

МАКСИМАЛЬНЫЕ ВНЕШНЕПЛОСКИЕ ГРАФЫ С ЭКСТРЕМАЛЬНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ ДИАМЕТРА

Ю. Л. Носов

*Guardian Software Inc., Калгары, Канада; удалённый офис: Липецк, Россия
yl.nosov@yandex.ru*

Рассматриваются максимальные внешнеплоские графы (МВП-графы) с экстремальными значениями диаметра. Определены нижняя и верхняя оценки диаметра произвольных МВП-графов. Для решётчатых МВП-графов (т. е. для графов, уложенных на решётке из равносторонних треугольников без «дыр» и пересечений) доказано, что верхняя оценка диаметра совпадает с верхней оценкой диаметра произвольных МВП-графов; получена предварительная нижняя оценка диаметра. Для нижней и верхней оценок диаметра произвольных и решётчатых МВП-графов определены экстремальные графы, на которых эти оценки достигаются. Экстремальные графы с максимальным диаметром для произвольных и решётчатых МВП-графов совпадают. Полученные результаты могут быть использованы для классификации изображений, представленных МВП-графами, и для классификации изомеров сопряжённых полиеновых углеводородов.

Ключевые слова: *максимальные внешнеплоские графы, диаметр, экстремальные графы, графы экстремальные по диаметру.*

Введение

Рассматриваются конечные связные неориентированные графы $G = (V, E)$ без петель и кратных рёбер с множеством вершин $V(G)$ и множеством рёбер $E(G)$. Число $|V|$ вершин графа G называется его порядком и обозначается через $n(G)$. Расстоянием $d(u, v|G)$ (или просто $d(u, v)$, если ясно, о каком графе G идёт речь) между вершинами u и v графа G называется длина кратчайшей по числу рёбер простой цепи, соединяющей вершины u и v в графе G . *Эксцентриситетом* $e(v)$ вершины v графа G называется величина $e(v) = \max_{u \in V(G)} d(v, u)$. *Диаметром* $\text{diam}(G)$ графа G называется максимальное расстояние между двумя вершинами G . Кратчайшая простая цепь между вершинами u, v графа G , длина которой равна диаметру G , называется *диаметральной цепью*, а её концевые вершины u, v — *диаметральными вершинами*. Все неопределяемые ниже термины можно найти в [1; 2].

Работа посвящена определению нижней и верхней оценок диаметра максимальных внешнеплоских графов (МВП-графов) и экстремальных МВП-графов, на которых эти оценки достигаются. Напомним, что внешнеплоским графом называется плоский граф, все вершины которого принадлежат одной (обычно внешней) грани. Максимальным внешнеплоским графом называется такой внешнеплоский граф, который при добавлении хотя бы одного ребра перестаёт быть внешнеплоским [2]. Основные свойства МВП-графов представлены в [3–6].

Графы этого вида, входящие в класс хордальных графов, являются триангуляциями выпуклого многоугольника и находят широкое применение [7; 8]. В частности, такие графы применяются для перечисления изомеров сопряжённых полиено-

вых углеводов [7] и в системах искусственного интеллекта для обнаружения фигур в изображениях [8].

Диаметр графа является его топологическим инвариантом и отражает структурные свойства графа («компактность» и «разветвлённость»), поэтому его, как и любой другой топологический инвариант, можно использовать для классификации и распознавания объектов, представленных графовыми моделями. Однако наибольшее применение диаметр нашел в химии, где он обычно используется вместе с другими топологическими инвариантами для классификации и распознавания молекулярных графов, т. е. графов, вершины и рёбра которых соответствуют атомам и валентным связям молекулы химического соединения (см., например, работу [9] и её обширную библиографию).

Особенно перспективным выглядит использование диаметра МВП-графов для классификации и распознавания молекулярных графов изомеров сопряжённых полиеновых углеводов (СПУ). Это объясняется следующими факторами: молекулярные графы изомеров СПУ являются слабыми двойственными графами к МВП-графам, уложенным на треугольной решётке из равносторонних треугольников; большинство изомеров СПУ отличается друг от друга только формой, поэтому для их классификации и распознавания обычные топологические инварианты молекулярных графов не пригодны.

«Разветвлённость» молекулы химического соединения влияет на его физические свойства. Поэтому диаметр молекулярного графа химического соединения является важным классифицирующим признаком, от которого зависят свойства этого соединения. Для химических приложений важно знать, какой вид имеют молекулярные графы с экстремальными значениями классифицирующего признака. Однако в силу двойственности молекулярных графов изомеров СПУ к МВП-графам экстремальные значения их диаметра определяются экстремальными значениями диаметра соответствующих МВП-графов. Таким образом, определение минимального и максимального значений диаметра МВП-графов и МВП-графов с экстремальными значениями диаметра является актуальной задачей.

Настоящая работа является продолжением работ [10; 11] по МВП-графам и содержит полное решение поставленной задачи для произвольных МВП-графов. Для МВП-графов, уложенных на треугольной решётке, доказано, что верхняя оценка их диаметра совпадает с верхней оценкой диаметра произвольных МВП-графов; получена предварительная нижняя оценка диаметра.

1. Предварительные сведения и результаты

Приведём необходимые определения и известные результаты по МВП-графам [1–5].

Используются следующие обозначения: K_n — полный n -вершинный граф; k -вершинный полный граф (подграф) называется k -полным графом (подграфом); P_n — простая цепь с n вершинами; C_n — простой цикл с n вершинами; C_3 называется треугольником; $G[V']$ — подграф графа G , индуцированный (порождённый) подмножеством V' вершин графа G ; $\deg v$ — степень вершины v в графе G ; $\Delta(G)$, $\delta(G)$ — максимальная и минимальная степени вершин графа G .

Граф k -дерево определяется рекурсивно следующим образом: полный граф из $k + 1$ вершин есть k -дерево; k -дерево с $n + 1$ вершиной получается из k -дерева с n вершинами путём добавления в него вершины v и k рёбер, соединяющих вершину v со всеми вершинами некоторого k -полного подграфа [5]. *Простым k -деревом* на-

зывается k -дерево, в котором любой его k -полный подграф является подграфом не более двух $(k + 1)$ -полных подграфов [5].

МВП-графы, как и k -деревья, рекурсивно определимы. Это означает, что любой МВП-граф G_n порядка $n \geq 3$ или является графом K_3 , или получается из графа K_3 в результате последовательного k -кратного ($k = n - 3$) выполнения операции элементарного расширения [3]. При этом под *элементарным расширением* понимается операция добавления вершины и двух рёбер, соединяющих её с вершинами внешнего ребра [3].

Используя сходство рекурсивных определений 2-деревьев и МВП-графов, легко показать, что МВП-графы являются простыми 2-деревьями [5, лемма 1], входят в класс хордальных графов и представляют собой триангуляции выпуклого многоугольника.

Отсюда следует, что любой n -вершинный МВП-граф имеет внешнюю грань, ограниченную гамильтоновым циклом, $n - 2$ внутренних треугольных граней и не менее двух вершин степени 2, являющихся симплициальными вершинами [2]. Внутренние грани МВП-графа разделяются на три типа по числу смежных граней: концевые, промежуточные и грани ветвления. Грань ветвления соседствует с тремя внутренними гранями, промежуточная грань — с двумя гранями, а концевая грань — с одной внутренней гранью. В дальнейшем под гранью мы будем понимать простой цикл, являющийся границей этой грани.

В соответствии с [4] *2-цепью графа* мы будем называть чередующуюся последовательность $P = (e_0, t_1, e_1, t_2, \dots, t_p, e_p)$ рёбер и треугольников (C_3), в которой каждый треугольник t_i содержит точно два ребра e_{i-1} и e_i , ($1 \leq i \leq p$); p называется *размером 2-цепи*.

