



DIÂMETRO DE GRAFOS FULERENES E TRANSVERSALIDADE DE  
CICLOS ÍMPARES DE FULERÓIDES-(3, 4, 5, 6)

Diego de Souza Nicodemos

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia de Sistemas e Computação, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Sistemas e Computação.

Orientadores: Sulamita Klein  
Luerbio Faria  
Matěj Stehlík

Rio de Janeiro  
Abril de 2017

DIÂMETRO DE GRAFOS FULERENES E TRANSVERSALIDADE DE  
CICLOS ÍMPARES DE FULERÓIDES-(3, 4, 5, 6)

Diego de Souza Nicodemos

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ  
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)  
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR  
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE SISTEMAS E COMPUTAÇÃO.

Examinada por:

---

Prof. Sulamita Klein, D.Sc.

---

Prof. Luerbio Faria, D.Sc.

---

Prof. Matěj Stehlík, Ph.D.

---

Prof. Jayme Luiz Szwarcfiter, Ph.D.

---

Prof. André Luiz Pires Guedes, D.Sc.

---

Prof. Danilo Artigas da Rocha, D.Sc.

---

Prof. Diana Sasaki Nobrega, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2017

Nicodemos, Diego de Souza

Diâmetro de Grafos Fullerenes e Transversalidade de Ciclos Ímpares de Fuleróides-(3,4,5,6)/Diego de Souza Nicodemos. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XV, 93 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Sulamita Klein

Luerbio Faria

Matěj Stehlík

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia de Sistemas e Computação, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 87 – 91.

1. Grafos. 2. Fullerenes. 3. Diâmetro. 4. Fuleróides. 5. Frustração de arestas. 6. Conjuntos independentes. I. Klein, Sulamita *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia de Sistemas e Computação. III. Título.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

## DIÂMETRO DE GRAFOS FULERENES E TRANSVERSALIDADE DE CICLOS ÍMPARES DE FULERÓIDES-(3, 4, 5, 6)

Diego de Souza Nicodemos

Abril/2017

Orientadores: Sulamita Klein

Luerbio Faria

Matěj Stehlík

Programa: Engenharia de Sistemas e Computação

Os grafos fulerenes são modelos matemáticos para moléculas compostas exclusivamente por átomos de carbono, descobertas experimentalmente no início da década de 80 por *Kroto, Heath, O'Brien, Curl e Smalley*. Muitos parâmetros associados a estes grafos vêm sendo discutidos, buscando descrever a estabilidade das moléculas de fulerene. Precisamente falando, grafos fulerenes são grafos cúbicos, planares, 3-conexos cujas faces são pentagonais e hexagonais.

A Conjectura de Andova e Škrekovski [1] afirma que o diâmetro de todo grafo fulerene, contendo  $n$  vértices, é pelo menos igual a  $\left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ . Esta conjectura tornou-se relevante, pois Andova e Škrekovski conceberam-na a partir do estudo de grafos fulerenes altamente regulares, esféricos e simétricos.

Introduzimos os conceitos de curvatura combinatória de vértice e curvatura combinatória de face de um grafo planar. Definimos, então, uma classe particular de grafos fulerenes, chamada de nanodiscos de fulerene. Mostramos que a Conjectura de Andova e Škrekovski não é válida para nenhum nanodisco de fulerene com mais de 300 vértices. No entanto, exibimos infinitas classes de grafos fulerenes, semelhantes aos grafos estudados por Andova e Škrekovski, que satisfazem a referida conjectura.

Acrescentando, aos grafos fulerenes, faces triangulares e quadrangulares concebemos os grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6). Estudamos os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo sobre os grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6), obtendo limites apertados para ambos os problemas.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

DIAMETER OF FULLERENE GRAPHS AND ODD CYCLE TRANSVERSALS  
OF FULLEROIDS-(3, 4, 5, 6)

Diego de Souza Nicodemos

April/2017

Advisors: Sulamita Klein

Luerbio Faria

Matěj Stehlík

Department: Systems Engineering and Computer Science

Fullerene graphs are mathematical models for molecules composed exclusively of carbon atoms, discovered experimentally in the early 1980s by *Kroto, Heath, O'Brien, Curl and Smalley*. Many parameters associated to these graphs have been discussed, trying to describe the stability of the fullerene's molecule. Formally, fullerene graphs are 3-connected, cubic, planar graphs with pentagonal and hexagonal faces.

Andova and Škrekovski Conjecture [1] states that the diameter of all fullerene graph, on  $n$  vertices, is at least equal to  $\left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ . This conjecture became relevant, since Andova and Škrekovski conceived it from the study of highly regular, spherical and symmetrical fullerene graphs.

We introduce the concepts of combinatorial curvature of vertex and combinatorial curvature of face of a planar graph and then we define a specific class of fullerene graphs, called fullerene nanodiscs. We have shown that the Andova and Škrekovski Conjecture is not valid for any fullerene nanodisc with more than 300 vertices. However, we exhibit infinite classes of fullerene graphs, similar to the graphs studied by Andova and Škrekovski, which satisfy this conjecture.

Adding to fullerene graphs, triangular and quadrangular faces we conceive fulleroid-(3, 4, 5, 6) graphs. We studied the bipartite edge frustration and the maximum independent set problems on the fulleroid-(3, 4, 5, 6) graphs, obtaining tight limits for both problems.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Conceitos Básicos . . . . .	5
<b>2 Curvatura Combinatória</b>	<b>9</b>
2.1 A Ideia de Curvatura Combinatória . . . . .	10
2.2 Curvatura Combinatória de Vértices . . . . .	12
2.3 Curvatura Combinatória de Faces . . . . .	15
<b>3 Nanodiscos de Fullerene</b>	<b>20</b>
3.1 Nanodiscos de Fullerenes . . . . .	22
<b>4 Fullerenes Icosaedrais</b>	<b>31</b>
4.1 Grafos Fullerenes com Simetria Icosaedral . . . . .	31
4.2 Propriedades das Planificações e das Malhas Hexagonais . . . . .	37
4.2.1 Remendos Hexagonais . . . . .	40
4.3 Cota Inferior para o Diâmetro de Grafos fullerenes com Simetria Ico- saedral . . . . .	43
<b>5 Transversalidade de Ciclos Ímpares</b>	<b>50</b>
5.1 Frustração de Arestas - Versão Dual . . . . .	51
5.1.1 $T$ -Junções e $T$ -Cortes . . . . .	55
5.1.2 Remendos e Fossos . . . . .	59
5.1.3 Triangulação Planar em grafos com $\Delta \leq 6$ . . . . .	66
5.2 Conjuntos Independentes . . . . .	73
<b>6 Complexidade Relacionada à Problemas Combinatórios em Fulleróides-(3, 4, 5, 6)</b>	<b>76</b>
6.1 Problema da Frustração de Arestas . . . . .	76
6.2 Problema do Conjunto Independente Máximo . . . . .	80

6.3 Problema da Coloração Total . . . . .	82
<b>7 Conclusão e Trabalhos Futuros</b>	<b>85</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>87</b>
<b>Índice Remissivo</b>	<b>92</b>

# Lista de Figuras

1.1	Em (a), um tetraedro plano representando um fulleróide-(3) (contendo apenas faces triangulares). Em (b), um dodecaedro plano representando o menor fullerene que existe, conhecido por $C_{20}$ . Em (c), um fulleróide-(3, 4, 5) (sem face hexagonal) e, em (d), um fulleróide-(3, 4, 5, 6) contendo faces de tamanho 3, 4, 5 e 6. . . . .	8
2.1	Face (ou vértice) de grau 6: curvatura nula. . . . .	10
2.2	Face hexagonal deletada do triângulo $f_6$ . . . . .	11
2.3	Face (ou vértice) de grau 5: curvatura positiva. . . . .	11
2.4	Faces geradas a partir de um hexágono regular. . . . .	12
2.5	A curvatura combinatória do vértice $u_1$ é dada por $\phi_G(u_1) = 1 - \frac{4}{2} + 4 \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{3}$ , enquanto os demais vértices têm curvatura igual a $\phi_G(u_i) = 1 - \frac{3}{2} + \frac{2}{3} + \frac{1}{4} = \frac{5}{12}$ , para todo $2 \leq i \leq 5$ . . . . .	13
2.6	Para os vértices da triangulação $G^*$ (Curvatura de triangulações - Teorema 2.4): $\phi_G^*(u) = \frac{6 - d(u)}{6} = \frac{1}{6}$ , para todo $u \in V(G^*)$ . Para as faces de $G$ (Definição 2.5 - Gromov): $\phi_G^*(f) = 1 - \frac{5}{2} + \sum_{i=1}^{d(f)} \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$ , para toda $f \in F(G)$ . A igualdade obtida foi prevista pelo Teorema 2.6	16
2.7	À esquerda um fulleróide-(3, 4, 5, 6): a face triangular possui curvatura $\frac{3}{6}$ , as faces quadrangulares possuem curvatura $\frac{2}{6}$ , as faces pentagonais possuem curvatura $\frac{1}{6}$ e as faces hexagonais possuem curvatura nula. À direita, uma triangulação finita, dual ao fulleróide-(3, 4, 5, 6) dado. Nesta triangulação, o vértice de grau 3 tem curvatura $\frac{3}{6}$ , os vértices de grau 4 têm curvatura $\frac{2}{6}$ , os vértices de grau 5 têm curvatura $\frac{1}{6}$ e os vértices de grau 6 têm curvatura nula. . . . .	17
2.8	Face genérica de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) decomposta em $d(u)$ triângulos equiláteros, sendo $d(u)$ o grau do vértice $u$ . . . . .	18



2.9	Em (a) e (b), grafos fullerenes com simetria icosaedral. Os hexágonos, de amarelo, têm curvatura nula, enquanto os pentágonos, de azul, têm curvatura positiva igual a $\frac{1}{6}$ . Em (c), temos um grafo contendo faces de tamanho 5, 6 e 7 representados pelas faces azuis, amarelas e vermelhas, respectivamente. As faces vermelhas têm tamanho 7 e curvatura negativa igual a $-\frac{1}{6}$ . . . . .	19
3.1	Grafo fullerene com simetria icosaedral $G_{1,1}$ tridimensional e sua correspondente representação planar, via projeção estereográfica. . . . .	21
3.2	Em (a), o subgrafo $T_2(N)$ cuja fronteira é composta por 12 vértices, e em (b), o subgrafo $T_3(N)$ cuja fronteira é composta por 18 vértices. . . . .	23
3.3	À esquerda, o subgrafo $T_3(N)$ e à direita o subgrafo $T_3(S)$ . Observe que $r = 3$ e $t = 1$ . Neste caso, os subgrafos serão unidos de modo que os vértices $u_i$ coincidam com os vértices $v_{i+1}$ . Note, por exemplo, que o vértice $u_{18}$ deverá ser colado sobre o vértice $v_{19}$ o que equivale a colar $u_{18}$ no vértice $v_1$ , pois $19 \cong 1(mod18)$ . . . . .	23
3.4	À esquerda, a triangulação plana $D_{3,1}^*$ e à direita o seu correspondente nanodisco de fullerene $D_{3,1}$ . . . . .	24
3.5	À esquerda, de vermelho e azul, os caminhos de comprimento $2 \cdot 3 = 6$ entre os vértices $u$ e $v$ passando por $N$ e por $S$ em $D_{3,1}^*$ , e o reflexo do Lema 3.6 no correspondente nanodisco de fullerene $D_{3,1}$ . . . . .	26
3.6	$D_{3,1}^*$ : o vértice $w_1$ da face $uvw_1$ satisfaz $2 = dist(w_1, N) < dist(u, N) = 3$ , enquanto o vértice $w_2$ da face $uvw_2$ satisfaz $2 = dist(w_2, S) < dist(u, S) = 3$ . . . . .	27
3.7	À esquerda, os vértices $A$ e $B$ do nanodisco de fullerene $D_{3,1}$ realizam distância $4 \cdot 3 = 12$ . À direita, uma possível configuração para os vértices $u, u', u'', v, v' e v''$ , em $D_{3,1}^*$ . . . . .	28
3.8	Visão tridimensional do nanodisco de fullerene $D_{5,2}$ com 300 vértices construído em CaGe. [2] . . . . .	30
4.1	Mapeamento hexagonal do plano a partir de vetores unitários $\vec{x}, \vec{y}$ e $\vec{z}$ . . . . .	32
4.2	Face $ABC$ da planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor $\vec{G} = (2, 3)$ . O vértice $A = 0\vec{x} + 0\vec{y} + 0\vec{z}$ , ou simplesmente, $A = (0, 0, 0)$ . O vértice $B = 2\vec{x} - 3\vec{y} + 0\vec{z} = (2, -3, 0)$ , e o vértice $C = -\vec{x} - 3\vec{y} + 2\vec{z} = (-1, -3, 2)$ . . . . .	32
4.3	Planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor $\vec{G} = (2, 3)$ . Os vértices de mesmo rótulo na planificação coincidirão quando reconstruirmos o correspondente icosaedro regular. . . . .	33
4.4	Planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor $\vec{G} = (1, 4)$ . . . . .	34

4.5	As partes coloridas formarão os 12 pentágonos do sólido com simetria icosaedral gerado pelo vetor $\vec{G} = (1, 4)$ . . . . .	34
4.6	Grafo fullerene com simetria icosaedral $G_{1,4}$ . . . . .	35
4.7	(a) Dodecaedro = Grafo fullerene com simetria icosaedral $G_{0,1}$ contendo 20 vértices. O seu dual é um icosaedro regular. (b) Nanodisco de fullerene $D_{2,t}$ com 48 vértices. As faces pentagonais deste nanodisco são dispostas lado à lado, portanto este grafo fullerene não é icosaedral. . . . .	35
4.8	Face triangular $OBD$ do icosaedro regular gerado pelo vetor $\vec{G} = (1, 3)$ , na malha hexagonal. . . . .	36
4.9	Face triangular $OBD$ do icosaedro regular gerado pelo vetor $\vec{G} = (1, 3)$ , nas malhas hexagonal e triangular. . . . .	37
4.10	Planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor $\vec{G} = (1, 4)$ e, consequentemente, do grafo fullerene com simetria icosaedral $G_{1,4}$ . . . . .	38
4.11	A distância entre o hexágono que contém o ponto $P$ e o hexágono que contém o ponto $Q$ é de 1 unidade e entre os hexágonos que contém os pontos $P$ e $R$ é de 2 unidades. . . . .	38
4.12	Parte das planificações de $G_{1,4}$ , tracejado, e $G_{1,5}$ , de preto. A distância entre os hexágonos que contém os vértices $A'$ de $G_{1,4}$ e $A'$ de $G_{1,5}$ é de 3 unidades. . . . .	40
4.13	O vértice $a$ é um vértice à direita da face hexagonal $h_a$ , e o vértice $b$ é um vértice à esquerda da face hexagonal $h_b$ . . . . .	41
4.14	As linhas tracejadas de azul, verde e vermelho indicam os três paralelogramos gerados pelos vértices $a$ e $b$ . . . . .	42
4.15	Segmento tracejado = Paralelogramo gerado por $a$ e $b$ degenerado em um segmento. . . . .	42
4.16	O paralelogramo tracejado, gerado por $a$ e $b$ , induz um paralelogramo formado por arestas da malha hexagonal, cuja fronteira está colorida de azul. A este circuito fechado damos o nome de remendo hexagonal. . . . .	43
4.17	Grafo $G_{1,3}$ . O caminho mínimo entre $u$ e $v$ , de comprimento 17, está representado pelas arestas vermelhas da malha. . . . .	44
4.18	Parte das planificações dos grafos $G_{1,j}$ e $G_{1,j+1}$ : o caminho mínimo entre $v$ e $v'$ tem comprimento de 6 unidades. . . . .	45
4.19	Planificação de $G_{1,3}$ : o hexágono que contém $A' \in A'D'E'$ encontra-se à direita do hexágono que contém $A \in ABC$ . . . . .	46
4.20	Parte das planificações de $G_{1,3}$ , de roxo e de $G_{2,5}$ , tracejado de verde. Observe que $dist(a', a'') = 14$ . . . . .	48

5.1	Em (a), um grafo $G = (V, E)$ fulleróide-(3, 4, 5, 6) que não é bipartido, pois possui faces de tamanho 3 e 5. Em (b), destacamos um conjunto mínimo $C$ de arestas de $G$ que ao serem deletadas torna bipartido o grafo remanescente, $C$ é mínimo porque tem 4 ciclos ímpares disjuntos de arestas e $ C  = 4$ . Em (c), eliminamos as 4 arestas destacadas em (b) e obtemos um grafo bipartido. Portanto, $\tau_{odd}(G) = 4$ . . . . .	51
5.2	Um grafo fullerene (dodecaedro), de preto, e o seu dual, de vermelho.	52
5.3	Os grafos da Figura 5.2 separados. Em (a), o grafo fullerene (dodecaedro) e, em (b), o seu correspondente dual. Observe que em (b) todos os vértices são defeituosos, pois todos os vértices têm grau menor que 6.	53
5.4	Em (a), uma triangulação planar $G^*$ , dual do grafo da Figura 5.1a, contendo um vértice de grau 3 e três vértices de grau 5. Em (b), de vermelho, um conjunto de arestas, de cardinalidade mínima, 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, $\tau(G^*) = 4$ . Repare que o dual do grafo obtido em (c) será bipartido, pois o grafo em (c) não possui vértice de grau ímpar. . . . .	53
5.5	Os vértices de vermelho representam o conjunto $T = \{t_1, t_2, p_1, h_2\}$ e as arestas de vermelho representam uma $T$ -junção de $G$ . . . . .	55
5.6	O conjunto de vértices de vermelho $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$ é o conjunto de todos os vértices de grau ímpar de $G$ . As arestas de vermelho representam a menor $T$ -junção de $G$ . Neste exemplo, $\tau(G, T) = 2$ . . .	55
5.7	Dois exemplos de $T$ -cortes, com $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$ . As arestas verdes representam o $T$ -corte obtido a partir do conjunto $X = \{t_1, p_1, t_2, s_1, h_1\}$ e as arestas vermelhas representam o $T$ -corte obtido a partir do conjunto $X = \{p_1, s_2\}$ . . . . .	56
5.8	$T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$ é o conjunto dos vértices de grau ímpar de $G$ . À esquerda o empacotamento $\{\delta(\{t_1\}), \delta(\{t_2\})\}$ de $T$ -cortes de $G$ representado pelas arestas vermelhas e azuis, e à direita o empacotamento $\{\delta(\{p_1\}), \delta(\{p_2\})\}$ de $T$ -cortes de $G$ representado pelas arestas laranjas e roxas. Observe que ambos os empacotamento são máximos e têm tamanho 2, logo $\nu(G, T) = 2$ . . . . .	56

- 5.9 Em (a), um grafo bipartido  $G$  e seu conjunto de vértices de grau ímpar  $T = \{a, b, c, d, e, f, i, m, o, p\}$ . Em (b), de vermelho, uma  $T$ -junção de tamanho mínimo. Neste caso,  $\tau(G, T) = 7$ . Em (c), exibimos um empacotamento  $\{\delta(X_1), \delta(X_2), \delta(X_3), \delta(X_4), \delta(X_5), \delta(X_6), \delta(X_7)\}$  de  $T$ -cortes de  $G$ , com  $X_1 = \{f\}$ ,  $X_2 = \{i\}$ ,  $X_3 = \{b\}$ ,  $X_4 = \{p\}$ ,  $X_5 = \{m\}$ ,  $X_6 = \{d\}$  e  $X_7 = \{o, p, q, c, b, j, i, k, a, f, e, g, d\}$ . Note que este é um empacotamento de tamanho máximo, portanto  $\nu(G, T) = 7$ , satisfazendo o Teorema de Seymour 5.2. . . . . 57
- 5.10 Em (a), uma face da triangulação  $G$ . Em (b), sua subdivisão  $G'$  e, em (c), seu refinamento  $G^\Delta$ . . . . . 58
- 5.11 Em (a), uma triangulação  $G$  tal que todos os seus vértices têm grau ímpar, logo  $T = V(G)$ . Em (b), destacamos uma  $T$ -junção de tamanho mínimo, portanto  $\tau(G, T) = 2$ . Em (c), o refinamento do grafo  $G$ , representado por  $G^\Delta$ . Exibimos um empacotamento  $\{\delta(\{a\}), \delta(\{b\}), \delta(\{c\}), \delta(\{d\})\}$  de  $T$ -cortes de  $G$  que é laminar, ótimo formado por inclusões minimais. Portanto,  $\nu(G^\Delta) = 4$ , satisfazendo o Lema 5.3 . . . . . 58
- 5.12 De vermelho, um remendo  $H \subset G$ . Em  $H$  há um vértice de grau 3 e três vértices de grau 4. Os demais vértices têm grau 6, logo  $\sum_{u \in V(H)} (6 - d(u)) = 9$ . Portanto,  $H$  é um 9-remendo de  $G$ . Além disso,  $A(H) = 27$ . . . . . 59
- 5.13 À esquerda, de vermelho, temos um 3-remendo  $H_1$  de  $G$  e, à direita, de azul, temos um 9-remendo  $H_2$  de  $G$ . . . . . 61
- 5.14 Nas duas figuras os subgrafos azuis representam 3-remendos  $G[X]$ . As arestas de vermelho indicam um 3-fosso de largura 1 e as arestas de verde um 3-fosso de largura 2. . . . . 61
- 5.15 De azul, à esquerda e à direita, temos dois 1-remendo  $G[X]$ . De verde o 1-fosso de largura 1 consiste de todas as arestas dos caminhos da fronteira do 1-remendo  $G[X]$  aos vértices a uma distância 1 do conjunto  $X$  e de vermelho o 1-fosso de largura 2 é composto pelas arestas dos caminhos da fronteira de  $G[X]$  aos vértices que distam 2 unidades de  $X$ . . . . . 62
- 5.16  $C_{60} = G_{1,1}$  = Grafo fulleróide-(5, 6) contendo 60 vértices. As 12 arestas tracejadas e os 24 vértices de vermelho satisfazem os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo para o  $G_{1,1}$ :  $\tau_{odd}(G_{1,1}) = \sqrt{\frac{12 \cdot 60}{5}} = 12$  e  $\alpha(G_{1,1}) = \frac{60}{2} - \sqrt{\frac{3 \cdot 60}{5}} = 24$ . . . 74

5.17	Grafo fulleróide-(3, 6) 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, $\tau_{odd}(G) = \sqrt{\frac{4 \cdot 12}{3}} = 4$ e $\alpha(G) = \frac{12}{2} - \sqrt{\frac{12}{3}} = 4$ . . . . .	75
6.1	À esquerda, em $G^*$ , os caminhos entre $p_1$ e $p_2$ e entre $p_3$ e $p_4$ obtidos a partir do emparelhamento perfeito de peso mínimo em $K_{12}(G)$ . Observe que caso haja algum vértice comum a ambos os caminhos, é possível obter uma soma menor entre os caminhos de $p_1$ à $p_3$ e de $p_2$ à $p_4$ que a soma obtida através do emparelhamento perfeito de peso mínimo em $K_{12}(G)$ , situação descrita à direita, em $G$ . . . . .	78
6.2	À esquerda, em $G^*$ , os caminhos entre $p_1$ e $p_2$ e entre $p_3$ e $p_4$ obtidos a partir do emparelhamento perfeito de peso mínimo em $K_{12}(G)$ . Se houvesse aresta comum a ambos os caminhos, então mais uma vez melhorariamos (diminuiríamos) o peso do emparelhamento perfeito obtido em $K_{12}(G)$ , como observado à direita, em $G$ . . . . .	79
6.3	Em (a), o grafo $G = \text{fulleróide-(3, 4, 5, 6)}$ . Em (b), o grafo dual $G^*$ do grafo $G = \text{fulleróide-(3, 4, 5, 6)}$ . Destacamos, de vermelho, os 4 vértices de grau ímpar de $G^*$ . Em (c), o grafo $K_4$ ponderado representando o grafo distância pentagonal de $G$ . . . . .	79
6.4	Dois campos desobstruídos de dimensões (5, 3). Os arcos dos campos desobstruídos estão representados pelas setas. Hexágonos com menos de três vértices no conjunto independente estão de amarelo. A penalidade do campo desobstruído em (a) é de $2 \cdot 5 + 3 = 13$ , enquanto a penalidade do campo desobstruído em (b) é de $5 + 2 \cdot 3 = 11$ . . . . .	80
6.5	Grafo Fullerene $G$ com $\chi''(G) = 4$ . . . . .	82
6.6	Grafo Tipo 1, em (a). Em (b), um grafo Tipo 2, provado por Sasaki [3, Propriedade 11]. . . . .	83

# Lista de Tabelas

2.1	Curvatura combinatória das faces dos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6). . . . .	16
3.1	Número de vértices, faces, arestas e camadas do nanodisco de fullerene $D_{r,t}$ em função do parâmetro $r \geq 2$ . . . . .	25
3.2	Cotas para o diâmetro de nanodiscos dadas pela Conjectura de Andova e Škrekovski (linha 2 - cotas inferiores) e dadas pelo Teorema do Nanodisco (linha 3 - cotas superiores). Quando $n \geq 300$ a Conjectura de Andova e Škrekovski não vale para nenhum nanodisco de fullerene. . . . .	29
4.1	Cada entrada é composta por um par ordenado da forma (Conjectura 3.2, Lema 4.8). A região de verde corresponde aos grafos fullerenes com simetria icosaedral que satisfazem a Conjectura, garantida pelo Teorema 4.9, ou seja, $G_{i,j}$ com $0 < i$ e $j \geq \frac{11i}{2}$ , sendo a nossa contribuição. A região de azul indica os grafos fullerenes com simetria icosaedral estudados por Andova e Škrekovski em [1], $G_{i,j}$ com $0 = i < j$ ou $0 < i = j$ , conseqüentemente estando de acordo com a Conjectura. As demais regiões descrevem os grafos fullerenes com simetria icosaedral do tipo $G_{i,j}$ com $0 < i$ , $0 < j < \frac{11i}{2}$ e $i \neq j$ . Desconhecemos a validade da Conjectura nesta última região, deixando estes problemas como questões em aberto. . . . .	49
4.2	Cada entrada é composta por um par ordenado da forma (Conjectura 3.2, Lema 4.8). A região de verde corresponde aos grafos fullerenes com simetria icosaedral que satisfazem a Conjectura, garantida pelo Teorema 4.9, ou seja, $G_{i,j}$ com $0 < i$ e $j \geq \frac{11i}{2}$ , sendo a nossa contribuição. As demais regiões descrevem os grafos fullerenes com simetria icosaedral do tipo $G_{i,j}$ com $0 < i$ , $0 < j < \frac{11i}{2}$ e $i \neq j$ . Desconhecemos a validade da Conjectura nesta última região, deixando estes problemas como questões em aberto. . . . .	49

5.1	Fuleróides-(3, 4, 5, 6) e seus duais. São dados os números de vértices de graus 3, 4, 5 e 6 dos grafos duais. Contabilizamos, também, os tamanhos dos conjuntos de vértices, arestas e de vértices defeituosos de cada dual $G^*$ . . . . .	54
5.2	Limites para o problema da frustração bipartida de arestas. . . . .	72
5.3	Limites para o problema do conjunto independente máximo. . . . .	75
6.1	Complexidade de alguns problemas envolvendo subclasses dos grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6). A palavra open indica que o problema encontra-se em aberto para aquela classe específica de grafo. A classe dos problemas P é aquela para os quais existe um algoritmo tal que o seu consumo de tempo no pior caso é limitado por um polinômio no tamanho das instâncias do problema. A classe dos problemas NP é aquela para as quais podemos verificar, em tempo polinomial, se uma dada solução é correta. A classe NPc indica a subclasse dos problemas NP tal que se pudermos resolver um desses problemas em tempo polinomial, então todos os demais problemas em NP também podem ser resolvidos em tempo polinomial. . . . .	84

# Capítulo 1

## Introdução

Substâncias simples são aquelas formadas por um único elemento químico. Substâncias simples e distintas compostas pelo mesmo elemento químico são chamadas de *alótropas*. Os gases oxigênio  $O_2$  e ozônio  $O_3$  são exemplos de alótropos devido à atomicidade que é a quantidade de átomos em cada molécula. Outro tipo de alotropia ocorre pelo arranjo espacial dos átomos, como no caso dos átomos de carbono que variam suas configurações geométricas formando o diamante e o carvão, por exemplo.

De acordo com Gibney [4], em 1919, Mary Lea Heager, da Universidade da Califórnia (Observatório de Lick em Mount Hamilton), detectou que determinados comprimentos de onda de luz comportavam-se de uma forma que parecia não estar relacionada às estrelas. À medida que os astrônomos perceberam mais tais características, eles as atribuíram às moléculas no gás interestelar que absorvem comprimentos de onda de luz em seu caminho para a Terra, e as chamaram de bandas interestelares difusas (DIB). Até então não se sabia exatamente quais moléculas eram as responsáveis por tal comportamento. Um estudo recente de Campell, Holz e Maier [5], publicado em julho de 2015 na revista *Nature*, identificou positivamente que todo esse comportamento imprevisível foi devido às moléculas de uma substância simples composta por 60 átomos de carbono, chamada de  $C_{60}$ .

Em 1985, a comunidade científica testemunhou o surgimento de um novo alótropo do carbono. Um grupo de cientistas liderados por *Kroto, Smalley e Curl* [6], motivados pela descoberta de Mary Lea Heager, descobriu experimentalmente uma molécula altamente simétrica, estável, composta apenas por átomos de carbono e até então diferente dos demais alótropos de carbono. Esta nova molécula, concebida em laboratório, recebeu o nome de *buckminsterfullerene* –  $C_{60}$  – em homenagem ao arquiteto Richard Buckminster Fuller <sup>1</sup>. Em 1996, *Kroto, Smalley e Curl* foram agraciados com o Prêmio Nobel de Química [7] por essa notável descoberta.

---

<sup>1</sup>Famoso por suas construções de cúpulas geodésicas que eram compostas por faces pentagonais e hexagonais. Tais estruturas também estão presentes nas moléculas de fulerene



A estrutura da molécula buckminsterfullerene ou simplesmente  $C_{60}$  assemelha-se a uma bola de futebol oca, pois possui 32 faces sendo 20 hexagonais e 12 pentagonais. No final da década de 80 a ciência conhecia outras moléculas alótropas de carbono geradas em laboratório possuindo estrutura espacial similar à molécula  $C_{60}$ . Estas estruturas foram batizadas de *moléculas de fulerene*.

