

Aplikasi Graf Isomorfik dalam Menentukan Molekul Kimia Berstruktur Sama

Ariel Ansa Razumardi 13517040¹
Program Studi Teknik Informatika
Sekolah Teknik Elektro dan Informatika
Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha 10 Bandung 40132, Indonesia
¹13517040@std.stei.itb.ac.id

Abstrak—Akhir-akhir ini, mulai banyak hal yang menggunakan bahan-bahan kimia yang tersusun dari molekul-molekul kimia. Oleh karena itu, sangat penting untuk mencari bahan kimia yang memiliki sifat kimia yang sesuai dengan kebutuhan masing-masing. Akan tetapi, kita tidak bisa hanya mencari bahan kimia yang memiliki rumus molekul yang sesuai saja. Karena terdapat sejumlah isomer yang mungkin lebih dari satu untuk setiap molekul kimia yang ada, perlu dilakukan tahap lebih lanjut untuk mencari molekul kimia dengan struktur yang memiliki sifat kimia yang dibutuhkan. Graf Isomorfik merupakan salah satu cara untuk memudahkan tahap lebih lanjut tersebut dengan cara merepresentasikan struktur molekul sebagai sebuah graf.

Kata Kunci—Graf Isomorfik, Struktur Molekul, Isomer, Sifat Kimia.

I. PENDAHULUAN

Molekul kimia merupakan hal yang sangat penting dalam kehidupan sehari-hari. Mulai dari makanan yang kita makan, udara yang kita pakai untuk bernapas, sampai berbagai produk yang kita pakai juga. Semua yang ada di dunia pasti tersusun atas bahan kimia yang kebanyakan disusun dari molekul-molekul kimia.

Akhir-akhir ini, studi tentang kimia, termasuk tentang bahan-bahan kimia dan sifat-sifatnya semakin maju sehingga banyak manfaat yang bisa diperoleh dari hal tersebut. Akibat dari kemajuan tersebut adalah semakin banyak orang yang memanfaatkan bahan-bahan kimia yang memiliki sifat-sifat kimia tertentu dalam berbagai aspek kehidupan. Contoh pemanfaatannya adalah dalam berbagai produk-produk, penelitian, dan masih banyak lagi.

Oleh karena itu, sangat penting untuk mencari bahan kimia yang memiliki sifat kimia yang sesuai dengan kebutuhan masing-masing. Akan tetapi, kita tidak bisa hanya mencari bahan kimia yang memiliki rumus molekul yang sesuai saja. Karena terdapat sejumlah isomer yang mungkin lebih dari satu untuk setiap molekul kimia yang ada, perlu dilakukan tahap lebih lanjut untuk mencari molekul kimia dengan struktur yang memiliki sifat kimia yang dibutuhkan.

Graf Isomorfik merupakan salah satu cara untuk memudahkan tahap lebih lanjut tersebut dengan cara merepresentasikan struktur molekul sebagai sebuah graf dan membandingkannya dengan struktur yang memiliki sifat kimia

yang dibutuhkan.

II. DASAR TEORI

A. Definisi Graf

Graf G didefinisikan sebagai pasangan himpunan (V, E) , dengan V merupakan himpunan tidak kosong dari simpul-simpul dan E adalah himpunan dari sisi-sisi yang menghubungkan simpul-simpul pada G (himpunan sisi-sisi pada suatu graf boleh kosong).

Simpul pada graf biasa dinyatakan dengan huruf, angka, atau gabungan dari keduanya, seperti $a, b, c, 1, 2, 3, a_1, b_2$, atau c_3 . Sisi pada graf yang menghubungkan dua simpul, misalkan a dan b , bisa dinyatakan sebagai pasangan dari kedua simpul tersebut, seperti (a, b) . Selain itu, sisi pada graf juga bisa dinyatakan dengan lambang huruf e diikuti dengan sebuah angka, seperti e_1, e_2 , atau e_3 . Jika sebuah sisi e menghubungkan simpul a dan b , maka pernyataan $e = (a, b)$ berlaku.