Более удобно такую цепь понимать как последовательность попарно смежных треугольных граней и обозначать как $P = (t_1, t_2, \dots, t_p)$ [5]. Далее грани t_1, t_p мы будем называть концевыми гранями 2-цепи P и говорить, что она *2-соединяет* грани t_1, t_p . В [5] было доказано, что в любом МВП-графе G для любых его двух граней есть единственная 2-цепь, которая их 2-соединяет.

Определение 1. *Стволом МВП-графа G_n называется его подграф $H = \bigcup_{i=1}^p t_i$, индуцированный вершинами 2-цепи $P = (t_1, t_2, \dots, t_p)$, концевые грани t_1, t_p которой являются концевыми гранями графа G_n и симплициальные вершины граней t_1, t_p являются диаметральными.*

Определение 2. *Сегментом МВП-графа G_n называется его подграф $S = \bigcup_{i=1}^p t_i$, индуцированный вершинами 2-цепи $P = (t_1, t_2, \dots, t_p)$, у которой концевые грани t_1, t_p являются или гранями ветвления, или концевыми гранями графа G_n , или одна из граней t_1, t_p является концевой гранью графа G_n , а другая — гранью ветвления.*

Имеется три вида сегментов: *магистральный сегмент* (грани t_1, t_p — концевые), *промежуточный сегмент* (грани t_1, t_p — грани ветвления) и *ответвительный сегмент*, соединяющий грань ветвления с концевой гранью графа. *Размером сегмента* называется число его граней. Ясно, что число ответвительных сегментов МВП-графа определяет меру его «разветвлённости».

Далее *степенью $\rho(G_n)$ разветвлённости* МВП-графа G_n мы будем называть число N_{SB} его ответвительных сегментов, которое равно числу N_{FB} граней ветвления, т. е. $\rho(G_n) = N_{SB} = N_{FB}$. Нетрудно заметить, что число граней ветвления равно числу N_{FT} концевых граней за вычетом двух концевых граней ствола. Таким образом, степень разветвлённости G_n можно определить как $\rho(G_n) = N_{FT} - 2$.

Определение 3. *Внутренним графом* $\text{Int}(G_n)$ МВП-графа G_n называется его связный подграф, полученный из G_n удалением всех внешних рёбер с последующим удалением изолированных вершин (в G_n эти вершины были симплицальными вершинами) [11].

В соответствии с [11] МВП-графы с двумя симплицальными вершинами будем называть *МВП-графами класса «2-цепь»*, а МВП-графы, имеющие не менее трёх симплицальных вершин — *МВП-графами класса «2-дерево»*.

Любой МВП-граф G_n^p класса «2-цепь» обладает следующими свойствами [11]:

1) внутренний граф $\text{Int}(G_n^p)$ графа G_n^p является двудольным графом с долями X, Y , т. е. $\text{Int}(G_n^p) = (X, Y; E)$;

2) гамильтонов цикл C_n графа G_n^p разделяется симплицальными вершинами s_1, s_2 на две цепи $P_A = (s_1, x_1, x_2, \dots, x_a, s_2)$ и $P_B = (s_1, y_1, y_2, \dots, y_b, s_2)$, причём $X = \{x_1, x_2, \dots, x_a\}$ и $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_b\}$;

3) граф G_n^p можно уложить на плоскости так, что все вершины цепей P_A, P_B будут размещены на двух параллельных линиях A, B без пересечений рёбер и каждое ребро является отрезком прямой.

Полное описание и классификация МВП-графов класса «2-цепь» даны в работе [11]. В классификацию входят три типа МВП-графов класса «2-цепь», различающихся по своей структуре, полностью определяемой их внутренним графом.

Графы этих трёх типов получили название МВП-графов типов «веер», «лестница» и «цепь». Образцы МВП-графов класса «2-дерево» и графов типа «цепь», «лестница» и «веер» приведены на рис. 1, а, б, в, г.

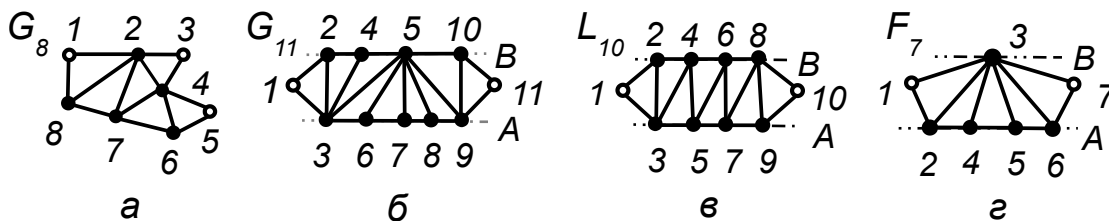


Рис. 1. МВП-графы: а — класса «2-дерево»; б — типа «цепь»; в — типа «лестница»; г — типа «веер»

При работе с МВП-графами класса «2-цепь» более удобна их рекурсивная характеристика, введённая в [11]. В этой рекурсивной характеристике используется понятие *элементарного расширения s-типа* как элементарного расширения, при котором новая вершина соединяется рёбрами с вершинами ребра, инцидентного симплицальной вершине.

Определение 4. МВП-граф порядка 4, полученный из полного графа K_4 удалением одного ребра, называется *графом алмаз* и обозначается через D_4 . (В англоязычной математической литературе такой граф называется графом diamond).

Утверждение 1. *Любой n -вершинный ($n \geq 5$) МВП-граф класса «2-цепь» может быть получен из графа алмаз D_4 в результате последовательного k -кратного ($k = n - 4$) выполнения операции элементарного расширения s -типа.*

Таким образом, свойства МВП-графа G_n класса «2-цепь» определяются последовательностью (h_1, h_2, \dots, h_k) k операций элементарного расширения s -типа. Каждая операция элементарного расширения s -типа может быть выполнена со стороны любого из двух рёбер, инцидентных симплицальной вершине, т. е. имеется два варианта добавления новой вершины. Следовательно, каждому n -вершинному

($n = 4 + k$) МВП-графу G_n класса «2-цепь» можно поставить в соответствие некоторый двоичный кортеж $B(G_n) = (b_1, b_2, \dots, b_k)$, в котором элемент b_i описывает свойство операции h_i элементарного расширения и принимает значение 0 или 1 в зависимости от того, на ребре какой цепи (P_B или P_A) выполняется операция h_i . (Далее кортеж $B(G_n)$ мы будем называть *кортежем свойств*). Например МВП-граф G_{11} типа «цепь» имеет кортеж свойств $B(G_{11}) = (1, 1, 0, 0, 0, 0, 1)$, МВП-граф L_{10} типа «лестница» имеет кортеж свойств $B(L_{10}) = (1, 0, 1, 0, 1, 0)$, а МВП-граф F_7 типа «веер» — кортеж свойств $B(F_7) = (0, 0, 0)$ (см. рис. 1, б, в, г соответственно).

Замечание 1. МВП-граф G_8 на рис. 1, а имеет *циклическую нумерацию* вершин, когда номер вершины определяется её порядковым номером в гамильтоновом цикле. Графы G_{11}, L_{10}, F_7 на рис. 1, б, в, г, имеют *рекурсивную нумерацию* вершин. Такая нумерация возникает при построении n -вершинного МВП-графа из K_3 (или D_4) посредством k -кратного выполнения элементарного расширения. Для этого необходимо сначала пронумеровать вершины исходного графа $K_3(D_4)$ числами 1, 2, 3, (4), а все остальные вершины нумеровать последовательно в порядке их добавления в граф [10].

Замечание 2. Легко видеть, что при построении графа типа «веер» каждая операция элементарного расширения s -типа всегда выполняется на ребре одной цепи, например цепи P_B (рис. 1, г), а при построении графа типа «лестница» каждая операция элементарного расширения s -типа выполняется поочерёдно то на ребре цепи P_B , то на ребре P_A (рис. 1, в).