Atualmente as moléculas de fulerene são largamente estudadas pelos mais diferentes ramos da ciência, da medicina à matemática. Cogita-se que estas moléculas sejam capazes de contribuir no transporte de quimioterápicos, de antibióticos ou de agentes antioxidantes e liberadas em contato com células deficientes. Existem planos de produção destas moléculas em escala suficiente para a construção de elevadores orbitais a base de fulerenes devido a sua dureza e estabilidade. Teoricamente isto propiciaria a manutenção de estações espaciais a um custo bem menos elevado do que o atual.

Cada *molécula de fulerene* pode ser matematicamente modelada por um grafo da seguinte maneira: os átomos da molécula correspondem aos vértices do grafo e as ligações entre os átomos correspondem às arestas do grafo. Convém observar que nesta modelagem eventuais duplas ligações entre átomos de carbono da molécula de fulerene dão origem a exatamente uma aresta entre os vértices do grafo que as corresponde. Além disso, os *grafos fulerenes* herdam propriedades geométricas das moléculas de fulerene, isto é, os *grafos fulerenes* são planares, conexos, todos os vértices têm exatamente 3 arestas incidentes e todas as suas faces são pentagonais ou hexagonais<sup>2</sup>.

Em 2012, Andova e Škrekovski [1] determinaram o diâmetro dos grafos fulerenes com simetria icosaedral completa (ou cheia). Esta classe de grafos fulerenes além de altamente simétrica é perfeitamente esférica. Tais propriedades os levaram a conjecturar que o diâmetro dos grafos fulerenes com simetria icosaedral completa era uma cota inferior apertada para todos os demais grafos fulerenes. A Conjectura de Andova e Škrekovski afirma que em todo grafo fulerene  $F$ , com  $n$  vértices,  $diam(F) \geq \left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ .

De acordo com Došlić e Vukičević [8] a estabilidade das moléculas de fulerene é uma questão que tem impulsionado o estudo dos grafos que servem de modelo matemático para essas moléculas. Segundo Rocha-Filho [9], as moléculas  $C_{60}$  e  $C_{70}$  são as menores moléculas de fulerene em que todas as faces pentagonais estão isoladas umas das outras. Esta é a *regra do pentágono isolado-IPR* que afirma que o isolamento entre as 12 faces pentagonais é um requisito para a estabilidade de uma molécula de fulerene.

Muitos invariantes relacionados à estabilidade destas moléculas vêm sendo pesquisados. Um desses invariantes mede quão próximo um dado grafo está de se tornar

---

<sup>2</sup>Introduzimos uma definição mais formal de grafos fulerenes na próxima secção.

um grafo bipartido e, conseqüentemente, de se tornar mais estável. Sabemos que grafos bipartidos são caracterizados por não conterem ciclos de tamanho ímpar, portanto torna-se claro que a presença de ciclos ímpares são obstáculos para um grafo ser bipartido e, conseqüentemente, para a estabilidade de sua correspondente molécula de fulerene.

Outra abordagem que quantifica a *não bipartividade*<sup>3</sup> de um grafo  $G = (V, E)$  é baseada na contagem das arestas que violam a propriedade para um grafo ser bipartido, isto é, aquelas arestas que têm extremidades na mesma classe de uma bipartição de  $V$ . Segundo Došlić e Vukičević [8] 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.

Holme, Liljeros, Edling e Kim [10] introduziram uma medida de *bipartividade* de um grafo ( $b(G)$ ) baseada na frustração de arestas:  $b(G) = 1 - (\tau_{odd}(G)/|E|)$ , onde  $\tau_{odd}(G)$  é o número mínimo de arestas frustradas no grafo  $G = (V, E)$ . Claramente para grafos bipartidos  $\tau_{odd}(G) = 0$  e  $b(G) = 1$ . Além disso, quanto mais próximo  $b(G)$  estiver de zero, mais arestas deverão ser removidas de  $G$  para que o grafo remanescente seja bipartido.

Lemos [11], em sua dissertação de mestrado, realizou um interessante estudo comparando invariantes da teoria dos grafos na previsão da estabilidade das moléculas de fulerenes. Lemos detecta que o diâmetro parece ser um dos invariantes menos úteis para prever a estabilidade de uma molécula de fulerene, enquanto a frustração (bipartida) de arestas e o número de independência se destacam como os invariantes mais precisos para prever a estabilidade de moléculas de fulerene.

Se um grafo fulerene não tiver faces pentagonais adjacentes, então é necessário a remoção de no mínimo 12 arestas para tornar bipartido o grafo remanescente, caso contrário é possível que a remoção de apenas 6 arestas seja suficiente. Klein, Faria e Stehlík [12] provaram a Conjectura de Došlić e Vukičević [8] estabelecendo um limite superior apertado para o problema da frustração de arestas em grafos fulerenes e, determinaram, também, uma cota inferior apertada para o problema do conjunto independente máximo em grafos fulerenes.

No Capítulo 2, discutimos as definições de curvatura combinatória de vértices e de faces para grafos planares e mostramos que essas definições são equivalentes. Este conceito nos ajudará a entender com precisão a estrutura combinatória presente nos grafos fulerenes.

No Capítulo 3, baseados no conceito de curvatura combinatória, definimos uma classe de grafos fulerenes chamada de *nanodiscos de fulerene*. Mostramos que a Conjectura de Andova e Škrekovski, surpreendentemente, não é válida para nenhum

---

<sup>3</sup>A bipartividade de um grafo pode ser interpretada como uma maneira de medir o quão diferente este grafo é do seu correspondente subgrafo gerador bipartido máximo.

nanodisco de fullerene com mais de 300 vértices. Os resultados apresentados neste capítulo foram desenvolvidos em parceria com o professor Matěj Stehlík e deram origem ao artigo “Fullerene Graphs of Small Diameter” publicado, em 2017, na MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry [13].

No Capítulo 4, estudamos os *grafos fulerenes com simetria icosaedral* e algumas propriedades de suas planificações na malha hexagonal. Exibimos também uma quantidade infinita de classes de grafos fulerenes com simetria icosaedral que satisfazem a Conjectura de Andova e Škrekovski. Os resultados deste capítulo foram apresentados, em 2014, no LAWCG - VI Latin American Workshop on Cliques in Graphs [14].

Faria, Klein e Stehlík [12] estabeleceram limites para os problemas da frustração (bipartida) de arestas e do conjunto independente máximo para grafos fulerenes. No Capítulo 5, estendemos os resultados de Faria, Klein e Stehlík para grafos fuleróides  $(3, 4, 5, 6)$ . Estes são grafos similares aos grafos fulerenes, porém permitimos faces triangulares e quadrangulares, além das pentagonais e hexagonais. Os resultados deste capítulo estão contidos no artigo “Packing and Covering Odd Cycle in Cubic Plane Graphs with Small Faces” desenvolvido em cooperação com o professor Matěj Stehlík. Este artigo encontra-se submetido ao European Journal of Combinatorics e para o Eurocomb 2017 - European Conference on Combinatorics, Graph Theory and Applications-2017. Parte deste capítulo, que trata dos grafos fuleróides  $(3, 4, 6)$  foi apresentado no Primeiro encontro de Teoria da Computação - ETC 2016 [15], no XLVIII Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional - SBPO 2016 [16] e no VII Latin American Workshop on Cliques in Graphs - LAWCG 2016 [17].

No capítulo 6, discutimos a utilização de algoritmos que computam em tempo polinomial os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo em grafos fulerenes. Estes algoritmos são devidos à Došlić e Vukičević [8] e à Daugherty [18], respectivamente. Além disso, apresentamos o problema da coloração total em grafos fuleróides  $(3, 4, 5, 6)$  e o atual desenvolvimento deste trabalho em parceria com os professores Luerbio Faria, Sulamita Klein e Diana Sasaki.

Finalmente, no Capítulo 7, apresentamos um panorama global dos resultados aqui obtidos e discutimos potenciais problemas que desejamos pesquisar sobre os grafos fuleróides  $(3, 4, 5, 6)$ .

Este doutorado teve início em março de 2012 sob orientação da professora Sulamita Klein e do professor Luerbio Faria, com período de doutorado sanduíche, de março de 2015 à setembro de 2015, no Laboratório G-SCOP afiliado à Universidade Joseph Fourier em Grenoble, França, sob orientação do professor Matěj Stehlík.

A seguir, apresentamos algumas definições básicas de teoria de grafos e definimos formalmente grafos fulerenes e fuleróides  $(3, 4, 5, 6)$ .

## 1.1 Conceitos Básicos

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, isto é, para toda aresta  $e \in E(G)$  existem  $u \in V(G)$  e  $v \in V(G)$  distintos e tais que  $e = \{u, v\}$  ou simplesmente  $e = uv$ . Neste caso, dizemos que os vértices  $u$  e  $v$  são *adjacentes* ou *vizinhos* e que a aresta  $e$  é *incidente* aos vértices  $u$  e  $v$  ou que  $u$  e  $v$  são as *extremidades* da aresta  $e$ . De maneira análoga, duas arestas que possuem a mesma extremidade são chamadas de *arestas adjacentes*. Quando não houver risco de ambiguidade escreveremos  $G = (V, E)$  ou simplesmente  $G$ . Neste trabalho, todos os grafos considerados são *simples*, isto é, não possuem arestas *múltiplas* ou *paralelas* (arestas distintas que unem o mesmo par de vértices) ou *laços* (aresta que une um vértice a ele mesmo).

Um grafo é *finito* quando seu conjunto de vértices  $V$  é finito, 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  $v$ . Denotamos por  $\delta(G)$  e  $\Delta(G)$  os graus mínimo e máximo, respectivamente, dos vértices do grafo  $G$ . O número de arestas de um grafo  $G = (V, E)$  depende do somatório dos graus dos vértices de  $G$ , através da seguinte relação  $\sum_{v \in V} d(v) = 2|E|$ , conhecida como Teorema do Aperto de Mãos. Consequentemente, em um grafo qualquer, 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*. Se todos os vértices de um grafo têm graus menores que 3, então ele é chamado de grafo *subcúbico*.

Um grafo em que cada par de vértices distintos está unido por uma aresta é chamado de grafo *completo*. Todo grafo completo com  $n$  vértices é  $(n - 1)$ -regular.

Uma *triangulação planar finita* é um grafo finito, planar cujas faces são triângulos. Se o grafo é infinito, planar e suas faces são triângulos, então dizemos que este grafo é uma *triangulação planar infinita*.

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  $U \subseteq V$ . De maneira análoga, definimos um subgrafo induzido por um subconjunto de arestas  $F \subseteq E$ .

Dado um grafo  $G = (V, E)$ , um *emparelhamento* é um subconjunto de arestas de  $G$  tal que seus elementos não são adjacentes dois à dois.

Dado  $k \geq 0$ , um *passeio*  $P = v_1 e_1 v_2 e_2 v_3 e_3 v_4 \dots v_{k-1} e_{k-1} v_k e_k v_{k+1}$  é uma sequência

finita de vértices e arestas de um grafo, tal que  $v_i \in V$ ,  $e_i \in E$ , e  $e_i = v_i v_{i+1}$ . Neste caso, o *comprimento* de  $P$  é igual a  $k$ , seu número de arestas com ou sem repetição. Vamos denotar o passeio somente pela sequência  $(v_1, v_2, \dots, v_{k+1})$  subjacente de seus vértices. Se um passeio não possui arestas repetidas, então o chamamos de *trilha*. Se o passeio não repete vértices, então o chamamos de *caminho*. Dados dois vértices  $u$  e  $v$  de um grafo  $G = (V, E)$ , um *caminho* entre  $u$  e  $v$ , ou caminho que *conecta*  $u$  à  $v$ , em  $G$  é uma sequência  $P = l_0 l_1 \dots l_k$ , em que  $u = l_0$ ,  $v = l_k$ , os vértices  $l_i$  são distintos e  $l_i l_{i+1} \in E$ . O *caminho geodésico* ou *caminho mínimo* ou *menor caminho* entre dois vértices de um grafo é o caminho de menor comprimento dentre todos os caminhos que conectam esses vértices.

Um passeio  $P = l_0 l_1 \dots l_k$  é *fechado* se  $k > 0$  e  $l_0 = l_k$ . Um *ciclo* ou *circuito* é uma trilha fechada com uma única repetição de vértices de comprimento no mínimo igual a 3. Um ciclo em  $k$  arestas é também chamado de *k-ciclo*. A paridade do inteiro  $k$  define se o ciclo é *par* ou se o ciclo é *ímpar*.

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.

A *distância* entre dois vértices  $u$  e  $v$  de um grafo conexo  $G = (V, E)$  é representada por  $dist_G(u, v)$  ou por  $dist(u, v)$  (se não houver risco de ambiguidade) e é definida como o comprimento do menor caminho entre  $u$  e  $v$  em  $G$ . O *diâmetro* de um grafo conexo é dado pela máxima distância entre dois vértices do grafo, ou pode ser visto como o comprimento do maior caminho geodésico entre dois vértices.

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 cada uma de 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.

Definimos a *k-vizinhança aberta* de um subconjunto  $X \subseteq V(G)$  em  $G$  como sendo o conjunto  $N_G^k(X) = \{v \in V(G) \mid dist_G(v, x) = k \text{ para algum } x \in X\}$ . Quando  $k = 1$  temos a *vizinhança aberta* (ou *vizinhança aberta usual*) de um subconjunto  $X \subseteq V(G)$  em  $G$ , denotada por  $N_G(X) = N_G^1(X)$ . A *k-vizinhança fechada* de um subconjunto  $X \subseteq V(G)$  em  $G$  é definida por  $N_G^k[X] = \{v \in V(G) \mid dist_G(v, x) \leq k \text{ para algum } x \in X\}$ . Para  $k = 1$  temos a *vizinhança fechada* (ou *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 *k-vinhança aberta* e *k-vizinhança fechada*, escrevendo  $N_G(x)$  e  $N_G[x]$ .

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 um desenho plano  $D(G)$  de  $G$ , representado por  $(D(G))^*$ , da seguinte forma: a cada face  $f$  de  $D(G)$  corresponde um vértice  $f^*$  de  $(D(G))^*$ , e a cada aresta  $e$  de  $D(G)$  corresponde uma aresta  $e^*$  de  $(D(G))^*$  de modo que dois vértices  $f^*$  e  $g^*$  de  $(D(G))^*$  são ligados por uma aresta  $e^*$  se e somente se as faces  $f$  e  $g$  em  $D(G)$  são separadas pela aresta  $e$ . Sabe-se que o grafo dual de um grafo planar é um grafo planar e que  $((D(G))^*)^*$  é isomorfo a  $G$ . 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). Outro resultado conhecido muito importante para nós é que todo grafo 3-conexo possui, a menos de isomorfismo, uma única imersão planar. Assim, se  $G$  é 3-conexo podemos considerar o dual  $G^*$  de  $G$  independente do desenho plano  $D(G)$  de  $G$ .

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* (ou o *tamanho*) 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. Em um grafo conexo planar com  $f$  faces,  $n$  vértices e  $m$  arestas, vale  $n + f - m = 2$  que é conhecida como *relação de Euler* [19].

Um grafo planar, cúbico, 3-conexo cujas faces são pentagonais ou hexagonais é chamado de **Grafo Fulerene** ou simplesmente *fulerene*.

**Lema 1.1** *Todo grafo fulerene possui exatamente 12 faces pentagonais.*

*Demonstração.* Seja  $G$  um grafo fulerene com  $p$  faces pentagonais e  $h$  faces hexagonais. Então  $G$  possui  $p + h$  faces,  $\frac{5p+6h}{2}$  arestas (cada aresta pertence a 2 faces e o grafo é simples) e  $\frac{5p+6h}{3}$  vértices (o grafo é cúbico). Como  $G$  é um grafo planar e conexo então pela relação de Euler  $\frac{5p+6h}{3} + p + h + \frac{5p+6h}{2} = 2$ . Consequentemente,  $10p + 12h + 6p + 6h = 15p + 18h + 12$ .

Portanto,  $p = 12$ . □

Em um grafo fulerene os vértices pertencentes às faces pentagonais são chamados de *vértices pentagonais* e os vértices pertencentes às faces hexagonais são chamados de *vértices hexagonais*. Um vértice será pentagonal mesmo pertencendo a ambos tipos de faces.

Um **Grafo Fuleróide**  $(f_1, f_2, \dots, f_k)$ , com  $f_i < f_{i+1}$ ,  $f_i \in \{3, 4, 5, 6\}$  é um grafo planar, 3-conexo, cúbico cujas faces têm tamanho  $f_1, f_2, \dots, f_k$ . As faces de tamanho 3, 4, 5 e 6 serão chamadas de faces *triangulares*, *quadrangulares*, *pentagonais*, e *hexagonais*, respectivamente. Um grafo fuleróide  $(5, 6)$  não possui faces de tamanho 3 e de tamanho 4, sendo portanto um grafo fulerene. A Figura 1.1 mostra alguns exemplos de grafos fuleróides  $(f_1, f_2, \dots, f_k)$ .

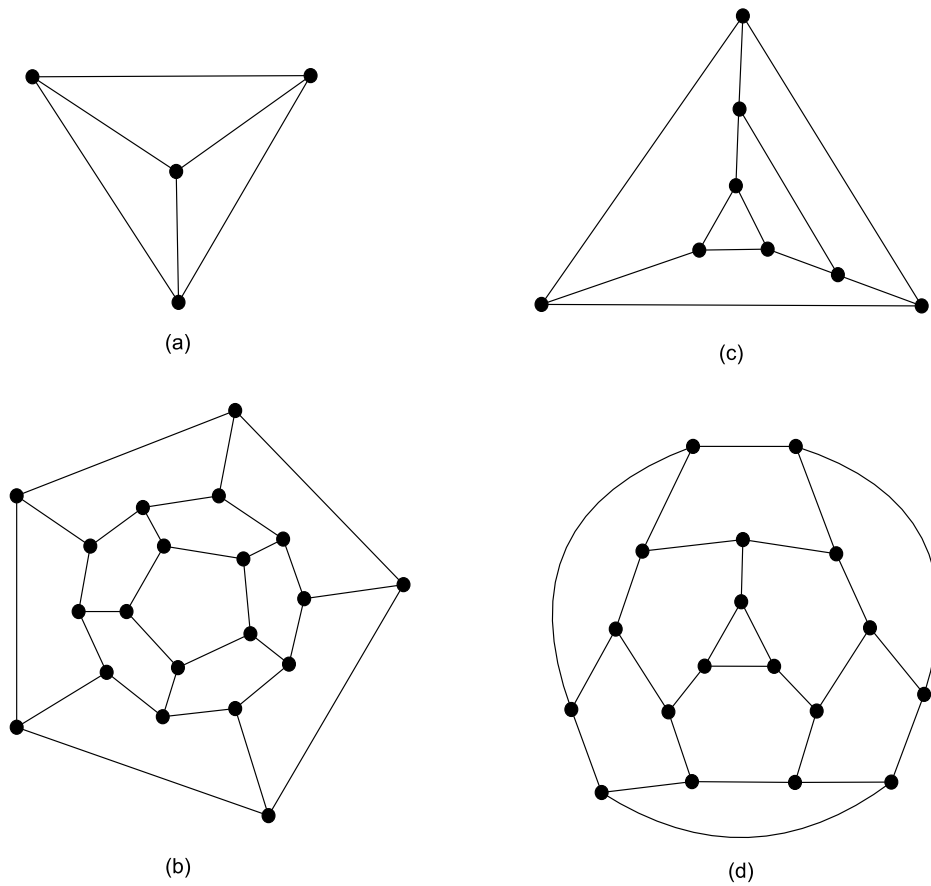


Figura 1.1: Em (a), um tetraedro plano representando um fulleróide-(3) (contendo apenas faces triangulares). Em (b), um dodecaedro plano representando o menor fullerene que existe, conhecido por  $C_{20}$ . Em (c), um fulleróide-(3, 4, 5) (sem face hexagonal) e, em (d), um fulleróide-(3, 4, 5, 6) contendo faces de tamanho 3, 4, 5 e 6.

No decorrer do trabalho acrescentaremos definições específicas ao contexto abordado. As definições de teoria de grafos apresentadas neste capítulo podem ser encontradas em Bondy e Murty [19]. As notações utilizadas neste trabalho são notações padrões e seguem, em geral, as notações adotadas em [19].

## Capítulo 2

# Curvatura Combinatória

Neste capítulo, definimos dois tipos de curvaturas em grafos planares. Estas curvaturas, chamadas de curvaturas combinatórias, medem o quão trabalhoso é revestir o plano utilizando as faces de um grafo planar. Abordamos as definições de curvatura combinatória de um vértice, dada por Higuchi [20], e a curvatura combinatória de uma face, dada por Gromov [21]. O objetivo deste capítulo é justificar como os grafos dos capítulos seguintes foram concebidos, fornecendo uma ideia plena da estrutura discreta intrínseca aos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6).

O Teorema Egregium de Gauss [22], publicado em 1827, afirma que a *curvatura Gaussiana* de uma superfície só depende da geometria intrínseca da superfície, ou seja, a curvatura Gaussiana de uma superfície é um invariante por isometria <sup>1</sup>.

As curvaturas Gaussianas de um plano e de um cilindro são nulas, portanto o plano e o cilindro são superfícies isométricas. A esfera de raio  $R > 0$  possui curvatura Gaussiana igual a  $\frac{1}{R^2}$ , isto justifica a não existência de isometria entre o plano e a esfera.

De acordo com Lima [23], a *Topologia Combinatória* é o ramo da matemática onde são estudados tipos “especiais” de espaços topológicos, os poliedros. Lima define um poliedro como uma reunião finita de vértices, segmentos de retas, triângulos, tetraedros, enfim, objetos genericamente denominados de *simplexos*, os quais se acham regularmente dispostos, como num poliedro comum do espaço euclidiano. Afirma ainda que a noção básica na topologia dos poliedros é o conceito de incidência (investigar, por exemplo, as incidências de uma aresta ou de uma face em um vértice).

Alexandrov [24] mostrou que toda superfície poligonal convexa obtida pela colagem de polígonos é isométrica à superfície de um poliedro. Isto nos diz que todo grafo planar 3-conexo  $G$  é isométrico à superfície de algum poliedro  $P$ . Convém observar que as arestas do poliedro  $P$  podem ser dobradas até gerarem as arestas do

---

<sup>1</sup>Isometrias são aplicações de uma superfície em outra que preservam localmente comprimentos de arcos, distâncias e áreas de regiões.



grafo  $G$ , preservando o mesmo comprimento. Entretanto devemos enfatizar que as arestas do poliedro  $P$  podem não corresponder às arestas do grafo  $G$ . Esta isometria entre grafos planares 3-conexos e poliedros nos permite tratar os grafos fulleróides  $(3, 4, 5, 6)$  como objetos geométricos e, conseqüentemente, estudar a sua “estrutura discreta” através de sua curvatura.

O Teorema 2.1 assegura que todo grafo planar possui uma imersão na esfera. Mais uma vez vale ressaltar que no contexto de nosso trabalho, na teoria de grafos, permitimos dobraduras das arestas.

**Teorema 2.1 (Bondy e Murty [19], Teorema 9.2)** *Um grafo possui uma imersão no plano se, e somente se, ele é imersível na esfera.*

A seguir discutimos a ideia de curvatura combinatória de vértices e de faces.

## 2.1 A Ideia de Curvatura Combinatória

Considere um hexágono regular de lado  $L$ , como na Figura 2.1. É possível decomporlo em 6 triângulos equiláteros. Note que o ângulo central desta face hexagonal mede  $2\pi$  radianos. Isto assegura que faces hexagonais são planas e, conseqüentemente, possuem curvatura nula. Observe que no centro da face hexagonal construímos um vértice de grau 6. Naturalmente podemos interpretar que os vértices de grau 6 delimitados por faces triangulares também têm curvatura nula, pois foram obtidos a partir de faces hexagonais.

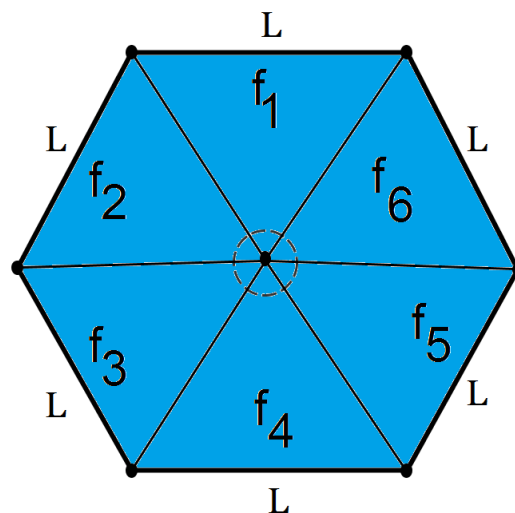


Figura 2.1: Face (ou vértice) de grau 6: curvatura nula.

Admita agora que retiramos uma das 6 faces triangulares que decompõem a face hexagonal da Figura 2.1, e obtemos a Figura 2.2.

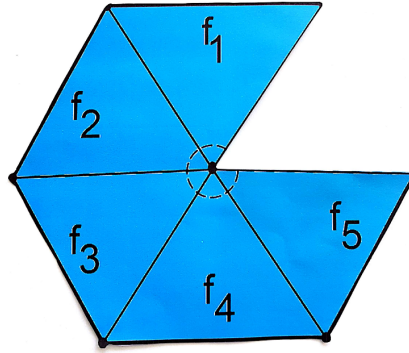


Figura 2.2: Face hexagonal deletada do triângulo  $f_6$ .

Unindo umas das arestas da face  $f_1$  com umas das arestas de  $f_5$ , obtemos uma face pentagonal, como mostra a Figura 2.3. O ângulo central desta face pentagonal mede  $(2\pi - \frac{\pi}{3})$  radianos. Isto garante que as faces pentagonais não são planas e diremos que a sua curvatura é positiva.

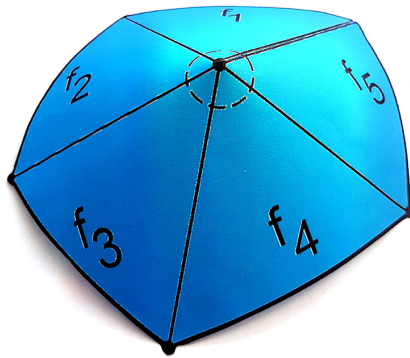


Figura 2.3: Face (ou vértice) de grau 5: curvatura positiva.

Repetindo este processo de remoção dos triângulos que decompõem a face hexagonal e unindo as arestas das faces mais próximas, geramos faces quadrangulares e triangulares. Observe que as faces quadrangulares e as faces triangulares têm ambas curvaturas positivas, pois o ângulo central em cada uma dessas faces é menor que  $2\pi$  radianos. Por outro lado, se adicionamos triângulos na face hexagonal ao invés de removermos, obteremos faces de curvatura negativa, pois o ângulo central destas novas faces serão maiores que  $2\pi$  radianos. A Figura 2.4 exhibe faces triangulares, quadrangulares, pentagonais e heptagonais todas geradas por este processo a partir de uma face hexagonal. Observe que a curvatura de cada uma dessas faces induz naturalmente a curvatura dos correspondentes vértices nos grafos duais.

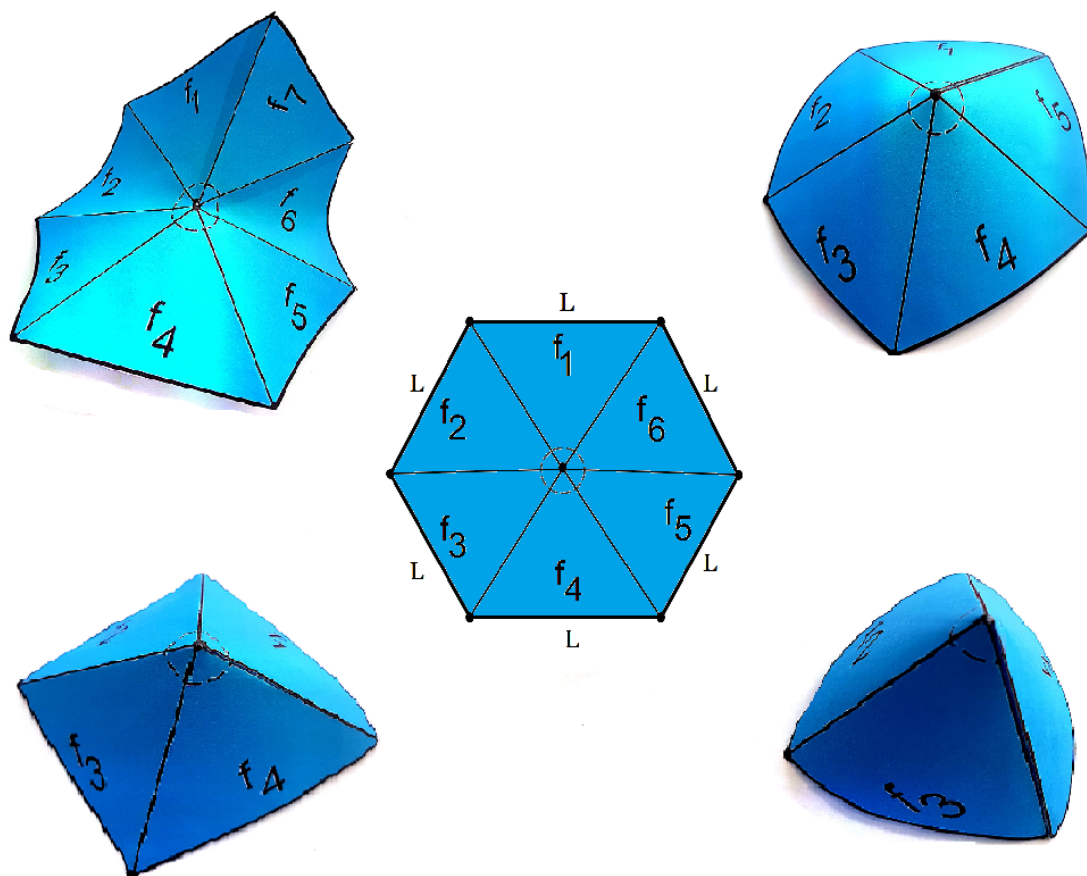


Figura 2.4: Faces geradas a partir de um hexágono regular.

A seguir introduzimos o conceito de *Curvatura Combinatória*. Este parâmetro descreve, essencialmente, o comportamento da vizinhança de cada ponto da superfície, mais especificamente observa o comportamento das faces que incidem em cada vértice do grafo.

## 2.2 Curvatura Combinatória de Vértices

Segundo Higuchi [20], a *Curvatura Combinatória* mede o quão trabalhoso é ladrilhar o plano utilizando as faces de um grafo planar. Higuchi afirma que a curvatura combinatória de um grafo corresponde a curvatura seccional de uma superfície<sup>2</sup>.

