# Frustração de Arestas e Conjuntos Independentes de $(3, 6)$-*Fullerenes*[*]

**Diego de Souza Nicodemos**
Colégio Pedro II e COPPE – Sistemas, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)
Rio de Janeiro – RJ – Brasi
nicodemos@cos.ufrj.br

**Sulamita Klein**
IM e COPPE–Sistemas, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)
Rio de Janeiro – RJ – Brasil
sula@cos.ufrj.br

**Luerbio Faria**
Departamento de Matemática – Universidade do Estado do Rio de Janeiro (Uerj)
Rio de Janeiro – RJ – Brasil
luerbio@cos.ufrj.br

**RESUMO**

Grafos $(3, 6)$-fullerenes são grafos planares, 3-conexos, cúbicos cujas faces têm tamanho 3 ou 6. Determinar o menor número de arestas a serem deletadas de um grafo de modo a obter um subgrafo gerador bipartido é conhecido na literatura [Došlić e Vukičević, 2007] como o *Problema de Frustração de Arestas*. Neste trabalho, abordamos os Problemas da Frustração de Arestas e do Conjunto Independente Máximo em grafos $(3, 6)$- fullerenes. Mostramos que todo grafo $(3, 6)$-fullerene com $n$ vértices torna-se bipartido após a retirada de no máximo $\sqrt{\frac{4}{3}n}$ arestas e possuem um conjunto independente com pelo menos $\left(n/2 - \sqrt{n/3}\right)$ vértices. Caracterizamos também a classe de grafos que torna estes limites justos.

**PALAVRAS CHAVE. Frustração de Arestas, Conjuntos Independentes, Grafos $(3, 6, )$-Fullerenes.**

**Tópicos (Teoria de Grafos e Otimização Combinatória)**

**ABSTRACT**

A $(3, 6)$-fullerene graph is a cubic bridgeless plane graph with all faces of size 3 or 6. Determining the smallest number of edges that have to be deleted from the graph to obtain a bipartite spanning subgraph is known in the literature [Došlić e Vukičević, 2007] as the *Bipartite Edge Frustration Problem*. In this paper, we investigate the Bipartite Edge Frustration Problem and the Maximal Independent Set Problem in $(3, 6)$-fullerene graphs. We show that every graph $(3, 6)$-fullerene on $n$ vertices becomes bipartite after deleting at most $\sqrt{\frac{4}{3}n}$ edges and has an independent set with at least $\left(n/2 - \sqrt{n/3}\right)$ vertices. Both bounds are sharp, and we characterise the extremal graphs.

**KEYWORDS. Edge Frustration, Odd Cycle Transversals, Fullerene Graphs.**

**Paper topics (Graph Theory and Combinatorial Optimization)**

[*]Parcialmente fomentado pelo CNPq e FAPERJ.

## 1. Introdução

Em 1985, um grupo de cientistas liderados por *Kroto, Smalley e Curl* descobriu experimentalmente uma molécula altamente simétrica, estável, composta apenas por átomos de carbono e até então diferente dos demais alótropos[1] de carbono. Esta nova molécula, concebida em laboratório, recebeu o nome de *fullerene*. As *moléculas de fullerene* são matematicamente modeladas por grafos: os átomos das moléculas correspondem aos vértices dos grafos e as ligações entre os átomos correspondem às arestas dos grafos.

Formalmente falando um grafo fullerene é um grafo planar, 3-conexo, cúbico cujas faces têm tamanho $5$ ou $6$. Pela fórmula de Euler todo *grafo fullerene* possui exatamente $12$ faces pentagonais (faces de tamanho $5$).

Segundo Došlić e Vukičević [Došlić e Vukičević, 2007] uma aresta $e \in E$ é dita *frustrada* com respeito à bipartição $(V_1, V_2)$ de $V$ se ambas as extremidades de $e$ pertencem à mesma classe da bipartição. O menor número de arestas a serem deletadas de um grafo de modo a obter um subgrafo gerador bipartido é conhecido na literatura como o Problema da Frustração de Arestas e é representado pelo parâmetro $\tau_{odd}$. Klein, Faria e Stehlik [Klein et al., 2012] mostraram que todo grafo fullerene com $n$ vértices torna-se bipartido após a remoção de no máximo $\sqrt{12n/5}$ arestas.

Se, em um grafo fullerene, substituimos as $12$ faces pentagonais por faces triangulares (faces de tamanho $3$) obtemos um grafo $(3,6)$-fullerene. Os grafos $(3,6)$-fullerenes mantêm-se cúbicos, 3-conexos e planares.

**Lema 1.1** *Todo grafo $(3,6)$-fullerene possui exatamente $4$ faces triangulares (faces de tamanho $3$).*

*Demonstração.* Seja $G$ um grafo fullerene com $t$ faces triangulares e $h$ faces hexagonais. Então $G$ possui $t+h$ faces, $\dfrac{3t+6h}{2}$ arestas e $\dfrac{3t+6h}{3}$ vértices. Como $G$ é um grafo planar e conexo então pela Fórmula de Euler, $\dfrac{3t+6h}{3} + t + h = \dfrac{3t+6h}{2} + 2$.

Portanto, $t = 4$. □

O resultado central deste trabalho, Teorema 1.2, fornece uma cota superior para o Problema da Frustração de Arestas em grafos $(3,6)$-fullerenes.