Для МВП-графов типа «лестница» длины их цепей $P_A = (s_1, x_1, x_2, \dots, x_a, s_2)$ и $P_B = (s_1, y_1, y_2, \dots, y_b, s_2)$ при чётном n равны, а при нечётном n отличаются друг от друга на единицу, т. е. при чётном n выполняется равенство $a = b$, а при нечётном n — равенство $b = a + 1$ или $a = b + 1$.

Нетрудно заметить, что любой МВП-граф L_n типа «лестница» имеет «поперечные» рёбра $\{x_1, y_1\}, \{x_2, y_2\}, \dots, \{x_p, y_p\}$ ($p = \lfloor (n - 2)/2 \rfloor$) и «диагональные» рёбра одного из двух видов: *диагональные рёбра первого вида* $\{x_1, y_2\}, \{x_2, y_3\}, \dots, \{x_g, y_{g+1}\}$ или *диагональные рёбра второго вида* $\{y_1, x_2\}, \{y_2, x_3\}, \dots, \{y_g, x_{g+1}\}$, причём $g = p - 1$ при чётном n и $g = p$ при нечётном n .

Подграф $L_n \setminus \{s_1, s_2\}$ МВП-графа L_n типа «лестница», полученный после удаления его симплициальных вершин s_1, s_2 , можно представить в виде объединения попарно пересекающихся подграфов $Z_1, Z_2, \dots, Z_{p-1}, t_{ab}$ ($p = \lfloor (n - 2)/2 \rfloor$):

$$L_n \setminus \{s_1, s_2\} = \begin{cases} Z_1 \cup Z_2 \cup \dots \cup Z_{p-1}, & \text{если } n \text{ чётное;} \\ Z_1 \cup Z_2 \cup \dots \cup Z_{p-1} \cup t_{ab}, & \text{если } n \text{ нечётное,} \end{cases}$$

где Z_i — подграф, порождённый множеством вершин $\{x_i, x_{i+1}, y_{i+1}, y_i\}$, т. е. $Z_i = G[\{x_i, x_{i+1}, y_{i+1}, y_i\}]$; t_{ab} — подграф (треугольник), порождённый множеством вершин $\{x_a, x_{a-1}, y_b\}$ или множеством вершин $\{y_b, y_{b-1}, x_a\}$.

Далее подграфы Z_i , порождённые множеством вершин $\{x_i, x_{i+1}, y_{i+1}, y_i\}$, мы будем называть *z-ячейками*, а подграф t_{ab} — *Δ-ячейкой*.

Все z -ячейки и Δ -ячейки можно разделить на два вида по виду «диагонального» ребра, принадлежащего ячейке. Ясно, что в МВП-графе типа «лестница» все z -ячейки и Δ -ячейка являются ячейками одного вида.

Определение 5. Любой МВП-граф G_n типа «цепь» называется *ступенчатым МВП-графом*, если он имеет «поперечные» рёбра и «диагональные» рёбра двух

видов, образующие два вида z -ячеек Z_1, Z_2, \dots, Z_{p-1} ($p = \lfloor (n-2)/2 \rfloor$) и Δ -ячейку t_{ab} , причём $G_n \setminus \{s_1, s_2\} = Z_1 \cup Z_2 \cup \dots \cup Z_{p-1}$, если n чётное и $G_n \setminus \{s_1, s_2\} = Z_1 \cup Z_2 \cup \dots \cup Z_{p-1} \cup t_{ab}$, если n нечётное; в противном случае, граф G_n называется *квазиступенчатым МВП-графом*.

Любой ступенчатый МВП-граф G_n может быть получен из МВП-графа L_n типа «лестница» посредством замены одного или нескольких «диагональных» рёбер одного вида на «диагональные» рёбра другого вида.

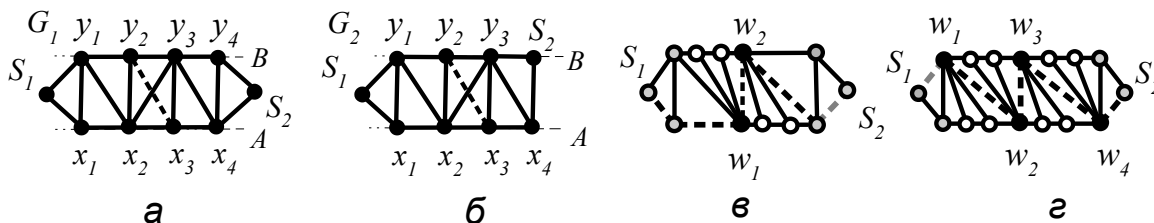


Рис. 2. МВП-графы: ступенчатые МВП-графы (а, б); квазиступенчатые МВП-графы (в, г); создаваемые вершины степени 6, 7 обозначены зачернёнными кружками; добавленные вершины — пустыми кружками; диаметральные цепи показаны пунктиром

Пример 1. Например, граф G_1 , представленный на рис. 2, а, имеет 4 «поперечных» ребра и 3 «диагональных» ребра двух видов, образующих 3 z -ячейки. А граф G_2 , представленный на рис. 2, б, имеет 3 «поперечных» ребра и 3 «диагональных» ребра двух видов, образующих 2 z -ячейки и Δ -ячейку. (Рёбра z -ячеек и Δ -ячейки показаны сплошными линиями, заменяемые рёбра — пунктирными). Оба графа получены из МВП-графов типа «лестница» заменой «диагонального» ребра $\{y_2, x_3\}$ (изображён пунктиром) на «диагональное» ребро $\{x_2, y_3\}$.

Ступенчатые МВП-графы имеют одну или несколько вершин степени 5, каждая из которых инцидентна «диагональным» рёбрам двух разных видов. Например, в графах G_1, G_2 такими вершинами являются вершины x_2, y_3 .

Квазиступенчатые МВП-графы имеют одну или несколько вершин степени 5, 6 или более. Из этого следует, что квазиступенчатый МВП-граф может быть получен из МВП-графа типа «лестница» или из ступенчатого МВП-графа созданием q ($q \geq 1$) вершин w_1, w_2, \dots, w_q со степенью 5, 6 или более. Для этого в исходный граф посредством гомеоморфных подразбиений внешних рёбер добавляются t_1, t_2, \dots, t_q вершин и каждая вершина w_j соединяется рёбрами со всеми t_j вершинами. Образцы квазиступенчатых МВП графов представлены на рис. 2, в, г.

Отметим важное для химических приложений свойство МВП-графов.

Свойство 1. Пусть G_n — МВП граф, а $T^*(G_n)$ — слабый двойственный к нему граф. Тогда $T^*(G_n)$ есть дерево и $\Delta(T^*(G_n)) = 3$.

Вершины $T^*(G_n)$ степени 3 будем называть *вершинами ветвления*, степени 2 — *промежуточными вершинами*, а степени 1 — *висячими вершинами*. *Сегментом* дерева $T^*(G_n)$ называется его простая цепь, концевые вершины которой являются или вершинами ветвления, или висячими вершинами, а все внутренние вершины цепи имеют степень 2 [12]. Различают три вида сегментов: *магистральный сегмент* (обе концевые вершины являются висячими вершинами), *промежуточный сегмент* (обе концевые вершины являются вершинами ветвления), *ответвительный сегмент* (одна вершина — висячая, другая — вершина ветвления).

В качестве *степени разветвлённости* $\rho(T^*(G_n))$ графа $T^*(G_n)$ можно принять число $N_{SB}(T^*(G_n))$ его ответвительных сегментов, которое равно числу $N_{VB}(T^*(G_n))$ вершин ветвления. Очевидно, что в этом случае число $N_{VB}(T^*(G_n))$

вершин ветвления равно числу $N_{VT}(T^*(G_n))$ висячих вершин за вычетом двух висячих вершин, являющихся диаметральными вершинами. Следовательно, степень разветвлённости $\rho(T^*(G_n))$ графа $T^*(G_n)$ можно определить как $\rho(T^*(G_n)) = N_{VT}(T^*(G_n)) - 2$.