A definição a seguir introduz o conceito de curvatura de um vértice de um grafo

---

<sup>2</sup>De fato Higuchi admite que grafos infinitos e planares correspondem à *variedades* de dimensão 2, não-compactas e simplesmente conexas. Viana [25] caracteriza as variedades como objetos que podem ser descritos localmente por coordenadas, isto é, objetos que podem ser localmente mapeados, sendo portanto localmente planos. A dimensão de uma variedade é o número de coordenadas necessárias para descrevê-la. Por exemplo, uma variedade de dimensão 1 é uma curva e uma variedade de dimensão 2 é uma superfície. As definições formais de variedades, compacidade e conexidade não serão dadas aqui, pois não são objetivo central deste trabalho.

planar.

**Definição 2.2 (Higuchi [20])** *Sejam  $G = (V, E)$  um grafo planar,  $d(u)$  o grau do vértice  $u \in V$ ,  $F$  o conjunto das faces de  $G$  e  $d(f)$  o grau da face  $f \in F$ . A Curvatura Combinatória é uma função  $\phi_G : V \rightarrow \mathbb{R}$  definida para cada vértice do grafo  $G$  e dada por:*

$$\phi_G(u) = 1 - \frac{d(u)}{2} + \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{1}{d(f_i)},$$

onde  $f_1, f_2, \dots, f_{d(u)}$  são as faces em torno do vértice  $u$ .

A definição de curvatura combinatória de Higuchi é dada para cada vértice de um grafo planar. A soma das curvaturas combinatórias dos vértices de um grafo finito e planar será chamada de *curvatura total* do grafo. A Figura 2.5 exhibe o exemplo do cálculo das curvaturas dos vértices de um grafo planar.

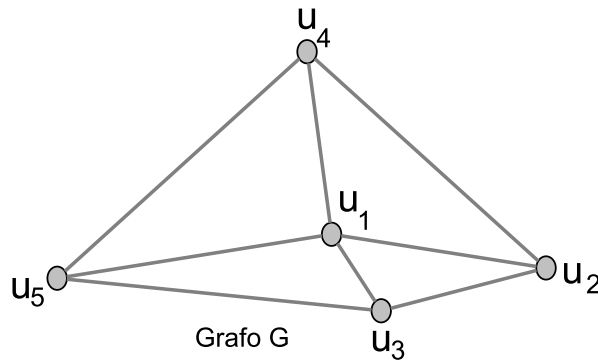


Figura 2.5: A curvatura combinatória do vértice  $u_1$  é dada por  $\phi_G(u_1) = 1 - \frac{4}{2} + 4 \cdot \frac{1}{3} = \frac{1}{3}$ , enquanto os demais vértices têm curvatura igual a  $\phi_G(u_i) = 1 - \frac{3}{2} + \frac{2}{3} + \frac{1}{4} = \frac{5}{12}$ , para todo  $2 \leq i \leq 5$ .

**Teorema 2.3 (Higuchi [20])** *Se  $G = (V, E)$  é um grafo conexo planar finito e toda face de  $G$  é limitada por um ciclo finito, então a curvatura total de  $G$  é constante e igual a  $\phi(G) = 2$ .*

*Demonstração.* Sejam  $G = (V, E)$  um grafo conexo planar finito e  $F$  o conjunto das faces de  $G$ . Suponha que cada face  $f \in F$  é limitada por um ciclo finito. Pelas definições de curvatura 2.2 e curvatura total, temos que:

$$\begin{aligned}\phi(G) &= \sum_{u \in V} \phi_G(u) \\ &= \sum_{u \in V} 1 - \sum_{u \in V} \frac{d(u)}{2} + \sum_{u \in V} \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{1}{d(f_i)}.\end{aligned}$$

Observe que  $\sum_{u \in V} 1 = |V|$  e, pelo Teorema do Aperto de Mãos,  $\sum_{u \in V} \frac{d(u)}{2} = |E|$ .

Além disso, repare que para cada face  $f$ , de tamanho  $d(f)$ , o termo  $\frac{1}{d(f)}$  aparecerá  $d(f)$  vezes após o cálculo do duplo somatório  $\sum_{u \in V} \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{1}{d(f_i)}$ . Rearrmando os termos deste somatório finito, temos que  $\sum_{u \in V} \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{1}{d(f_i)} = \sum_{f \in F} d(f) \cdot \frac{1}{d(f)} = |F|$ .

Como por hipótese  $G$  é um grafo conexo, concluímos que  $\phi(G) = |V| + |F| - |E| = 2$ .

□

O grafo  $G$  da Figura 2.5 tem curvatura total igual a  $\phi(G) = \frac{1}{3} + 4 \cdot \frac{5}{12} = 2$ .

Neste trabalho, estudamos parâmetros sobre grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6) que são grafos 3-conexos finitos planares cúbicos com faces de tamanho no máximo igual a 6. O resultado a seguir, obtido por nós, caracteriza a curvatura combinatória para os vértices de triangulações finitas planares conexas com  $\Delta \leq 6$ , que são os grafos duais dos fulleróides-(3, 4, 5, 6).

**Teorema 2.4 (Curvatura de Triangulações)** *Sejam  $G = (V, E)$  um grafo finito cúbico planar conexo cujas faces têm tamanho no máximo 6 e  $G^* = (V^*, E^*)$  o grafo dual de  $G$ . A função curvatura combinatória  $\phi_{G^*} : V^* \rightarrow \mathbb{R}$  satisfaz:*

$$\phi_{G^*}(v) = \frac{6 - d(v)}{6}, \quad \forall v \in V^*.$$

*Demonstração.* Suponha que  $G = (V, E)$  é um grafo finito cúbico planar conexo cujas faces têm tamanho no máximo igual a 6. O grafo  $G^* = (V^*, E^*)$  é o grafo dual de  $G$  e  $F^*$  é o conjunto das faces de  $G^*$ . Sejam  $v \in V^*$ ,  $d(v)$  o grau do vértice  $v$  e  $F_i \in F^*$  a  $i$ -ésima face em torno do vértice  $v$ . Como  $G^*$  é uma triangulação,  $d(F_i) = 3$ ,  $\forall i \in \{1, 2, \dots, d(v)\}$ . Aplicando a função curvatura combinatória para o

vértice  $v$ , temos:

$$\begin{aligned}
\phi_{G^*}(v) &= 1 - \frac{d(v)}{2} + \sum_{i=1}^{d(v)} \frac{1}{d(F_i)} \\
&= 1 - \frac{d(v)}{2} + \sum_{i=1}^{d(v)} \frac{1}{3} \\
&= 1 - \frac{d(v)}{2} + \frac{d(v)}{3} \\
&= \frac{6 - d(v)}{6}.
\end{aligned}$$

□

Pelo Teorema 2.4, em toda triangulação finita e planar com  $\Delta \leq 6$  os vértices de grau 6 têm curvatura nula, os vértices de grau 5 têm curvatura igual a  $\frac{1}{6}$ , os vértices de grau 4 têm curvatura igual a  $\frac{2}{6}$  e os de grau 3 têm curvatura igual a  $\frac{3}{6}$ . Conseqüentemente, controlamos o comportamento das curvaturas dos vértices dos grafos duais aos fulleróides-(3, 4, 5, 6).

Introduzimos, na próxima seção, o conceito de curvatura combinatória de uma face. Quando estamos restritos aos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6) a regularidade dos graus de seus vértices requer o uso de um conceito de curvatura combinatória que observa diretamente o comportamento das faces do grafo a partir dos vértices que compõem a fronteira de cada face.

## 2.3 Curvatura Combinatória de Faces

Gromov [21] introduz o conceito de curvatura combinatória para as faces de um grafo planar. A função curvatura combinatória de Gromov é definida a seguir.

**Definição 2.5 (Gromov [21])** *Sejam  $G = (V, E)$  um grafo planar,  $F$  o conjunto das faces de  $G$ ,  $d(f)$  o grau da face  $f \in F$  e  $d(u)$  o grau do vértice  $u \in V$ . A Curvatura Combinatória de Gromov é uma função  $\phi_G^* : F \rightarrow \mathbb{R}$  definida para cada face do grafo  $G$  e dada por:*

$$\boxed{\phi_G^*(f) = 1 - \frac{d(f)}{2} + \sum_{i=1}^{d(f)} \frac{1}{d(u_i)}},$$

onde  $u_1, u_2, \dots, u_{d(f)}$  são os vértices da fronteira da face  $f$ .

Como já dissemos, a definição de curvatura combinatória dada por Gromov é mais conveniente às faces dos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6). A Tabela 2.1 sintetiza os valores das curvaturas de cada face de um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6).

Faces	Triangular	Quadrangular	Pentagonal	Hexagonal
Curvatura (Gromov)	$\frac{3}{6}$	$\frac{2}{6}$	$\frac{1}{6}$	Zero

Tabela 2.1: Curvatura combinatória das faces dos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6).

As definições de curvatura combinatória dadas por Higuchi [20] e Gromov [21] são análogas, isto é, ambas as definições têm uma estrita relação se tomadas uma para um grafo planar e outra para o seu grafo dual. Esta relação é estabelecida pelo Teorema 2.6.

**Teorema 2.6 (Higuchi [20])** *Se  $G = (V, E)$  é um grafo planar,  $F$  é o conjunto das faces de  $G$ ,  $G^* = (V^*, E^*)$  é o dual de  $G$  e  $F^*$  é o conjunto das faces de  $G^*$ , então  $\phi_G(u) = \phi_{G^*}^*(f)$ , sempre que  $f = u^*$ ,  $\forall u \in V$ .*

*Demonstração.* Basta observar que se  $u \in V$  e  $f = u^* \in V^*$ , então  $d(u) = d(f^*)$ . Além disso, os graus das faces que incidem no vértice  $u$  serão iguais aos graus dos vértices que limitam a face  $f$ .  $\square$

A Figura 2.6 ilustra a relação dada entre as duas definições de curvatura combinatória.

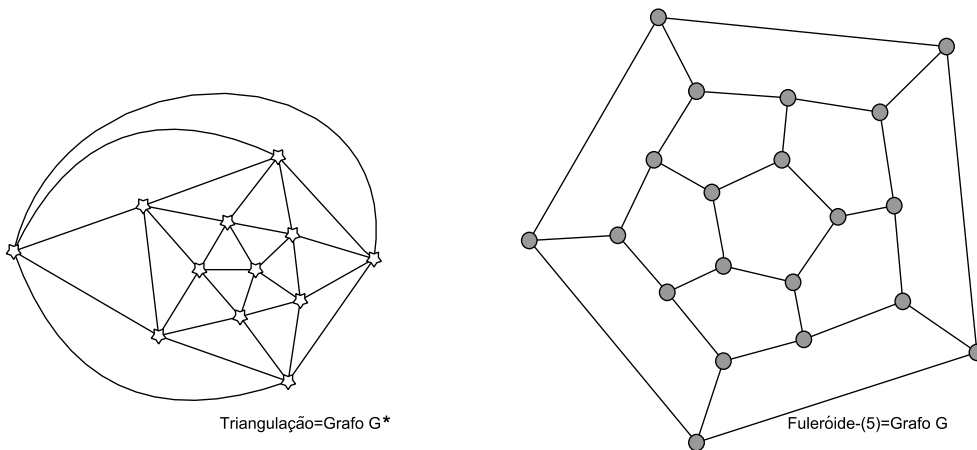


Figura 2.6: Para os vértices da triangulação  $G^*$  (Curvatura de triangulações - Teorema 2.4):  $\phi_{G^*}^*(u) = \frac{6 - d(u)}{6} = \frac{1}{6}$ , para todo  $u \in V(G^*)$ . Para as faces de  $G$  (Definição 2.5 - Gromov):  $\phi_G^*(f) = 1 - \frac{5}{2} + \sum_{i=1}^{d(f)} \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$ , para toda  $f \in F(G)$ . A igualdade obtida foi prevista pelo Teorema 2.6

Para a conveniência do leitor nós oferecemos, na Figura 2.7, um desenho de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) com as curvaturas de suas faces e as curvaturas dos vértices de seu grafo dual. Note que as curvaturas totais do fulleróide-(3, 4, 5, 6) e de seu dual são iguais a 2.

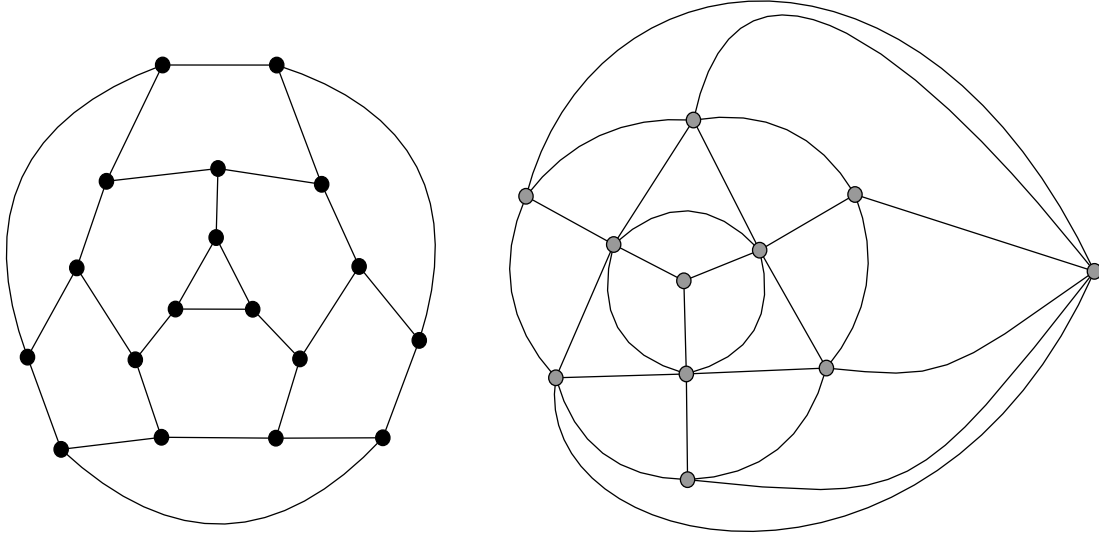


Figura 2.7: À esquerda um fulleróide-(3, 4, 5, 6): a face triangular possui curvatura  $\frac{3}{6}$ , as faces quadrangulares possuem curvatura  $\frac{2}{6}$ , as faces pentagonais possuem curvatura  $\frac{1}{6}$  e as faces hexagonais possuem curvatura nula. À direita, uma triangulação finita, dual ao fulleróide-(3, 4, 5, 6) dado. Nesta triangulação, o vértice de grau 3 tem curvatura  $\frac{3}{6}$ , os vértices de grau 4 têm curvatura  $\frac{2}{6}$ , os vértices de grau 5 têm curvatura  $\frac{1}{6}$  e os vértices de grau 6 têm curvatura nula.

Mencionamos no início do capítulo que, de acordo com Higuchi, a curvatura combinatória mede o quão trabalhoso é revestir o plano utilizando as faces de um grafo planar. Nos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6) as faces hexagonais têm curvatura zero e isto pode ser geometricamente justificado pela capacidade que estas faces têm em ser decompostas em 6 triângulos regulares. Já as demais faces de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) se decompostas em triângulos regulares terão um comportamento parabólico (curvatura combinatória positiva) e quanto maior for o grau da face menor será a sua curvatura. A Figura 2.8 descreve esta questão. Cada ângulo central é dado por  $\theta_i = \pi - \frac{2\pi}{d(f_i)}$ , onde  $f_i$  é o  $i$ -ésimo triângulo regular incidente em  $u$ .

A soma dos ângulos centrais na Figura 2.8 nos fornece o seguinte:

$$\sum_{i=1}^{d(u)} \theta_i = \sum_{i=1}^{d(u)} \pi - \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{2\pi}{d(f_i)}$$

$$\sum_{i=1}^{d(u)} \theta_i = d(u) \cdot \pi - 2\pi \cdot \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{1}{d(f_i)}$$



Finalmente,

$$\sum_{i=1}^{d(u)} \theta_i = 2\pi \left( \frac{d(u)}{2} - \sum_{i=1}^{d(u)} \frac{1}{d(f_i)} \right).$$

Isto nos diz que a soma dos ângulos centrais das faces pentagonais, quadrangulares e triangulares de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) é menor que  $2\pi$ . Conseqüentemente, estas faces não são planas e têm curvatura combinatória positiva. Enfatizamos que na topologia aqui abordada podemos efetuar dobraduras nas arestas dos grafos de modo que seja possível obter imersões no plano (ou na esfera).

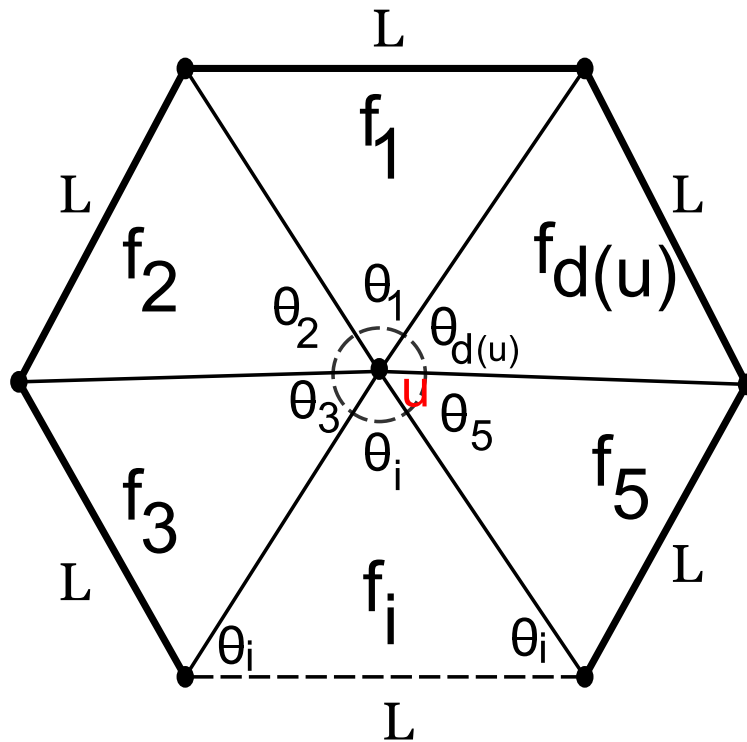


Figura 2.8: Face genérica de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) decomposta em  $d(u)$  triângulos equiláteros, sendo  $d(u)$  o grau do vértice  $u$ .

A Figura 2.9 retirada de [26] exhibe grafos com faces de curvaturas positivas e negativas.

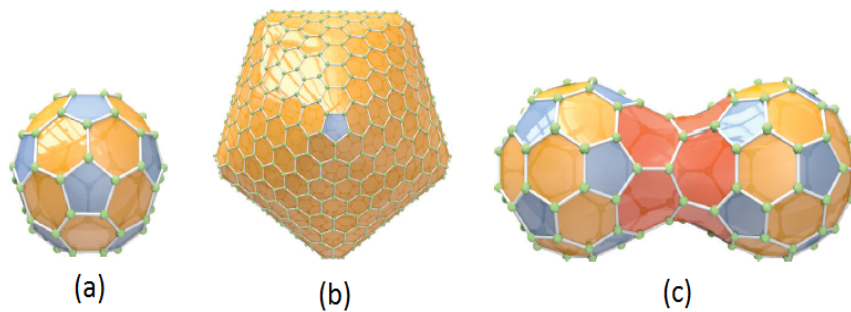


Figura 2.9: Em (a) e (b), grafos fulerenes com simetria icosaedral. Os hexágonos, de amarelo, têm curvatura nula, enquanto os pentágonos, de azul, têm curvatura positiva igual a  $\frac{1}{6}$ . Em (c), temos um grafo contendo faces de tamanho 5, 6 e 7 representados pelas faces azuis, amarelas e vermelhas, respectivamente. As faces vermelhas têm tamanho 7 e curvatura negativa igual a  $-\frac{1}{6}$ .

# Capítulo 3

## Nanodiscos de Fullerene

Neste capítulo, estudamos uma classe muito particular de grafos fulerenes: os nanodiscos de fullerene. O objetivo em estudar os nanodiscos de fullerene foi o de analisar a Conjectura de Andova e Škrekovski que relaciona o diâmetro de grafos fulerenes com o seu número de vértices. Mostramos que a Conjectura de Andova e Škrekovski não é válida para nenhum nanodisco de fullerene com mais de 300 vértices. Para isso, estudamos propriedades sobre os nanodiscos e sobre seus grafos duais. Os resultados deste capítulo foram baseados no artigo “Fullerene Graphs of Small Diameter”, escritos em colaboração com o professor Matěj Stehlík. Este artigo foi submetido e aceito para o MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry - Vol. 77 issue 3 (2017) [13].

O Lema 1.1 afirma que em todo grafo fullerene há exatamente 12 faces pentagonais. Isto nos diz que o menor grafo fullerene é aquele composto exclusivamente por faces pentagonais e contém 20 vértices (dodecaedro ou  $C_{20} \cong I_h$ ). Grunbaum e Motzkin [27] mostraram que é possível obter grafos fulerenes contendo  $n$  vértices para todo  $n$  par maior ou igual a 20. A única exceção é quando  $n = 22$ . Neste caso, deveríamos ter, além das 12 faces pentagonais, exatamente 1 face hexagonal ( $n = \frac{12 \cdot 5 + 1 \cdot 6}{3} = 22$ ). A tentativa de construir uma imersão planar para este grafo fullerene, quando  $n = 22$ , se inicia colocando uma face hexagonal no centro e, em seguida, ir incluindo as demais faces pentagonais. Este procedimento obrigatoriamente irá requerer mais uma face hexagonal, a última, para que o grafo em questão seja cúbico. E assim chegamos a conclusão da não existência deste fullerene com 22 vértices.

Segundo Andova e Škrekovski [1], embora o número de faces pentagonais seja insignificante, comparado ao número de faces hexagonais, a disposição das faces pentagonais irá determinar a forma do grafo fullerene. Esta observação justifica-se quando lembramos que as faces pentagonais têm curvatura positiva ( $\frac{1}{6}$ ), as faces hexagonais têm curvatura zero (são planas), e a curvatura total de qualquer poliedro é 2.

Em 2012, Andova e Škrekovski [1] estudaram o diâmetro de grafos fulerenes com simetria icosaedral, que de acordo com os autores, são grafos fulerenes cujos centros das faces pentagonais dão origem a um icosaedro regular<sup>1</sup>. A disposição de suas faces pentagonais é obtida através de dois parâmetros  $i$  e  $j$  que somados fornecem a distância entre quaisquer duas faces pentagonais mais próximas. Desta maneira, um grafo fullerene com simetria icosaedral, representado por  $G_{i,j}$  com  $0 \leq i \leq j$ , é tal que a distância entre duas faces pentagonais é no mínimo igual a  $i + j$ . Um grafo fullerene com simetria icosaedral completa ou cheia é aquele representado por  $G_{i,j}$  tal que  $0 = i < j$  ou  $0 < i = j$ . A Figura 3.1 retirada de [26] mostra o grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{1,1}$ , também chamado de  $C_{60}$ .

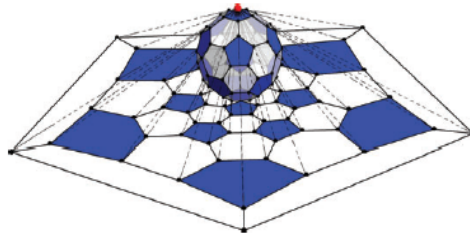


Figura 3.1: Grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{1,1}$  tridimensional e sua correspondente representação planar, via projeção estereográfica.

**Teorema 3.1 (Andova e Škrekovski [1])** *Se  $G_{i,j}$  é um grafo fullerene com simetria icosaedral cheia, então  $\text{diam}(G_{i,j}) = 4i + 6j - 1$ .*

O Teorema 3.1 motivou a conjectura a seguir, sobretudo porque a família de grafos fulerenes com simetria icosaedral cheia, estudada por Andova e Škrekovski [1], assemelha-se à superfície de uma esfera, além de ser a mais regular e simétrica dentre todos os grafos fulerenes.

**Conjectura 3.2 (Andova e Škrekovski [1])** *Se  $G$  é um grafo fullerene com  $n$  vértices, então  $\text{diam}(G) \geq \lfloor \sqrt{5n/3} \rfloor - 1$ .*

A Conjectura 3.2 assemelha-se à famosa Conjectura de Alexandrov [29], da geometria diferencial, que relaciona o diâmetro  $D$  de uma superfície com a sua área  $A$ .

**Conjectura 3.3 (Alexandrov [29])** *Se  $S$  é uma superfície fechada e orientada de área  $A$  e  $D$  é o seu diâmetro, então  $D \geq \sqrt{2A/\pi}$ .*

<sup>1</sup>Definiremos, formalmente no Capítulo 4, o que é um grafo fullerene com simetria icosaedral. Em 1939, Goldberg [28] definiu os sólidos com simetria icosaedral que, posteriormente, motivaram a definição e o estudo dos grafos fulerenes com simetria icosaedral.

A semelhança não para aí: o limite na conjectura de Alexandrov é alcançado por uma superfície de forma discoidal, isto é, pela superfície de um disco duplamente coberto formada pela colagem de dois discos simétricos ao longo de suas fronteiras. Isto sugere que os grafos fulerenes que minimizam o diâmetro, para um determinado número de vértices, devem ser aqueles que mais se assemelham à superfície de um disco e não à superfície de uma esfera. Isto nos levou a estudar a classe de grafos fulerenes chamada, por Graver e Monacino [30], de *nanodiscos de fulerene*. Mostramos que os nanodiscos de fulerene têm diâmetro de no máximo  $\sqrt{4n/3}$ , refutando assim a Conjectura de Andova e Škrekovski, sempre que em um nanodisco tenhamos  $n \geq 300$ .

### 3.1 Nanodiscos de Fulerenes

Semanticamente falando um *nanodisco de fulerene* ou, simplesmente, *nanodisco* é uma superfície composta por 2 tampas (ou capas)<sup>2</sup> planas e idênticas conectadas por uma faixa ao longo de suas fronteiras. Sabemos que nos grafos fulerenes as faces pentagonais são as responsáveis por prover curvatura ao grafo, uma vez que as faces hexagonais são planas, isto é, têm curvatura nula. Consequentemente, um nanodisco de fulerene terá nas duas tampas apenas faces hexagonais e, na faixa que as une, as 12 faces pentagonais dispostas lado à lado.

Pedimos ao leitor que acompanhe a Figura 3.2 durante a leitura deste parágrafo. Um nanodisco é mais facilmente definido a partir de seu grafo dual. Seja  $T$  uma triangulação plana, infinita e 6-regular. Sejam  $N \in V(T)$ , um inteiro  $r \geq 2$  e  $T_r(N)$  o subgrafo de  $T$  induzido por todos os vértices a uma distância no máximo  $r$  de  $N$ . Seja  $C$  a fronteira (ou o ciclo exterior) de  $T_r(N)$ . Observe que  $|C| = 6r$  e, portanto,  $C = (u_1, u_2, \dots, u_{6r})$ . Claramente  $C$  tem seis vértices de grau 3, em  $T_r(N)$ . Na Figura 3.3, os vértices de grau 3, em  $T_3(N)$ , são os vértices  $u_1, u_4, u_7, u_{10}, u_{13}$ , e  $u_{16}$ . De um modo geral, os vértices de grau 3, em  $T_r(N)$ , são os vértices dados por  $u_{1+pr}$ , com  $0 \leq p \leq 5$ . Os demais vértices de  $C$  têm todos grau 4, em  $T_r(N)$ . A Figura 3.2 exibe dois subgrafos  $T_r(N)$  com diferentes tamanhos de fronteira.

Seja  $t$  um número inteiro tal que  $1 \leq t \leq r - 1$ . Tome duas cópias do grafo  $T_r(N)$  definido anteriormente (uma centrada no vértice  $N$  e outra em um vértice  $S$ , diferente de  $N$ ), e suponha que  $u_1, u_2, \dots, u_{6r}$  é a fronteira de  $T_r(N)$  e  $v_1, v_2, \dots, v_{6r}$  é a fronteira  $T_r(S)$ .

O grafo dual de um nanodisco, representado por  $D_{r,t}^*$ , é obtido a partir da união disjunta de  $T_r(N)$  e  $T_r(S)$  pela identificação dos vértices  $u_i$  e  $v_{i+t}$ , para todo  $1 \leq i \leq 6r$  (os índices são tomados módulo  $6r$ ).

---

<sup>2</sup>Neste Capítulo, os termos tampa ou capa servirão para expressar um grafo 2-conexo, subcúbico tal que todas as suas faces exceto a face exterior, são hexagonais.

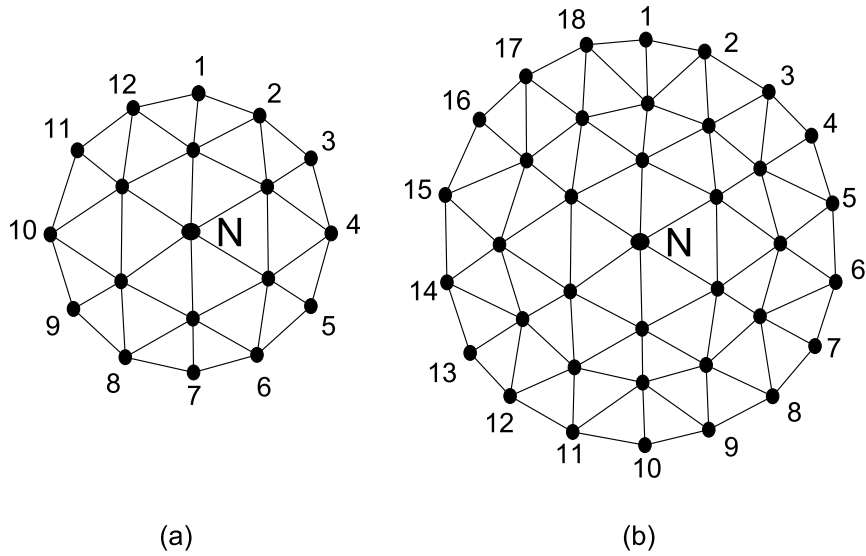


Figura 3.2: Em (a), o subgrafo  $T_2(N)$  cuja fronteira é composta por 12 vértices, e em (b), o subgrafo  $T_3(N)$  cuja fronteira é composta por 18 vértices.

A Figura 3.3 ilustra os dois subgrafos  $T_3(N)$  e  $T_3(S)$  que irão gerar o grafo  $D_{3,1}^*$ .