Jika ada dua buah sisi yang menghubungkan dua simpul yang sama, maka kedua sisi tersebut disebut sisi ganda. Jika ada sisi yang menghubungkan sebuah simpul dengan simpul tersebut sendiri, maka sisi tersebut disebut sisi gelang.

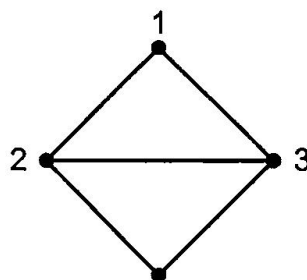
Secara geometri, graf digambarkan sebagai sekumpulan simpul di bidang dua dimensi yang dihubungkan oleh sekumpulan sisi.

B. Jenis Graf

Ada 3 jenis graf tidak berarah berdasarkan dari ada tidaknya sisi gelang dan sisi ganda pada graf tersebut, yaitu:

1. Graf Sederhana

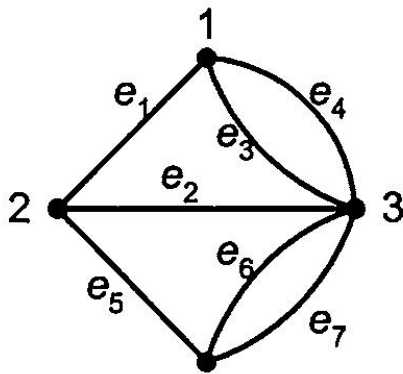
Graf Sederhana adalah graf yang tidak mengandung sisi gelang maupun sisi ganda.



Gambar 1. Graf Sederhana

2. Graf Ganda

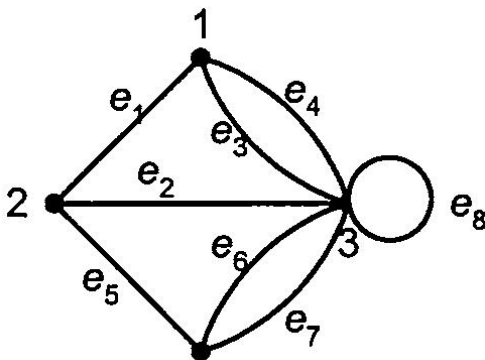
Graf Ganda adalah graf yang memiliki sisi ganda, tetapi tidak memiliki sisi gelang.



Gambar 2. Graf Ganda

3. Graf Semu

Graf Semu adalah graf yang memiliki sisi gelang pada satu atau lebih simpulnya.



Gambar 3. Graf Semu

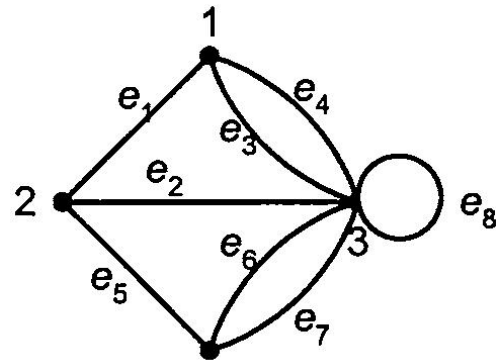
Ada 2 jenis graf berdasarkan orientasi arah pada sisinya, yaitu:

1. Graf Tidak Berarah

Graf Tidak Berarah adalah graf yang tidak memiliki orientasi arah pada sisinya. Jika sebuah sisi e pada graf tidak berarah menghubungkan simpul a dan b , maka pernyataan $e = (a, b) = (b, a)$ berlaku. Gambar 1, Gambar 2, dan Gambar 3 merupakan contoh dari graf tidak berarah.

2. Graf Berarah

Graf Berarah adalah graf yang memiliki orientasi arah pada sisinya. Sisi pada graf berarah biasa disebut dengan nama busur. Jika busur $e = (a, b)$, maka simpul a disebut sebagai simpul asal dan simpul b disebut sebagai simpul terminal sehingga jelas bahwa $(a, b) \neq (b, a)$. Graf berarah ini berguna untuk merepresentasikan sesuatu yang membutuhkan arah, seperti misalnya graf yang digunakan untuk merepresentasikan jalan pada sebuah kota dan arah pada busur menunjukkan dari arah mana ke arah mana jalan tersebut dapat dilalui.