В силу взаимной двойственности МВП-графа G_n и слабого двойственного к нему графа $T^*(G_n)$ каждой концевой грани G_n соответствует висячая вершина $T^*(G_n)$, каждой грани ветвления G_n соответствует вершина ветвления $T^*(G_n)$, а каждому ответительному сегменту G_n — ответительный сегмент $T^*(G_n)$.

Свойство 2. Степень разветвлённости $\rho(G_n)$ МВП-графа G_n равна степени разветвлённости $\rho(T^*(G_n))$ слабого двойственного к нему графа $T^*(G_n)$, т. е. $\rho(G_n) = \rho(T^*(G_n))$.

2. Изменение диаметра МВП-графов при добавлении симплициальных вершин

Нам понадобятся следующие хорошо известные и очевидные утверждения.

Утверждение 2. Пусть u и v — смежные вершины связного графа G , а x — любая другая вершина. Тогда справедливы неравенства

$$\begin{aligned} |d(u, x) - d(v, x)| &\leq 1, \\ |e(u) - e(v)| &\leq 1. \end{aligned} \quad (1)$$

Утверждение 3. Пусть u и v — смежные вершины МВП-графа G , z — симплициальная вершина, смежная с вершинами u и v , а x — любая другая отличная от них вершина. Тогда справедливы равенства

$$\begin{aligned} d(z, x) &= \min[d(u, x), d(v, x)] + 1, \\ e(z) &= \min[e(u), e(v)] + 1. \end{aligned} \quad (2)$$

Из утверждения 1 следует, что любой n -вершинный ($n \geq 5$) МВП-граф G_n класса «2-цепь», полученный из исходного МВП-графа G^0 , определяется последовательностью (h_1, h_2, \dots, h_k) k операций элементарного расширения s -типа. В процессе выполнения этой последовательности операций будут получены МВП-графы $(G^1, G^2, \dots, G^k = G_n)$, где G^i — граф, полученный после выполнения операции h_i над графом G^{i-1} . В каждой i -й операции добавляется симплициальная вершина S_i и соединяется двумя рёбрами с симплициальной вершиной S_{i-1} , полученной на $(i-1)$ -м шаге, и с одной из двух вершин, смежных с вершиной S_{i-1} .

Диаметр графа G^i равен эксцентриситету $e(S_i)$ вершины S_i , который определяется согласно (2), поэтому $\text{diam}(G^i) = e(S_i) = \min[e(S_{i-1}), e(v_{i-1})] + 1$; здесь v_{i-1} — одна из вершин, смежных с S_{i-1} , с которой вершина S_i соединяется ребром в i -й операции. Величина $e(S_i)$ и, следовательно, величина диаметра G^i зависит от соотношения величин эксцентриситетов $e(S_{i-1}), e(v_{i-1})$.

В случае, когда $e(S_{i-1}) = e(v_{i-1})$, эксцентриситет $e(S_i)$ увеличивается на единицу, т. е. $e(S_i) = e(S_{i-1}) + 1$. Если же $e(S_{i-1}) > e(v_{i-1})$, то эксцентриситет не изменяется, т. е. $e(S_i) = e(S_{i-1})$.

Операцию h_i , в которой происходит увеличение эксцентриситета (диаметра), мы будем называть *активной операцией*, а операцию, в которой эксцентриситет (диаметр) не изменяется, — *пассивной операцией*.

Таким образом, МВП-графу G_n соответствуют кортеж свойств $B(G_n) = (b_1, b_2, \dots, b_k)$ и кортеж активностей $A(G_n) = (a_1, a_2, \dots, a_k)$, где a_i — активность

операции h_i элементарного расширения; причём $a_i = 1$, если операция h_i активная и $a_i = 0$, если операция h_i пассивная.

Обозначим через ΔD_i величину увеличения диаметра при выполнении i -й операции. Тогда диаметр графа G^k определяется через диаметр $\text{diam}(G^0)$ исходного графа G^0 по следующему выражению $\text{diam}(G^k) = \text{diam}(G^0) + \sum_{i=1}^k \Delta D_i$. Ясно, что $\Delta D_i = 1$, если операция h_i активная, и $\Delta D_i = 0$, если операция h_i пассивная. Следовательно, диаметр графа G^k определяется числом N_A активных операций и диаметром исходного графа G_0 , т. е. $\text{diam}(G^k) = \text{diam}(G^0) + N_A$.

Предложение 1. Пусть G^0 — МВП-граф класса «2-цепь», имеющий 4 вершины, а G_n — МВП-граф класса «2-цепь» порядка n ($n = 4 + k$), полученный из G^0 последовательностью (h_1, h_2, \dots, h_k) операций элементарного расширения s -типа. Тогда

- а) первая операция h_1 является пассивной независимо от варианта её исполнения;
- б) если операция h_i активна, то следующая за ней операция h_{i+1} будет пассивной операцией независимо от варианта её исполнения;
- в) если операция h_i — пассивная и операции h_i, h_{i+1} имеют одинаковые свойства, т. е. если $b_i = b_{i+1}$, то операция h_{i+1} также является пассивной; в противном случае, когда $b_i \neq b_{i+1}$, операция h_{i+1} является активной.

Доказательство. а) В графе G^0 его симплициальная вершина S_0 имеет эксцентриситет, равный 2, а смежные с ней вершины x_0, y_0 имеют одинаковые эксцентриситеты, равные 1. Отсюда следует, что эксцентриситеты вершин S_1, S_0 равны независимо от варианта исполнения операции h_1 (см. рис. 3, а, б).

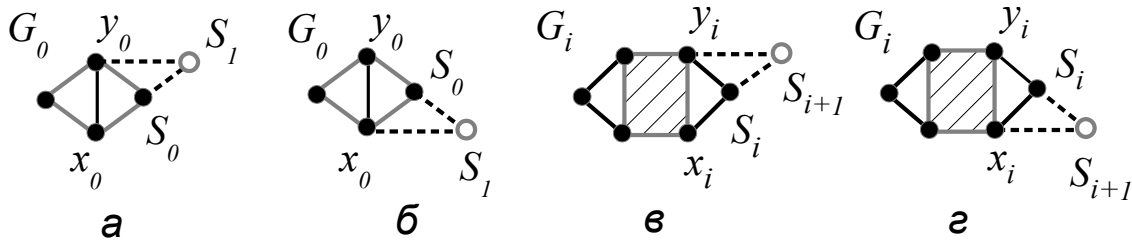


Рис. 3. Элементарные расширения МВП-графов: расширение МВП-графа G^0 (а, б); расширение произвольного МВП графа (в, г)

б) После выполнения активной операции h_i новая вершина S_i будет соединена рёбрами с вершинами x_i и y_i . Но тогда в силу (2) и условия активности операции h_i эксцентриситеты вершин x_i и y_i должны быть одинаковы, т. е. $e(x_i) = e(y_i) < e(S_i)$. Отсюда следует, что эксцентриситет вершины S_{i+1} , добавленной после выполнения операции h_{i+1} независимо от варианта её исполнения (на ребре $\{S_i, x_i\}$ или на ребре $\{S_i, y_i\}$), будет равен эксцентриситету вершины S_i , т. е. $e(S_{i+1}) = e(S_i)$ (см. рис. 3, в, г).

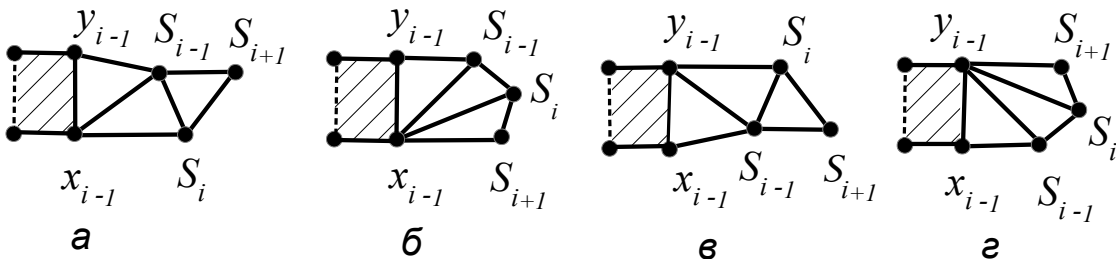


Рис. 4. Разные варианты последовательных элементарных расширений МВП-графа

в) Предположим, что операция h_i пассивная. Такая ситуация возможна в двух случаях: 1) операция h_{i-1} активная; 2) операция h_{i-1} пассивная.