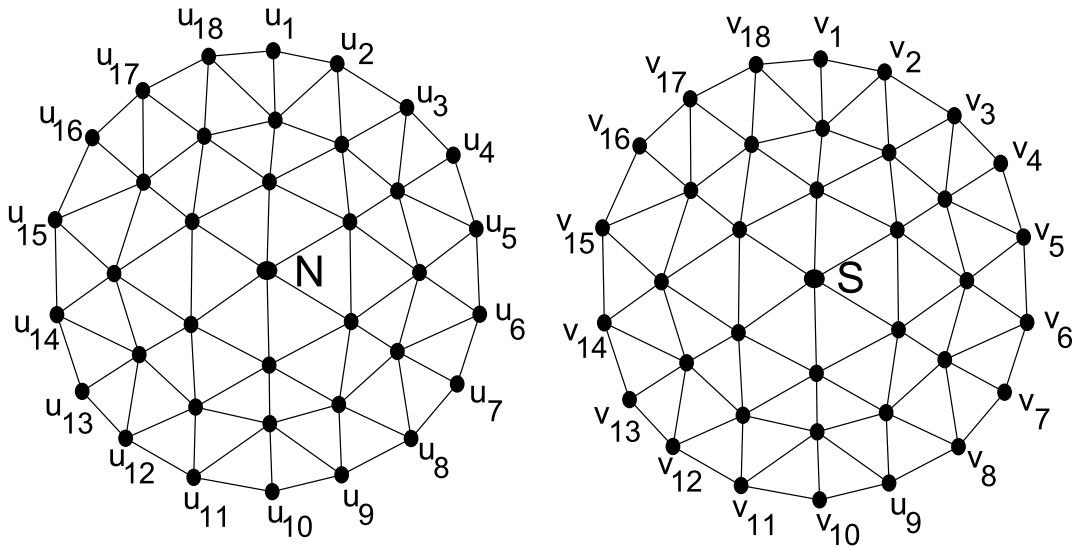


Figura 3.3: À esquerda, o subgrafo  $T_3(N)$  e à direita o subgrafo  $T_3(S)$ . Observe que  $r = 3$  e  $t = 1$ . Neste caso, os subgrafos serão unidos de modo que os vértices  $u_i$  coincidam com os vértices  $v_{i+1}$ . Note, por exemplo, que o vértice  $u_{18}$  deverá ser colado sobre o vértice  $v_1$ , pois  $19 \cong 1(\text{mod}18)$ .

Claramente,  $D_{r,t}^*$  é uma triangulação plana com todos os vértices de grau 5 ou 6 e o seu dual é um *nanodisco de fulerene* denotado por  $D_{r,t}$  (Figura 3.4).

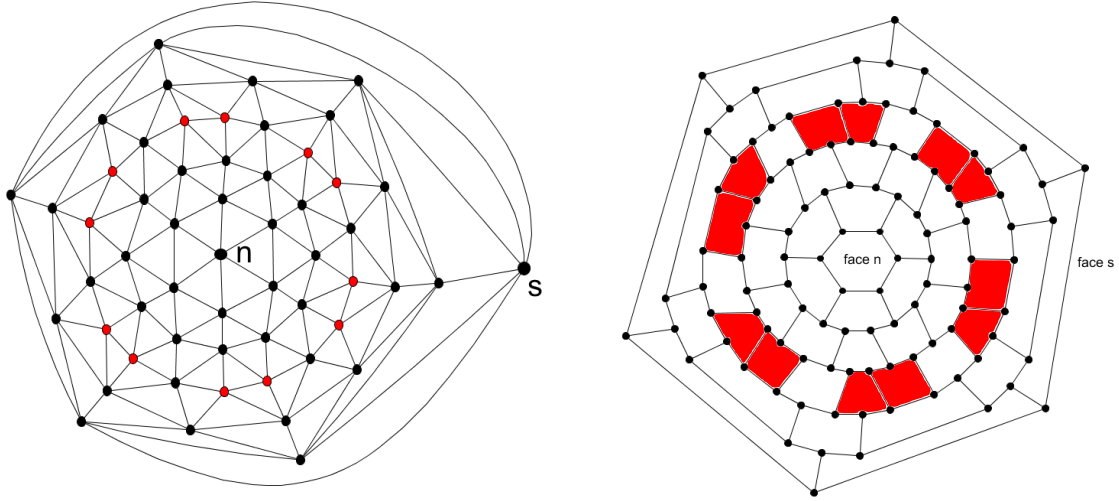


Figura 3.4: À esquerda, a triangulação plana  $D_{3,1}^*$  e à direita o seu correspondente nanodisco de fulerene  $D_{3,1}$ .

Os vértices  $N$  e  $S$  da triangulação  $D_{r,t}^*$  serão chamados, respectivamente, de *Pólo Norte* e *Pólo Sul* do nanodisco. Mantendo a analogia com a cartografia, é possível definir a *latitude*  $\varphi$  de um vértice  $u \in V(D_{r,t}^*)$ .

$$\varphi(u) = \begin{cases} r - \text{dist}(N, u), & \text{se } \text{dist}(N, u) \leq r \\ -r + \text{dist}(S, u), & \text{se } \text{dist}(S, u) \leq r \end{cases}$$

Portanto,  $N$  tem latitude  $r$ ,  $S$  tem latitude  $-r$  e os vértices a uma distância  $r$  de  $N$  e  $S$  têm latitude zero (estão na linha do *Equador*). Em particular os vértices de grau 5 têm todos latitude zero.

A sequência  $\{1, 6, 12, 18, \dots, 6(r-1), 6r, 6(r-1), \dots, 18, 12, 6, 1\}$  fornece a quantidade de faces em cada camada<sup>3</sup> da planificação do nanodisco  $D_{r,t}$ , quando  $r \geq 2$ . Além disso, esta sequência nos diz que um nanodisco  $D_{r,t}$  tem  $(6r^2 + 2)$  faces,  $12r^2$  vértices e  $(2r + 1)$  camadas. As 12 faces pentagonais pertencentes à camada zero de  $D_{r,t}$  dividem a mesma camada com outras  $(6r - 12)$  faces hexagonais. Observe que exigimos  $r \geq 2$ , pois se admitíssemos  $r = 1$ , então teríamos que dispor as 12 faces pentagonais adjacentes à face hexagonal central, obtendo uma contradição. A Tabela 3.1 resume os dados fornecidos neste parágrafo.

Os próximos lemas tratam de propriedades das triangulações planares  $D_{r,t}^*$  e de nanodiscos de fulerenes  $D_{r,t}$ .

**Lema 3.4** *Sejam  $r \geq 2$  e  $1 \leq t \leq r - 1$ . A distância entre os pólos  $N$  e  $S$ , vértices de  $V(D_{r,t}^*)$ , é menor ou igual a  $2r$ .*

*Demonstração.* Basta usar a definição de latitude. □

<sup>3</sup>Cada camada do nanodisco  $D_{r,t}$  correspondente à uma latitude em  $D_{r,t}^*$ .

$r$	# Vértices	# Face	# Arestas	# Camadas
2	48	26	72	5
3	108	56	162	7
4	192	98	288	9
5	300	152	450	11
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$r \geq 2$	$12r^2$	$6r^2 + 2$	$18r^2$	$2r + 1$

Tabela 3.1: Número de vértices, faces, arestas e camadas do nanodisco de fulerene  $D_{r,t}$  em função do parâmetro  $r \geq 2$ .

**Lema 3.5** *Sejam  $r \geq 2$  e  $1 \leq t \leq r - 1$ . O diâmetro do grafo  $D_{r,t}^*$  é menor ou igual a  $2r$ .*

*Demonstração.* Para todo par de vértices  $u, v \in V(D_{r,t}^*)$  existem dois caminhos distintos de comprimento no máximo igual a  $2r$  entre  $N$  e  $S$  um passando por  $u$  e outro por  $v$ . Isto decorre do fato de  $D_{r,t}^*$  ser um disco e de suas faces distribuírem-se em espiral. Então, usando duas vezes a desigualdade triangular, temos que:

$$\text{dist}(N, u) + \text{dist}(u, S) \leq 2r$$

$$\text{dist}(N, v) + \text{dist}(v, S) \leq 2r$$

$$2\text{dist}(u, v) \leq \text{dist}(u, N) + \text{dist}(N, v) + \text{dist}(u, S) + \text{dist}(S, v) \leq 4r$$

$$\text{dist}(u, v) \leq 2r.$$

□

**Lema 3.6** *Para qualquer par de vértices  $u, v \in V(D_{r,t}^*)$  tal que  $\text{dist}(u, v) = 2r$ , existe um caminho geodésico de comprimento igual a  $2r$  entre  $u$  e  $v$  passando por  $N$  e outro caminho geodésico de comprimento igual a  $2r$  passando por  $S$ .*

*Demonstração.* Sejam  $u, v \in V(D_{r,t}^*)$  tais que  $\text{dist}(u, v) = 2r$ .

Suponha que cada caminho entre  $u$  e  $v$  passando por  $N$  tem comprimento maior que  $2r$ . Sabemos que existem um caminho de comprimento no máximo igual a  $2r$  entre  $N$  e  $S$  passando por  $u$  e outro caminho de comprimento no máximo igual a  $2r$  entre  $N$  e  $S$  passando por  $v$ . Isto nos diz que:



$$\text{dist}(N, S) \leq \text{dist}(N, u) + \text{dist}(u, S) \leq 2r$$

$$\text{dist}(N, S) \leq \text{dist}(N, v) + \text{dist}(v, S) \leq 2r$$

$$\text{dist}(u, N) + \text{dist}(N, v) + \text{dist}(u, S) + \text{dist}(S, v) \leq 4r$$

Como supomos que cada caminho entre  $u$  e  $v$  passando por  $N$  tem comprimento maior que  $2r$ , então existe um caminho de comprimento no máximo igual a  $2r$  entre  $u$  e  $v$  passando por  $S$ . Tal caminho deve ter comprimento exatamente igual a  $2r$ , pois  $\text{dist}(u, v) = 2r$ . Este caminho será denotado por  $P_1 = u_0u_1\dots u_{2r}$ , em que  $u = u_0$ ,  $v = u_{2r}$  e  $N = u_j$ , para algum  $j \in \{1, 2, \dots, 2r - 1\}$ .

Além disso, se  $\text{dist}(N, u) = l$  e  $\text{dist}(N, v) = t$  então  $\text{dist}(u, S) = 2r - l$  e  $\text{dist}(v, S) = 2r - t$ .

Assim,

$$2r = \text{dist}(u, v) \leq \text{dist}(u, S) + \text{dist}(S, v) = 2r - l + 2r - t = 4r - (l + t).$$

Logo, concluímos que existe outro caminho de comprimento igual a  $2r$  entre  $u$  e  $v$  passando por  $N$ . Este outro caminho entre  $u$  e  $v$  será denotado por  $P_2 = v_0v_1\dots v_{2r}$ , em que  $u = v_0$ ,  $v = v_{2r}$  e  $S = v_{j'}$ , para algum  $j' \in \{1, 2, \dots, 2r - 1\}$ .  $\square$

A Figura 3.5 ilustra o Lema 3.6, para  $D_{3,1}^*$ .

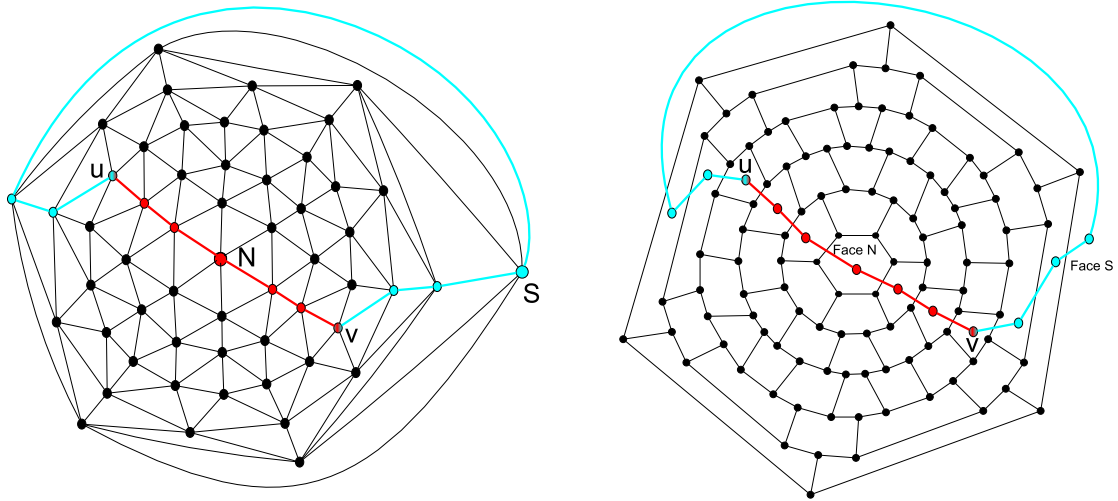


Figura 3.5: À esquerda, de vermelho e azul, os caminhos de comprimento  $2 \cdot 3 = 6$  entre os vértices  $u$  e  $v$  passando por  $N$  e por  $S$  em  $D_{3,1}^*$ , e o reflexo do Lema 3.6 no correspondente nanodisco de fullerene  $D_{3,1}$ .

**Lema 3.7** *Sejam  $r \geq 2$  e  $1 \leq t \leq r - 1$ . Se  $u$  e  $v$  são vértices adjacentes de  $D_{r,t}^*$  e pertencem a mesma latitude, então existe uma face  $uvw_1 \in F(D_{r,t}^*)$  tal que  $\text{dist}(w_1, N) < \text{dist}(u, N)$  e outra face  $uvw_2 \in F(D_{r,t}^*)$  tal que  $\text{dist}(w_2, S) < \text{dist}(u, S)$ .*

*Demonstração.* Como  $u$  e  $v$  estão na mesma latitude,  $dist(u, S) = dist(v, S)$ . Além disso,  $uv \in E(D_{r,t}^*)$ , logo existem exatamente 2 faces triangulares  $uvw_1$  e  $uvw_2$  que contêm  $u$  e  $v$ .

Se  $dist(w_i, N) = dist(u, N)$ ,  $i \in \{1, 2\}$ , então  $u$ ,  $v$  e  $w_i$  estariam na mesma latitude (pois fixado  $r > 0$  a definição de latitude depende apenas da distância do vértice aos pólos) e  $uvw_i$  não seria uma face triangular (pois  $v$  e  $w_1$  não seriam vértices adjacentes).

Além disso, como  $D_{r,t}^*$  é uma triangulação plana, se  $dist(w_2, N) > dist(u, N)$  então  $dist(w_2, S) < dist(u, S)$  e se  $dist(w_1, S) > dist(u, S)$  então  $dist(w_1, N) < dist(u, N)$ .

Concluimos que existem duas faces  $uvw_1 \in F(D_{r,t}^*)$  e  $uvw_2 \in F(D_{r,t}^*)$  tais que  $w_1$  está mais próximo de  $N$  do que  $u$  de  $N$ , e  $w_2$  está mais próximo de  $S$  do que  $v$  de  $S$ .  $\square$

A Figura 3.6 contribui para compreensão do Lema 3.7.

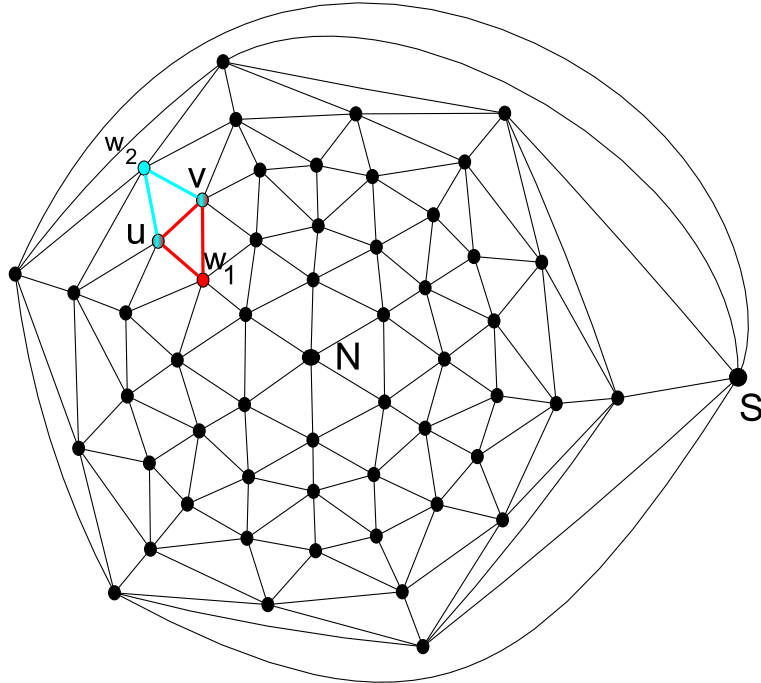


Figura 3.6:  $D_{3,1}^*$ : o vértice  $w_1$  da face  $uvw_1$  satisfaz  $2 = dist(w_1, N) < dist(u, N) = 3$ , enquanto o vértice  $w_2$  da face  $uvw_2$  satisfaz  $2 = dist(w_2, S) < dist(u, S) = 3$ .

**Lema 3.8** *Sejam  $r \geq 2$  e  $1 \leq t \leq r - 1$ . Se  $A, B \in V(D_{r,t})$ , então  $dist(A, B) \leq 4r$ .*

*Demonstração.*

Sugerimos que o leitor acompanhe a Figura 3.7, pois ela auxilia a compreensão da prova.

Sejam  $A, B \in V(D_{r,t})$  tais que  $A$  pertence à face  $u \in V(D_{r,t}^*)$  e  $B$  pertence à face  $v \in V(D_{r,t}^*)$ .

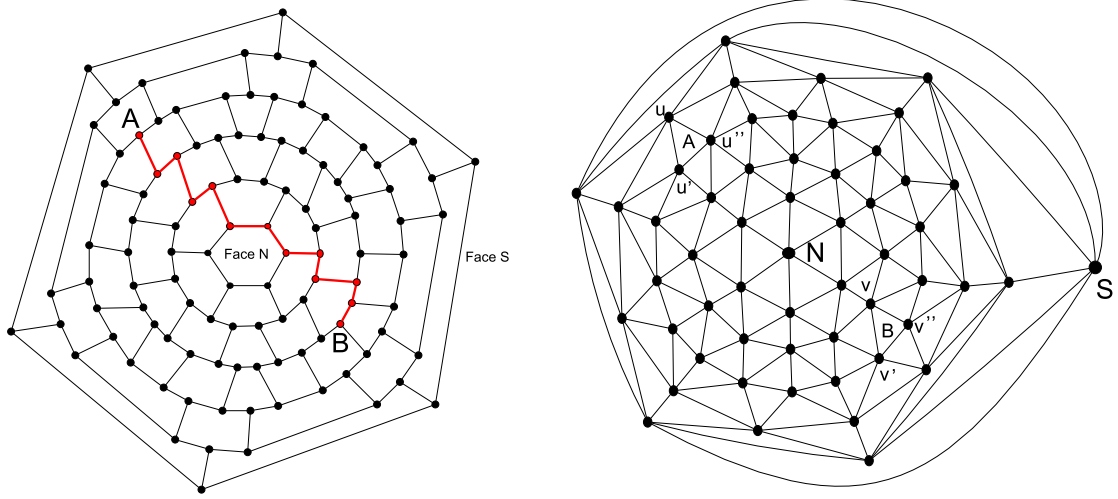


Figura 3.7: À esquerda, os vértices  $A$  e  $B$  do nanodisco de fullerene  $D_{3,1}$  realizam distância  $4 \cdot 3 = 12$ . À direita, uma possível configuração para os vértices  $u, u', u'', v, v'$  e  $v''$ , em  $D_{3,1}^*$ .

Se  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) \leq 2r - 2$  então  $dist_{D_{r,t}}(A, B) \leq \frac{4 \cdot (2r-2) + 6}{2} = 4r - 1$ .

Se  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) = 2r - 1$ , então sejam  $u, u', u'' \in V(D_{r,t}^*)$  vértices da face triangular  $A \in V(D_{r,t})$  e sejam  $v, v', v'' \in V(D_{r,t}^*)$  vértices da face triangular  $B \in V(D_{r,t})$ . Pelo Lema 3.7, temos que é impossível  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) = dist_{D_{r,t}^*}(u, v') = dist_{D_{r,t}^*}(u, v'')$  e  $v, v', v''$  pertencerem a mesma face. Então temos duas possibilidades para tais distâncias:  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) = dist_{D_{r,t}^*}(u, v') = 2r - 1$  e  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v'') = 2r$  ou  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) = 2r - 1$  e  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v') = dist_{D_{r,t}^*}(u, v'') = 2r$ .

Quando  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) = dist_{D_{r,t}^*}(u, v') = 2r - 1$  e  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v'') = 2r$  existe, pelo Lema 3.7, um vértice  $w \in V(D_{r,t}^*)$  pertencente aos caminhos geodésicos entre  $u$  e  $v$  e entre  $u$  e  $v'$  tal que  $dist_{D_{r,t}^*}(u, w) = 2r - 2$ . Então,  $dist_{D_{r,t}}(a, b) \leq \frac{4 \cdot (2r-2) + 6}{2} + 1 = 4r - 1 + 1 = 4r$ .

Quando  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v) = 2r - 1$  e  $dist_{D_{r,t}^*}(u, v') = dist_{D_{r,t}^*}(u, v'') = 2r$  existem, pelo Lema 3.6, caminhos geodésicos de comprimentos  $2r$  entre  $u$  e  $v'$  passando por  $N$  (ou por  $S$ ) e outro caminho geodésico de comprimento  $2r$  entre  $u$  e  $v''$  passando por  $N$  (ou por  $S$ ). Pelo Lema 3.7, existe um vértice  $w \in V(D_{r,t}^*)$  pertencente aos tais caminhos geodésicos.

Desta maneira, se  $dist_{D_{r,t}^*}(u, w) = 2r - 1$  então  $dist_{D_{r,t}^*}(u', w) = 2r - 2$  ou  $dist_{D_{r,t}^*}(u'', w) = 2r - 2$  ou  $dist_{D_{r,t}^*}(u', w) = dist_{D_{r,t}^*}(u'', w) > 2r - 2$ .

Quando  $dist_{D_{r,t}^*}(u', w) = 2r - 2$ , então  $dist_{D_{r,t}^*}(u', v') = dist_{D_{r,t}^*}(u', v'') = 2r - 1$  e  $dist_{D_{r,t}}(a, b) \leq \frac{4 \cdot (2r-2) + 6}{2} + 1 = 4r - 1 + 1 = 4r$  (análogo se  $dist_{D_{r,t}^*}(u'', w) = 2r - 2$ ).

Note que se  $dist_{D_{r,t}^*}(u, w) = 2r - 1$  e  $dist_{D_{r,t}^*}(u', w) = dist_{D_{r,t}^*}(u'', w) > 2r - 2$ , então  $dist_{D_{r,t}^*}(u', v) = 2r - 2$  ou  $dist_{D_{r,t}^*}(u'', v) = 2r - 2$  e, então  $dist_{D_{r,t}}(A, B) \leq \frac{4 \cdot (2r-2) + 6}{2} + 1 = 4r - 1 + 1 = 4r$ .

□

O Corolário 3.9 decorre imediatamente do Lema 3.8.

**Corolário 3.9** *O diâmetro do nanodisco de fulerene  $D_{r,t}$ , com  $r \geq 2$  e  $1 \leq t \leq r-1$ , é no máximo igual a  $4r$ .*

Estamos prontos para o estudo dos Teoremas 3.10 e 3.11 que tratam do diâmetro de nanodiscos de fulerenes e da Conjectura de Andova e Škrekovski, respectivamente.

**Teorema 3.10 (Teorema do Nanodisco)** *Sejam  $r \geq 2$  e  $1 \leq t \leq r-1$ . O diâmetro do nanodisco de fulerene  $D_{r,t}$  é no máximo igual a  $\sqrt{\frac{4n}{3}}$ .*

*Demonstração.* O grafo  $D_{r,t}$  tem  $n = 12r^2$  vértices. Então usando o Corolário 3.9 temos  $\text{diam}(D_{r,t}) \leq 4 \cdot \sqrt{\frac{n}{12}} = \sqrt{\frac{4n}{3}}$ .  $\square$

A Tabela 3.2 compara as cotas dadas pela Conjectura de Andova e Škrekovski e pelo Teorema do Nanodisco 3.10 para o diâmetro dos nanodiscos de fulerene com no máximo 1200 vértices.

$r$	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$n = 12r^2$	48	108	192	300	432	588	768	972	1200
Conjectura 3.2 $\left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$	7	12	16	21	25	30	34	39	43
Teorema 3.10 $\sqrt{\frac{4n}{3}}$	8	12	16	20	24	28	32	36	40

Tabela 3.2: Cotas para o diâmetro de nanodiscos dadas pela Conjectura de Andova e Škrekovski (linha 2 - cotas inferiores) e dadas pelo Teorema do Nanodisco (linha 3 - cotas superiores). Quando  $n \geq 300$  a Conjectura de Andova e Škrekovski não vale para nenhum nanodisco de fulerene.

De acordo com a Conjectura de Andova e Škrekovski para todo grafo fulerene  $G$  com  $n$  vértices vale  $\text{diam}(G) \geq \left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ . Quando  $r = 4$ , temos que  $n = 12 \cdot 4^2 = 192$ . Substituindo  $n = 192$  na Conjectura de Andova e Škrekovski, temos que o diâmetro de qualquer fulerene contendo 192 vértices deve ser no mínimo igual a  $\left\lfloor \sqrt{\frac{5 \cdot 192}{3}} \right\rfloor - 1 = 16$  o que a torna compatível com o valor do diâmetro do nanodisco de fulerene  $D_{4,t}$ , dado por  $\text{diam}(D_{4,t}) \leq \sqrt{\frac{4 \cdot 192}{3}} = 16$  (Teorema 3.10).

Por outro lado, quando  $r = 5$ , temos que  $n = 12 \cdot 5^2 = 300$  e pela Conjectura de Andova e Škrekovski o diâmetro de qualquer fulerene contendo 300 vértices deve ser no mínimo igual a  $\left\lfloor \sqrt{\frac{5 \cdot 300}{3}} \right\rfloor - 1 = 21$ . Entretanto o diâmetro do nanodisco de fulerene  $D_{5,t}$  é no máximo igual a  $\text{diam}(D_{5,t}) \leq \sqrt{\frac{4 \cdot 300}{3}} = 20$ , não satisfazendo a Conjectura de Andova e Škrekovski.

**Teorema 3.11** *A Conjectura de Andova e Škrekovski 3.2 não é válida para os nanodiscos de fulerene de raio  $r \geq 5$ .*

*Demonstração.* Observe que a taxa de crescimento da função  $f(n) = \sqrt{\frac{5}{3}}$  é maior que a taxa de crescimento da função  $g(n) = \sqrt{\frac{4}{3}}$ . Além disso, para  $n_0 = 12 \cdot 5^2 = 300$  temos,  $f(300) > 22$ , enquanto  $g(300) = 20$ . Então  $f(n) > g(n)$ , sempre que  $n \geq n_0 = 300$  ou, simplesmente,  $r \geq 5$ . □

A Figura 3.8 mostra o exemplo do menor nanodisco de fulerene, contendo 300 vértices, que contraria a Conjectura de Andova e Škrekovski. O software CaGe [2], implementado em C ou em Java, é por definição um ambiente virtual desenvolvido com a finalidade de estudar algumas classes especiais de gráficos planos.

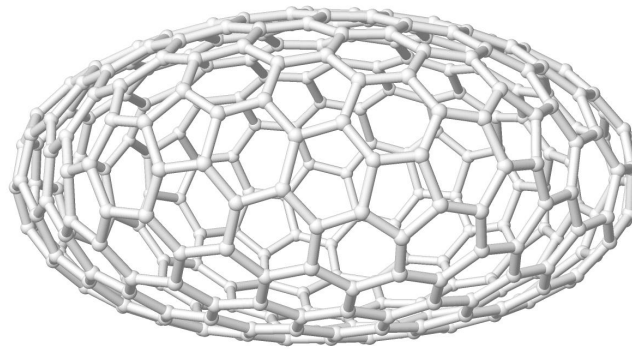


Figura 3.8: Visão tridimensional do nanodisco de fulerene  $D_{5,2}$  com 300 vértices construído em CaGe. [2]

# Capítulo 4

## Fulerenes Icosaedrais

A Conjectura de Andova e Škrekovski [1] sugere uma cota inferior para o diâmetro de grafos fulerenes. Vimos no Capítulo 3 que esta conjectura não é válida para nenhum nanodisco de fulerene com mais de 300 vértices.

Neste capítulo, mostramos que existem infinitas classes de grafos fulerenes que satisfazem a Conjectura de Andova e Škrekovski, isto é, mostramos que os grafos fulerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,j}$  com  $0 < i$  e  $j \geq \frac{11i}{2}$  satisfazem a referida conjectura. Ressaltamos que desconhecemos a validade da Conjectura de Andova e Škrekovski para os grafos fullerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,j}$  com  $0 < i$ ,  $0 < j < \frac{11i}{2}$  e  $i \neq j$ .

Os resultados deste capítulo foram submetidos e apresentados no LAWCG - VI Latin American Workshop on Cliques in Graphs 2014 [14].

### 4.1 Grafos Fulerenes com Simetria Icosaedral

Em 1939, Goldberg [28] propôs a planificação de icosaedros regulares em malhas hexagonais planas. Estas planificações induziram a definição de sólidos chamados de *sólidos com simetria icosaedral*. Por sua vez, os sólidos com simetria icosaedral motivaram a definição dos *grafos fulerenes com simetria icosaedral*.

A planificação de icosaedros regulares realizada por Goldberg, na malha hexagonal, depende de dois parâmetros inteiros não-negativos e não simultaneamente nulos  $i$  e  $j$ . De acordo com Andova e Škrekovski [1], estes parâmetros são as componentes bidimensionais do vetor de Goldberg  $\vec{G} = (i, j)$  que irá gerar todas as faces do icosaedro regular planificado na malha hexagonal e para evitar o efeito espelho iremos sempre considerar  $0 < i \leq j$ .

Como observado por Andova e Škrekovski [1], o mapeamento do plano por hexágonos regulares resume-se em adicionar hexágonos em três direções distintas chamadas de direções  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$ . Por todo este capítulo os vetores  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$  serão vetores unitários obedecendo às direções como na Figura 4.1.