Gambar 4. Graf Berarah

C. Terminologi Graf

Ada beberapa terminologi tentang graf tak berarah, yaitu:

1. Bertetangga

Dua buah simpul dikatakan bertetangga jika terdapat sisi yang menghubungkan kedua simpul. Jika terdapat sisi (a, b) , maka a dan b bertetangga.

2. Bersisian

Sebuah sisi dikatakan bersisian dengan kedua simpul yang dihubungkan oleh sisi tersebut. Jika terdapat sisi $e = (a, b)$, maka sisi e bersisian dengan simpul a dan simpul b .

3. Simpul Terpencil

Sebuah simpul disebut sebagai simpul terpencil apabila tidak ada sisi yang bersisian dengannya.

4. Graf Kosong

Graf Kosong merupakan graf yang tidak memiliki sisi sama sekali atau himpunan sisinya adalah himpunan kosong.

5. Derajat

Derajat dari sebuah simpul pada suatu graf adalah jumlah sisi pada graf tersebut yang bersisian dengan simpul tersebut. Untuk perhitungan derajat, sisi gelang dianggap sebagai dua sisi yang berbeda. Pada gambar 3, simpul 3 berderajat 7 atau bisa ditulis $d(3) = 7$.

6. Lintasan

Lintasan yang memiliki panjang n dari simpul awal a ke simpul tujuan b adalah barisan selang-seling simpul dan sisi yang berbentuk $a, e_1, c, \dots, d, e_2, b$ sehingga $e_1 = (a, c), \dots$, dan $e_2 = (d, b)$ adalah sisi-sisi pada graf.

7. Sirkuit

Sirkuit merupakan jenis khusus dari lintasan yang memiliki simpul awal dan simpul tujuan yang sama.

8. Terhubung

Dua buah simpul dikatakan terhubung apabila terdapat lintasan dengan salah satu simpul sebagai simpul awal dan simpul satunya lagi sebagai simpul tujuan pada graf. Graf disebut sebagai Graf Terhubung

apabila semua simpulnya saling terhubung satu sama lain.

9. Upagraf

Sebuah Graf $G_1 = (V_1, E_1)$ disebut sebagai upagraf dari $G_2 = (V_2, E_2)$ apabila semua sisi dan simpul milik G_1 merupakan bagian dari sisi dan simpul milik G_2 atau V_1 merupakan himpunan bagian dari V_2 dan E_1 merupakan himpunan bagian dari E_2 .

10. Upagraf Merentang

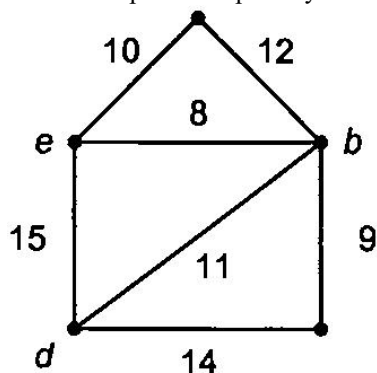
Sebuah Graf $G_1 = (V_1, E_1)$ disebut sebagai upagraf merentang dari $G_2 = (V_2, E_2)$ apabila G_1 merupakan upagraf dari G_2 dan $E_1 = E_2$.

11. Cutset / Jembatan

Cutset atau Jembatan adalah himpunan dari sisi-sisi pada sebuah graf terhubung yang jika dihilangkan dari graf akan menyebabkan graf menjadi graf tidak terhubung.