1 случай. Так как операция h_{i-1} активная, то в силу (1), (2) выполняется равенство $e(y_{i-1}) = e(x_{i-1})$. Следовательно, если $b_i = 1$, то $e(S_{i-1}) > e(x_{i-1})$ и $e(S_i) = e(S_{i-1})$, а если $b_i = 0$, то $e(S_{i-1}) > e(y_{i-1})$ и $e(S_i) = e(S_{i-1})$.

Но тогда, если $b_i = 1$ и $b_{i+1} = 0$, то $e(S_{i+1}) = \min[e(S_i), e(S_{i-1})] + 1 = e(S_i) + 1$, следовательно, h_{i+1} — активная операция (рис. 4, а).

А если $b_i = 1$ и $b_{i+1} = 1$, то для $e(S_{i+1})$ имеем $e(S_{i+1}) = \min[e(S_i), e(x_{i-1})] + 1 = e(S_i)$, поэтому h_{i+1} — пассивная операция (рис. 4, б).

Также если $b_i = 0$ и $b_{i+1} = 1$, то $e(S_{i+1}) = \min[e(S_i), e(S_{i-1})] + 1 = e(S_i) + 1$, следовательно, h_{i+1} — активная операция (рис. 4, в).

Но если $b_i = 0$ и $b_{i+1} = 0$, то $e(S_{i+1}) = \min[e(S_i), e(y_{i-1})] + 1 = e(S_i)$, поэтому h_{i+1} — пассивная операция (рис. 4, г).

2 случай. Так как операция h_{i-1} пассивная, то $e(x_{i-1}) \neq e(y_{i-1})$. Положим $e(y_{i-1}) > e(x_{i-1})$. Откуда, используя (1), (2), для $b_i = 1$ получим $e(S_{i-1}) > e(x_{i-1})$ и $e(S_i) = e(S_{i-1})$. Вариант с $b_i = 0$ не подходит, поскольку в этом случае $e(S_{i-1}) = e(y_{i-1})$ и, следовательно, операция h_i будет активной, что противоречит принятому предположению об её пассивности.

Теперь положим $e(x_{i-1}) > e(y_{i-1})$. С помощью (1), (2) для $b_i = 0$ получим $e(S_{i-1}) > e(y_{i-1})$ и $e(S_i) = e(S_{i-1})$. Вариант с $b_i = 1$ не подходит, поскольку в этом случае $e(S_{i-1}) = e(x_{i-1})$ и поэтому операция h_i будет активной, что противоречит предположению.

Дальнейший ход доказательства полностью совпадает с ходом доказательства для случая 1. \square

3. МВП-графы с экстремальными значениями диаметра

Теорема 1. Пусть G_n — МВП-граф класса «2-цепь» порядка $n \geq 6$ с диаметром $\text{diam}(G_n)$. Тогда $2 \leq \text{diam}(G_n) \leq \lfloor n/2 \rfloor$, причём левое неравенство превращается в равенство, если граф G_n есть МВП-граф типа «веер», а правое неравенство становится равенством, если G_n является ступенчатым МВП-графом или МВП-графом типа «лестница».

Доказательство. Левое равенство для МВП-графов типа «веер» и минимальность их диаметра очевидны (рис. 1, г). Докажем правое неравенство. Из утверждения 1 следует, что любой n -вершинный ($n \geq 5$) МВП-граф G_n класса «2-цепь» получается из графа алмаз D_4 посредством выполнения последовательности (h_1, h_2, \dots, h_k) k ($k = n - 4$) операций элементарного расширения s -типа. В силу предложения 1 (б) после активной операции обязательно следует пассивная операция. Следовательно, с учётом предложения 1 (а) число N_A активных операций равно числу пассивно-активных пар операций, т. е. — числу пар операций h_i, h_{i+1} ($i \in \{1, 2, \dots, k-1\}$), в которых операция h_i пассивная, а операция h_{i+1} активная.

Ясно, что кортеж активностей МВП-графа G_n класса «2-цепь» с максимальным диаметром имеет вид $A(G_n) = (0, 1, 0, 1, \dots)$. Но тогда максимально возможное число N_{\max} пассивно-активных пар операций определяется по выражению $N_{\max} = \lfloor k/2 \rfloor$. Отсюда максимальный диаметр МВП-графа класса «2-цепь» определяется по выражению $\max[\text{diam}(G_n)] = \text{diam}(D_4) + \lfloor (n-4)/2 \rfloor$. Окончательно, подставляя значение $\text{diam}(D_4) = 2$, получаем $\max[\text{diam}(G_n)] = \lfloor n/2 \rfloor$.

Из замечания 2 и предложения 1 следует, что n -вершинный МВП-граф L_n типа «лестница» обладает кортежем активностей $A(L_n) = (0, 1, 0, 1, \dots)$ и, следовательно,

но, максимальным диаметром

$$\text{diam}(L_n) = \lfloor n/2 \rfloor. \quad (3)$$

Докажем, что ступенчатый МВП-граф G_n , полученный из МВП графа L_n типа «лестница», имеет диаметр $\text{diam}(G_n) = \text{diam}(L_n)$. Легко видеть (рис. 2, а, б), что в любом ступенчатом МВП-графе G_n , как и в МВП-графе типа «лестница», кратчайшая цепь P_{kr} между двумя симплициальными вершинами проходит в каждой ячейке по одному ребру (внешнему или «диагональному»). Поэтому её длина $d(P_{kr})$ определяется через число N_c ячеек $d(P_{kr}) = N_c + 2$. При чётном n имеем $N_c + 1 = |X| = |Y| = (n - 2)/2$. Следовательно, $d(P_{kr}) = d(P_A) = d(P_B) = n/2$.

При нечётном n число ячеек определяется числом вершин более короткой цепи, например P_B (рис. 2, б), по выражению $N_c + 1 = |Y| = (n - 3)/2$. Следовательно, $d(P_{kr}) = d(P_B) = (n - 1)/2$. Таким образом, для диаметров этих графов выполняется равенство $\text{diam}(G_n) = \text{diam}(L_n) = \lfloor n/2 \rfloor$.

Пусть Q_n — квазиступенчатый МВП-граф порядка n , полученный из p -вершинного ($p \geq 6$) МВП-графа L_p типа «лестница» (или из ступенчатого МВП-графа G_p) созданием q вершин w_1, w_2, \dots, w_q со степенями 5, 6 или более. Число вершин Q_n определяется как $n = p + k$, где $k = t_1 + t_2 + \dots + t_q$, а $t_j = \deg(w_j) - 4$.

Из-за добавления новых вершин длина цепи P_A и (или) P_B увеличивается. Однако при этом диаметр графа Q_n или не увеличивается, или увеличивается очень незначительно. Это объясняется тем, что диаметральная цепь между симплициальными вершинами s_1 и s_2 будет проходить через каждую вершину w_j по одному или по двум (рис. 2, в, г) инцидентным ей рёбрам, в обход добавленных вершин.

Сравним диаметры МВП-графов Q_n, L_n . Легко показать, что диаметры МВП-графов Q_n, L_n определяются по следующим выражениям:

$$\text{diam}(Q_n) = \text{diam}(G_p) + \Delta D(Q_n), \quad \text{diam}(L_n) = \text{diam}(L_p) + \Delta D(L_n),$$

где $\Delta D(Q_n) = \sum_{i=1}^{N_c} \Delta D_i$, $\Delta D(L_n) = \lfloor k/2 \rfloor$, если p — чётное, и $\Delta D(L_n) = \lceil k/2 \rceil$, если p — нечётное.