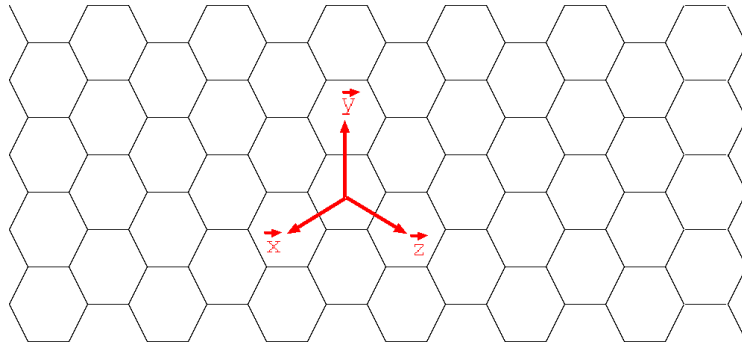


Figura 4.1: Mapeamento hexagonal do plano a partir de vetores unitários  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$ .

A planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  será obtida face à face, isto é, construímos cada uma das vinte faces triangulares do icosaedro regular pretendido, utilizando o vetor  $\vec{G} = (i, j)$  na malha hexagonal.

A primeira face da planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  será denotada de face  $ABC$ . Sua construção inicia-se escolhendo-se arbitrariamente um hexágono da malha. No centro deste hexágono marcamos o vértice  $A$  e as origens dos vetores unitários  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$ . Desta maneira, o vértice  $A$  terá coordenadas  $(0, 0, 0)$ . Os demais vértices da face  $ABC$  terão coordenadas  $B = (i, -j, 0)$  e  $C = (i - j, -j, i)$ .

Semanticamente obtemos o vértice  $B$  a partir do vértice  $A$  e das coordenadas do vetor  $\vec{G} = (i, j)$ . O vértice  $B$  é construído percorrendo  $i$  unidades na direção  $\vec{x}$  a partir de  $A$  e, em seguida,  $j$  unidades na direção  $-\vec{y}$ . Observe que as direções percorridas formam entre si 120 graus. Para o vértice  $C$ , percorremos  $i$  unidades na direção  $\vec{z}$  a partir de  $B$  e, em seguida,  $j$  unidades na direção  $-\vec{x}$ , sempre obedecendo 120 graus entre as direções percorridas. É possível retornar ao vértice  $A$  percorrendo  $i$  unidades na direção  $\vec{y}$  a partir de  $C$  e, em seguida,  $j$  unidades na direção  $-\vec{z}$ . Este procedimento define um triângulo do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$ , e é exibido na Figura 4.2, para  $\vec{G} = (2, 3)$ .

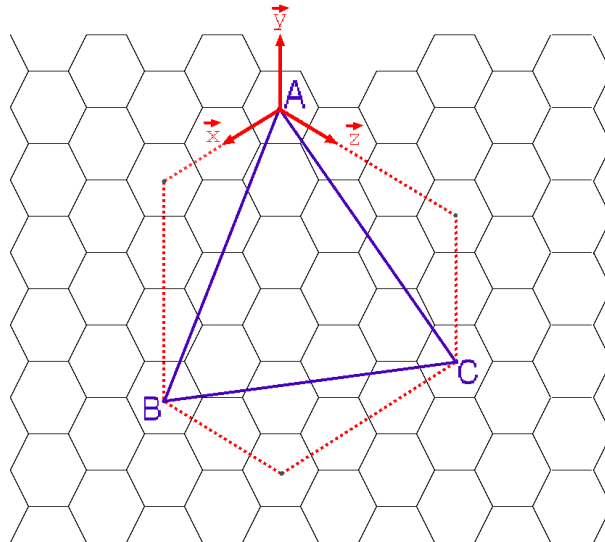


Figura 4.2: Face  $ABC$  da planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (2, 3)$ . O vértice  $A = 0\vec{x} + 0\vec{y} + 0\vec{z}$ , ou simplesmente,  $A = (0, 0, 0)$ . O vértice  $B = 2\vec{x} - 3\vec{y} + 0\vec{z} = (2, -3, 0)$ , e o vértice  $C = -\vec{x} - 3\vec{y} + 2\vec{z} = (-1, -3, 2)$ .

As demais faces da planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  serão obtidas de maneira inteiramente análoga à descrita para a face  $ABC$ , usando para isso o primeiro triângulo descrito. A Figura 4.3 mostra a planificação completa do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (2, 3)$ .

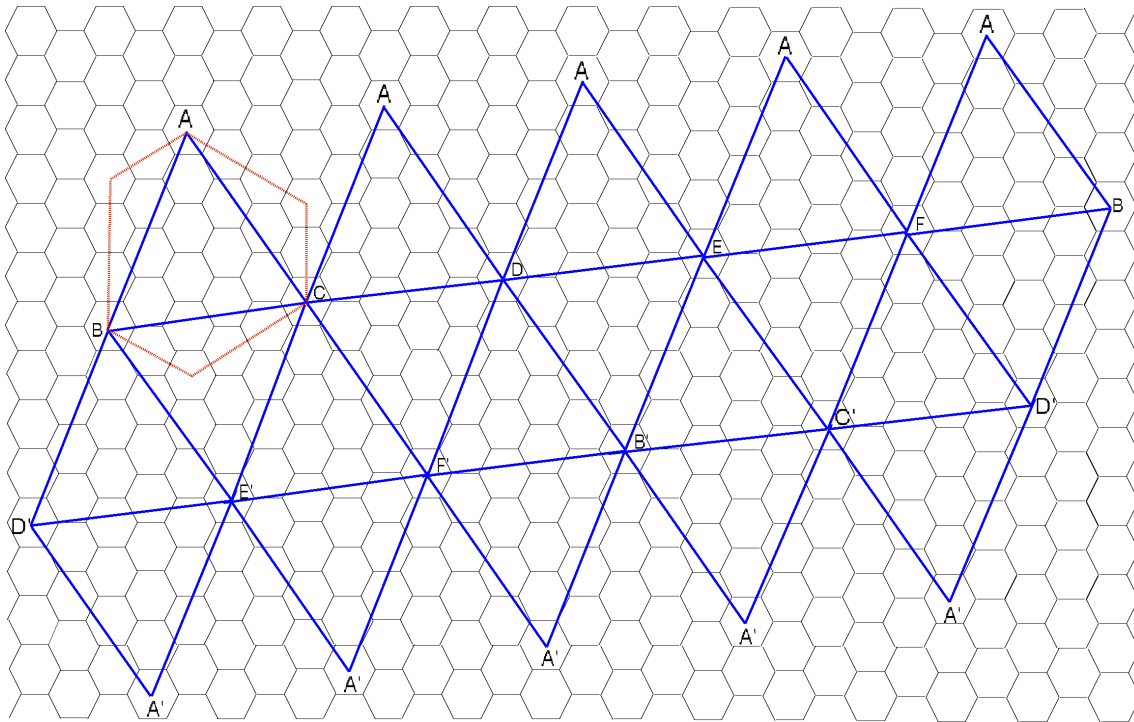


Figura 4.3: Planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (2, 3)$ . Os vértices de mesmo rótulo na planificação coincidirão quando reconstruirmos o correspondente icosaedro regular.

A fronteira da planificação gerada pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  remonta a superfície de um icosaedro regular. Observe que os vértices rotulados servem para orientar-nos na montagem do icosaedro regular uma vez que rótulos iguais indicam mesmo vértice no icosaedro regular pretendido. Um olhar local para a superfície deste icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  e, pela malha hexagonal, revela a existência de um sólido cuja superfície é formada por hexágonos (provenientes da malha hexagonal) e por 12 pentágonos obtidos pelos vértices  $A, B, C, D, E, F, A', B', C', D', E', F'$ . Dizemos que este sólido é um *sólido com simetria icosaedral gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$* , pois é gerado a partir da superfície do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$ .

Os sólidos com simetria icosaedral satisfazem os requisitos para serem vistos como grafos fullerênicos, isto é, são cúbicos, 3-conexos, planares e possuem faces pentagonais e hexagonais, porém nem todos os grafos fullerênicos podem ser obtidos a partir da superfície de icosaedros regulares. Os nanodiscos de fullerênicos são bons exemplos desta impossibilidade. Conseqüentemente, os grafos fullerênicos que correspondem à sólidos com simetria icosaedral são chamados de *grafos fullerênicos com simetria icosaedral*. Denotamos por  $G_{i,j}$  os *grafos fullerênicos com simetria icosaedral gerados*



pelos vetores  $\vec{G} = (i, j)$ . Com esta definição em mente a planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  fornece naturalmente uma planificação para o grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,j}$ .

As Figuras 4.4, 4.5 e 4.6 ilustram a obtenção do grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{1,4}$ .

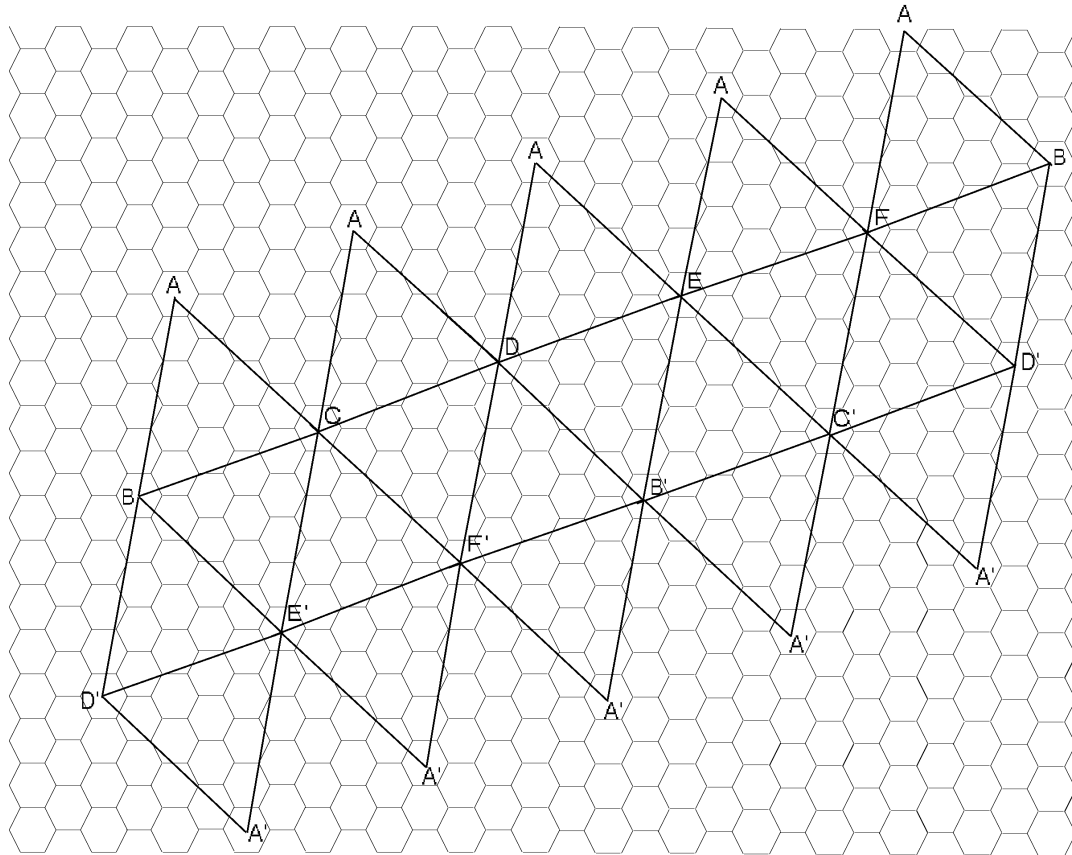


Figura 4.4: Planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (1, 4)$ .

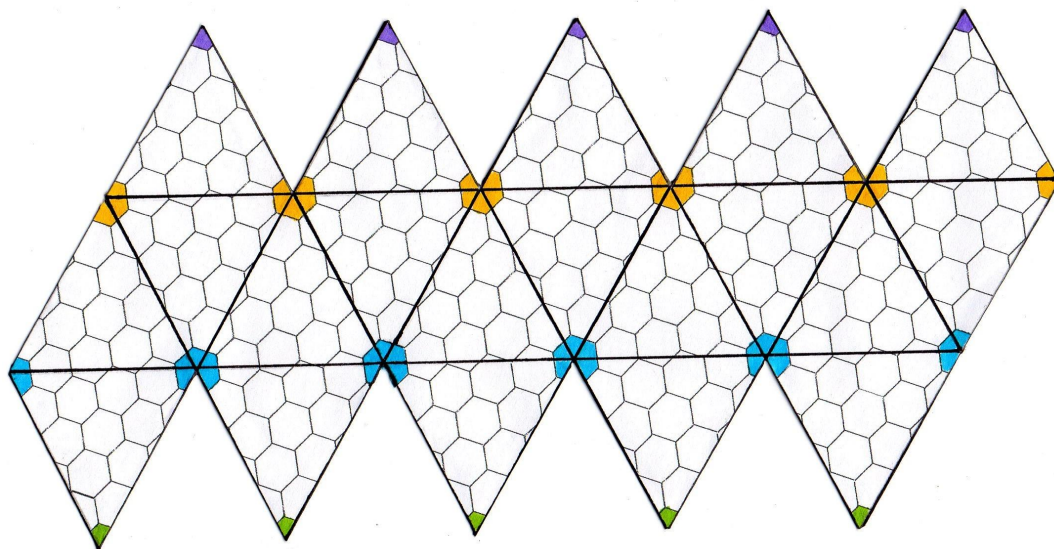


Figura 4.5: As partes coloridas formarão os 12 pentágonos do sólido com simetria icosaedral gerado pelo vetor  $\vec{G} = (1, 4)$ .

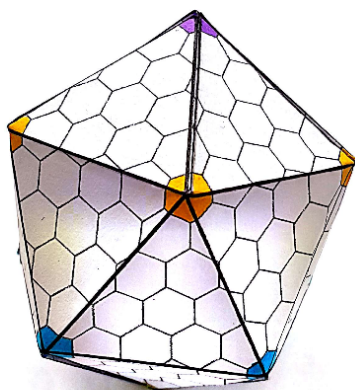


Figura 4.6: Grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{1,4}$ .

Como já dissemos no Capítulo 3, Andova e Škrekovski [1] detectam a simetria icosaedral de um grafo fullerene a partir da disposição de suas faces pentagonais, ou seja, os centros das 12 faces pentagonais de um fullerene ao serem ligadas dão origem a um icosaedro regular se, e somente se, o grafo fullerene é um *grafo fullerene com simetria icosaedral*. A Figura 4.7 fornece exemplos planares de grafos fullerenes com e sem simetria icosaedral.

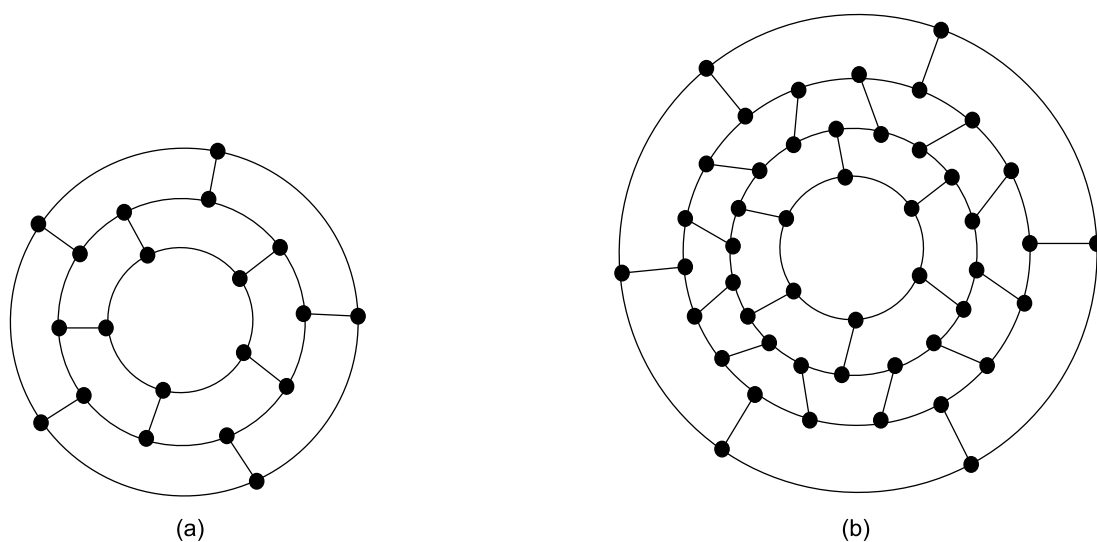


Figura 4.7: (a) Dodecaedro = Grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{0,1}$  contendo 20 vértices. O seu dual é um icosaedro regular. (b) Nanodisco de fullerene  $D_{2,t}$  com 48 vértices. As faces pentagonais deste nanodisco são dispostas lado à lado, portanto este grafo fullerene não é icosaedral.

De acordo com Goldberg[28], o número de vértices e de arestas de um sólido com simetria icosaedral gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  é, respectivamente, igual a  $n = 20(i^2 + ij + j^2)$  e  $m = 30(i^2 + ij + j^2)$ . Essas equações são conhecidas como *Equações de Goldberg*.

O Corolário 4.1, devido à Goldberg, fornece os números de vértices e arestas em um grafo  $G_{i,j}$ . A sua demonstração é incluída, pois a técnica usada na prova será utilizada em outros resultados deste capítulo.

**Corolário 4.1 (Goldberg [28])** *Sejam  $0 \leq i \leq j$  inteiros e  $G_{i,j}$  um grafo fullerene com simetria icosaedral. O número de vértices e arestas de  $G_{i,j}$  é dado, respectivamente, por  $n = 20(i^2 + ij + j^2)$  e  $m = 30(i^2 + ij + j^2)$ .*

*Demonstração.* Sejam  $G_{i,j}$ ,  $0 \leq i \leq j$  um grafo fullerene com simetria icosaedral e  $OBD$  uma face triangular da planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$ , como mostra a Figura 4.8 para o vetor  $\vec{G} = (1, 3)$ .

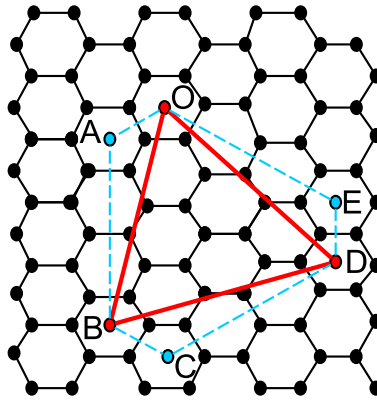


Figura 4.8: Face triangular  $OBD$  do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (1, 3)$ , na malha hexagonal.

Observe que as arestas  $OA$  e  $OB$  medem, respectivamente,  $i$  e  $j$  unidades. O ângulo entre  $OA$  e  $OB$  é de 120 graus, e portanto, a aresta  $OB$  mede  $\sqrt{i^2 + j^2 + ij}$  unidades e a área do triângulo regular  $OBD$  é de  $\frac{\sqrt{3}}{4}(i^2 + ij + j^2)$ .

Em seguida, construímos a malha dual à malha hexagonal, como mostra a Figura 4.9, para o vetor  $\vec{G} = (1, 3)$ . Observe que como as malhas hexagonal e triangular são duais, cada triângulo da malha triangular corresponde a um vértice do grafo fullerene  $G_{i,j}$ .

A aresta de cada triângulo regular da malha triangular mede 1 unidade e, consequentemente, a área de cada triângulo regular da malha triangular é de  $\frac{\sqrt{3}}{4}$ . Assim, a área do triângulo  $OBD$  pode ser entendida como  $(i^2 + ij + j^2)$  vezes a área de 1 triângulo regular da malha triangular, ou seja, cada face do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  contém  $i^2 + ij + j^2$  triângulos regulares da malha triangular. Além disso, as malhas hexagonal e triangular são duais e cada um dos  $i^2 + ij + j^2$

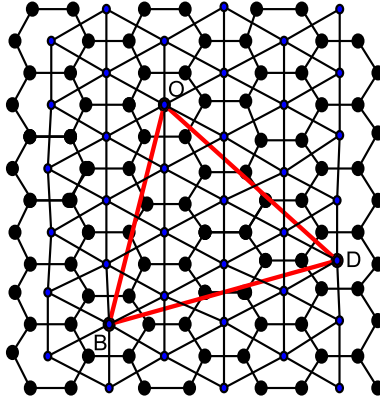


Figura 4.9: Face triangular  $OBD$  do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (1, 3)$ , nas malhas hexagonal e triangular.

triângulos da malha triangular, pertencentes à face  $OBD$ , correspondem a 1 vértice do grafo  $G_{i,j}$ . Como  $G_{i,j}$  é formado pelas 20 faces do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$ , segue que o número de vértices de  $G_{i,j}$  é igual a  $20(i^2 + ij + j^2)$ .

Para mostrar que o número de arestas de  $G_{i,j}$  é igual a  $30(i^2 + ij + j^2)$ , basta observar que cada vértice de  $G_{i,j}$  dá origem a 3 arestas de  $G_{i,j}$  e que cada uma destas arestas são contabilizadas 2 vezes por cada uma de suas extremidades.  $\square$

## 4.2 Propriedades das Planificações e das Malhas Hexagonais

Afim de tornar mais compreensível o resultado central deste capítulo, discutimos, nesta seção, algumas propriedades das malhas hexagonais e das planificações dos grafos fulerenes com simetria icosaedral. Daqui por diante, os vértices das planificações de todos os icosaedros regulares gerados pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$ , abordados neste trabalho, seguirão os rótulos como na Figura 4.10.

Em toda planificação de grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,j}$ , com  $0 < i \leq j$ , o par de triângulos  $ABC$  e  $A'B'C'$  é dito ser um *par de triângulos opostos*. A motivação desta definição se deve ao fato que no correspondente icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  estes triângulos pertencem a planos paralelos. Para a conveniência do leitor veja os triângulos  $ABC$  e  $A'B'C'$  na Figura 4.10. Como consideramos o icosaedro regular, existem exatos 10 pares de triângulos opostos, identificados dois a dois por faces do tipo  $MNP$  e  $M'N'P'$  (veja Figura 4.10). As faces pentagonais de centro em  $A$  e em  $A'$ , do grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,j}$ , são chamadas de *faces pentagonais antipodais*, pois pertencem a planos paralelos e opostos. Os demais pares de faces pentagonais antipodais são:  $B$  e  $B'$ ,  $C$  e  $C'$ ,  $D$  e  $D'$ ,  $E$  e  $E'$ ,  $F$  e  $F'$ .

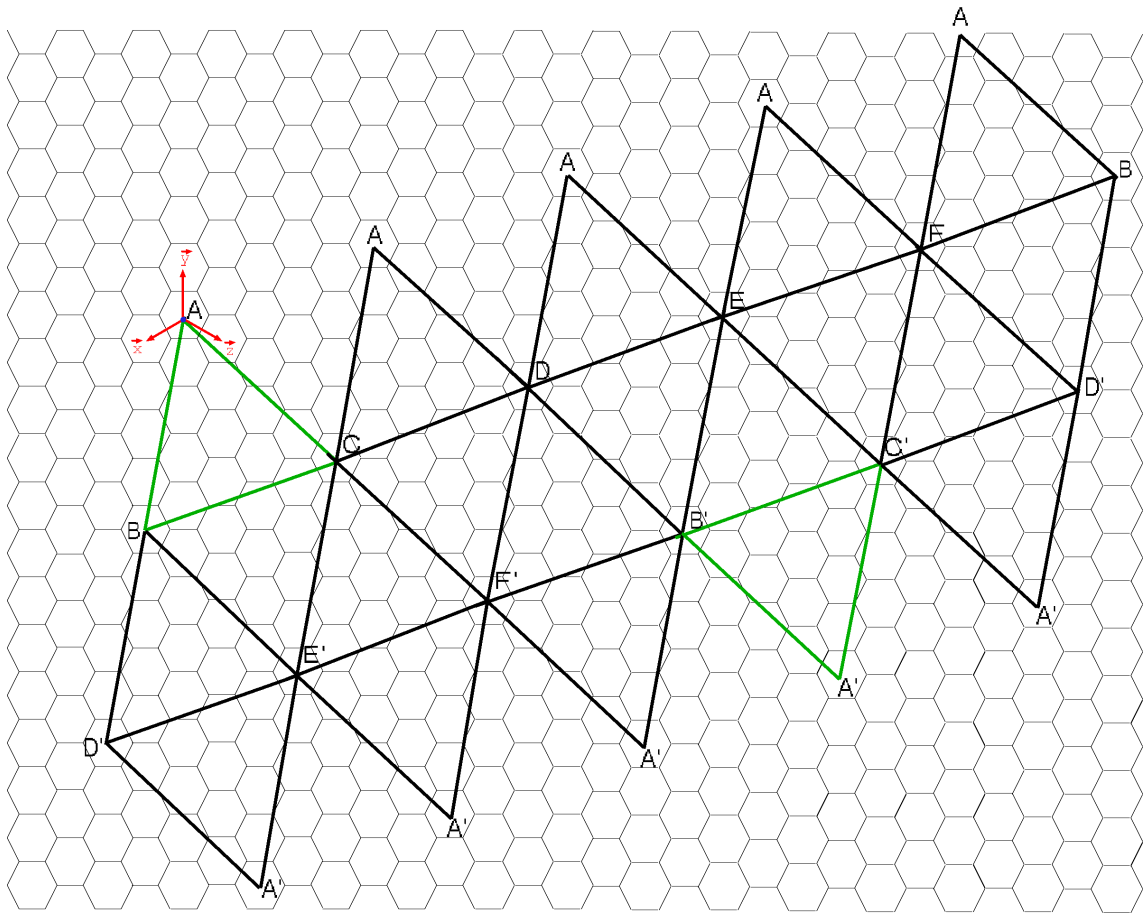


Figura 4.10: Planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (1, 4)$  e, consequentemente, do grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{1,4}$ .

A Propriedade 4.2 caracteriza a distância entre faces da malha hexagonal, veja a Figura 4.11.

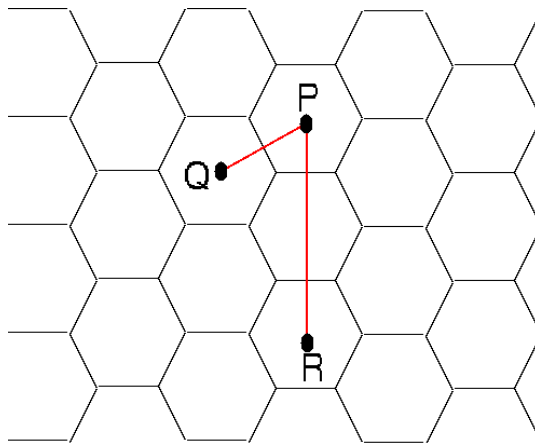


Figura 4.11: A distância entre o hexágono que contém o ponto  $P$  e o hexágono que contém o ponto  $Q$  é de 1 unidade e entre os hexágonos que contém os pontos  $P$  e  $R$  é de 2 unidades.

**Propriedade 4.2** *A distância entre dois hexágonos de uma malha hexagonal é dada pelo comprimento do caminho mínimo de hexágonos que os conecta.*

*Demonstração.* O dual da malha hexagonal é a malha triangular e ambas as

malhas são conexas e planares. Portanto a distância entre dois hexágonos da malha hexagonal é dada pela distância entre dois vértices da malha triangular. A distância entre dois vértices da malha triangular é dada pelo comprimento do caminho mínimo de arestas que os conecta. Retornando à malha hexagonal de posse deste conceito, verificamos que a propriedade enunciada é imediatamente satisfeita.  $\square$

**Propriedade 4.3** *Sejam  $0 < i < j$  números inteiros,  $G_{i,j}$  e  $G_{i,j+1}$  grafos fullerenes com simetrias icosaedrais. Se as planificações de  $G_{i,j}$  e  $G_{i,j+1}$  na malha hexagonal iniciam-se no mesmo hexágono que contém o vértice  $A$ , então a distância entre o hexágono que contém o vértice  $A'$  de  $G_{i,j}$  e o hexágono que contém o vértice  $A'$  de  $G_{i,j+1}$  é de 3 unidades.*

*Demonstração.* Pela construção das planificações de  $G_{i,j}$  e  $G_{i,j+1}$ , temos que o vértice  $B$  de  $G_{i,j}$  tem coordenadas  $B = (i, -j, 0)$  enquanto o vértice  $B$  de  $G_{i,j+1}$  tem coordenadas  $B = (i, -j - 1, 0)$ , ou seja, há uma diferença de 1 unidade entre os hexágonos que contêm os vértices rotulados de  $B$ . Esta diferença aumenta em mais 1 unidade entre o vértice  $D'$  de  $G_{i,j}$  e  $D'$  de  $G_{i,j+1}$ , construídos a partir dos vértices  $B$ 's. Desta maneira, entre os hexágonos que contêm os vértices  $A'$ 's haverá uma distância de 3 unidades.  $\square$

Um exemplo da Propriedade 4.3 é dado na Figura 4.12.

**Propriedade 4.4** *Sejam  $0 < i < j$  números inteiros. A distância entre os hexágonos que contêm os vértices  $A$  e  $B$  da planificação de um grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,j}$  é igual a  $i + j$  unidades. Além disso, a distância entre dois hexágonos cujos centros pertencem a um dos pontos do conjunto  $P = \{A, B, C, D, E, F, A', B', C', D', E', F'\}$  é no mínimo de  $i + j$  unidades.*

A demonstração da Propriedade 4.4 decorre imediatamente da construção da planificação do fullerene obtido a partir do vetor de Goldberg  $\vec{G} = (i, j)$ , bastando observar que obtemos o vértice  $B$  a partir do vértice  $A$  percorrendo  $i + j$  unidades, sendo  $i$  unidades na direção  $\vec{x}$  e  $j$  unidades na direção  $-\vec{y}$ .

**Propriedade 4.5** *Sejam  $0 < i < j$  números inteiros. Na planificação do grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,j}$  do hexágono que contém  $A \in ACD$  até o hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  há um deslocamento de  $2i - j$  unidades na direção do vetor  $\vec{x}$ .*

*Demonstração.* Sejam  $A$  e  $C \in ACD$  e  $A'$  e  $E' \in A'D'E'$ .