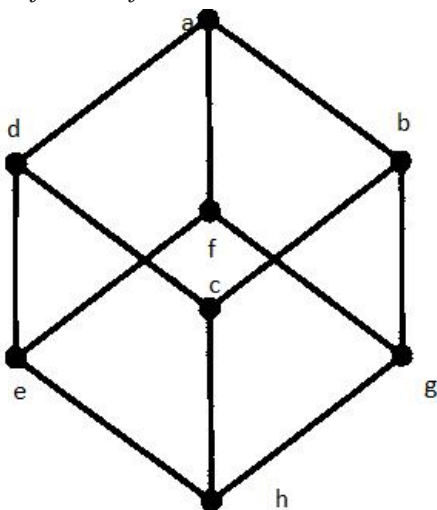
12. Graf Berbobot

Graf Berbobot atau Graf Berlabel adalah graf yang memiliki nilai pada setiap sisinya.

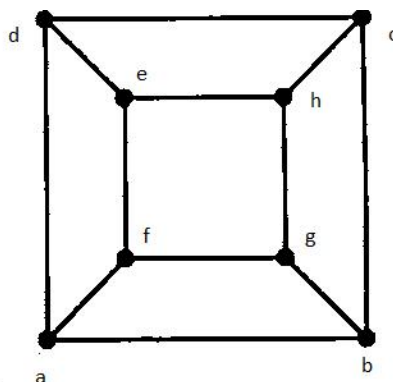


Gambar 5. Graf Berbobot

D. Graf Isomorfik



Gambar 6. Graf Isomorfik A



Gambar 7. Graf Isomorfik B

Pada Gambar 7 dan Gambar 8, mungkin saat digambar kedua graf tersebut akan terlihat berbeda, namun ketika simpul dan sisinya dilihat secara detail dan direpresentasikan dalam bentuk lain seperti matriks ketetanggaan, Kedua graf tersebut akan terbukti merupakan graf yang sama dengan simpul yang diberi label suatu huruf pada gambar 6 berkoresponden dengan simpul yang diberi label dengan huruf yang sama pada gambar 7, walaupun memang secara geometri terlihat berbeda.

Definisi Graf Isomorfik: “Dua buah graf, G_1 dan G_2 dikatakan isomorfik jika terdapat korespondensi satu-satu antara simpul-simpul keduanya dan antara sisi-sisi keduanya sedemikian sehingga jika sisi e bersisian dengan simpul u dan v di G_1 , maka sisi e' yang berkorespon di G_2 juga harus bersisian dengan simpul u' dan v' di G_2 .”

Dari Definisi tersebut, dapat dikatakan bahwa graf pada gambar 7 isomorfik dengan graf pada gambar 8.

E. Definisi Kimia

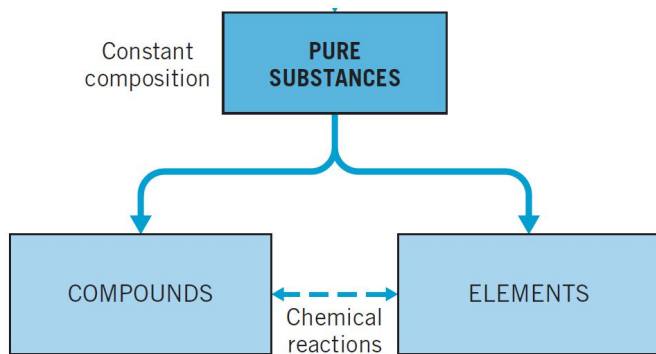
Kimia bisa didefinisikan sebagai studi mengenai komposisi, sifat, dan perubahan zat. Hal ini meliputi seluruh bahan kimia yang menyusun seluruh dari dunia ini. Kimia secara khusus peduli dengan cara suatu zat berubah ketika berinteraksi satu sama lain dalam reaksi kimia. Karena cakupannya yang sangat luas, kimia menyentuh seluruh dari ilmu yang ada, yang karena itu, kimia disebut sebagai ilmu sentral.

F. Zat

Zat bisa didefinisikan sebagai segala sesuatu yang menempati ruang dan memiliki massa. Zat inilah yang membentuk seluruh alam semesta yang kita tempati ini. Semua benda yang berada di sekitar kita, baik benda mati, maupun makhluk hidup, merupakan contoh dari zat. Dalam definisi di atas, kata massa digunakan daripada berat karena massa adalah berapa banyak zat yang ada pada suatu benda, sedangkan berat adalah gaya benda karena gravitasi.