Ясно, что если диаметральная цепь P_{kp} проходит по i -й ячейке через одно ребро (рис. 2, в), инцидентное одной или двум вершинам w_j, w_{j+1} , то увеличение диаметра не происходит, т. е. величина изменения ΔD_i диаметра графа Q_n равна 0.

Если же диаметральная цепь P_{kp} проходит по i -й ячейке через вершины w_j, w_{j+1} по двум рёбрам, из которых одно ребро «поперечное» (рис. 2, г), то диаметр графа увеличивается на 1, т. е. $\Delta D_i = 1$. Отсюда следует, что $\Delta D(Q_n) = N_c^2 < N_c$, где N_c^2 — число ячеек, для которых $\Delta D_i = 1$.

Легко видеть, что на каждую единицу увеличения длины диаметральной цепи приходится по двум или более новых вершин, добавленных в одну ячейку (рис. 2, г) или в две соседние ячейки (рис. 2, в).

Следовательно, $\Delta D(L_n) > N_c^2 > \Delta D(Q_n)$ и $\text{diam}(Q_n) < \text{diam}(L_n)$. \square

Следствие 1. Для диаметров МВП-графов L_n и L_{n-1} типа «лестница» порядка n и $n - 1$ соответственно выполняется одно из следующих равенств:

$$\begin{aligned} \text{diam}(L_{n-1}) &= \text{diam}(L_n) - 1 \text{ при чётном } n, \\ \text{diam}(L_{n-1}) &= \text{diam}(L_n) \text{ при нечётном } n. \end{aligned}$$

Определение 6. МВП-граф класса «2-дерево», полученный из p -вершинного МВП-графа F_p типа «веер» посредством элементарных расширений на k рёбрах, ни

одно из которых не инцидентно ни одной симплициальной вершине F_p , называется *МВП-графом типа «ребень»* и обозначается через $H_{p,k}$, ($p \geq 5, k \geq 1$).

Определение 7. МВП-граф $H_{p,k}$, ($p \geq 6, k \geq 2$) называется *МВП-графом S -ребень* и обозначается через $H_{p,k}^S$, если для любых двух добавленных симплициальных вершин s_i, s_j выполняется неравенство $d(s_i, s_j) \leq 3$, если же $d(s_i, s_j) \geq 4$, то граф $H_{p,k}$ называется *МВП-графом L -ребень* и обозначается как $H_{p,k}^L$.

Примеры построения МВП-графов $H_{5,1}, H_{p,1}$ и $H_{p,2}^S, H_{p,3}^S$ изображены на рис. 5, а, б, в, г.

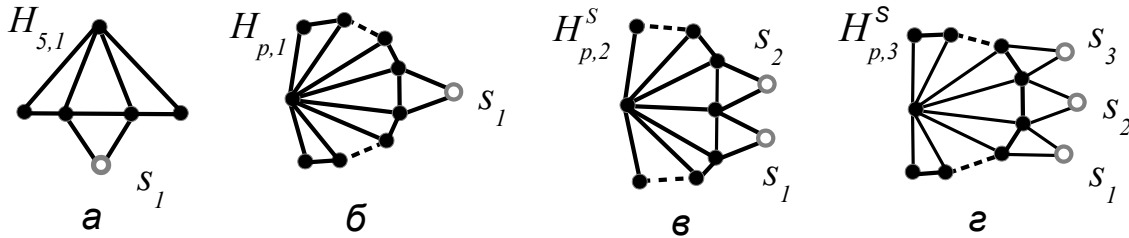


Рис. 5. МВП-графы класса «2-дерево» с малым диаметром: $H_{5,1}$ (а); МВП-граф $H_{p,1}$ (б); МВП-граф $H_{p,2}^S$ (в); МВП-граф $H_{p,3}^S$ (г); пунктиром показана последовательность попарно смежных вершин МВП-графа типа «веер»; пустыми кружками — добавленные симплициальные вершины

Определение 8. Ствол, являющийся МВП-графом типа «лестница» (ступенчатым МВП-графом), называется *L -стволом* (*S -стволом*).

Теорема 2. Пусть G_n — МВП-граф класса «2-дерево» порядка $n \geq 6$. Тогда

$$\text{diam}(G_6) = \text{diam}(H_{5,1}) = 2, \text{ если } n = 6, \tag{4}$$

$$3 \leq \text{diam}(G_n) \leq \text{diam}(L_n), \text{ если } n \geq 7, \tag{5}$$

причём равенство (4) выполняется, если граф G_6 есть МВП-граф $H_{5,1}$, изображённый на рис. 5, а; левое неравенство в (5) обращается в равенство тогда и только тогда, когда граф G_n есть один из МВП-графов $H_{p,1}, H_{p,2}^S, H_{p,3}^S$, изображённых на рис. 5, б, в, г, а правое неравенство в (5) обращается в равенство тогда и только тогда, когда граф G_n имеет нечётное число вершин, L -ствол или S -ствол и один ответственный сегмент размера 2.

Доказательство. Доказательства равенства (4) и левого неравенства в (5) очевидны и вытекают из построения МВП-графов $H_{5,1}, H_{p,1}, H_{p,2}^S, H_{p,3}^S$.

Докажем правое неравенство в (5). По определению, любой МВП-граф G_n класса «2-дерево» имеет ствол H из n_H вершин и n_B , ($n_B = n - n_H$) вершин, не принадлежащих стволу. Ясно, что любая цепь между диаметральными вершинами, проходящая через вершины ствола и через вершины, не входящие в ствол, будет длиннее, чем диаметральная цепь. Поэтому диаметральная цепь (как самая короткая) проходит только через вершины и рёбра ствола. Отсюда следует, что диаметр $\text{diam}(G_n)$ графа G_n равен диаметру $\text{diam}(H)$ его ствола H , т. е. $\text{diam}(G_n) = \text{diam}(H)$.

Тогда если в G_n число n_B вершин, не входящих в ствол, больше 1 (т. е. $n_B > 1$), то всегда выполняется неравенство $\text{diam}(L_n) > \text{diam}(G_n)$. Если в G_n есть всего одна вершина, не входящая в ствол, т. е. $n_B = 1$, то в случае, когда ствол есть квазиступенчатый МВП-граф, выполняется неравенство $\text{diam}(L_n) > \text{diam}(G_n)$.

В других случаях, когда ствол есть ступенчатый МВП-граф или МВП-граф типа «лестница» в силу следствия 1 при нечётном n выполняется равенство $\text{diam}(L_n) = \text{diam}(G_n)$, а при чётном n — неравенство $\text{diam}(L_n) > \text{diam}(G_n)$. \square

Пример 2. Например, МВП-граф G_8 , представленный на рис. 1, *a*, имеет диаметр 3 и две диаметральные вершины 1 и 5. Ствол графа (с вершинами 1,2,4,5,6,7,8) есть МВП-граф L_7 типа «лестница»; ответвительный сегмент — размера 2 с вершинами 3,4,7,2. Число n вершин графа G_8 чётное. Следовательно, $\text{diam}(L_8) > \text{diam}(G_8)$.

4. Диаметр МВП-графов, уложенных на треугольной решётке из равносторонних треугольников

Довольно привлекательной областью применения МВП-графов является их использование для распознавания и классификации геометрических изомеров сопряжённых полиеновых углеводов (СПУ). Молекулярные графы СПУ представляют собой деревья, в которых любые два смежных ребра образуют угол 120° . Причём каждый молекулярный граф СПУ является слабым двойственным графом некоторого МВП-графа [7]. Отсюда следует, что молекулярные графы СПУ вписаны как двойственные в МВП-графы, вершины и рёбра которых располагаются на узлах и рёбрах решётки из равносторонних треугольников без образования «дыр» и пересечений (см. рис. 6).