Para obter o vértice  $C$  a partir do vértice  $A$  há um deslocamento de  $i$  unidades na direção do vetor  $\vec{x}$ . Em  $C$  há um deslocamento de mais  $i$  unidades, na direção do

vetor  $\vec{x}$ , até chegarmos em  $E'$ . Finalmente de  $E'$  à  $A$  efetuamos um deslocamento de  $-j$  unidades na direção do vetor  $\vec{x}$ . Contabilizamos do hexágono que contém  $A \in ACD$  até o hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  um deslocamento total de  $2i - j$  unidades na direção  $\vec{x}$ .  $\square$

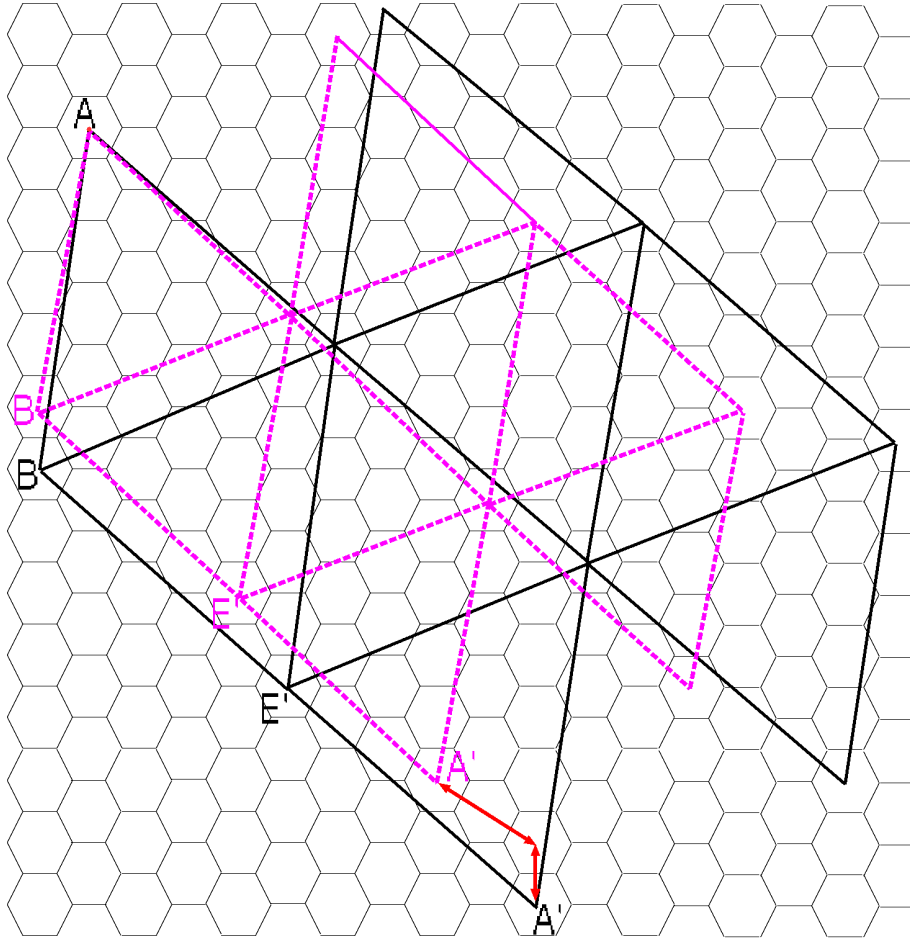


Figura 4.12: Parte das planificações de  $G_{1,4}$ , tracejado, e  $G_{1,5}$ , de preto. A distância entre os hexágonos que contêm os vértices  $A'$  de  $G_{1,4}$  e  $A'$  de  $G_{1,5}$  é de 3 unidades.

### 4.2.1 Remendos Hexagonais

A Propriedade 4.6 que veremos a seguir foi estabelecida por Andova e Škrekovski e fornece uma rota de caminhos mínimos entre dois vértices da malha hexagonal. Todas as definições desta subsecção podem ser encontradas em [1] e são devido à Andova e Škrekovski.

As definições obtidas nesta secção necessitam da escolha de uma das três direções  $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$ , introduzidas na secção anterior.

Considere, sem perda de generalidade, a direção vertical  $\vec{y}$ . Todo vértice  $a$  da malha hexagonal é incidente a exatamente uma aresta normal a  $\vec{y}$ , isto é, todo vértice  $a$  é incidente a uma aresta horizontal  $e_a$ . O vértice  $a$  é também incidente a uma face hexagonal  $h_a$  da malha que não contém a aresta  $e_a$ . Dizemos que o vértice  $a$  é um vértice à direita da face  $h_a$  quando a aresta  $e_a$  está à direita da face hexagonal  $h_a$ . Se a aresta horizontal  $e_a$  estiver à esquerda da face hexagonal  $h_a$ , então diremos que o vértice  $a$  é um vértice à esquerda da face  $h_a$ , como ilustrado na Figura 4.13.

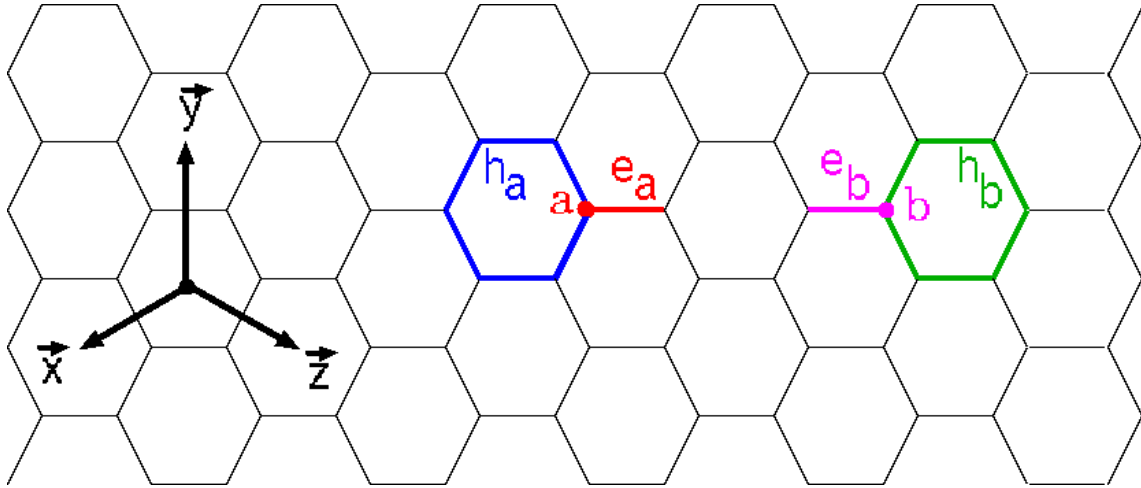


Figura 4.13: O vértice  $a$  é um vértice à direita da face hexagonal  $h_a$ , e o vértice  $b$  é um vértice à esquerda da face hexagonal  $h_b$ .

Sejam  $a$  e  $b$  vértices da malha hexagonal. Digamos que  $a$  e  $b$  estão dispostos de modo que o vértice  $a$  está à esquerda de  $b$  ou que os vértices  $a$  e  $b$  estão dispostos na mesma linha de hexágonos em alguma das direções  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  ou  $\vec{z}$ . Sejam  $h_a$  e  $h_b$  as faces hexagonais geradas, respectivamente, por  $a$  e  $b$ . As linhas paralelas às direções  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$  passando pelos centros de  $h_a$  e  $h_b$  geram 3 paralelogramos (Figura 4.14).

Quando  $a$  e  $b$  pertencem à mesma linha de hexágonos este paralelogramo é um "segmento" (Figura 4.15).

Dados dois vértices  $a$  e  $b$  de uma malha hexagonal, o menor paralelogramo gerado por  $a$  e  $b$  induz um circuito fechado de arestas da malha hexagonal passando por  $a$  e  $b$ . Este circuito fechado será denotado de *remendo hexagonal*, como mostra a Figura 4.16.

**Propriedade 4.6 (Remendo hexagonal - Andova e Škrekovski [1])** *Sejam  $a$  e  $b$  dois vértices de uma malha hexagonal, definindo um remendo hexagonal  $P$ . Um caminho mínimo entre  $a$  e  $b$  consiste de arestas consecutivas da fronteira de  $P$ . Além disso, todo vértice de um remendo hexagonal pertence a algum caminho mínimo entre os vértices que geram o remendo.*



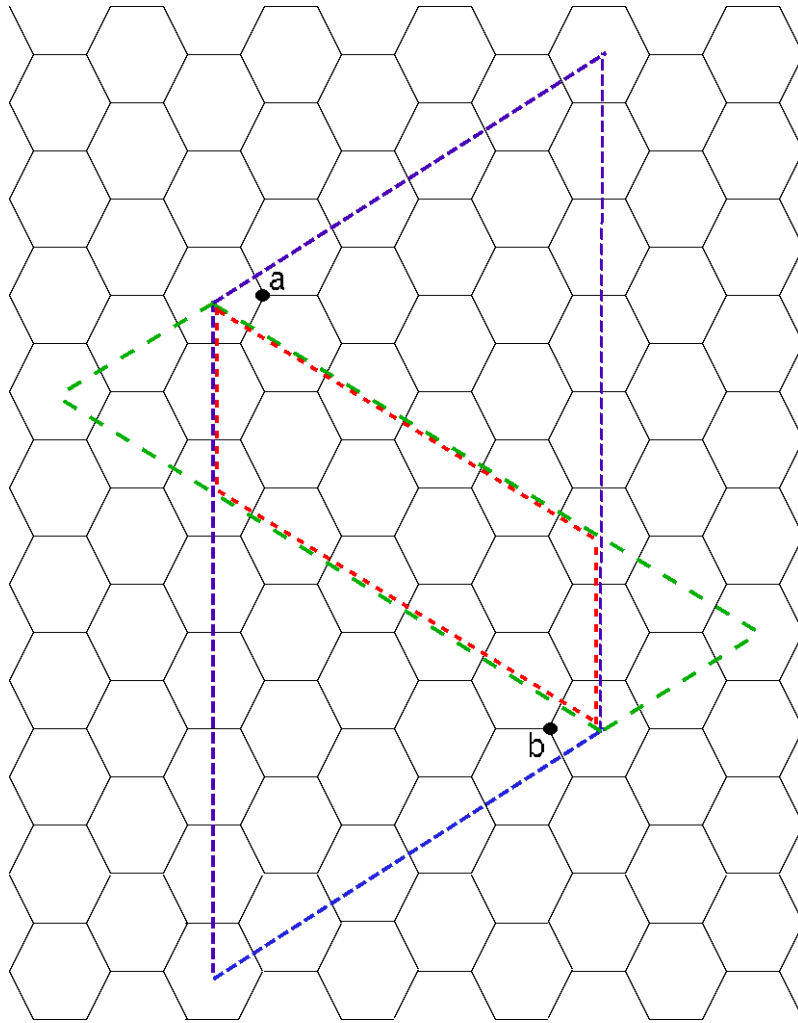


Figura 4.14: As linhas tracejadas de azul, verde e vermelho indicam os três paralelogramos gerados pelos vértices  $a$  e  $b$ .

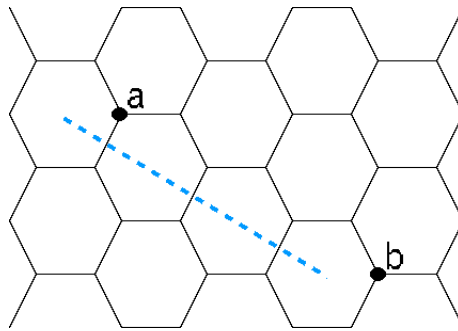


Figura 4.15: Segmento tracejado = Paralelogramo gerado por  $a$  e  $b$  degenerado em um segmento.

Uma consequência fundamental da Propriedade 4.6 é a de que se um vértice não pertence ao remendo hexagonal gerado por  $a$  e  $b$ , então não existe caminho mínimo de  $a$  até  $b$  passando por este vértice. Desta maneira, o remendo hexagonal fornece uma rota de obtenção de todos os caminhos mínimos entre dois vértices da malha hexagonal.

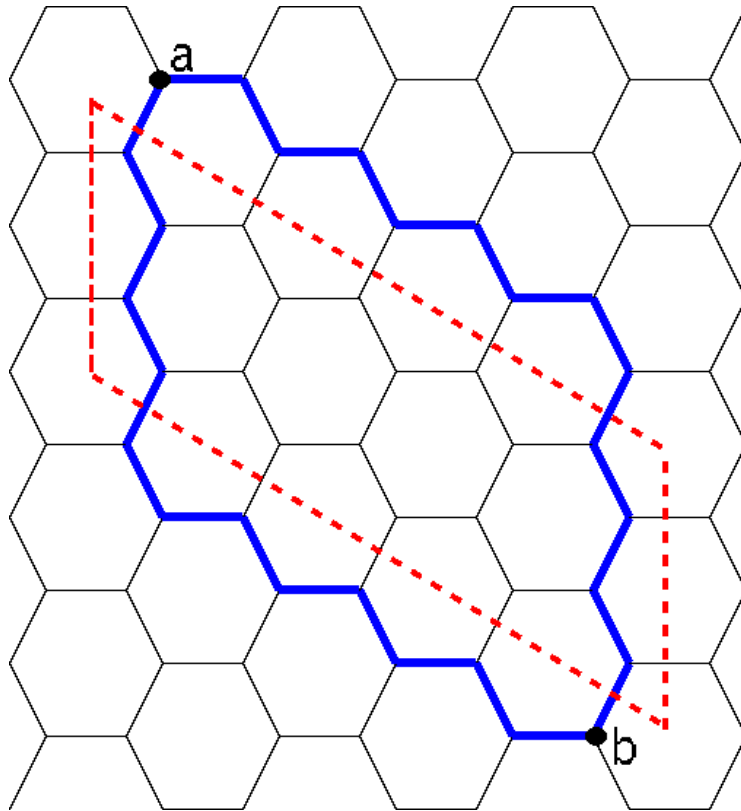


Figura 4.16: O paralelogramo tracejado, gerado por  $a$  e  $b$ , induz um paralelogramo formado por arestas da malha hexagonal, cuja fronteira está colorida de azul. A este circuito fechado damos o nome de remendo hexagonal.

### 4.3 Cota Inferior para o Diâmetro de Grafos fullerenes com Simetria Icosaedral

Os Lemas 4.7 e 4.8 que veremos a seguir estabelecem uma cota inferior para o diâmetro dos grafos fullerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,2i+p}$ , com  $i > 0$  e  $p > 0$  números inteiros.

É conveniente lembrar que em todo grafo fullerene um vértice é dito pentagonal quando este vértice é incidente a alguma face pentagonal do grafo, caso contrário o vértice é dito hexagonal.

**Lema 4.7** *Sejam  $j \geq 3$  um número inteiro e  $G_{1,j}$  um grafo fullerene com simetria icosaedral. Se  $u$  e  $v$  são vértices pentagonais de  $G_{1,j}$ , com  $u$  pertencente à face pentagonal centrada em  $A \in ABC$  e  $v$  pertencente à face pentagonal centrada em  $A' \in A'D'E'$ , então a distância entre  $u$  e  $v$  é dada por a  $dist(u, v) = 6j - 1$ .*

*Demonstração.*

Faremos indução sobre  $j \geq 3$ .

Para  $j = 3$ , temos o grafo  $G_{1,3}$  e  $dist(u, v) = 6 \cdot 3 - 1 = 17$  arestas, como mostra a Figura 4.17.

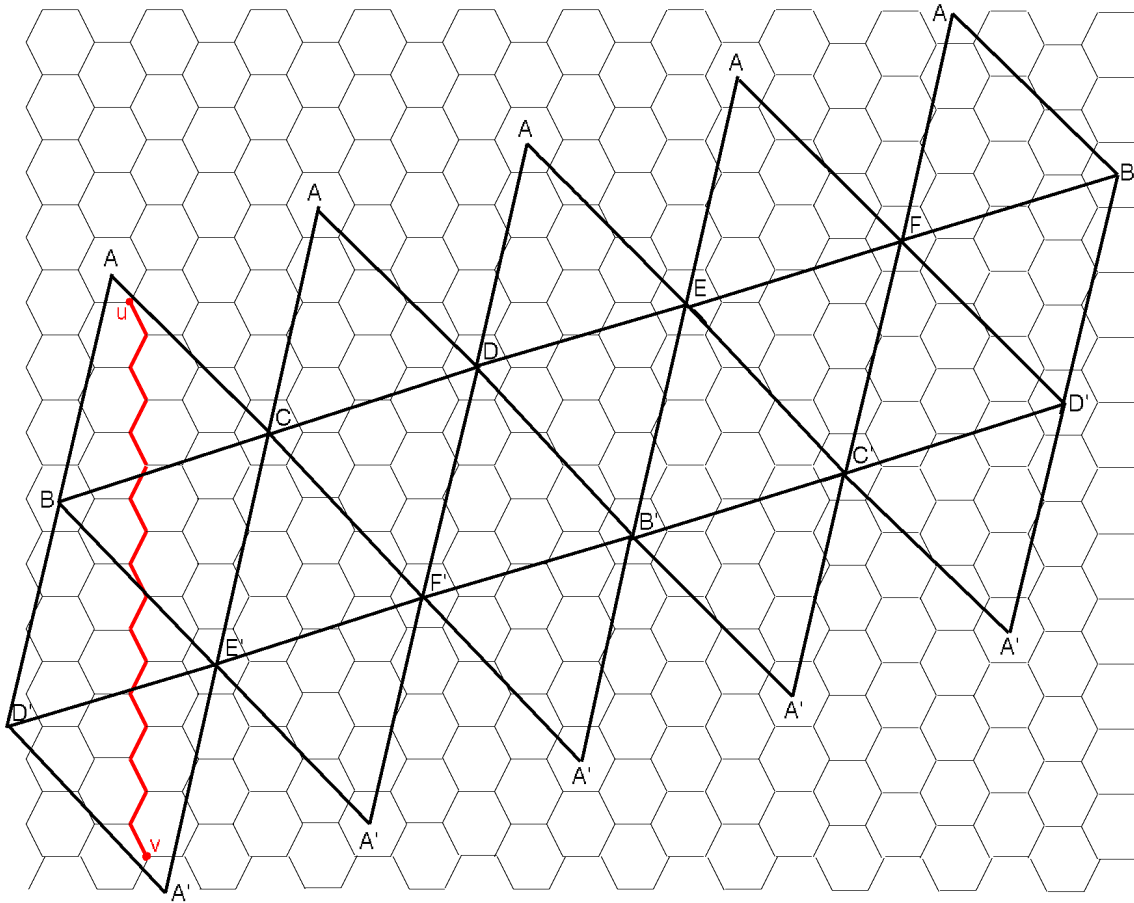


Figura 4.17: Grafo  $G_{1,3}$ . O caminho mínimo entre  $u$  e  $v$ , de comprimento 17, está representado pelas arestas vermelhas da malha.

Sejam  $u$  e  $v$  vértices do grafo  $G_{1,j}$  pertencentes às faces pentagonais centradas em  $A \in ABC$  e em  $A' \in A'D'E'$ , respectivamente. Suponha que  $dist(u, v) = 6j - 1$ .

É possível construir a planificação do grafo fullerene  $G_{1,j+1}$  a partir do mesmo hexágono centrado em  $A \in ABC$  o qual a planificação do grafo fullerene  $G_{1,j}$  foi iniciada. Desta maneira, o vértice  $u$  de  $G_{1,j}$  é também vértice pentagonal de  $G_{1,j+1}$ .

Seja  $v'$  o vértice pertencente à face pentagonal centrada em  $A' \in A'D'E'$  de  $G_{1,j+1}$ . Desejamos mostrar que  $dist(u, v') = 6(j + 1) - 1 = 6j + 5$ .

Pela Propriedade 4.3, o caminho mínimo entre  $v$  e  $v'$  tem comprimento igual a 6 unidades (Figura 4.18).

Portanto,  $dist(u, v') = dist(u, v) + dist(v, v') \stackrel{\text{hipótese}}{=} 6j - 1 + 6 = 6j + 5$ .

□

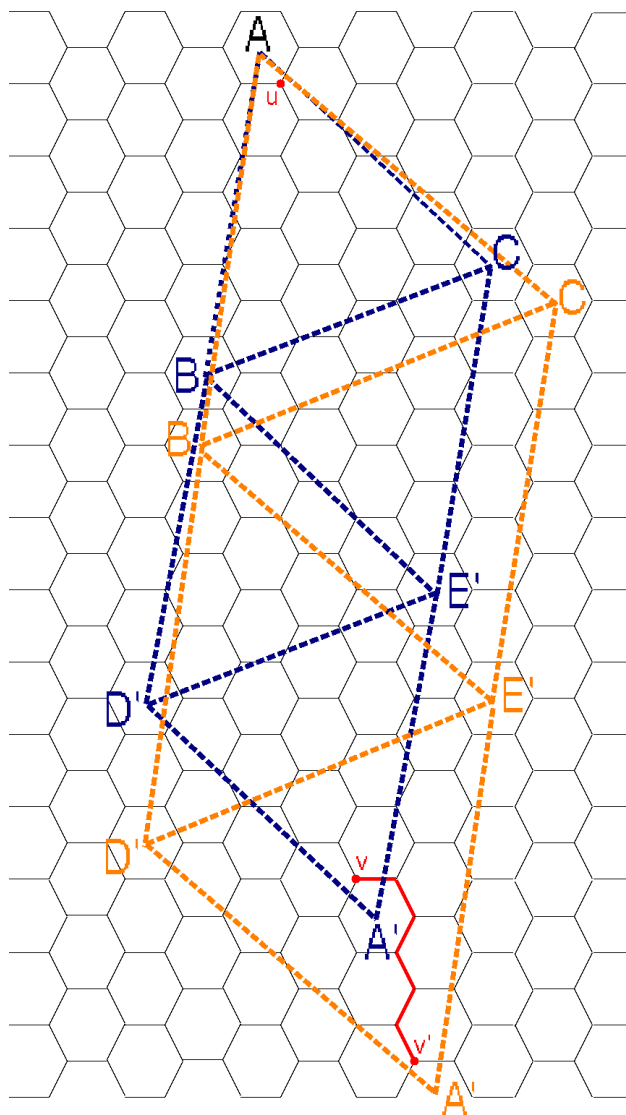


Figura 4.18: Parte das planificações dos grafos  $G_{1,j}$  e  $G_{1,j+1}$ : o caminho mínimo entre  $v$  e  $v'$  tem comprimento de 6 unidades.

**Lema 4.8** *Sejam  $i > 0$  e  $p > 0$  números inteiros e  $G_{i,2i+p}$  um grafo fullerene com simetria icosaedral. O diâmetro de  $G_{i,2i+p}$  é pelo menos igual a  $14i + 6p - 1$ .*

*Demonstração.* É suficiente exibirmos dois vértices de  $G_{i,2i+p}$  cuja distância é igual a  $14i + 6p - 1$ . Mostraremos que existe um par de vértices pentagonais pertencentes à faces pentagonais antipodais que realizam esta distância.

Pela Propriedade 4.5, na planificação do grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,2i+p}$  do hexágono que contém  $A \in ABC$  até o hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  há um deslocamento de  $2i - 2i - p = -p$  unidades na direção do vetor  $\vec{x}$ . Isto nos diz que na planificação do grafo  $G_{i,2i+p}$  o hexágono que contém  $A \in ABC$  situa-se sempre à direita do hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  (Figura 4.19).

Já discutimos que, para todo  $0 < i < j$ , os vértices  $A$  e  $A'$  da planificação do icosaedro regular gerado pelo vetor  $\vec{G} = (i, j)$  são centros de faces pentagonais antipodais do grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,j}$ .

Sejam  $a, b, c, d$  e  $e$  vértices pentagonais do grafo  $G_{i,2i+p}$ , tais que  $a$  pertence à face pentagonal centrada em  $A \in ABC$ ,  $b$  pertence à face pentagonal centrada em  $A \in ACD$ ,  $c$  pertence à face pentagonal centrada em  $A \in ADE$ ,  $d$  pertence à face pentagonal centrada em  $A \in AEF$  e  $e$  pertence à face pentagonal centrada em  $A \in ABF$ , como na Figura 4.19.

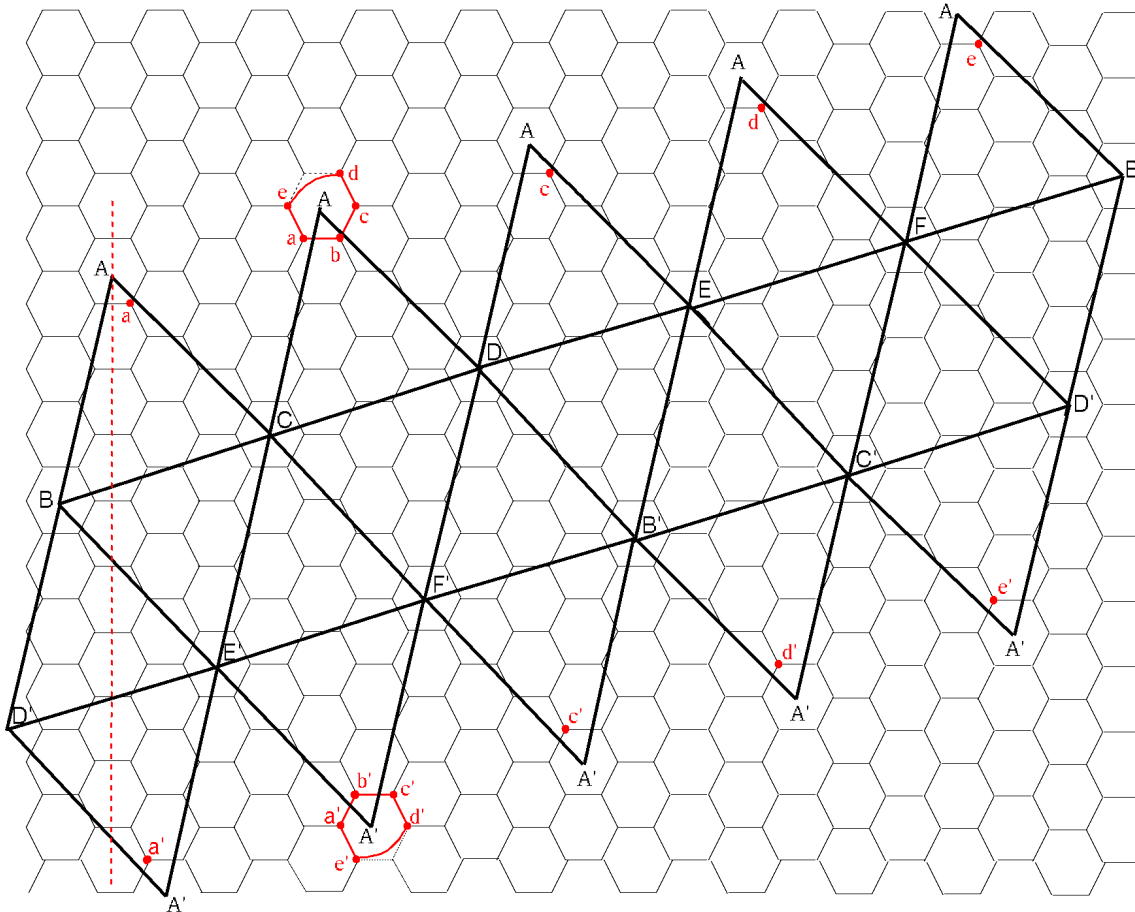


Figura 4.19: Planificação de  $G_{1,3}$ : o hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  encontra-se à direita do hexágono que contém  $A \in ABC$ .

Além disso, em todo grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,2i+p}$  os vértices  $a$  e  $c$  são adjacentes à  $b$ , assim como o vértice  $d$  pode ser considerado adjacente à  $e$  e à  $c$ , enquanto o vértice  $e$  pode ser considerado adjacente aos vértices  $a$  e  $d$  (Figura 4.19).

A face pentagonal  $a'b'c'd'e'$  é antipodal à face pentagonal  $abcde$ . Em  $a'b'c'd'e'$ , o vértice mais próximo ao vértice  $a$  é o vértice  $a'$ , o vértice mais próximo ao vértice  $b$  é o vértice  $b'$ , o vértice mais próximo ao vértice  $c$  é o vértice  $c'$ , o vértice mais próximo ao vértice  $d$  é o vértice  $d'$  e, finalmente, o vértice mais próximo ao vértice  $e$  é o vértice  $e'$ . Os vértices pentagonais do tipo  $u$  e  $u'$  da planificação de  $G_{i,2i+p}$  são chamados de *vértices pentagonais antipodais*.

A disposição dos vértices  $a'b'c'd'e'$ , na malha hexagonal, está de acordo com a Figura 4.19 e pode ser justificada pela Propriedade 4.6, bastando observar, por

exemplo, que o remendo hexagonal gerado pelos vértices  $b$  e  $b'$  está contido nos demais remendos hexagonais gerados pelos pares  $b$  e  $a'$ , ou por  $b$  e  $c'$ , ou por  $b$  e  $d'$ , ou por  $b$  e  $e'$ . De maneira análoga, obtemos a disposição dos demais vértices da face  $a'b'c'd'e'$  na planificação de  $G_{i,2i+p}$ .

Vamos mostrar que a distância entre os pares de vértices pentagonais antipodais referentes às faces  $abcde$  e  $a'b'c'd'e'$  de todo grafo fullerene com simetria icosaedral  $G_{i,2i+p}$  é dada por  $dist(a, a') = 14i + 6p - 3$ . Para isso fixamos  $p > 0$  e usamos indução sobre  $i > 0$ .

Para  $i = 1$ , temos o grafo  $G_{1,2+p}$  com  $p > 0$ . Pelo Lema 4.7,  $dist(a, a') = 6(2 + p) - 1 = 12 + 6p - 1 = 6p + 11 = 14 \cdot 1 + 6p - 3$ .

Suponha que  $a$  e  $a'$  são vértices pentagonais antipodais pertencentes ao grafo  $G_{i,2i+p}$  satisfazendo  $dist(a, a') = 14i + 6p - 3$ .

Construindo a planificação do grafo  $G_{i+1,2(i+1)+p}$  a partir do mesmo hexágono o qual a planificação do grafo  $G_{i,2i+p}$  foi construída, garantimos que o vértice pentagonal  $a$  de  $G_{i,2i+p}$  é também vértice pentagonal de  $G_{i+1,2(i+1)+p}$ .

Seja  $a''$  o vértice pentagonal antipodal à  $a$  no grafo  $G_{i+1,2(i+1)+p}$ . Desejamos mostrar que  $dist(a, a'') = 14(i + 1) + 6p - 3$ .