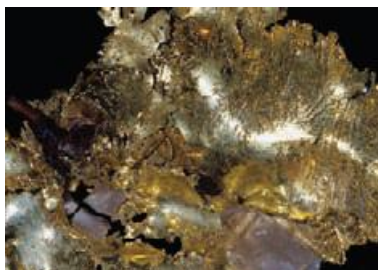
Berdasarkan kemurniannya, zat terbagi menjadi dua, yaitu Zat Murni dan Campuran. Perbedaan antara dua jenis zat ini salah satunya ada pada komposisi zatnya, komposisi dari zat murni selalu konstan tidak peduli apa yang terjadi, sedangkan komposisi dari campuran bisa berbeda sesuai dengan keadaan.

Zat Murni dibagi lagi menjadi dua berdasarkan keteruraikannya, yaitu Unsur yang tidak dapat diurai dan Senyawa yang masih dapat diurai.



Gambar 8. Klasifikasi Zat Murni

G. Unsur



Gambar 9. Unsur (Emas)

Berdasarkan penjelasan pada bagian zat di atas, diketahui bahwa unsur merupakan zat murni yang sudah tidak dapat diurai lagi menjadi zat murni yang lebih sederhana. Contoh dari unsur ada pada gambar 9, yaitu emas. Contoh unsur-unsur lainnya yaitu unsur-unsur yang memiliki simbol pada tabel periodik, seperti emas memiliki simbol Au pada tabel periodik. Tabel periodik merupakan tabel yang disusun dari semua unsur-unsur yang telah ditemukan oleh para ilmuwan dan diurutkan berdasarkan sifat-sifat tertentu. Simbol-simbol yang ada pada tabel periodik ini akan sangat terpakai dalam pembahasan-pembahasan yang lebih lanjut.

Selain unsur dengan satu atom penyusun, terdapat juga unsur-unsur yang tersusun dari dua atau lebih atom sejenis karena tidak bisa diurai lagi, seperti contohnya adalah unsur oksigen yang biasa ada dalam bentuk O_2 yang jelas terdiri dari dua buah atom O.

H. Senyawa



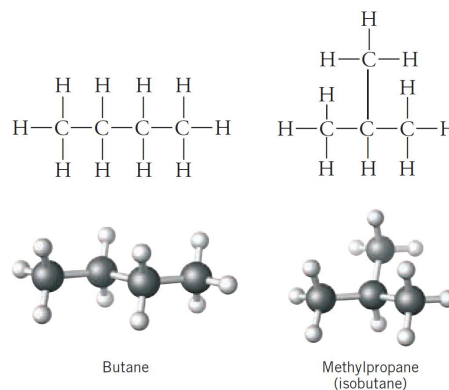
Gambar 10. Model Molekul dari Senyawa Air

Berdasarkan penjelasan pada bagian zat di atas, kita telah mengetahui bahwa senyawa adalah zat murni yang masih bisa diurai menjadi zat murni yang lebih sederhana lagi dan dari penjelasan pada bagian unsur, kita mengetahui bahwa unsur merupakan zat murni yang paling sederhana yang tidak bisa diurai lagi. Dari kedua pernyataan tersebut, kita dapat mengetahui bahwa senyawa adalah kombinasi dari dua atau

lebih unsur yang berbeda dan cara agar unsur menjadi senyawa atau sebaliknya adalah melalui reaksi kimia.

Pada gambar 10 di atas, terdapat salah satu contoh dari senyawa, yaitu air yang memiliki rumus molekul H_2O . Maksud dari rumus molekul tersebut adalah bahwa setiap molekul air adalah kombinasi dari dua unsur hidrogen yang memiliki simbol H di tabel periodik dan satu unsur oksigen yang memiliki simbol O di tabel periodik. Model pada gambar tersebut merepresentasikan struktur dari sebuah molekul H_2O .

I. Isomer



Gambar 11. Contoh Isomer C_4H_{10}

Kemampuan atom untuk menyusun diri mereka sendiri dengan lebih dari satu cara untuk menghasilkan struktur molekul yang berbeda dengan rumus molekul yang sama disebut dengan isomerisme.