**Teorema 1.2** *Se $G$ é um grafo $(3,6)$-fullerene com $n$ vértices, então $\tau_{odd}(G) \leq \sqrt{\frac{4}{3}n}$. A igualdade mantém-se se e somente se $n = 12k^2$, para algum $k \in \mathbb{N}$, e $Aut(G) \cong T_d$.*

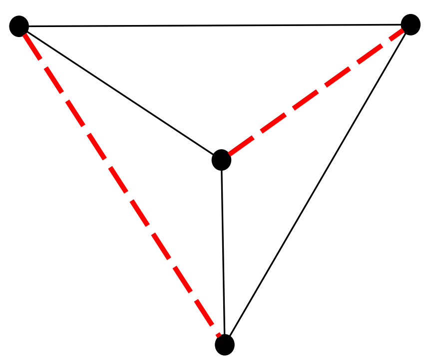


Figura 1: Tetraedro representando o menor grafo $(3,6)$-fullerene. As arestas tracejadas, ao serem deletadas, tornam o remanescente grafo bipartido. Portanto, $\tau_{odd}(G) = 2$.

[1]Substâncias simples são aquelas formadas por um único elemento químico. Substâncias simples e distintas compostas pelo mesmo elemento químico são chamadas de *alótropas*.

Um conjunto de vértices $X \subseteq V(G)$ é *independente* se o grafo induzido por $X$ não tem arestas. Em outras palavras, $X$ é um *conjunto independente* se não há arestas entre qualquer par de vértices de $V(X)$. O Problema do Conjunto Independente Máximo corresponde a determinar o maior conjunto independente (de vértices) de um grafo. O tamanho do maior conjunto independente de $G$ é o *número independente* de $G$ denotado por $\alpha(G)$.

O corolário a seguir é uma consequência imediata do Teorema 1.2.

**Corolário 1.3** *Se $G$ é um grafo $(3, 6)$-fullerene com $n$ vértices, então $\alpha(G) \geq n/2 - \sqrt{n/3}$. A igualdade mantém-se se e somente se $n = 12k^2$, para algum $k \in \mathbb{N}$, e $Aut(G) \cong T_d$.*

Informalmente falando, o Corolário 1.3 diz que um grafo planar, 3-conexo, cúbico ou tem um conjunto independente "grande"ou tem uma face de tamanho "grande".

O restante do artigo está dividido da seguinte maneira. Na seção 2, discutimos conceitos básicos e fundamentais da teoria de grafos e conceitos específicos para a abordagem dos Problemas da Frustração de Arestas e do Conjunto Independente Máximo. Na seção 3, introduzimos a ideia de remendos e fossos. Na seção 4, provamos o Teorema 1.2 e o Corolário 1.3.

## 2. Preliminares

Um *grafo* $G = (V(G), E(G))$ consiste de um conjunto não vazio $V(G)$ de *vértices* e de um conjunto $E(G)$ de *arestas*, de modo que cada *aresta* $e \in E(G)$ é um par não ordenado de vértices distintos. Neste trabalho, todos os grafos considerados são *simples*, isto é, não possuem arestas *paralelas* ou *laços*.

Um grafo é *finito* quando seus conjuntos de vértices e arestas são finitos, caso contrário ele é um grafo *infinito*.

O *grau* de um vértice $v$ em $G$, representado por $d(v)$, é o número de arestas incidentes à $v$. Em qualquer grafo, o número de vértices de grau ímpar é par. Um grafo é $k$-*regular* se todos os seus vértices têm grau $k$. Um grafo 3-regular é chamado de grafo *cúbico*. Uma *triangulação planar infinita* 6-*regular* é um grafo infinito, 6-regular cujas faces são triângulos.

Um grafo $H = (U, F)$ é um *subgrafo* de um grafo $G = (V, E)$ quando $U \subseteq V$ e $F \subseteq E$, e denotamos por $H \subseteq G$. Um subgrafo $H \subseteq G$ é *gerador* se $H$ contém todos os vértices de $G$. Dado um conjunto de vértices $U \subseteq V$, dizemos que o subgrafo $H = (U, F)$ do grafo $G = (V, E)$ é *induzido* por $U$ quando todas as arestas de $G$ com extremidades em $U$ pertencem à $F$, e denotamos por $H = G[U]$ o subgrafo $H \subseteq G$ induzido por $U \subseteq V$. Se $G = (V, E)$ é um grafo e $J \subset E$, então $G - J$ é o subgrafo de $G$ obtido a partir da remoção das arestas em $J$.

Um grafo $G = (V, E)$ é *bipartido* quando é possível particionar o seu conjunto de vértices $V$ em dois subconjuntos $X$ e $Y$ de modo que todas as suas arestas têm uma extremidade em $X$ e a outra extremidade em $Y$. A partição $(X, Y)$ é chamada de *bipartição* do grafo $G = (V, E)$. Uma caracterização para os grafos bipartidos é a ausência de ciclos ímpares, isto é, um grafo é bipartido se e somente se ele não possui ciclos de comprimento ímpar. Para maiores detalhes o leitor é convidado a consultar [Bondy e Murty, 1976].

Um grafo $G$ é *conexo* quando existe um caminho entre qualquer par de vértices de $G$, caso contrário dizemos que $G$ é desconexo. Um grafo é dito 3-*conexo* se a remoção de quaisquer 2 de seus vértices não o torna desconexo.