Поэтому для того, чтобы ранее полученные оценки диаметра нашли свое применение в химических приложениях, их необходимо скорректировать с учётом следующих ограничений: (а) вершины и рёбра МВП-графов должны располагаться на узлах и рёбрах решётки из равносторонних треугольников без образования «дыр» и пересечений; (б) максимальная степень $\Delta(G)$ вершин МВП-графа G ограничена и $\Delta(G) \leq 6$.

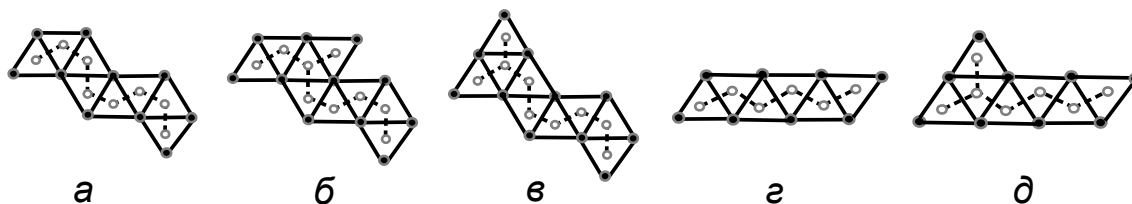


Рис. 6. Взаимно однозначное соответствие МВП-графов и слабых двойственных к ним деревьев: ступенчатый МВП-граф (*a*); МВП-граф типа «лестница» (*г*); МВП-графы с ответвительным сегментом (*б, в, д*); рёбра деревьев, слабых двойственных к МВП-графам, показаны пунктиром, а вершины — пустыми кружками

Далее МВП-граф, удовлетворяющий вышеуказанным ограничениям, мы будем называть МВП-графом, уложенным на треугольной решётке, или для краткости *решётчатым МВП-графом*.

Нетрудно заметить, что для верхней оценки диаметра решётчатых МВП-графов справедливо следующее утверждение.

Теорема 3. *Максимальное значение диаметра решётчатых МВП-графов совпадает с максимальным значением диаметра произвольных МВП-графов.*

Доказательство. Действительно, имеется четыре вида МВП-графов с максимальным диаметром: МВП-графы типа «лестница»; ступенчатые МВП-графы; МВП-графы с нечётным числом вершин, имеющие L -ствол или S -ствол и один ответвительный сегмент размера 2. Но все эти графы имеют максимальную степень вершин $\Delta(G) \leq 6$ и могут быть уложены на треугольной решётке без «дыр» и пересечений. Образцы решётчатых МВП-графов этих видов и двойственные им молекулярные графы представлены на рис. 6. \square

В силу теорем 1, 2 максимальный диаметр имеют МВП-графы, ствол которых является МВП-графом типа «лестница» или ступенчатым МВП-графом и не имеют ответвительных сегментов. С увеличением числа ответвительных сегментов и, следовательно, с увеличением «разветвлённости» диаметр МВП-графа уменьшается. В пределе МВП-граф с максимальным числом ответвительных сегментов (с максимальной «разветвлённостью») будет иметь минимальное, или близкое к нему, значение диаметра.

Определение 9. *Редукцией* называется удаление симплициальной вершины ствола МВП-графа (при этом образуется новый ствол) с последующим добавлением симплициальной вершины, смежной с вершинами внешнего ребра (нового ствола), не инцидентного ни одной симплициальной вершине нового ствола.

Теорема 4. Пусть G_n^R — n -вершинный МВП-граф класса «2-дерево», имеющий L -ствол и максимальное число R ответвительных сегментов размера 2, а G_n^P — МВП-граф такого же типа, что и G_n^R , но с меньшим числом P ответвительных сегментов. Тогда

$$\text{diam}(G_n^P) > \text{diam}(G_n^R), \text{ если } R - P \geq 2, \quad (6)$$

$$\text{diam}(G_n^P) \geq \text{diam}(G_n^R), \text{ если } R - P = 1, \quad (7)$$

$$\text{diam}(G_n^R) = \begin{cases} (n+4)/4 & \text{при чётном } n; \\ (n+5)/4 & \text{при нечётном } n. \end{cases} \quad (8)$$

Доказательство. Пусть имеем n -вершинный МВП-граф L_n типа «лестница». Повторив $1, 2, \dots, R$ раз операцию редукции, получим МВП-графы $G_n^1, G_n^2, \dots, G_n^R$ класса «2-дерево», причём любой граф G_n^k ($k = 1, 2, \dots, R$) имеет L -ствол L_S из $S = n - k$ вершин и k вершин, не входящих в ствол. Максимальное число R новых симплициальных вершин при чётном n определяется как $R = S - 4$, а при нечётном n — как $R = S - 5$. Откуда, подставляя значения R в выражение числа вершин $n = S + R$, получим $S = (n + 4)/2$, $R = (n - 4)/2$ при чётном n и $S = (n + 5)/2$, $R = (n - 5)/2$ при нечётном n .

Диаметр МВП-графа G_n^k равен диаметру его L -ствола, т.е. диаметру МВП-графа L_S типа «лестница», который определяется по формуле (3). Следовательно, $\text{diam}(G_n^k) = \lfloor S/2 \rfloor$. Отсюда с учётом следствия 1 получаем неравенства (6), (7), а подставляя значения S при $k = R$, получим выражение (8) для диаметра графа G_n^R . \square

Ясно, что из графа G_n^R после выполнения ещё одной или нескольких *операций переноса* симплициальных вершин, не входящих в ствол, можно получить множество подобных МВП-графов с тем же диаметром. При переносе, как и при редукции, удаляется симплициальная вершина, взамен добавляется новая и соединяется парой рёбер с вершинами ребра, не входящего в ствол. Причём основным критерием для выполнения операции является сохранение диаметра.

В качестве примера на рис. 7 показаны МВП-графы, полученные из МВП-графа L_{12} методом многократной редукции и операций переноса.

Формулы (6)–(8) задают нижнюю оценку диаметра решётчатых МВП-графов класса «2-дерево», имеющих L -ствол и максимальное число ответвительных сегментов размера 2, 3, которую можно принять в качестве предварительной нижней оценки диаметра всех решётчатых МВП-графов.

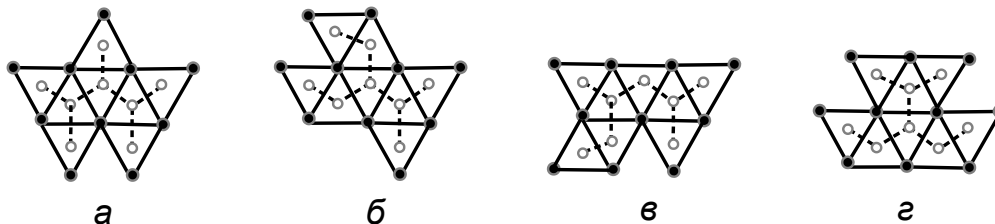


Рис. 7. МВП-графы, полученные посредством многократной редукции и переноса симплициальных вершин из МВП-графа L_{12} типа «лестница»: многократная редукция (а); варианты выполнения операций переноса (б, в, г)

Из теорем 1, 2, 3 следует, что диаметр произвольных и решётчатых МВП-графов порядка n изменяется в узком диапазоне, поскольку он ограничен сверху величиной $\lfloor n/2 \rfloor$. Однако несмотря на эти ограничения, с помощью диаметра можно выполнить классификацию МВП-графов, т. е. разделить их на небольшое число классов по величине диаметра.

Полученные результаты (теоремы 1, 2) дают нижнюю и верхнюю оценки диаметра произвольных МВП-графов и, следовательно, могут быть использованы для классификации фигур по их диаметру в изображениях, представляемых в виде МВП-графов [8].