Pela Propriedade 4.5, na planificação de  $G_{i,2i+p}$  o hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  está deslocado  $2i - 2i - p = -p$  unidades na direção  $\vec{x}$  em relação ao hexágono que contém  $A \in ABC$  e na planificação de  $G_{i+1,2(i+1)+p}$  o hexágono que contém  $A' \in A'D'E'$  também está deslocado  $2(i+1) - 2(i+1) - p = -p$  unidades em relação ao hexágono que contém  $A \in ABC$ . Isto nos diz que, para quaisquer  $i, p > 0$ , a distância entre os vértices  $a'$  de  $G_{i,2i+p}$  e  $a''$  de  $G_{i+1,2(i+1)+p}$  é sempre constante e igual a 14, veja o caso quando  $i = j = 1$  na Figura 4.20.

Portanto,  $dist(a, a'') = dist(a, a') + dist(a', a'') \stackrel{\text{hipótese}}{=} 14i + 6p - 3 + 14 = 14(i + 1) + 6p - 3$ .

Para finalizar a demonstração, observe que a distância máxima entre dois vértices de um mesmo pentágono é igual a 2. Portanto,  $d(a, c') = 14i + 6p - 3 + 2 = 14i + 6p - 1$ .  $\square$

**Teorema 4.9** *Sejam  $i > 0$  e  $j > 0$  números inteiros e  $G_{i,j}$  um grafo fullerene com simetria icosaedral contendo  $n$  vértices. Se  $j \geq \frac{11}{2}i$  então  $diam(G_{i,j}) \geq \left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ .*

*Demonstração.*

O Lema 4.8 garante que se  $i > 0$  e  $j > 0$  são inteiros e  $G_{i,j}$  é um grafo fullerene com simetria icosaedral tal que  $j \geq 2i + 1$ , então o diâmetro de  $G_{i,j}$  é pelo menos igual a  $6j + 2i - 1$ , bastando tomar  $p = j - 2i$ .

Para provar que  $diam(G_{i,j}) \geq \left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ , sempre que  $j \geq \frac{11}{2}i$ , é suficiente mostrar que  $6j + 2i - 1 \geq \sqrt{\frac{5n}{3}} - 1$ , sempre que  $j \geq \frac{11}{2}i$ .

Se  $j \geq \frac{11}{2}i$ , então  $j \geq \frac{7i+15i}{4} = \frac{7i+\sqrt{225i^2}}{4}$ . Segue que  $4j - 7i \geq \sqrt{225i^2}$ .

Isto implica em  $8j^2 - 28ij - 88i^2 \geq 0$ .

Reescrevendo-a, temos  $108j^2 - 100j^2 + 72ij - 100ij + 12i^2 - 100i^2 \geq 0$ . Portanto,

$$3(36j^2 + 24ij + 4i^2) \geq 5 \cdot 20(i^2 + ij + j^2). \quad (4.1)$$

A equação de Goldberg para o número de vértices do grafo fullerene  $G_{i,j}$ , dada pelo Corolário 4.1, nos diz que  $n = 20(i^2 + ij + j^2)$ . Substituindo-a na inequação (4.1) e rearrumando os termos obtemos,  $(6j + 2i)^2 \geq \frac{5n}{3}$ .

Finalmente, temos que  $6j + 2i - 1 \geq \sqrt{\frac{5n}{3}} - 1 \geq \left\lfloor \sqrt{\frac{5n}{3}} \right\rfloor - 1$ , sempre que  $j \geq \frac{11}{2}i$ .  $\square$

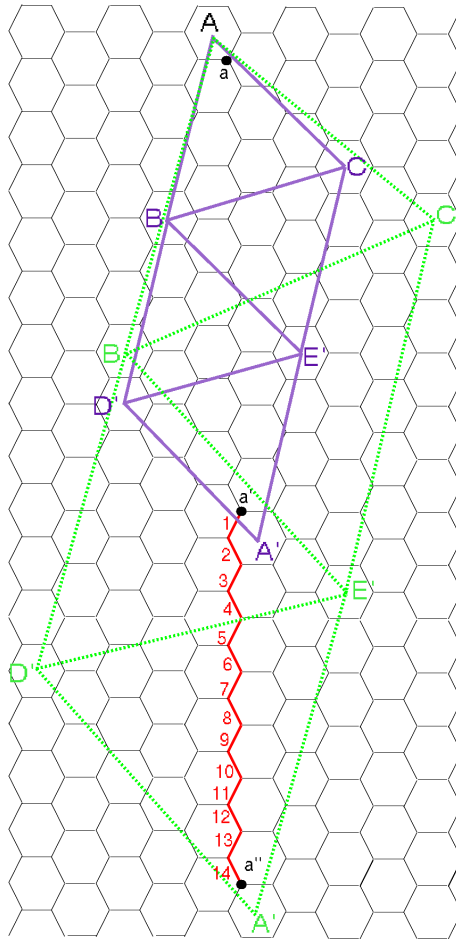


Figura 4.20: Parte das planificações de  $G_{1,3}$ , de roxo e de  $G_{2,5}$ , tracejado de verde. Observe que  $dist(a', a'') = 14$ .

Para cada  $0 \leq i \leq j$  a Tabela 4.2 confronta os valores das cotas inferiores para os diâmetros dos grafos fullerenes  $G_{i,j}$  dados pela Conjectura de Andova e Škrekovski e pelo Lema 4.8, estando de acordo com o Teorema 4.9. Observe que os grafos fullerenes com simetria icosaedral  $G_{i,j}$  são simétricos aos grafos fullerenes com simetria icosaedral  $G_{j,i}$ , consequentemente estes grafos têm diâmetros iguais. Isto assegura a simetria da Tabela 4.2.

$i \setminus j$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
0	(-, -)	(5, -)	(11, -)	(17, -)	(23, -)	(29, -)	(35, -)	(41, -)	(47, -)	(53, -)	(59, -)	(65, -)	(71, -)	(77, -)	(83, -)	(89, -)	(95, -)	(101, -)	(107, -)	(113, -)
1	(5, -)	(9, -)	(14, -)	(19, -)	(25, -)	(31, -)	(36,39)	(42,45)	(48,51)	(54,57)	(59,63)	(65,69)	(71,75)	(77,81)	(82,87)	(88,93)	(94,99)	(100,105)	(105,111)	(111,117)
2	(11, -)	(14, -)	(19, -)	(24, -)	(29, -)	(35, -)	(40, -)	(46, -)	(51, -)	(57, -)	(63, -)	(69,71)	(74,77)	(80,83)	(86,89)	(91,95)	(97,101)	(103,107)	(109,113)	(114,119)
3	(17, -)	(19, -)	(24, -)	(29, -)	(34, -)	(39, -)	(44, -)	(50, -)	(55, -)	(61, -)	(67, -)	(72, -)	(78, -)	(84, -)	(89, -)	(95, -)	(101, -)	(106,109)	(112,115)	(118,121)

Tabela 4.1: Cada entrada é composta por um par ordenado da forma (Conjectura 3.2, Lema 4.8). A região de verde corresponde aos grafos fulerenes com simetria icosaedral que satisfazem a Conjectura, garantida pelo Teorema 4.9, ou seja,  $G_{i,j}$  com  $0 < i$  e  $j \geq \frac{11i}{2}$ , sendo a nossa contribuição. A região de azul indica os grafos fulerenes com simetria icosaedral estudados por Andova e Škrekovski em [1],  $G_{i,j}$  com  $0 = i < j$  ou  $0 < i = j$ , consequentemente estando de acordo com a Conjectura. As demais regiões descrevem os grafos fulerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,j}$  com  $0 < i$ ,  $0 < j < \frac{11i}{2}$  e  $i \neq j$ . Desconhecemos a validade da Conjectura nesta última região, deixando estes problemas como questões em aberto.

$i \setminus j$	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	32	34	35	36
4	(127, -)	(133, -)	(139,141)	(144,147)	(150,153)	(156,161)	(161,165)	(167,171)	(173,177)	(179,183)	(184,189)	(190,195)	(196,201)	(202,207)	(207,213)	(213,219)	(219,225)
5	(131, -)	(136, -)	(142, -)	(148, -)	(154, -)	(159, -)	(165, -)	(171, -)	(176,179)	(182,185)	(188,189)	(194,197)	(199,203)	(205,209)	(211,215)	(216,221)	(222,227)
6	(165, -)	(140, -)	(146, -)	(152, -)	(157, -)	(163, -)	(169, -)	(174, -)	(180, -)	(186, -)	(191, -)	(197, -)	(203, -)	(209, -)	(217,217)	(220,223)	(226,229)

Tabela 4.2: Cada entrada é composta por um par ordenado da forma (Conjectura 3.2, Lema 4.8). A região de verde corresponde aos grafos fulerenes com simetria icosaedral que satisfazem a Conjectura, garantida pelo Teorema 4.9, ou seja,  $G_{i,j}$  com  $0 < i$  e  $j \geq \frac{11i}{2}$ , sendo a nossa contribuição. As demais regiões descrevem os grafos fulerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,j}$  com  $0 < i$ ,  $0 < j < \frac{11i}{2}$  e  $i \neq j$ . Desconhecemos a validade da Conjectura nesta última região, deixando estes problemas como questões em aberto.



## Capítulo 5

# Transversalidade de Ciclos Ímpares

Neste capítulo, estabelecemos uma cota superior para o problema da frustração bipartida de arestas em grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6) e, conseqüentemente, uma cota inferior para o problema do conjunto independente máximo em grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6) e indicamos as classes de grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6) que alcançam os limites para ambos os problemas. Desenvolvemos a versão dual do problema da frustração bipartida de arestas, utilizamos alguns conceitos de otimização combinatória, de teoria de grafos e de álgebra linear para, enfim, generalizar os resultados obtidos por Faria, Klein e Stehlík [12] que fornecem cotas superiores e inferiores para os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo para grafos fulerenes. Este capítulo está contido no artigo “Packing and Covering Odd Cycles in Cubic Plane Graphs with Small Faces” desenvolvido em parceria com o professor Matěj Stehlík, submetido ao European Journal of Combinatorics e submetido e aceito para o Eurocomb 2017 - European Conference on Combinatorics, Graph Theory and Applications-2017 [31].

Um *transversal de ciclos ímpares* de um grafo  $G = (V, E)$  é um conjunto de arestas de  $G$  que intersepta cada ciclo ímpar de  $G$ . Como grafos bipartidos caracterizam-se por não possuírem ciclos ímpares, um transversal de ciclos ímpares  $C \subset E$  de  $G$  pode ser visto como um conjunto de arestas do grafo  $G$  que ao ser removido torna bipartido o grafo remanescente  $G(V, E \setminus C)$ . A cardinalidade do menor *transversal de ciclos ímpares* de um grafo  $G$  é denotada por  $\tau_{odd}(G)$ . A Figura 5.1 fornece um exemplo do cálculo de  $\tau_{odd}$  de um grafo fuleróide-(3, 4, 5, 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 [8] como o *problema da Frustração Bipartida de Arestas*.

Thomassen [32] provou que existem infinitos valores de  $n$  tais que existe um grafo  $G$  planar, 3-conexo e cúbico com  $n$  vértices com  $\tau_{odd}(G) \geq (10n/57 + 12)$ . Entretanto, para  $n$  suficientemente grande, os grafos construídos por Thomassen tem faces de tamanho pelo menos 24.

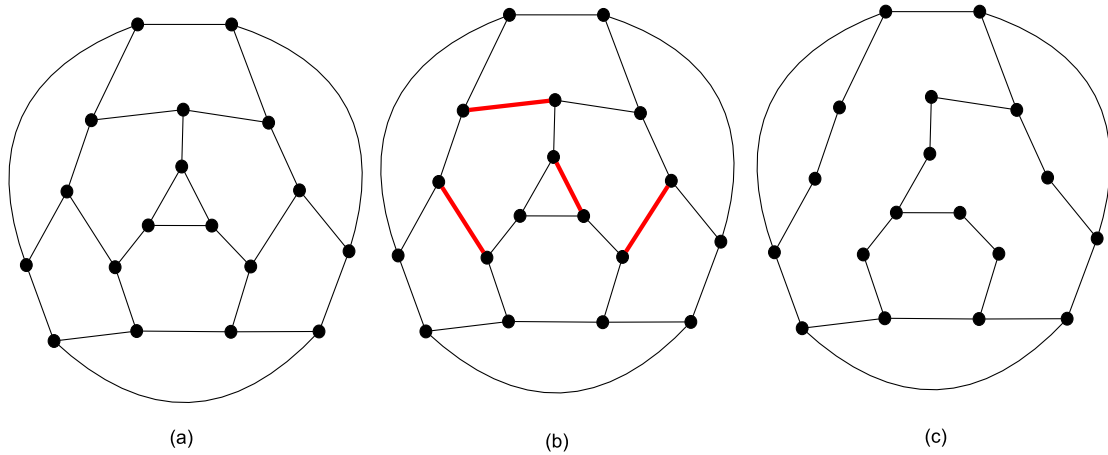


Figura 5.1: Em (a), um grafo  $G = (V, E)$  fulleróide-(3, 4, 5, 6) que não é bipartido, pois possui faces de tamanho 3 e 5. Em (b), destacamos um conjunto mínimo  $C$  de arestas de  $G$  que ao serem deletadas torna bipartido o grafo remanescente,  $C$  é mínimo porque tem 4 ciclos ímpares disjuntos de arestas e  $|C| = 4$ . Em (c), eliminamos as 4 arestas destacadas em (b) e obtemos um grafo bipartido. Portanto,  $\tau_{odd}(G) = 4$ .

O resultado central deste capítulo, Teorema 5.11, fornece um limite superior para  $\tau_{odd}$  de grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6). A prova deste teorema, apresentada na secção 5.1.3., requer o estudo de conceitos de teoria de grafos e otimização combinatória, além de resultados preliminares que serão abordados nas próximas secções. Este resultado<sup>1</sup> encontra-se publicado no recipiente da internet Arqv<sup>2</sup>.

## 5.1 Frustração de Arestas - Versão Dual

O *grafo dual* de um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) é uma *triangulação planar* sem loops ou arestas múltiplas e todos os seus vértices têm graus 3, 4, 5 ou 6. No grafo dual de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) os vértices de grau menor que 6 são chamados de *vértices defeituosos*. O grafo dual de um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6)  $G$  é denotado por  $G^*$  e poderá ser chamado simplesmente de dual, como nas Figuras 5.2 e 5.3. A Tabela 5.1 fornece alguns exemplos de grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6) e seus grafos duais, além do número de vértices defeituosos nos grafos duais.

**Lema 5.1** *Sejam  $G^*$  o dual de um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) e  $D \subset V(G^*)$  o conjunto dos vértices defeituosos de  $G^*$ . Então  $\sum_{u \in D} (6 - d(u)) = 12$ .*

<sup>1</sup>Este resultado deu origem ao artigo Packing and Covering Odd Cycle in Cubic Plane Graph With Small Faces desenvolvido em colaboração com o professor Matej Stelíík, encontra-se disponível em <https://arxiv.org/abs/1701.07748> e está submetido ao European Journal of Combinatorics.

<sup>2</sup>Disponível em <https://arxiv.org/pdf/1701.07748.pdf>.

*Demonstração.*

Seja  $G$  um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) com  $p$  faces pentagonais,  $s$  faces quadrangulares,  $t$  faces triangulares e  $h$  faces hexagonais.

Então  $G^*$  possuirá  $\frac{5p+4s+3t+6h}{3}$  vértices,  $p + s + t + h$  faces e  $\frac{5p+4s+3t+6h}{2}$  arestas.

Aplicando a relação de Euler  $|V| + |F| - |E| = 2$  em  $G^*$  temos:

$$\frac{5p + 4s + 3t + 6h}{3} + p + s + t + h - \frac{5p + 4s + 3t + 6h}{2} = 2,$$

$$p + 2s + 3t = 12.$$

Assim,  $p + 2s + 3t = p(6 - 5) + s(6 - 4) + t(6 - 3) = 12$ . E portanto temos:

$$\sum_{u \in D} (6 - d(u)) = 12.$$

□

O Lema 5.1 poderia ser facilmente demonstrado utilizando os Teoremas 2.3 e 2.4.

A *versão dual* do problema da frustração bipartida de arestas para um grafo consiste em determinar o menor número de arestas a serem deletadas de seu grafo dual de modo que todos os vértices do grafo remanescente tenham grau par. O número mínimo de arestas a serem deletadas de um grafo  $G$  de modo que o grafo remanescente não possua vértices de grau ímpar é denotado por  $\tau(G)$  - a *frustração* de  $G$ .

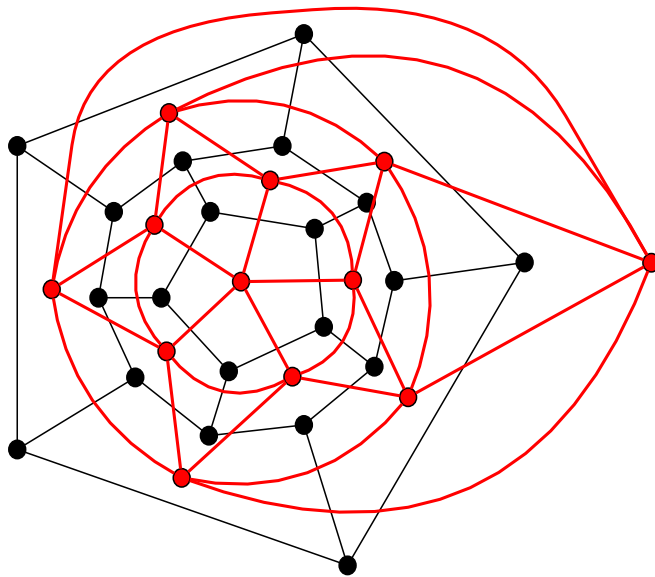


Figura 5.2: Um grafo fullerene (dodecaedro), de preto, e o seu dual, de vermelho.

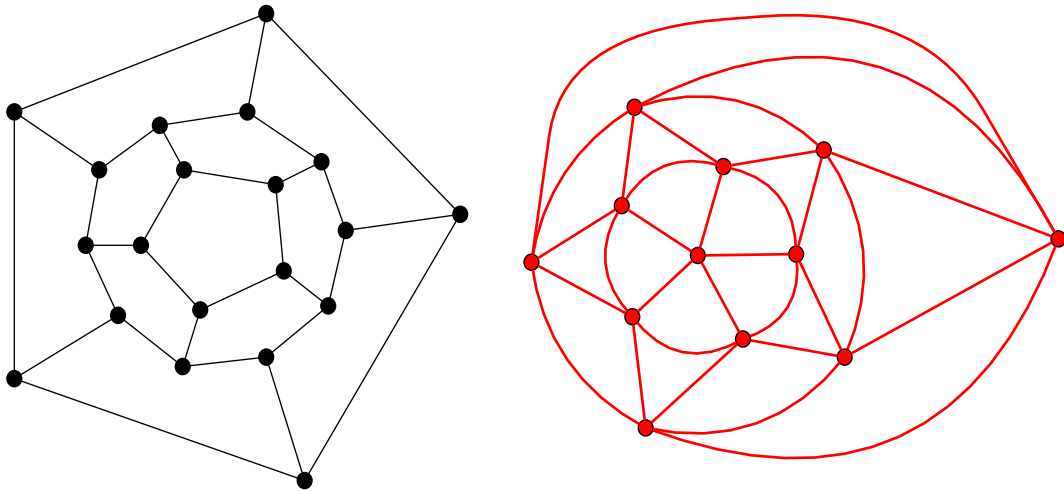


Figura 5.3: Os grafos da Figura 5.2 separados. Em (a), o grafo fullerene (dodecaedro) e, em (b), o seu correspondente dual. Observe que em (b) todos os vértices são defeituosos, pois todos os vértices têm grau menor que 6.

O problema da frustração bipartida de arestas para os grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6) será resolvido a partir de sua versão dual.

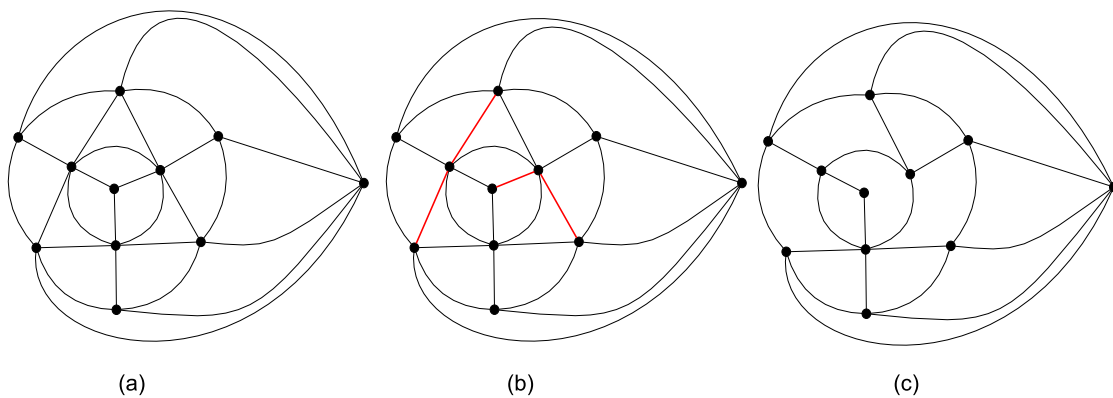


Figura 5.4: Em (a), uma triangulação planar  $G^*$ , dual do grafo da Figura 5.1a, contendo um vértice de grau 3 e três vértices de grau 5. Em (b), de vermelho, um conjunto de arestas, de cardinalidade mínima, que se removidas de  $G^*$  farão com que o grafo remanescente não tenha vértices de grau ímpar. Em (c), o grafo remanescente após a remoção das arestas vermelhas. Neste exemplo,  $\tau(G^*) = 4$ . Repare que o dual do grafo obtido em (c) será bipartido, pois o grafo em (c) não possui vértice de grau ímpar.

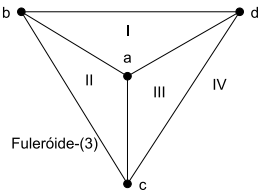
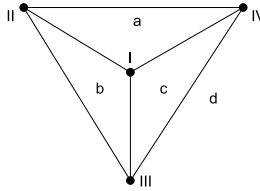
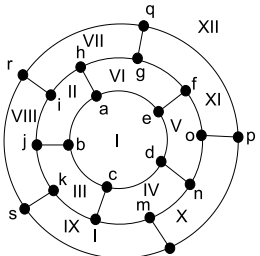
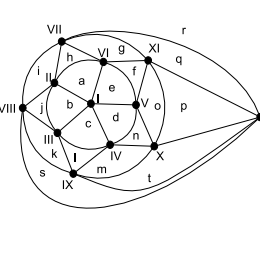
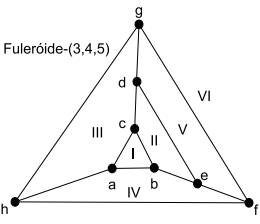
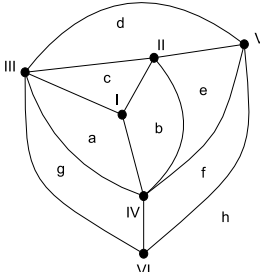
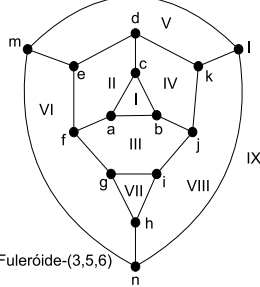
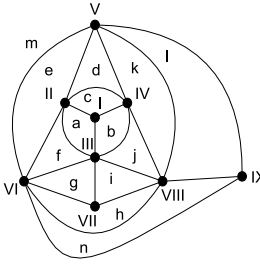
Fuleróides $G$		Duais $G^*$		# t	# s	# p	# h	#V( $G^*$ )	#E( $G^*$ )	#D( $G^*$ )
	Fuleróide-(3)			4	0	0	0	4	6	4
	Fuleróide-(5)			0	0	12	0	12	30	12
	Fuleróide-(3,4,5)			2	2	2	0	6	12	6
	Fuleróide-(3,5,6)			3	0	3	3	9	21	6

Tabela 5.1: Fuleróides-(3, 4, 5, 6) e seus duais. São dados os números de vértices de graus 3, 4, 5 e 6 dos grafos duais. Contabilizamos, também, os tamanhos dos conjuntos de vértices, arestas e de vértices defeituosos de cada dual  $G^*$ .

### 5.1.1 $T$ -Junções e $T$ -Cortes

Nesta seção, apresentamos alguns conceitos de otimização combinatória fundamentais para todo o trabalho:  $T$ -junções e  $T$ -cortes (do inglês  $T$ -joins e  $T$ -cuts [33–35]).

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  $G[J]$  (Figura 5.5).

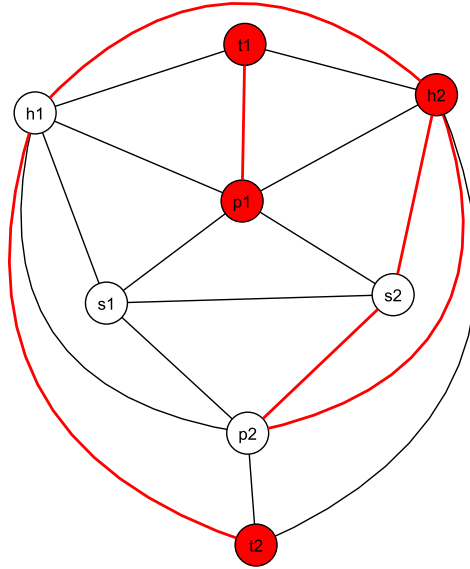


Figura 5.5: Os vértices de vermelho representam o conjunto  $T = \{t_1, t_2, p_1, h_2\}$  e as arestas de vermelho representam uma  $T$ -junção de  $G$ .

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 5.6.

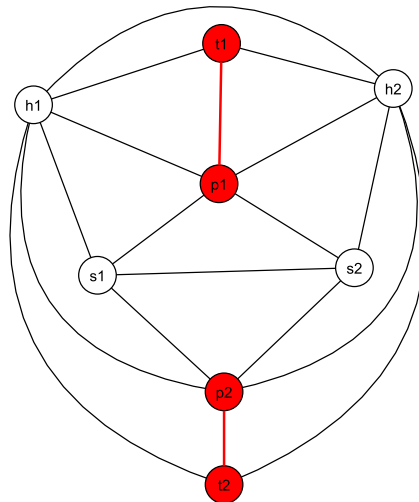


Figura 5.6: O conjunto de vértices de vermelho  $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$  é o conjunto de todos os vértices de grau ímpar de  $G$ . As arestas de vermelho representam a menor  $T$ -junção de  $G$ . Neste exemplo,  $\tau(G, T) = 2$ .

Seja  $\delta_G(X)$  o conjunto de arestas em um grafo  $G$  com exatamente um vértice em  $X \subseteq V(G)$ . Se  $H = G[X]$  podemos escrever  $\delta_G(H)$  para representar  $\delta_G(X)$ . Um conjunto  $C$  de arestas de  $G$  é um *corte de aresta* de  $G$  se  $C = \delta_G(X)$ , para algum  $X \subseteq V(G)$ . Quando não houver risco de ambiguidade omitiremos os subscritos nas notações acima.

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 (Figura 5.7).

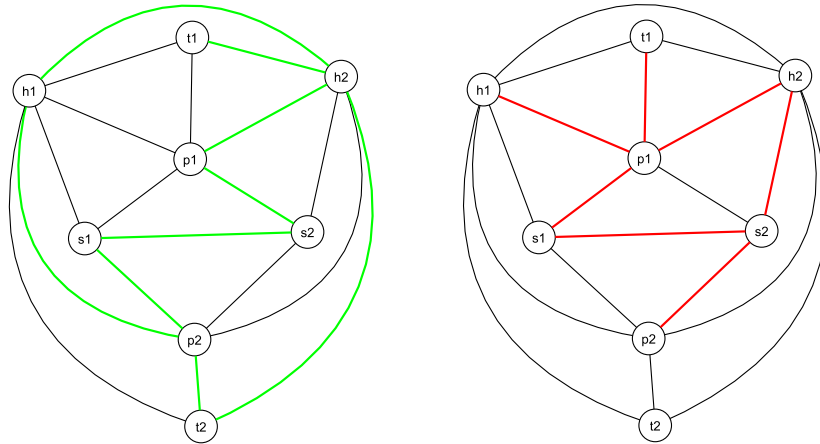


Figura 5.7: Dois exemplos de  $T$ -cortes, com  $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$ . As arestas verdes representam o  $T$ -corte obtido a partir do conjunto  $X = \{t_1, p_1, t_2, s_1, h_1\}$  e as arestas vermelhas representam o  $T$ -corte obtido a partir do conjunto  $X = \{p_1, s_2\}$ .

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  $G$ . 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  $G$ . O leitor é convidado a observar a Figura 5.8 para um entendimento pleno do conceito de empacotamento de  $T$ -cortes de um grafo.

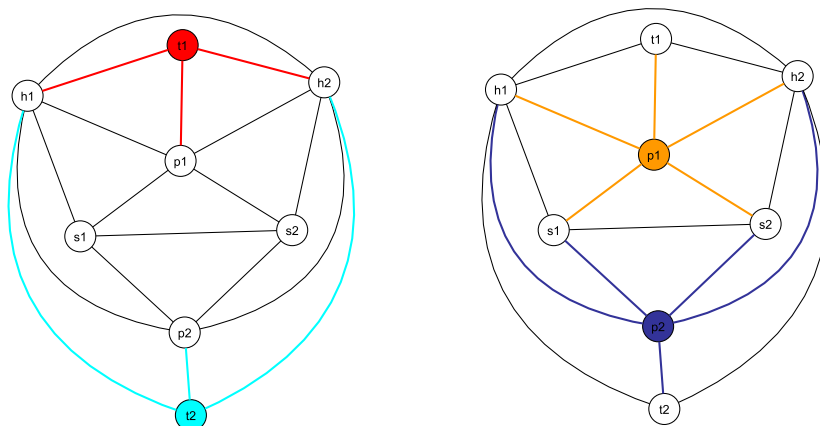


Figura 5.8:  $T = \{t_1, t_2, p_1, p_2\}$  é o conjunto dos vértices de grau ímpar de  $G$ . À esquerda o empacotamento  $\{\delta(\{t_1\}), \delta(\{t_2\})\}$  de  $T$ -cortes de  $G$  representado pelas arestas vermelhas e azuis, e à direita o empacotamento  $\{\delta(\{p_1\}), \delta(\{p_2\})\}$  de  $T$ -cortes de  $G$  representado pelas arestas laranjas e roxas. Observe que ambos os empacotamentos são máximos e têm tamanho 2, logo  $\nu(G, T) = 2$ .

Como cada  $T$ -junção intersepta cada  $T$ -corte, a desigualdade  $\nu(G, T) \leq \tau(G, T)$  sempre é satisfeita, mas o gap entre  $\nu(G, T)$  e  $\tau(G, T)$  pode ser arbitrariamente grande. Seymour [36] observou que a igualdade mantém-se para grafos bipartidos.