Definimos a $k$-*vizinhança aberta* de um subconjunto $X \subseteq V(G)$ em $G$ como sendo o conjunto $N^k_G(X) = \{v \in V(G) \mid d_G(v, X) = k\}$. Quando $k = 1$ temos a vizinhança aberta usual de um subconjunto $X \subseteq V(G)$ em $G$, denotada por $N_G(X) = N^1_G(X)$. A $k$-*vizinhança fechada* de um subconjunto $X \subseteq V(G)$ em $G$ é definida por $N^k_G[X] = \{v \in V(G) \mid d_G(v, X) \leq k\}$. Para $k = 1$ temos a vizinhança fechada usual de um subconjunto $X \subseteq V(G)$ em $G$, denotada por $N_G[X] = N_G^1[X]$. Para $X = \{x\}$ abreviamos as notações de vinhanças aberta e fechada, escrevendo $N_G^k(x)$ e $N_G^k[x]$.

Um grafo $G$ é *planar* se existe uma representação (desenho, imersão) de $G$ no plano de modo que as arestas se encontrem somente nos vértices, isto é, de modo que as arestas não se cruzem. Uma tal representação de $G$ é dita plana ou planar. Dado um grafo planar $G$ definimos o *grafo dual* de $G$, representado por $G^*$, da seguinte forma: a cada face $f$ de $G$ corresponde um vértice $f^*$ de $G^*$, e a cada aresta $e$ de $G$ corresponde uma aresta $e^*$ de $G^*$ de modo que dois vértices $f^*$ e $g^*$ de $G^*$ são ligados por uma aresta $e^*$ se e somente se as faces $f$ e $g$ em $G$ são separadas pela aresta $e$. Sabe-se que o grafo dual de um grafo planar é um grafo planar. Uma representação planar divide o plano em regiões chamadas *faces*. Existe sempre uma única face chamada *externa* ou *infinita*, que não está limitada (tem área infinita).

A *fronteira ou ciclo exterior* de uma face de um grafo planar conexo é um passeio fechado de arestas que limita e determina a face. O *grau de uma face* $f$ é o comprimento do passeio fechado que determina sua fronteira. A soma dos graus das faces de um grafo planar é igual ao dobro do seu número de arestas. Num grafo conexo planar com $f$ faces, $n$ vértices e $m$ arestas, vale $n + f - m = 2$ que é conhecida como *Relação (ou Fórmula) de Euler* [Bondy e Murty, 1976].

**Definição 2.1** *Um grafo* $(3, 6)$-fullerene *é um grafo planar,* $3$*-conexo, cúbico cujas faces têm tamanho* $3$ *ou* $6$*. As faces de tamanho* $3$ *são chamadas de faces triangulares e as faces de tamanho* $6$ *são chamadas de faces hexagonais.*

O *grafo dual* de um $(3, 6)$-fullerene é uma *triangulação planar* sem laços ou arestas paralelas e todos os seus vértices têm graus 3 ou 6. No dual de um $(3, 6)$-fullerene os vértices de grau 3 são também chamados de *vértices defeituosos*.

## 3. Remendos e Fossos

Por toda esta seção, $G$ é uma triangulação planar com todos os vértices de grau menor que 6. Sejam um grafo $G$ e um conjunto de vértices $T \subseteq V(G)$ tal que $|T|$ é par. Uma $T$*-junção* de $G$ (do inglês $T$-join of $G$) é um subconjunto $J \subseteq E(G)$ tal que $T$ é o conjunto dos vértices de grau ímpar em $G[J]$.

É fácil ver que se $T$ é o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G$ e $J$ é uma $T$-junção de $G$ então $|T|$ é par e cada vértice de $G - J$ tem grau par. O tamanho da menor $T$-junção de $G$ é denotado por $\tau(G, T)$, como mostra a Figura 2.

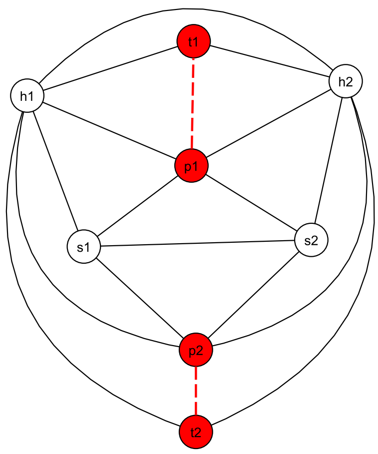



Figura 2: O conjunto $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$ é o conjunto de todos os vértices de grau ímpar de $G$. As arestas tracejadas representam a menor $T$-junção de $G$. Neste exemplo, $\tau(G, T) = 2$

Seja $\delta_G(X)$ o conjunto de arestas em um grafo $G$ tal que cada aresta em $\delta_G(X)$ apresenta exatamente um extremo em $X \subseteq V(G)$. Um conjunto $C$ de arestas de $G$ é um *corte de aresta* de $G$ se $C = \delta_G(X)$, para algum $X \subseteq V(G)$. Sejam $X \subseteq V(G)$ e $T$ o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G$. Um $T$-*corte* (do inglês $T$-cut) é um corte de aresta $\delta_G(X)$ tal que $|T \cap X|$ é ímpar. Acompanhe a Figura 3.

