, расстояния между которыми равны a и b (рис. 1).

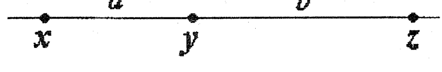

Рис. 1

Индекс асимметрии имеет две компоненты: одна из них равна 0, а вторая, χ, находится по значению степенной суммы $\Phi_3(x,y,z)$:

$$\chi = \tfrac{1}{27}\left(-(2a+b)^3+(a-b)^3+(a+2b)^3\right)=$$
$$=\tfrac{1}{27}\left(-(a-b)\left((2a+b)^2+(2a+b)(a+2b)+(a+2b)^2\right)+(a-b)^3\right)=$$
$$=\frac{a-b}{27}\left(-6a^2-15ab-6b^2\right)=\frac{b-a}{9}\left(2a^2+5ab+2b^2\right)=\frac{b-a}{9}\left(2(a+b)^2+ab\right)$$

Видно, что единственным симметричным решением является случай $a=b$, что соответствует обращению χ в 0.

Пример 3. Пусть на прямой на расстоянии a друг от друга расположены две точки, имеющие массы m_1, $m_2>0$ (см. рис. 2).

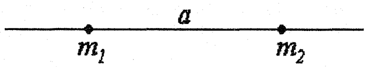

Рис. 2

Тогда индекс асимметрии такой фигуры равен $(0, \chi)$, где

$$\chi = (m_1 - m_2)\frac{m_1 m_2 a^3}{(m_1+m_2)^2}$$

Видно, что симметричный случай отвечает соотношению $m_1=m_2$.

Из приведенных примеров видно, что численное значение индекса ассиметрии зависит также от размеров фигуры. Поэтому если мы хотим, чтобы для подобных фигур значение индекса было одинаковым, то следует нормировать координаты точек, поделив их на максимальное удаление точек фигуры от центра инерции. Индекс ассиметрии, вычисленный для так *нормализованной* фигуры, будем называть *относительным индексом асимметрии.*

Примеры его поведения для конкретных молекул имеет смысл рассматривать для случая двух- и трехмерных фигур. В следующей работе будет построено соответствующее обобщение.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Теорема П1. Если система, содержащая n уравнений

$$\sum_{i=1}^{n} x_i^m = a_m, \quad m=1,\dots n \tag{П1}$$

имеет решение $\overline{x}_1,\dots,\overline{x}_n$, то это решение единственно (с точностью до перестановки компонент).

Доказательство. Многочлены $\Phi_m(x)$, стоящие в левой части уравнений системы (П1), симметричны, и поэтому могут быть разложены [4,5] по элементарным симметрическим многочленам

$$S_l(x) \equiv S_l(x_1,\dots,x_n) = \sum_{1\le i_1<i_2<\dots<i_l\le n} x_{i_1}\dots x_{i_l}\,. \tag{П2}$$

Поскольку $\Phi_m(x)$ - степенные суммы, то их можно представить через S_l с

помощью следующих формул Ньютона [4]:
при $1 \le k \le n$

$$\Phi_k - \Phi_{k-1}S_1 + \Phi_{k-2}S_2 + \ldots + (-1)^{k-1}\Phi_1 S_{k-1} + (-1)^k k S_k = 0, \qquad (\Pi3)$$

при $k > n$

$$\Phi_k - \Phi_{k-1}S_1 + \Phi_{k-2}S_2 + \ldots + (-1)^{n-1}\Phi_{k-n+1}S_{n-1} + (-1)^n \Phi_{k-n}S_n = 0. \qquad (\Pi4)$$

Заметим теперь, что согласно теореме Виета, любой набор чисел $\bar{x} = (\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n)$ дает все корни полинома n-ой степени

$$x^n - S_1(\bar{x})x^{n-1} + \ldots + (-1)^{n-1}S_{n-1}(\bar{x})x + (-1)^n S_n(\bar{x}) = 0, \qquad (\Pi5)$$

коэффициенты которого являются значениями элементарных симметрических многочленов на наборе $(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n)$.

Пусть теперь $\bar{y} = (\bar{y}_1, \ldots, \bar{y}_n)$ - другое решение системы (П1). Его компоненты являются корнями полинома вида (П5), коэффициенты которого содержат значения элементарных симметрических многочленов в точке $\bar{y} = (\bar{y}_1, \ldots, \bar{y}_n)$. Поскольку $\bar{x}$ и $\bar{y}$ - решения системы (П1), то справедливо

$\Phi_m(\bar{x}) = \Phi_m(\bar{y}), \quad m = 1, \ldots, n$. Покажем, что отсюда следует

$$S_k(\bar{x}) = S_k(\bar{y}), \quad k = 1, \ldots, n. \qquad (\Pi6)$$

Действительно, согласно (1) при $n=2$

$$\Phi_1(x) = S_1(x), \Phi_2(x) = \Phi_1(x)S_1(x) - 2S_2(x),$$

откуда и вытекает (П6) для $n=2$.