Dengan pengertian isomerisme di atas, dapat disimpulkan bahwa yang disebut dengan isomer adalah molekul-molekul yang memiliki struktur molekul yang berbeda, tetapi memiliki rumus molekul yang sama.

Contoh dari isomer ada pada gambar 11, yaitu Butana dan Isobutana yang sama-sama memiliki rumus molekul C_4H_{10} , tetapi seperti terlihat pada gambar, struktur molekul yang mereka miliki jelas berbeda.

Karena dua buah isomer memiliki struktur yang beda, walaupun rumus molekul mereka sama, masih sangat memungkinkan untuk mereka memiliki sifat kimia yang berbeda.

III. APLIKASI GRAF ISOMORFIK DALAM MENENTUKAN MOLEKUL KIMIA BERSTRUKTUR SAMA

A. Menentukan Jenis Graf yang Diperlukan

Setelah mengetahui tentang graf dan materi-materi kimia yang bersangkutan, sekarang saatnya implementasi graf isomorfik untuk menyelesaikan masalah struktur molekul kimia. Langkah pertama yang harus dilakukan adalah menentukan jenis graf yang akan digunakan untuk implementasi.

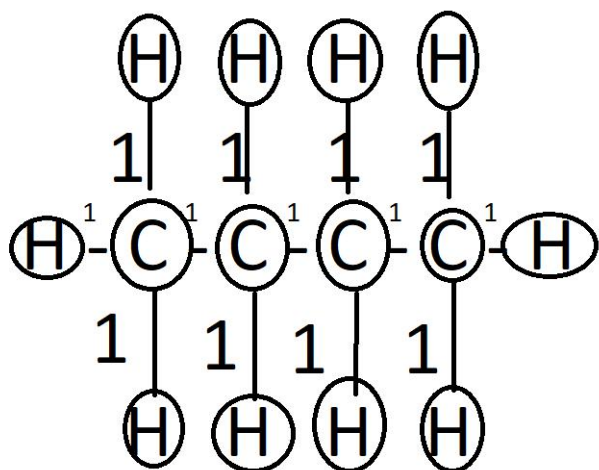
Pertama, akan dibahas mengenai apa yang direpresentasikan oleh simpul dan apa yang direpresentasikan oleh sisi. Agar mudah dilihat sebagai model dari sebuah molekul seperti gambar 10, simpul akan merepresentasikan sebuah atom yang ada pada molekul dan sisi akan merepresentasikan ikatan yang terjadi antar atom.

Kedua, akan dibahas mengenai jenis graf berdasarkan ada tidaknya sisi gelang dan sisi ganda. Karena tidak akan ada ikatan dari suatu atom kembali ke atom itu sendiri, bisa dipastikan kalau di graf representasi tidak akan ada satu pun sisi gelang. Akhirnya kita diberi dua pilihan, yaitu graf sederhana atau graf ganda. Jenis graf yang akan dipilih adalah graf sederhana, walaupun akan ada saatnya ikatan antar atom bukan termasuk ikatan tunggal, melainkan ikatan rangkap, sehingga memerlukan cara lain untuk merepresentasikan masing-masing ikatan. Cara lain ini akan dibahas nanti.

Ketiga, akan dibahas mengenai jenis graf berdasarkan orientasi arahnya. Karena ikatan antar atom tidak terpengaruh oleh arah dan bisa dikatakan sama dari atom manapun yang mengalami ikatan tersebut, bisa disimpulkan bahwa graf untuk implementasi tidak memerlukan arah. Oleh karena itu, jenis graf yang dipilih adalah graf tidak berarah.

Keempat, akan dibahas mengenai cara untuk merepresentasikan ikatan tunggal atau rangkap tanpa menggunakan sisi ganda. Alternatif dari sisi ganda untuk merepresentasikan jumlah ikatan antara dua atom adalah dengan menggunakan graf berbobot, dengan bobot pada sisinya melambangkan jumlah ikatan.