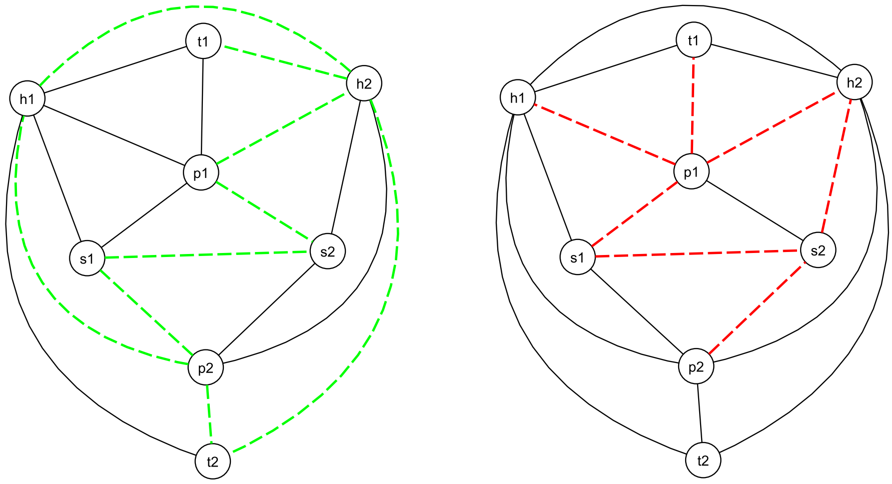



Figura 3: Dois exemplos de $T$-cortes, com $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$. As arestas tracejadas à esquerda representam o $T$-corte obtido a partir do conjunto $X = \{t_1, p_1, t_2, s_1, h_1\}$ e as arestas tracejadas à direita representam o $T$-corte obtido a partir do conjunto $X = \{p_1, s_2\}$.

Um *empacotamento* de $T$-cortes de $G$ (do inglês packing of $T$-cuts of $G$) é uma coleção disjunta $\delta(\mathcal{F}) = \{\delta(X) \mid X \in \mathcal{F}\}$ de $T$-cortes de $G$, onde $\mathcal{F}$ é a família composta por todos os subconjuntos de vértices de $G$. Se $T$ é o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G$, então denotaremos por $\nu(G, T)$ a cardinalidade do empacotamento de $T$-cortes de $G$ com a maior quantidade de cortes $\delta(X)$. Veja Figura 4.

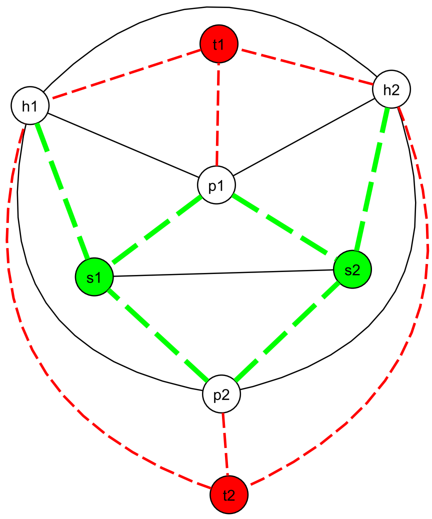



Figura 4: O conjunto das arestas tracejadas representa um empacotamento de $T$-cortes gerados pelos conjuntos $\{t_1, t_2\}$ e $\{s_1, s_2\}$.

Um *conjunto minimal em relação à inclusão* (do inglês inclusion-wise minimal) é um conjunto dentre uma coleção de conjuntos que não contém qualquer outro conjunto da coleção. Dado um empacotamento de $T$-cortes, um $T$-corte $\delta_G(X)$ é um conjunto minimal em relação à inclusão quando $\delta_G(X)$ não contém qualquer $T$-corte do empacotamento de $T$-cortes.

Uma família $\mathcal{F}$ é dita *laminar* se para cada par $X, Y \in \mathcal{F}$, tem-se $X \subseteq Y$, $Y \subseteq X$, ou $X \cap Y = \emptyset$. Fiorini, Hardy e Reed Fiorini et al. [2007] mostraram que para todo grafo bipartido $G$ e para cada subconjunto $T \subseteq V(G)$ tal que $|T|$ é par, existe um empacotamento de $T$-cortes em $G^{\triangle}$ que é laminar, ótimo e consiste apenas de conjuntos minimais em relação à inclusão.

Seja $G^*$ o dual de um $(3,6)$-fullerene. O grafo $G^*$ não é bipartido, pois suas faces são todas triangulares. O grafo $G^{*\prime}$ obtido subdividindo as arestas de $G^*$ é bipartido, pois todas as suas faces têm tamanho 6.

Seja $G^{*\triangle}$ o grafo obtido, a partir de $G^{*\prime}$, adicionando três novas arestas dentro de cada face de $G^{*\prime}$, incidentes a cada um dos 3 vértices de grau 2, como mostra a Figura 5. Chamamos $G^{*\triangle}$ de *refinamento* de $G^*$. Todos os vértices em $V(G^{*\triangle}) - V(G^*)$ têm grau 6 em $G^{*\triangle}$, portanto se $D$ é o conjunto dos vértices defeituosos de $G^*$, então $D$ é também o conjunto dos vértices defeituosos de $G^{*\triangle}$. A Figura 5 ilustra estas definições.

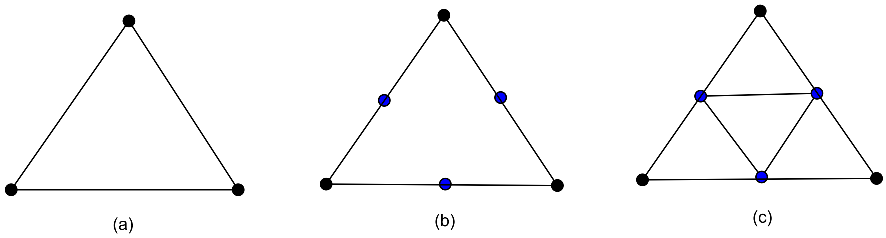



Figura 5: Em (a), uma face da triangulação $G^*$. Em (b), sua subdivisão $G^{*\prime}$ e, em (c), seu refinamento $G^{*\triangle}$.