Как следует из неравенств (6), (7) теоремы 4, диаметр МВП-графа класса «2-дерево» тесно связан со степенью его разветвлённости, определяемой через число ответвительных сегментов. А в силу свойства 2 степени разветвлённости МВП-графа и слабого двойственного к нему графа равны. Таким образом, классификация решётчатых МВП-графов по диаметру фактически позволяет классифицировать двойственные им молекулярные графы изомеров СПУ по степени их разветвлённости.

Отсюда следует необходимость продолжения исследований по уточнению нижней оценки диаметра и определению экстремальных решётчатых МВП-графов, на которых эта оценка достигается.

5. Заключение

Исследованы особенности изменения диаметра МВП-графов при добавлении новых симплициальных вершин. Определены свойства операций элементарного расширения s -типа при построении МВП-графов класса «2-цепь» (предложение 1, следствие 1).

Получены нижняя и верхняя оценки диаметра произвольных МВП-графов и экстремальные графы, на которых эти оценки достигаются. Определены соотношения между диаметрами разных классов графов.

Для решётчатых МВП-графов доказано, что верхняя оценка их диаметра совпадает с верхней оценкой диаметра произвольных МВП-графов; в качестве предварительной нижней оценки диаметра принят диаметр решётчатых МВП-графов, имеющих L -ствол и максимальное число ответвительных сегментов. Представляется актуальным продолжение исследований по уточнению нижней оценки диаметра и определению экстремальных решётчатых МВП-графов, на которых эта оценка достигается.

Автор благодарит профессора И. Б. Кожухова за ценные замечания по тексту статьи.

Список литературы

1. **Евстигнеев, В. А.** Словарь по графам в информатике / В. А. Евстигнеев, В. Н. Касьянов. — Новосибирск: Сиб. науч. изд-во, 2009. — 300 с.
2. **Харари, Ф.** Теория графов / Ф. Харари. — М.: Мир, 1973. — 300 с.
3. **Asratian, A. S.** Graphs with hamiltonian balls / A. S. Asratian, N. Oksimets // The Australian Journal of Combinatorics. — 1998. — Vol. 17, no. 4. — P. 185–198.
4. **Proskurowski, A.** Subgraphs in k -trees: cables and caterpillars / A. Proskurowski // Discrete Mathematics. — 1984. — Vol. 49, no. 5. — P. 275–278.
5. **Markov, M.** On the vertex separation of maximal outerplanar graphs / M. Markov // Serdica Journal of Computing. — 2008. — Vol. 154, no. 5. — P. 207–238.
6. **Farley, A. M.** Computation of the center and diameter of outerplanar graphs / A. M. Farley, A. Proskurowski // Discrete Applied Mathematics. — 1980. — Vol. 2, no. 3. — P. 185–191.
7. Chemical relevance of a pure combinatorial problem: isomers of conjugated polyenes / S. J. Cyvin, E. K. Lloyd, B. N. Cyvin, J. Brunvoll // Structural Chemistry. — 1996. — Vol. 7, no. 3. — P. 183–186.
8. **Felzenszwalb, P. F.** Representation and detection of deformable shapes / P. F. Felzenszwalb // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. — 2005. — Vol. 27, no. 2. — P. 208–220.
9. **Chung, F. R. K.** Diameters of graphs: old problems and new results / F. R. F. Chung // Congressus Numerantium. — 1987. — Vol. 60, no. 2. — P. 295–317.
10. **Носов, Ю. Л.** Индекс Винера максимальных внешнеплоских графов / Ю. Л. Носов // Приклад. дискрет. математика. — 2014. — Т. 26, № 4. — С. 112–122.
11. **Носов, Ю. Л.** О максимальных внешнеплоских графах с двумя симплициальными вершинами / Ю. Л. Носов // Приклад. дискрет. математика. — 2015. — Т. 29, № 3. — С. 95–109.
12. **Добрынин, А. А.** Индекс Винера для деревьев и гексагональных систем / А. А. Добрынин, И. Гутман // Дискрет. анализ и исслед. операций. Сер. 2. — 1998. — Т. 5, № 2. — С. 34–60.

Поступила в редакцию 12.04.2018

После переработки 14.06.2018

Сведения об авторе

Носов Юрий Леонидович, консультант Guardian Software Inc., Калгари, Канада; удалённый офис: Липецк, Россия; e-mail: yl.nosov@yandex.ru.

MAXIMAL OUTERPLANE GRAPHS OF EXTREMAL DIAMETER**Yu.L. Nosov***Guardian Software Inc., Calgary, Canada; remote office: Lipetsk, Russia
yl.nosov@yandex.ru*

We explore the maximal outerplane graphs (MOP-graphs) with extremal values of diameter. For arbitrary MOP-graphs we determine the lower and upper bounds of the diameter. For lattice MOP-graphs (i. e., graphs embedded into the lattice of equilateral triangles without "holes" and intersections) we prove that the upper bound of the diameter matches that of the arbitrary MOP-graphs; a preliminary lower bound of the diameter is determined. For the lower and upper bounds of the diameter of arbitrary and lattice MOP-graphs we determine the extremal graphs where these bounds are reached. Extremal graphs with maximal diameter are the same for both arbitrary and lattice MOP-graphs. The obtained results can be used for classification of images represented by MOP-graphs, and for classification of isomers of conjugated polyene hydrocarbons.

Keywords: *maximal outerplane graphs, diameter, extremal graphs, graphs with extremal values of diameter.*

References

1. **Evstigneev V.A.** *Slovar' po grafam v informatike* [Dictionary of graphs in computer science]. Novosibirsk: Siberian Scientific Publishing House, 2009. 300 p. (In Russ.).
2. **Harary F.** *Graph Theory*. Reading, MA, Addison-Wesley, 1969. 274 p.
3. **Asratian A.S., Oksimets N.** Graphs with hamiltonian balls. *The Australian Journal of Combinatorics*, 1998, vol. 17, no. 4, pp. 185–198.
4. **Proskurowski A.** Subgraphs in k -trees: cables and caterpillars. *Discrete Mathematics*, 1984, vol. 49, no. 5, pp. 275–278.
5. **Markov M.** On the vertex separation of maximal outerplanar graphs. *Serdica Journal of Computing*, 2008, vol. 154, no. 5, pp. 207–238.
6. **Farley A.M., Proskurowski A.** Computation of the center and diameter of outerplanar graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 1980, vol. 2, no. 3, pp. 185–191.
7. **Cyvin S.J., Lloyd E.K., Cyvin B.N., Brunvoll J.** Chemical relevance of a pure combinatorial problem: isomers of conjugated polyenes. *Structural Chemistry*, 1996, vol. 7, no. 3, pp. 183–186.
8. **Felzenszwalb P.F.** Representation and detection of deformable shapes. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2005, vol. 27, no. 2, pp. 208–220.
9. **Chung F.R.K.** Diameters of graphs: old problems and new results. *Congressus Numerantium*, 1987, vol. 60, no. 2, pp. 295–317.
10. **Nosov Yu.L.** O maksimal'nykh vneshneploskikh grafakh s dvumya simplitsial'nymi vershinami [Maximal outerplane graphs with two simplicial vertices]. *Prikladnaya diskretnaya matematika* [Applied discrete mathematics], 2015, vol. 29, no. 3, pp. 95–109. (In Russ.).
11. **Nosov Yu.L.** Indeks Vinera maksimal'nykh vneshneploskikh grafov [The Wiener index of maximal outerplane graphs]. *Prikladnaya diskretnaya matematika* [Applied discrete mathematics], 2014, vol. 26, no. 4, pp. 112–122. (In Russ.).

12. **Dobrynin A.A., Gutman I.** Indeks Vinera dlya derev'yev i geksagonal'nykh sistem [The Wiener index for trees and graphs of hexagonal systems]. *Diskretnyy Analiz i Issledovaniye Operatsiy* [Discrete analysis and operations research]. Ser. 2, 1998, vol. 5, no. 2, pp. 34–60. (In Russ.).

Accepted article received 12.04.2018

Corrections received 14.06.2018