Jadi, bisa disimpulkan bahwa, simpul di dalam graf merepresentasikan atom, sisi di dalam graf merepresentasikan ikatan, dan graf yang dipakai adalah graf sederhana tak berarah dan berbobot.



Gambar 12. Representasi Struktur Molekul Butana sebagai Graf Sederhana Tidak Berarah dan Berbobot

B. Cara Mengubah Struktur Molekul menjadi Graf Representasi

Setelah memutuskan graf apa yang digunakan, sekarang saatnya untuk memakainya, sebelum bisa membandingkan struktur molekul dengan cara graf isomorfik, struktur molekul harus diubah terlebih dahulu ke dalam bentuk graf. Berikut langkah-langkah untuk mengubah struktur molekul menjadi graf representasi, tetapi sebelum bisa masuk ke langkah-langkah tersebut, harus diketahui terlebih dahulu ada atom apa saja pada molekul dan bagaimana ikatan antar atom-atom tersebut.

Pertama, pilih satu atom manapun pada struktur molekul lalu masukkan atom tersebut sebagai simpul pada graf representasi.

Kedua, masukkan semua ikatan yang ada pada atom tersebut

dan belum dimasukkan sebagai sisi sebagai sisi pada graf representasi sesuai dengan jenis ikatannya (tunggal atau rangkap berapa) dan masukkan atom-atom yang terikat dengan atom tersebut sebagai simpul pada graf representasi apabila belum dimasukkan sebelumnya.

Ketiga, ulang langkah kedua sampai tidak ada atom dan ikatan lagi yang bisa dimasukkan ke dalam graf representasi.

Setelah ketiga langkah tersebut sudah dijalankan, akan terbentuk graf representasi dari struktur molekul.

C. Cara Membandingkan Struktur Molekul dengan Graf Isomorfik

Setelah kedua struktur molekul telah menjadi graf representasi masing-masing, akhirnya kedua graf bisa dicek apakah merupakan struktur yang sama atau bukan dengan cara graf isomorfik.

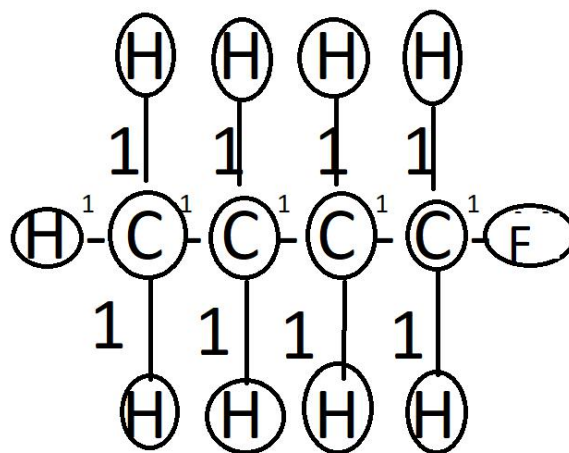
Cara mengecek apakah kedua graf isomorfik atau tidak bisa dengan berbagai cara, bisa dengan mencari simpul yang berkoresponden dengan masing-masing simpul pada graf satunya, bisa dengan mengubah kedua graf menjadi bentuk lain seperti matriks ketetanggaan dan melihat apakah kedua graf sama atau tidak, dan masih banyak cara lain untuk mengecek apakah kedua graf isomorfik atau tidak.

Setelah mengetahui apakah kedua graf representasi isomorfik atau tidak, strukturnya sama atau tidak kedua molekul mengikuti dari isomorfisme kedua graf. Jika kedua graf isomorfik, maka kedua molekul memiliki struktur yang sama. Sebaliknya, jika kedua graf tidak isomorfik, maka kedua molekul memiliki struktur yang berbeda.

Cara di atas bisa dicoba untuk butana dan isobutana seperti pada gambar 11 dan pasti didapatkan bahwa struktur molekul butana dan isobutana berbeda.

IV. PEMBAHASAN

Walaupun cara di atas terlihat seperti sudah memperhitungkan banyak hal, sebenarnya ada kelemahan pada cara tersebut.