O Lema 3.1 foi provado por Klein, Faria e Stehlik [Klein et al., 2012].

**Lema 3.1** *Para toda triangulação planar $G$ e todo subconjunto $T \subseteq V(G)$ tal que $|T|$ é par, $\tau(G,T) = \frac{1}{2}\nu(G^{\triangle}, T)$. Além disso, existe um empacotamento de $T$-cortes em $G^{\triangle}$ que é laminar, ótimo formado por conjuntos minimais em relação à inclusão.*

Um subgrafo 2-conexo $H \subset G$ tal que todas as faces de $H$, exceto a face exterior, são triângulos, é chamado de *remendo* de $G$ (do inglês patch of $G$). Se $C$ é o ciclo exterior (ou fronteira) de $H$, $D(H)$ é o conjunto dos vértices defeituosos de $H$ e $\sum_{u \in D(H) \cap V(H-C)} (6 - d(u)) = c$, então $H$ é um *$c$-remendo de $G$*. Definimos a *área* $A(H)$ de $H$ como o número de triângulos em $H$.

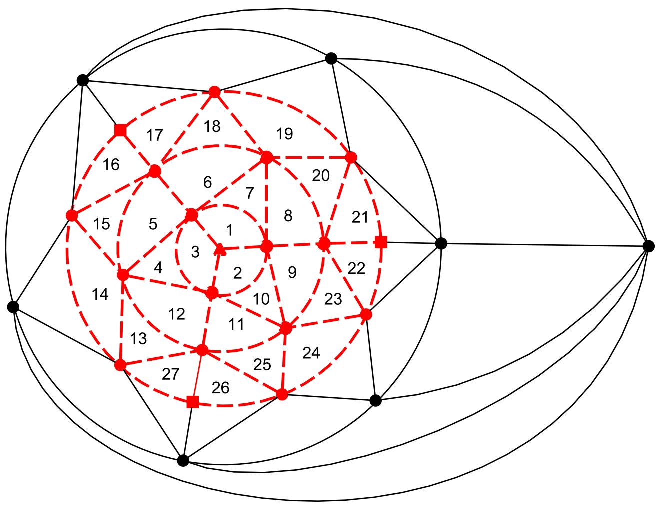



Figura 6: As arestas tracejadas representam as arestas do remendo $H$ de $G$. No interior de $H$ há um vértice de grau 3 e nove vértices de grau 6, logo $\sum_{u \in D \cap V(H-C)} (6 - d(u)) = 3$. Portanto, $H$ é um 3-remendo de $G$. Assim como os vértices de grau 6 no interior de $H$, os vértices da fronteira de $H$ não influenciam na classificação do remendo. Além disso, $A(H) = 27$.

Se $G$ é um grafo $(3,6)$-fullerene, então $G^*$ é uma triangulação planar com exatamente $4$ vértices de grau 3. Neste caso, os possíveis tipos de remendos de $G^*$ são os 3-remendos, os 6-remendos, os 9-remendos e os 12-remendos.

Sejam $X \subset V(G)$ e $G[X]$ um remendo de $G$. Um *fosso* de largura $k$ em $G$ ao redor do remendo $G[X]$ (do inglês moat of width $k$ in $G$ surrounding patch $G[X]$) é um subconjunto de $E(G)$ definido como:

$$\delta_G^k(X) = \bigcup_{i=0}^{k-1} \delta_G\left(N^i[X]\right).$$

Em particular, $\delta_G^1(X) = \delta_G(X)$. Se $\sum_{v \in X}(6 - d(v)) = d$, então $\delta_G^k(X)$ é um $d$-*fosso* de largura $k$, como mostra a Figura 7.

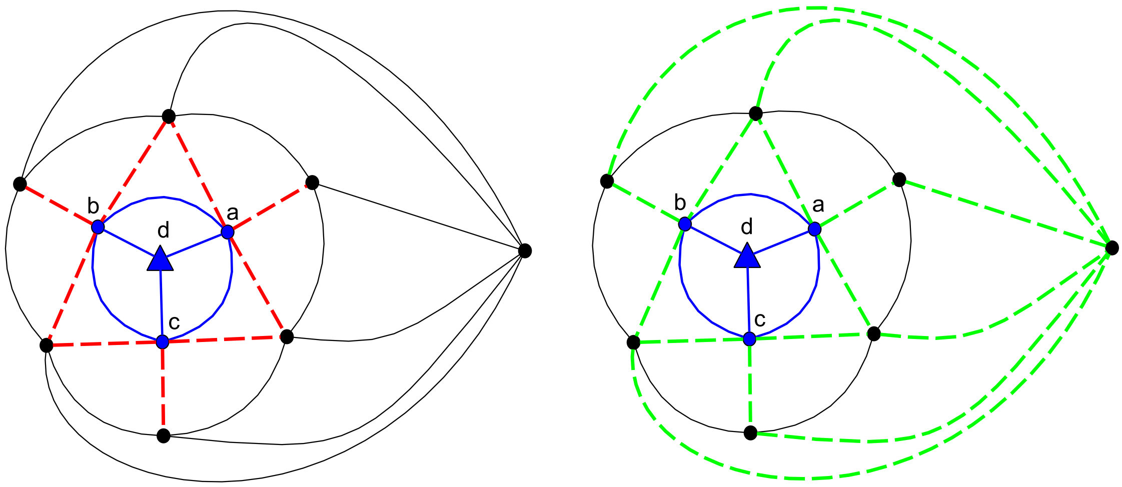



Figura 7: Em ambas figuras os subgrafos induzidos pelo conjunto $X = \{a, b, c, d\}$ representam 3-remendos de $G$. O conjunto de arestas tracejas à esquerda é um fosso de largura 1 e o conjunto de arestas tracejadas à direita é um fosso de largura 2. Ambos são 3-fossos, pois foram gerados por 3-remendos de $G$.

