Frustração de Arestas em $(3,6)$-*Fullerenes*

Diego S. Nicodemos[1], **Sulamita Klein**[2], **Luerbio Faria**[3]

[1]Colégio Pedro II / COPPE – Sistemas, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)
Rio de Janeiro – RJ – Brasil

[2]COPPE–Sistemas, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)
Rio de Janeiro – RJ – Brasil

[3]Departamento de Matemática – Universidade do Estado do Rio de Janeiro (Uerj)
Rio de Janeiro – RJ – Brasil

nicodemos@cos.ufrj.br, sula@cos.ufrj.br, 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 and Vukičević 2007] como o* Problema de Frustração de Arestas. *Neste trabalho, abordamos o Problemas da Frustração de Arestas 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.*

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 and Vukičević 2007] as the* Bipartite Edge Frustration Problem. *In this paper, we investigate the Bipartite Edge Frustration 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.*

1. Introdução

Segundo Došlić e Vukičević [Došlić and 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 a 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 τ_{odd}.

Um grafo $(3,6)$-fullerene é um grafo planar, cúbico, 3-conexo cujas faces têm tamanho 3 ou 6. Pela Relação de Euler sabe-se que todo *grafo $(3,6)$-fullerene* possui exatamente 4 faces triangulares (faces de tamanho 3). O resultado central deste trabalho fornece uma cota superior para o Problema da Frustração de Arestas em grafos $(3,6)$-fullerenes e estende o resultado similar obtido para grafos fullerenes.

Teorema 1.1 *Se G é um grafo $(3,6)$-fullerene com n vértices, então $\tau_{odd}(G) \leq \sqrt{\frac{4}{3}n}$.*

O restante do artigo está dividido da seguinte maneira. Na seção 2, discutimos conceitos específicos para a abordagem do Problema da Frustração de Arestas e introduzimos a ideia de remendos e fossos. Na seção 3, provamos o Teorema 1.1.

2. Preliminares

As definições usadas neste trabalho são definições padrões. Para maiores detalhes o leitor é convidado a consultar [Bondy and Murty 2008].

O *grafo dual* de um $(3,6)$-fullerene é uma *triangulação planar* sem loops ou arestas múltiplas 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*.

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 é um subconjunto $J \subseteq E(G)$ tal que T é o conjunto dos vértices de grau ímpar em $G[J]$. Observe 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 (pois o número de vértices de grau ímpar em um grafo é sempre par) e cada vértice de $G - J$ tem grau par (pois retiramos de G uma quantidade ímpar de arestas referentes aos vértices de grau ímpar e uma quantidade par de arestas referentes aos vértices de grau par). O tamanho da menor T-junção de G é denotado por $\tau(G,T)$.

Seja $\delta_G(X)$ o conjunto de arestas em um grafo G com exatamente um vértice 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* é um corte de aresta $\delta(X)$ tal que $|T \cap X|$ é ímpar.

Um *empacotamento* de T-cortes de G é uma coleção disjunta $\delta(\mathcal{F}) = \{\delta(X) \mid X \in \mathcal{F}\}$ de T-cortes de G. Se T é o conjunto dos vértices de grau ímpar de G, então denotaremos por $\nu(G,T)$ o tamanho do maior empacotamento de T-cortes de G. Uma *inclusão sábia 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 uma inclusão sábia minimal 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 $X \cap Y = \emptyset$.

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. Considere o grafo $G^{*\triangle}$ 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. 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 $G^{*\triangle}$.

O Lema 2.1 foi provado por Klein, Faria e Stehlik [Klein et al. 2012].

Lema 2.1 *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 inclusões sábias minimais.*

Sejam $X \subset V(G)$ e $G[X]$ um subgrafo, 2-conexo, de G tal que todas as faces de $G[X]$, exceto a face exterior, são triângulos. Um *fosso* de largura k em G ao redor do remendo $G[X]$ 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 1.

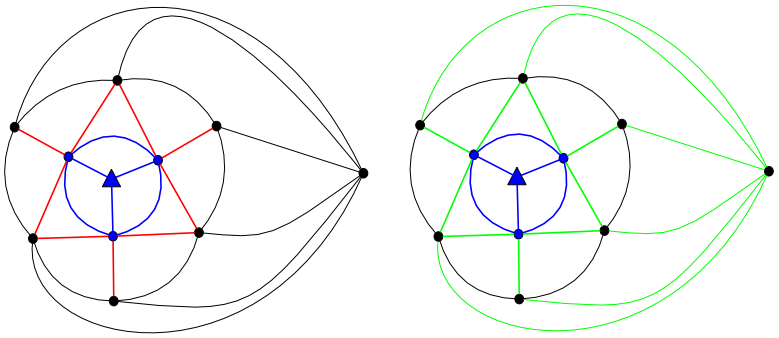

Figura 1. Nas duas figuras os subgrafos azuis representam remendos $G[X]$. As arestas de vermelho indicam um fosso de largura 1 e as arestas de verde um fosso de largura 2. Ambos são 3-fossos.

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.

Lema 2.2 *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. Observe que em cada camada do 3-fosso de G^* a quantidade de arestas é dada pela sequência $(3, 3+6, 3+6\cdot 2, 3+6\cdot 3, ..., 3+6\cdot(k-1))$. Portanto, $\left|\delta^k(u)\right| = \sum_{i=0}^{k-1} |\delta(N^i[u])| = 3k + 6(1+2+3+...+k-1) = 3k^2$. □

3. Resultados Centrais

O problema da frustração de arestas para os grafos $(3,6)$-fullerene será resolvido através de sua versão dual, ou seja, determinaremos o menor número de arestas a serem deletadas de um grafo G de modo que o grafo remanescente não possua vértices de grau ímpar. Este parâmetro é denotado por $\tau(G)$. 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 2.1, um empacotamento de T-cortes em $G^{*\triangle}$ que é laminar, ótimo, consistindo apenas de inclusões sábias minimais. Chamamos um tal empacotamento de um *empacotamento de fossos de T-cortes* que, neste caso, é composto apenas de 3-fossos de G^*.

Teorema 3.1 *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 $\tau(G^*, T) \leq \sqrt{\frac{4f}{3}}$.*

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 2.1, existe um empacotamento de fossos $\delta_{G^{*\triangle}}(\mathcal{F})$. Seja m_3 o número de arestas em um 3-moat de $\delta_{G^{*\triangle}}(\mathcal{F})$. Definimos o vetor de incidência $\vec{r} \in \mathbb{R}^4$ da seguinte maneira: para cada $u \in T$, 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 $\|\vec{a}\| = \langle \vec{a}, \vec{a} \rangle$.

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

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

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 2.2, $|\delta^{r_u}_{G^{*\triangle}}(u)| = 3r_u^2$, 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), temos: $4f \geq m_3 \geq 3\|\vec{r}\|^2$.

Consequentemente temos,

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

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

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

Concluímos que $\tau(G^*, T) \leq \sqrt{\frac{4f}{3}}$. □

Aplicando o Teorema 3.1 ao grafo dual, obtemos a prova do Teorema 1.1.

Prova do Teorema 1.1. 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 3.1, $|J| = |J^*| \leq \sqrt{\frac{4n}{3}}$. □

4. References

Referências

[Bondy and Murty 2008] Bondy, J. A. and Murty, U. S. R. (2008). *Graph theory*. Macmillan/Elsevier, Canada.

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

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