Gambar 13. Representasi Struktur Molekul 1-Floro-Butana sebagai Graf Sederhana Tidak Berarah dan Berbobot

Kalau kita mencoba menggunakan cara yang telah dijelaskan sebelumnya untuk mengecek apakah butana seperti pada gambar 12 dan 1-floro-butana seperti pada gambar 13

memiliki struktur yang sama atau tidak, hasil yang akan kita dapatkan melalui cara tersebut adalah kedua molekul memiliki struktur yang sama, padahal harusnya berbeda.

Hal ini terjadi karena cara di atas mengubah struktur molekul menjadi graf representasi tanpa memperhitungkan atom tersebut merupakan atom apa, sehingga yang diperhitungkan hanya jenis dari ikatan saja.

Untuk mengatasi hal ini, selain tiap sisi diberikan bobot untuk merepresentasikan jenis ikatan antar atom, simpul juga harus diberikan nilai berupa atom apa yang dijadikan simpul tersebut.

Namun, jika pada graf representasi ditambahkan nama atom pada setiap simpulnya, maka cara di atas akan semakin sulit untuk dilakukan karena harus dicari semua kemungkinan korespondensi antar simpul yang membuat kedua graf isomorfik sampai ketemu yang antar simpul koresponden semua memiliki nama atom yang sama atau sampai semua kemungkinan korespondensi antar simpul dicoba dan tidak ketemu yang antar simpul koresponden semua memiliki nama atom yang sama.

Walaupun cara yang pertama bermasalah untuk kesalahan tertentu, cara tersebut jauh lebih mudah dan cepat untuk digunakan. Oleh karena itu, solusi yang penulis tawarkan adalah dengan menggunakan cara pertama untuk kasus khusus yaitu kasus dimana rumus molekul kedua molekul sama dan menggunakan cara dengan nama atom pada kasus lainnya, sehingga tidak perlu menggunakan cara dengan nama atom kalau tidak diperlukan.

V. SIMPULAN

Hal yang dapat disimpulkan oleh penulis dalam makalah berjudul “Aplikasi Graf Isomorfik dalam Menentukan Molekul Kimia Berstruktur Sama” ini adalah bahwa cara yang dikemukakan oleh penulis mengenai permasalahan tersebut masih jauh dari sempurna dan masih banyak ruang untuk perbaikan.

Selain itu, dapat disimpulkan bahwa teori graf merupakan teori yang aplikasinya sangat luas dalam menyelesaikan berbagai permasalahan yang ada di dunia ini, contohnya di makalah ini aplikasi dari teori graf bisa sampai menyentuh ke bidang ilmu kimia.

VI. UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih ke semua pihak yang telah membantu dalam kelancaran dan selesainya pembuatan makalah ini. Pertama-tama penulis berterima kasih kepada Tuhan Yang Maha Esa atas berkat rahmat-Nya lah penulis dapat membuat makalah yang berjudul “Aplikasi Graf Isomorfik dalam Menentukan Molekul Kimia Berstruktur Sama” ini. Lalu, penulis juga ingin berterima kasih kepada Dr. Ir. Rinaldi Munir, MT. selaku dosen pengajar mata kuliah IF2110 Matematika Diskrit saya selama satu semester ini.

DAFTAR PUSTAKA

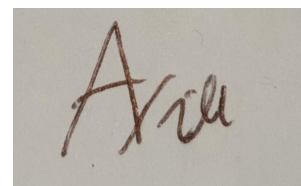
- [1] R. Munir, Matematika Diskrit. Bandung: Informatika Bandung, 2010, pp. 356-391.

- [2] J. E. Brady; A. Hyslop; N. D. Jespersen, Chemistry: The Molecular Nature of Matter. Hoboken, New Jersey: John Wiley and Sons, 2012, pp. 2-8, 13, 373-374.

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa makalah yang saya tulis ini adalah tulisan saya sendiri, bukan saduran, atau terjemahan dari makalah orang lain, dan bukan plagiasi.

Bandung, 10 Desember 2018



Ariel Ansa Razumardi 13517040