Semanticamente um *fosso* de largura $k$, $\delta_G^k(X)$, é o conjunto de todas as arestas pertencentes aos caminhos começando na fronteira do remendo $G[X]$ até os vértices que distam $k$ do conjunto $X$.

Se $G^*$ é o dual de um $(3,6)$-fullerene, então os possíveis tipos de fossos de $G^*$ são os 3-fossos, os 6-fossos, os 9-fossos e os 12-fossos.

Para todo fosso $\delta_G^k(X)$ corresponde um conjunto $|\delta_G^k(X)|$ de faces triangulares. Dizemos que as faces incidentes a pelo menos uma aresta de $\delta_G^k(X)$ são *geradas* pelo fosso $\delta_G^k(X)$.

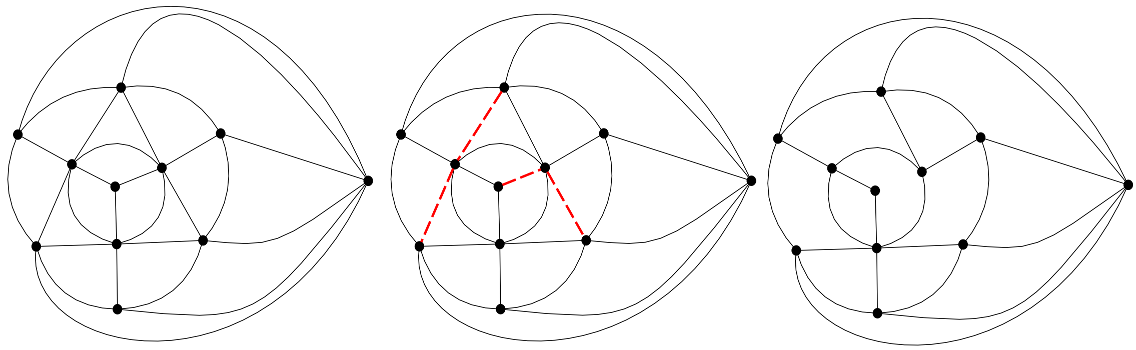
Se $G$ é um $(3,6)$-fullerene, então o número de arestas em um 3-fosso de $G^*$ é facilmente determinado pelo Lema 3.2

**Lema 3.2** *Sejam $G$ um grafo $(3,6)$-fullerene, $G^*$ o dual de $G$ e $D$ o conjunto dos vértices defeituosos de $G^*$. Se $d_{G^*}(u) = 3$, e nenhuma aresta de $\delta^{k-1}(u)$ é incidente a vértices do conjunto $D - \{u\}$, então $\left|\delta_{G^*}^k(u)\right| = 3k^2$.*

*Demonstração.* É fácil observar que $\left|\delta(N^k[u])\right| = 3(2k+1)$.
Portanto, $\left|\delta^k(u)\right| = \sum_{i=0}^{k-1} \left|\delta(N^i[u])\right| = 3\sum_{i=0}^{k-1}(2i+1) = 3k^2$. $\square$

## 4. Resultados Centrais

A versão dual do problema da frustração de arestas em um grafo $G$ é a de determinar o menor número de arestas a serem deletadas do dual $G^*$ de modo que todos os vértices do grafo remanescente tenham grau par. O problema da frustração de arestas para os grafos $(3,6)$-fullerene será resolvido através de sua versão dual. O menor número de arestas a serem deletadas de um grafo $G$ de modo que o grafo remanescente não possua vértices de grau ímpar é denotado por $\tau(G)$. Veja a Figura 8.



(a) (b) (c)

Figura 8: Em (a), uma triangulação planar $G^*$ contendo um vértice de grau 3 e três vértices de grau 5. As arestas tracejadas em (b), representam um menor conjunto de arestas que se removidas de $G^*$ farão com que o grafo remanescente não tenha vértices de grau ímpar. Em (c), o grafo remanescente após a remoção das arestas vermelhas. Neste exemplo, $\tau(G^*) = 4$.

Já discutimos que quando $G$ é um grafo $(3,6)$-fullerene o seu correspondente dual $G^*$ é uma triangulação planar cujos vértices têm graus 3 ou 6 e existe pelo Lema 3.1, um empacotamento de $T$-cortes em $G^{*\triangle}$ que é laminar, ótimo, consistindo apenas de conjuntos minimais em relação à inclusão. Chamamos um tal empacotamento de um *empacotamento de fossos de $T$-cortes* que, neste caso, é composto apenas de 3-fossos de $G^*$.