Применяя теперь индукцию по n, получим справедливость (П6) и в общем случае. Соотношения (П6) приводят к совпадению многочленов (П5) для точек $\bar{x}$ и $\bar{y}$, а значит, $\{\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n\} = \{\bar{y}_1, \ldots, \bar{y}_n\}$. ***Q.E.D.***

Теорема П2. Если система уравнений

$$\sum_{i=1}^{n} m_i x_i = a_s, \quad s = 0, \ldots, 2n-1, \qquad (\Pi7)$$

имеет решение $(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n)$ с попарно несовпадающими компонентами, то это решение единственно (с точностью до перестановки компонент $\bar{x}_i$, имеющих одинаковые m_i).

Доказательство. Применим для решения системы (П7) стандартный способ [6]. Пусть $y = (y_1, \ldots, y_n)$ - некоторый набор вещественных чисел. Умножим уравнение с $s=0$ на y_n, уравнение с $s=1$ на y_{n-1} и т.д., уравнение с $s=n$ на $y_0=1$, и сложим друг с другом. Тогда получим следующее уравнение

$$\sum_{i=1}^{n} m_i p_n(x_i) = \sum_{s=0}^{n} a_s y_{n-s},$$

где $p_n(x_i) = x_i^n + y_1 x_i^{n-1} + \ldots + y_{n-1}x_i + y_n$, является полиномом n-ой степени от переменной x_i с коэффициентами y_s ($s=1,\ldots,n$). Если каждая x_i является корнем этого полинома, то его коэффициенты y_s должны удовлетворять уравнению

$$\sum_{s=0}^{n} a_s y_{n-s} = 0. \tag{П8}$$

Умножая теперь уравнение (П7) с номером $s=1$ на y_n, с номером $s=2$ на y_{n-1}, и т.д., с номером $s=n+1$ на 1, получим по тем же соображениям другое линейное уравнение относительно y_s

$$\sum_{s=1}^{n+1} a_s y_{n-s+1} = 0. \tag{П9}$$

Продолжая такое преобразование уравнений (П7) вплоть до умножения $(n-1)$-го уравнения на y_n, n-го на y_{n-1} и т.д., $(2n-1)$-го на 1, получим вместе с (П8), (П9) и т.д. систему из n линейных уравнений

$$\sum_{s=k}^{n+k} a_s y_{n-s+k} = 0, \quad (k = 0,1,\ldots,n-1) \tag{П10}$$

для определения коэффициентов полинома $y_1,\ldots,y_n$. Перепишем (П10), выделив свободные члены:

$$\sum_{s=k}^{n+k-1} a_s y_{n-s+k} = -a_{n+k}, \quad (k = 0,1,\ldots,n-1).$$

Детерминант этой системы равен

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_0 & a_1 & \ldots & a_{n-1} \\ a_1 & a_2 & \ldots & a_n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n-1} & a_n & \ldots & a_{2n-2} \end{vmatrix},$$

где $a_s = \sum_{i=1}^{n} m_i \overline{x}_i^s$, причем $\forall i \neq j$ $\overline{x}_i \neq \overline{x}_j$. Значение Δ легко вычисляется (см., например, [7]) и равно

$$\Delta = m_1 \ldots m_n \prod_{1 \le k < i \le n} (\overline{x}_i - \overline{x}_j)^2, \quad \text{т.е.} \quad \Delta \neq 0.$$

Таким образом, существует единственный набор $y_1,\ldots,y_n$, удовлетворяющий (П10). По этому набору однозначно восстанавливаются коэффициенты полинома $p_n(t)$, корни которого дают решения системы (П7). По условию, они равны $\overline{x}_s$. Для нахождения порядка следования этих корней в решении системы рассмотрим n первых уравнений (П7) как уравнения относительно m_i, (которые мы обозначим через z_i) при $x_i = y_i$:

$$\sum_{i=1}^{n} y_i^s z_i = a_s, \quad s = 0,\ldots,n-1.$$

Детерминант этой системы

$$\begin{vmatrix} 1 & \ldots & 1 \\ y_1 & \ldots & y_n \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ y_1^{n-1} & \ldots & y_n^{n-1} \end{vmatrix}$$

равен $\prod_{1\le i<j\le n}(y_j - y_i) \neq 0$. В силу того, что $m = (m_1,...,m_n)$ - решения этой системы, любое другое решение $\{z_i\}_{i=1}^n$ будет перестановкой π компонент m: $z_i = m_{\pi(i)}$, а тогда $y_i = \overline{x}_{\pi(i)}$. Перестановка π единственна, если все m_i различны. Если же некоторые z_i совпадают друг с другом, то выбор их номеров неединствен.

Q.E.D.

Литература

1.Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. М.: Мир, 1966.
2.Lord Kelvin. Baltimore lectures. 1884 and 1893. London, C.J.Clay and Sons, 1904.
3.Соколов В.И. Введение в теоретическую стереохимию. М.: Наука, 1979.
4.Кострикин А.И. Введение в алгебру. М.: Наука, 1977.
5.Ван дер Варден Б.Л. Алгебра. М.: Наука, 1976.
6.Кречмар В.А. Задачник по алгебре. М.: Физматгиз, 1959.
7.Сборник задач по алгебре. Учебное пособие под ред. А.И.Кострикина. М.: Факториал, 1995.