**Teorema 4.1** *Seja $G^*$ o grafo dual de um $(3,6)$-fullerene. Se $f$ é o número de faces de $G^*$ e $T$ é o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G^*$, então $\tau(G^*, T) \leq \sqrt{4f/3}$. A igualdade mantém-se se e somente se $f = 12k^2$, para algum $k \in \mathbb{N}$, e $Aut(G^*) \cong T_d$.*

*Demonstração.* Seja $G^{*\triangle}$ o refinamento de $G^*$. Assim $G^{*\triangle}$ é uma triangulação planar com $4f$ faces e todos os vértices de graus 3 ou 6. Pelo Lema 3.1, existe um empacotamento de fossos $\delta_{G^{*\triangle}}(\mathcal{F})$. Seja $m_3$ o número de arestas em um 3-fosso de $\delta_{G^{*\triangle}}(\mathcal{F})$. Definimos o vetor de incidência $\vec{r} \in \mathbb{R}^4$ da seguinte maneira: para cada vértice $u \in T$, seja $r_u$ a largura do 3-fosso centrado em $u$.

Definimos o *produto interno* $\langle \cdot, \cdot \rangle$ em $\mathbb{R}^4$ por $\left\langle \vec{a}, \vec{b} \right\rangle = \sum_{u \in T} a_u b_u$. Também definimos a *norma* $\| \cdot \|$ por $\|\vec{a}\| = \langle \vec{a}, \vec{a} \rangle$.

Além disso, a *desigualdade de Cauchy-Schwarz* garante que dados $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^4$ vale a relação $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle^2 \leq \|\vec{u}\|^2 \cdot \|\vec{u}\|^2$, com igualdade sendo verificada quando os vetores forem linearmente dependentes.

Pela otimalidade de $\delta_{G^{*\triangle}}(\mathcal{F})$,

$$\tau(G^*, T) = \tfrac{1}{2}\nu(G^{*\triangle}, T) = \tfrac{1}{2}\left\langle \vec{r}, \vec{1} \right\rangle, \quad \text{sendo } \vec{1} = (1,1,1,1). \tag{1}$$

Para provar a desigualdade no Teorema 4.1, é suficiente encontrar uma cota superior para $\langle \vec{r}, 1 \rangle$ em função de $f$. Para fazer isto, computaremos uma cota inferior para $m_3$ em função do vetor $\vec{r}$, e então usaremos o fato de que $m_3$ não pode exceder $4f$, que é o número de faces de $G^{*\triangle}$.

Suponha que $\delta^{r_u}_{G^{*\triangle}}(u)$ é um 3-fosso de $\delta_{G^{*\triangle}}(\mathcal{F})$, para algum $u \in P$. Lembre-se que pelo Lema 3.2,

$$\left|\delta^{r_u}_{G^{*\triangle}}(u)\right| = 3r_u^2,$$

logo somando sobre todos os 3-fossos,

$$m_3 = 3\sum_{u\in T} r_u^2 = 3\|\vec{r}\|^2. \tag{2}$$

O grafo $G^{*\triangle}$ tem $4f$ triângulos, e os 3-fossos geram $m_3$ triângulos de $G^{*\triangle}$. Estes triângulos são mutuamente disjuntos.

Usando (2),

$$4f \geq m_3 \geq 3\|\vec{r}\|^2.$$

Consequentemente temos,

$$\sqrt{\tfrac{4f}{3}} \geq \|\vec{r}\|\,. \tag{3}$$

Portanto, por (1), (3) e pela desigualdade de Cauchy-Schwarz,

$$\tau(G^*, T) = \tfrac{1}{2}\,\langle \vec{r}, 1\rangle \leq \tfrac{1}{2}\,\|\vec{r}\|\,\|1\|. \tag{4}$$

Como $\vec{1} = (1, 1, 1, 1)$, segue que $\|1\| = \sqrt{4} = 2$ e, portanto,

$$\tau(G^*, T) \leq \tfrac{1}{2}\,\|\vec{r}\|\,\|1\| = \|\vec{r}\|\,.$$

Concluímos que,

$$\tau(G^*, T) \leq \sqrt{\tfrac{4f}{3}}.$$

Para provar a parte final do Teorema 4.1, suponha que $\tau(G^*, T) = \sqrt{\frac{4}{3}f}$. Desta maneira a igualdade deve manter-se em (4), desta maneira $r_u = r_v$ para cada $u, v \in T$. Portanto $4f = 3 \cdot 4r_u^2$, assim $f = 3r_u^2$. Como $f$ é par (pois nos $(3,6)$-fullerenes a quantidade de vértices é dada por $n = 4 + 2h$, onde $h$ é o número de faces hexagonais), segue que $r_u = 2k$, e portanto $f = 12k^2$, para algum $k \in \mathbb{N}$. Para ver que $Aut(G^*) \cong T_d$[2], note que o grafo $G^*$ pode ser construído a partir do tetraedro regular a partir da inserção em cada face de um 3-remendo da forma $G^*[N^k[u]]$.

Para a volta, se $G^*$ é uma triangulação planar com $f = 12k^2$ faces, com todos os vértices de graus 3 ou 6, e $Aut(G^*) \cong T_d$, então $G^*$ pode ser construído a partir do tetraedro regular inserindo em cada face um 3-remendo da forma $G^*[N^k[u]]$. Como consequência $d(u, v) \geq 2k$, para cada par de vértices distintos em $T$, assim $\tau(G^*, T) \geq 4k = \sqrt{\frac{4}{3}f}$.

□

[2] O automorfismo de um grafo é uma maneira de mapear um grafo a partir dele mesmo, não alterando suas estruturas geométricas, isto é, preservando as relações entre seus vértices e arestas. Um grupo é um conjunto dos automorfismos de um objeto nele mesmo. $T_d$ é um grupo de alta simetria que contém todas as operações de simetria de um tetraedro regular.

Aplicando o Teorema 4.1 ao grafo dual, obtemos a prova do Teorema 1.2.

*Prova do Teorema 1.2.* Seja $G$ um grafo planar, cúbico, 3-conexo com $n$ vértices e com todas as faces de tamanho 3 ou 6. O grafo dual de $G$ é uma triangulação planar com $n$ faces e todos os vértices de graus 3 ou 6. Sejam $T$ o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G^*$, $J^*$ uma $T$-junção mínima de $G^*$, e $J$ o conjunto de arestas de $G$ que corresponde à $J^*$. Como $G^* - J^*$ não tem vértices de grau ímpar, $G - J = (G^* - J^*)^*$ é bipartido, e pelo Teorema 4.1, $|J| = |J^*| \leq \sqrt{\frac{4n}{3}}$, com igualdade se e somente se $n = 12k^2$, para algum $k \in \mathbb{N}$, e $Aut(G) \cong T_d$.

□

Um conjunto de vértices de um grafo $G = (V, E)$ é um *conjunto transversal (de vértices) de ciclos ímpares* de $G$ se este conjunto intersepta cada ciclo ímpar de $G$.

*Prova do Corolário1.3.*

Seja $G$ um grafo planar, cúbico, 3-conexo com $n$ vértices e com todas as faces de tamanho 3 ou 6. O grafo dual de $G$ é uma triangulação planar com $n$ faces e todos os vértices de graus 3 ou 6. Todo grafo $G$ contém um conjunto transversal (de vértices) de ciclos ímpares $U$ tal que $|U| \leq \tau_{odd}(G)$, logo $\alpha(G) \geq \alpha(G - U) \geq \frac{1}{2}n - \frac{1}{2}\tau_{odd}(G)$. Portanto, pelo Teorema 1.2, $\alpha(G) \geq \frac{1}{2}n - \sqrt{\frac{1}{3}n}$, para cada grafo $G =$(3, 6)-fullerene.

Seja $T$ o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G^*$. Quando $J^*$ é uma $T$-junção mínima de $G^*$, cada face de $G^*$ é incidente a no máximo uma aresta de $J^*$. Isto significa que o conjunto de arestas $J \subset E(G)$ correspondente à $J^*$ é um emparelhamento de $G$. Portanto, pelo Teorema 1.2, a igualdade mantém-se se, e somente se, $n = 60k^2$, para algum $k \in \mathbb{N}$, e $Aut(G) \cong T_d$.

□

A Figura 9 exibe um grafo $(3, 6)$-fullerene em que os limites estipulados nos Teorema 1.2 e Corolário 1.3 são justos.

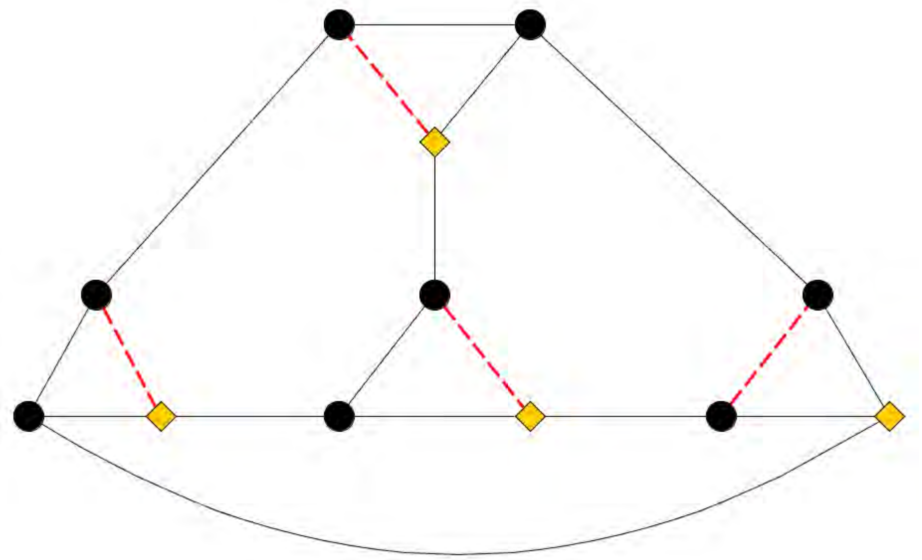


Figura 9: Grafo $(3, 6)$-fullerene contendo 12 vértices. As arestas tracejadas e os vértices em forma de diamante satisfazem os problemas da frustração de arestas e do conjunto independente máximo para este grafo. Neste exemplo, $\tau(G) = \sqrt{\frac{4 \cdot 12}{3}} = 4$ e $\alpha(G) = \frac{12}{2} - \sqrt{\frac{12}{3}} = 4$.

**Referências**

Bondy, J. A. e Murty, U. S. R. (1976). *Graph theory with applications*. Macmillan/Elsevier, Canada.

Došlić, T. e Vukičević, D. (2007). Computing the bipartite edge frustration of fullerene graphs. *Discrete Applied Mathematics*, 155(10):1294–1301.

Fiorini, S., Hardy, N., Reed, B., e Vetta, A. (2007). Approximate min-max relations for odd cycles in planar graphs. *Mathematical Programming, Series B*, 110(1):71–91.

Klein, S., Faria, L., e Stehlík, M. (2012). Odd cycle transversals and independent sets in fullerene graphs. *SIAM Journal of Discrete Mathematic*, 48(3):1458–469.