**Teorema 5.2 (Seymour [36])** *Para todo grafo bipartido  $G$  e todo subconjunto  $T \subseteq V(G)$  tal que  $|T|$  é par, tem-se  $\tau(G, T) = \nu(G, T)$ .*

A Figura 5.9 fornece um exemplo da aplicação do Teorema de Seymour 5.2.

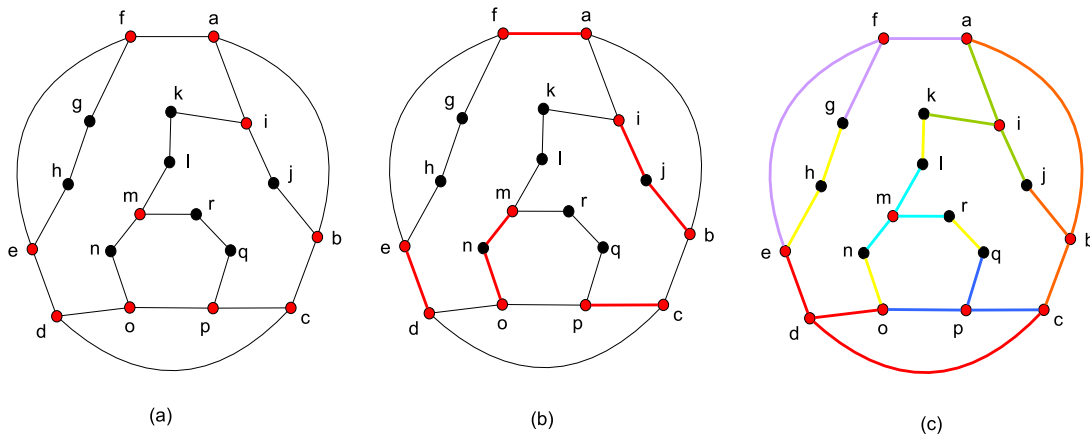


Figura 5.9: Em (a), um grafo bipartido  $G$  e seu conjunto de vértices de grau ímpar  $T = \{a, b, c, d, e, f, i, m, o, p\}$ . Em (b), de vermelho, uma  $T$ -junção de tamanho mínimo. Neste caso,  $\tau(G, T) = 7$ . Em (c), exibimos um empacotamento  $\{\delta(X_1), \delta(X_2), \delta(X_3), \delta(X_4), \delta(X_5), \delta(X_6), \delta(X_7)\}$  de  $T$ -cortes de  $G$ , com  $X_1 = \{f\}$ ,  $X_2 = \{i\}$ ,  $X_3 = \{b\}$ ,  $X_4 = \{p\}$ ,  $X_5 = \{m\}$ ,  $X_6 = \{d\}$  e  $X_7 = \{o, p, q, c, b, j, i, k, a, f, e, g, d\}$ . Note que este é um empacotamento de tamanho máximo, portanto  $\nu(G, T) = 7$ , satisfazendo o Teorema de Seymour 5.2.

O dual de um fulleróide-(3, 4, 5, 6) é uma triangulação planar, portanto não é um grafo bipartido. Por este motivo a igualdade entre  $\nu(G, T)$  e  $\tau(G, T)$  não pode ser garantida.

Como desejamos utilizar a igualdade de Seymour [36] transformamos os duais dos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6) em grafos bipartidos, utilizando a mesma técnica feita por Faria, Klein e Stehlík em [12] para os grafos fullerenes: tomamos o grafo  $G$ , dual de um fulleróide-(3, 4, 5, 6), e construímos o grafo  $G'$  subdividindo as arestas de  $G$ , isto é, substituindo as arestas de  $G$  por caminhos internamente disjuntos de comprimento 2. O grafo  $G'$  é bipartido, pois todas as suas faces têm tamanho 6. Em seguida, construímos o grafo  $G^\Delta$  a partir de  $G'$  adicionando três novas arestas dentro de cada face de  $G'$ , incidentes a cada um dos 3 vértices de grau 2, como mostra a Figura 5.10. Chamamos o grafo  $G^\Delta$  de *refinamento* de  $G$ . Todos os vértices em  $V(G^\Delta) - V(G)$  tem grau 6 em  $G^\Delta$ , portanto se  $D$  é o conjunto dos vértices defeituosos de  $G$ , então  $D$  é também o conjunto dos vértices defeituosos de  $G^\Delta$ .



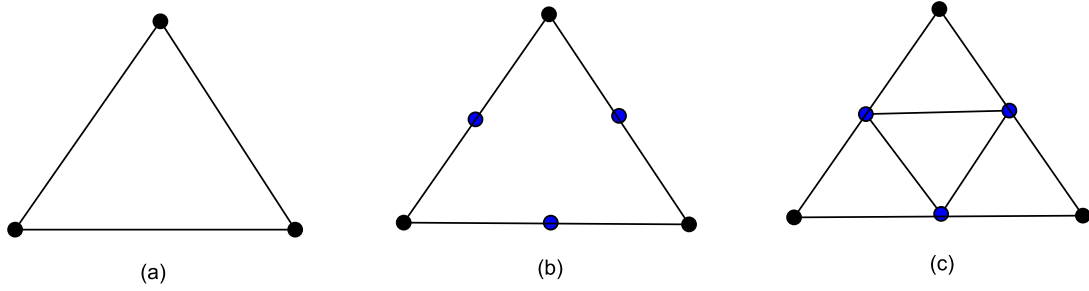


Figura 5.10: Em (a), uma face da triangulação  $G$ . Em (b), sua subdivisão  $G'$  e, em (c), seu refinamento  $G^\Delta$ .

Uma *inclusão minimal* (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 uma *inclusão 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  $X \cap Y = \emptyset$ . Fiorini, Hardy e Reed [37] 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  $G^\Delta$  que é laminar, ótimo e consiste apenas de inclusões minimais. Convidamos o leitor a retornar à Figura 5.9 e observar que o empacotamento de  $T$ -cortes do grafo  $G$ , exibido em (c), é um empacotamento laminar, ótimo, formado por inclusões minimais.

O Lema 5.3 foi provado por Klein, Faria e Stehlík [12].

**Lema 5.3** *Para toda triangulação planar  $G$  e todo subconjunto  $T \subseteq V(G)$  tal que  $|T|$  é par,  $\tau(G, T) = \frac{1}{2}\nu(G^\Delta, T)$ . Além disso, existe um empacotamento de  $T$ -cortes em  $G^\Delta$  que é laminar, ótimo formado por inclusões minimais.*

A Figura 5.11 evidencia o Lema 5.3.

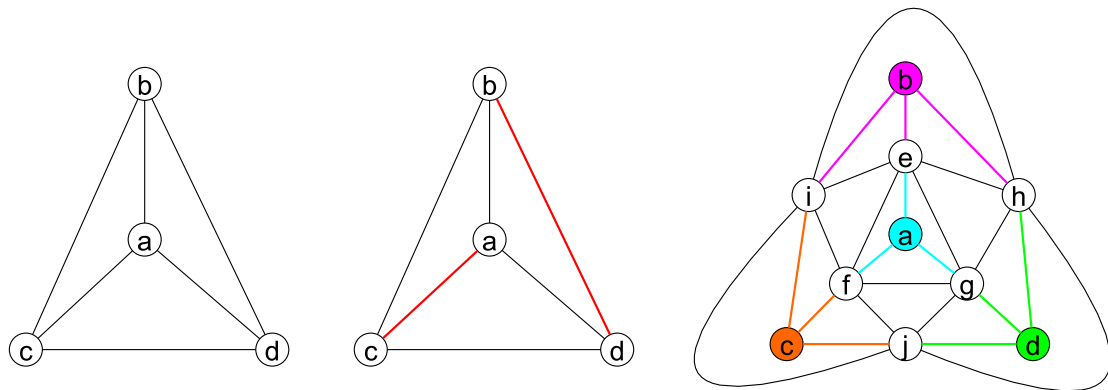


Figura 5.11: Em (a), uma triangulação  $G$  tal que todos os seus vértices têm grau ímpar, logo  $T = V(G)$ . Em (b), destacamos uma  $T$ -junção de tamanho mínimo, portanto  $\tau(G, T) = 2$ . Em (c), o refinamento do grafo  $G$ , representado por  $G^\Delta$ . Exibimos um empacotamento  $\{\delta(\{a\}), \delta(\{b\}), \delta(\{c\}), \delta(\{d\})\}$  de  $T$ -cortes de  $G$  que é laminar, ótimo formado por inclusões minimais. Portanto,  $\nu(G^\Delta) = 4$ , satisfazendo o Lema 5.3

## 5.1.2 Remendos e Fossos

Por toda esta subseção  $G$  é uma triangulação planar com todos os vértices de grau menor ou igual a 6.

Já vimos no Capítulo 2, Teorema 2.4, que a curvatura combinatória de um vértice  $u \in V(G)$  é dada por  $\phi_G(u) = \frac{6 - d(u)}{6}$ .

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  $c = \sum_{u \in V(H)} 6\phi_G(u)$ , então  $H$  é um  $c$ -remendo de  $G$ .

Convém observar que a classificação de um  $c$ -remendo  $H$  considera completamente os graus dos vértices da fronteira de  $H$  (ou ciclo exterior de  $H$ ).

A área do remendo  $H$ , denotada por  $A(H)$ , é definida como o número de triângulos em  $H$ . A Figura 5.12 ilustra a definição de *remendo* e suas propriedades.

No dual de um grafo fullerene os tipos de remendos dar-se-ão pela quantidade de vértices de grau 5 em cada remendo (incluindo os da fronteira de  $H$ ), acompanhe na Figura 5.12.

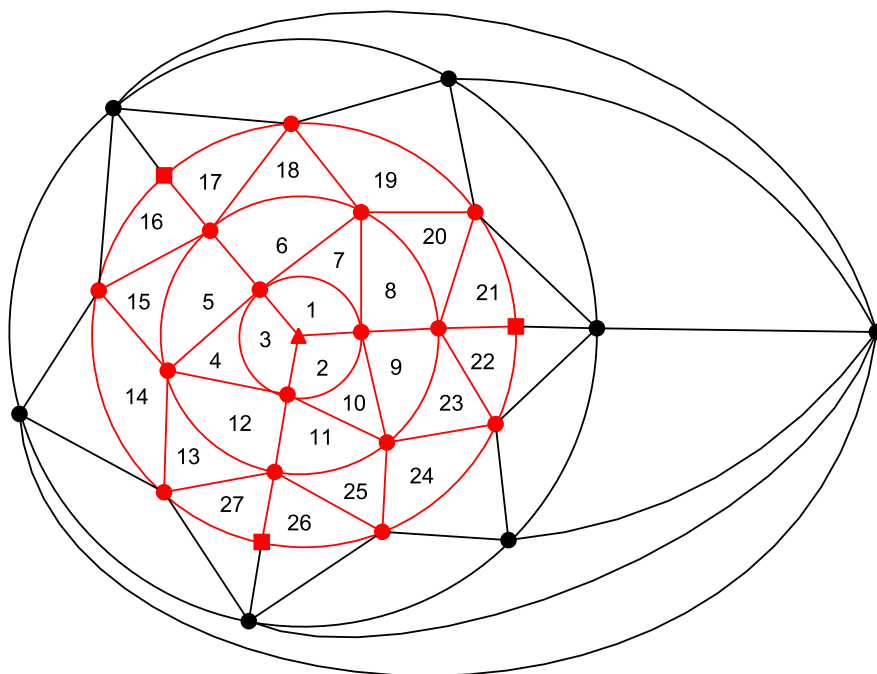


Figura 5.12: De vermelho, um remendo  $H \subset G$ . Em  $H$  há um vértice de grau 3 e três vértices de grau 4. Os demais vértices têm grau 6, logo  $\sum_{u \in V(H)} (6 - d(u)) = 9$ . Portanto,  $H$  é um 9-remendo de  $G$ . Além disso,  $A(H) = 27$ .

O resultado a seguir fornece um limite para o comprimento da fronteira de um remendo considerando que não exista, na fronteira do remendo, vértices defeituosos.

**Teorema 5.4 (Justus [38])** *Sejam  $G$  uma triangulação tal que  $3 \leq d_G(u) \leq 5$ , para todo vértice  $u \in V(G)$ , e  $H \subseteq G$  um  $c$ -remendo de  $G$ , com  $1 \leq c \leq 5$ . Se a Fronteira de  $H$ , representada por  $\partial H$ , não possui vértices defeituosos de  $G$ , então*

$$|\partial H| \geq \sqrt{(6-c)A(H)}.$$

*Se a igualdade é verificada, então no máximo 1 vértice do  $c$ -remendo  $H$  é defeituoso (tem grau menor que 6).*

Muito embora o Teorema 5.4 estabeleça uma relação entre a quantidade de vértices da fronteira de um remendo com os vértices deste remendo, faz-se necessário considerar a possibilidade de haver, na fronteira do remendo, vértices defeituosos de  $G$  (vértices de  $G$  de grau estritamente menor que 6). Observamos que o Teorema 5.4, de Justus, implica imediatamente na validade do Corolário 5.5 que expressa o tamanho da fronteira de um  $c$ -remendo levando em conta a possível existência de vértices defeituosos na fronteira do remendo.

**Corolário 5.5 (Desigualdade Isoperimétrica)** *Sejam  $G$  uma triangulação com  $\Delta \leq 6$  e  $H \subseteq G$  um  $c$ -remendo de  $G$  com  $1 \leq c \leq 5$ . Se  $\partial H$  é a fronteira de  $H$ , então*

$$|\partial H| \geq \sqrt{(6-c)A(H)}.$$

*Se a igualdade é verificada, então no máximo 1 vértice do interior de  $H$  é defeituoso.*

Na Figura 5.13 temos um 3-remendo  $H_1$  de  $G$  e um um 9-remendo  $H_2$  de  $G$ . Observe que  $A(H_1) = 12$  e, pelo Teorema de Justus 5.4, existem exatamente  $\sqrt{(6-3)A(H)} = \sqrt{3 \cdot 12} = 6$  vértices na fronteira de  $H_1$ . A área de  $H_2$  é igual a 27 e, pela Desigualdade Isoperimétrica 5.5, há na fronteira de  $H_2$  exatamente  $\sqrt{(6-9)A(H)} = \sqrt{3 \cdot 27} = 9$  vértices. Observe que em  $H_1$  aplicamos o Teorema de Justus 5.4, pois na fronteira de  $H_1$  todos os vértices têm grau 6, enquanto para  $H_2$  aplicamos a Desigualdade Isoperimétrica 5.5, pois na fronteira de  $H_2$  temos três vértices defeituosos (de grau menor que 6).

Sejam  $X \subset V(G)$  e  $G[X]$  um remendo de  $G$ . Um *fosso* de largura  $k$  em  $G$  ao redor do remendo  $G[X]$ <sup>3</sup> é um subconjunto de  $E(G)$  definido como:

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

<sup>3</sup>A expressão fosso de largura  $k$  em  $G$  ao redor do remendo  $G[X]$  é uma tradução do inglês moat of width  $k$  in  $G$  surrounding  $G[X]$ .

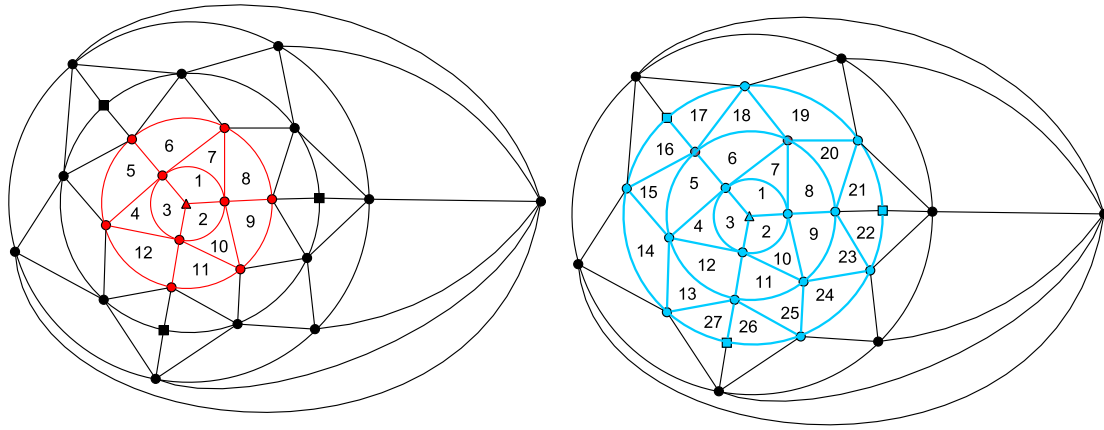


Figura 5.13: À esquerda, de vermelho, temos um 3-remendo  $H_1$  de  $G$  e, à direita, de azul, temos um 9-remendo  $H_2$  de  $G$ .

Além disso, um  $c$ -fosso é um fosso obtido ao redor de um  $c$ -remendo (Figura 5.14).

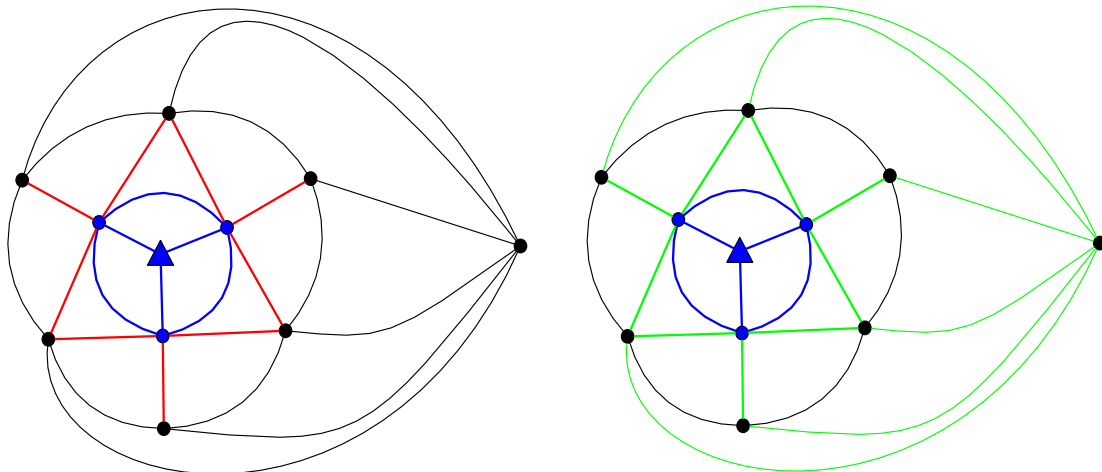


Figura 5.14: Nas duas figuras os subgrafos azuis representam 3-remendos  $G[X]$ . As arestas de vermelho indicam um 3-fosso de largura 1 e as arestas de verde um 3-fosso de largura 2.

Geometricamente, 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  $X$ . Outro exemplo é dado na Figura 5.15.

A Propriedade 5.6 relaciona o número de arestas de um *fosso* com a quantidade de faces ali contidas.

**Propriedade 5.6** *Para todo fosso  $\delta_G^k(X)$  corresponde um conjunto  $|\delta_G^k(X)|$  de faces, isto é, existe uma correspondência biunívoca entre o número de arestas em um fosso e a quantidade de faces pertencentes a este fosso. Dizemos que as faces incidentes a pelo menos uma aresta do fosso  $\delta_G^k(X)$  são geradas pelo fosso  $\delta_G^k(X)$ .*

A Propriedade 5.6 é facilmente verificada se observarmos que as arestas que compõem um fosso são aquelas que se afastam mais rapidamente do remendo que o gerou.

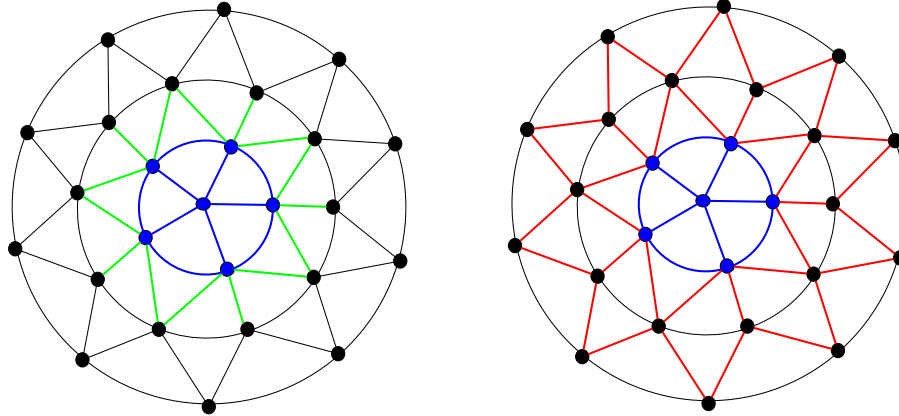


Figura 5.15: De azul, à esquerda e à direita, temos dois 1-remendo  $G[X]$ . De verde o 1-fosso de largura 1 consiste de todas as arestas dos caminhos da fronteira do 1-remendo  $G[X]$  aos vértices a uma distância 1 do conjunto  $X$  e de vermelho o 1-fosso de largura 2 é composto pelas arestas dos caminhos da fronteira de  $G[X]$  aos vértices que distam 2 unidades de  $X$ .

O número de arestas (ou de faces) em um fosso, ao redor de um remendo que contém um único vértice defeituoso em seu interior, é determinado pelo lema a seguir:

**Lema 5.7** *Sejam  $G$  uma triangulação planar com  $\Delta \leq 6$  e  $D$  o conjunto dos vértices defeituosos de  $G$ . Se  $d_G(u) = d$ , e nenhuma aresta de  $\delta^{k-1}(u)$  é incidente a vértices do conjunto  $D - \{u\}$ , então  $|\delta_G^k(u)| = dk^2$ .*

*Demonstração.* Vamos começar observando que  $|\delta(N^k[u])| = d(2k + 1)$ .

Portanto,

$$\begin{aligned} |\delta^k(u)| &= \sum_{i=0}^{k-1} |\delta(N^i[u])| \\ &= d \sum_{i=0}^{k-1} (2i + 1) = dk^2. \end{aligned}$$

□

O Lema 5.8 fornece o número de arestas (ou de faces) em fossos cujas fronteiras não contêm vértices defeituosos do grafo.

**Lema 5.8** *Sejam  $G$  uma triangulação planar com todos os vértices de grau menor ou igual a 6,  $D$  o conjunto dos vértices defeituosos de  $G$  e  $\partial G[X]$  a fronteira do*

$c$ -remendo,  $G[X]$ , induzido por  $X \subset V(G)$ , com  $0 < c < 6$ . Se  $\partial G[X] \cap D = \emptyset$  e nenhuma aresta do fosso  $\delta^{k-1}(X)$  é incidente a vértices de  $D$ , então o número de arestas (ou faces) do  $c$ -remendo  $G[X]$  satisfaz a desigualdade:

$$|\delta_G^k(X)| \geq (6 - c)k^2 + 2k\sqrt{(6 - c)A(G[X])}.$$

Se a igualdade é verificada, então no máximo 1 vértice de  $G[X]$  é defeituoso.

*Demonstração.* Seja  $\partial G[X]$  a fronteira (ou o ciclo exterior) do  $c$ -remendo  $G[X]$ . Sejam  $n$ ,  $m$  e  $f$ , respectivamente, o número de vértices, arestas e faces (incluindo a face exterior) de  $G[X]$ .

Somando os graus dos vértices do  $c$ -remendo  $G[X]$ , temos:

$$\begin{aligned} 2m &= \sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) + \sum_{v \in \text{int}(G[X])} d(v) \\ &= \sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) + \sum_{v \in D(G[X])} d(v) + 6(n - |D(G[X])| - |\partial G[X]|) \\ &= \sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) + 6(n - |\partial G[X]|) - \sum_{v \in D(G[X])} (6 - d(v)) \\ &= \sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) + 6(n - |\partial G[X]|) - c. \end{aligned}$$

logo,

$$\sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) = 6|\partial G[X]| + c - 6n + 2m. \quad (5.1)$$

Além disso,  $G[X]$  é um grafo conexo e planar, então somando os graus das faces, temos:  $2m = 3(f - 1) + |\partial G[X]|$ .

Reescrevendo a equação acima, obtemos:

$$0 = -2|\partial G[X]| + 4m - 6f + 6. \quad (5.2)$$

Somando (5.1) e (5.2),

$$\sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) = 4|\partial G[X]| + c - 6(n - m + f - 1).$$

Logo,

$$\sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) = 4|\partial G[X]| + c - 6, \quad (5.3)$$

onde a última igualdade segue da relação de Euler.

Além disso, vale observar que:

$$\sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v) + \sum_{v \in \partial G[X]} (6 - d_{G[X]}(v)) = 6|\partial G[X]|.$$

Daí segue que:

$$\sum_{v \in \partial G[X]} (6 - d_{G[X]}(v)) = 6|\partial G[X]| - \sum_{v \in \partial G[X]} d_{G[X]}(v). \quad (5.4)$$

Aplicando a Equação (5.4) ao  $c$ -remendo  $G[X]$  e utilizando a relação em (5.3), temos:

$$\sum_{v \in \partial G[X]} (6 - d_{G[X]}(v)) = 6|\partial G[X]| - (4|\partial G[X]| + c - 6) = 2|\partial G[X]| + 6 - c. \quad (5.5)$$

Por outro lado,

$$\sum_{v \in N(X)} d_{G \setminus G[X]}(v) + \sum_{v \in N(X)} (6 - d_{G \setminus G[X]}(v)) = 6|N(X)|.$$

Logo,

$$\sum_{v \in N(X)} (6 - d_{G \setminus G[X]}(v)) = 6|N(X)| - \sum_{v \in N(X)} d_{G \setminus G[X]}(v). \quad (5.6)$$

Pelo Teorema 2.3, como  $G[X]$  é um  $c$ -remendo, temos que  $G \setminus G[X]$  é um  $(12 - c)$ -remendo.

Aplicando a Equação (5.3) ao  $(12 - c)$ -remendo  $G \setminus G[X]$ , obtemos:

$$\sum_{v \in N(X)} d_{G[X]}(v) = 4|N(X)| + (12 - c) - 6 = 4|N(X)| + 6 - c. \quad (5.7)$$

Substituindo a Equação (5.7) na Equação (5.6), decorre que:

$$\sum_{v \in N(X)} (6 - d_{G \setminus G[X]}(v)) = 2|N(X)| + c - 6. \quad (5.8)$$

Observando que

$$\sum_{v \in V(C)} (6 - d_{G[X]}(v)) = \sum_{v \in N(X)} (6 - d_{G-X}(v)),$$

por (5.5) e por (5.8) concluímos que:

$$\begin{aligned}
2|\partial G[X]| + 6 - c &= \sum_{v \in \partial G[X]} (6 - d_{G[X]}(v)) \\
&= \sum_{v \in N(X)} (6 - d_{G \setminus G[X]}(v)) \\
&= 2|N(X)| - 6 + c,
\end{aligned}$$

consequentemente  $|N(X)| = |\partial G[X]| + 6 - c$  e por indução finita,

$$|N^k(X)| = |\partial G[X]| + (6 - c)k. \quad (5.9)$$

Por (5.3) e (5.9), o número de arestas em  $\delta(N^k[X])$  é igual a

$$\begin{aligned}
|\delta(N^k[X])| &= \sum_{v \in N^k(X)} (6 - d_{G[X]}(v)) \\
&= 2|N^k(X)| + 6 - c \\
&= 2|\partial G[X]| + (6 - c)(2k + 1).
\end{aligned}$$

Assim, o número de arestas em  $\delta^k(X)$  é dado por

$$\begin{aligned}
|\delta^k(X)| &= \sum_{i=0}^{k-1} |\delta(N^i[X])| \\
&= \sum_{i=0}^{k-1} (2|\partial G[X]| + (6 - c)(2i + 1)) \\
&= 2k|\partial G[X]| + (6 - c)k^2.
\end{aligned}$$

Pelo Teorema 5.4,  $|\partial G[X]| \geq \sqrt{(6 - c)A(G[X])}$ . Se vale a igualdade então no máximo 1 vértice do  $c$ -remendo  $G[X]$  é defeituoso. □

O corolário a seguir generaliza o resultado estabelecido pelo Lema 5.8, permitindo a existência de vértices defeituosos na fronteira do remendo e fornece o número de arestas (ou de faces) em um fosso sem restrições.

**Corolário 5.9** *Se  $G$  é uma triangulação planar com todos os vértices de grau menor ou igual a 6 e  $G[X]$  é um  $c$ -remendo de  $G$  induzido por  $X \subset V(G)$ , tal que  $0 < c < 6$ , então*

$$|\delta_G^k(X)| \geq (6 - c)k^2 + 2k\sqrt{(6 - c)A(G[X])}.$$

*Se a igualdade é verificada, então no máximo 1 vértice do interior de  $G[X]$  é defeituoso.*



### 5.1.3 Triangulação Planar em grafos com $\Delta \leq 6$

Já discutimos que quando  $G$  é uma triangulação planar e  $T$  é o conjunto dos vértices de grau ímpar em  $G$ , existe pelo Lema 5.3, um empacotamento de  $T$ -cortes em  $G^\Delta$  que é laminar, ótimo, consistindo apenas de inclusões minimais. Além disso, podemos supor que a família  $\mathcal{F}$  que dá origem a este empacotamento satisfaz:

$$\sum_{u \in X} (6 - d_{G^\Delta}(u)) \leq 5, \text{ para todo } X \in \mathcal{F} \text{ e minimiza } \sum_{X \in \mathcal{F}} |X|.$$

Faria, Klein e Stehlík [12] chamam um tal empacotamento de um *empacotamento de fossos*, pelas seguintes razões: para todo subconjunto  $U \subset T$  de cardinalidade ímpar, a união de todos os  $T$ -cortes em  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$  que separam  $U$  de  $T - U$  é da forma  $\delta_{G^\Delta}^k(X)$ , onde  $U \subseteq X \in \mathcal{F}$  e  $k \in \mathbb{N}$ , i.e., é um fosso de largura  $k$  ao redor de  $X$ . Pela minimalidade de  $\sum_{X \in \mathcal{F}} |X|$ , cada 1-fosso em  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$  é um disco centrado em um vértice  $u \in T$ , e cada vértice de  $T$  é o centro de um disco de raio pelo menos 1. Também pela minimalidade de  $\sum_{X \in \mathcal{F}} |X|$ , se  $X \in \mathcal{F}$  é tal que  $|X| > 1$ , então  $G[X]$  é 2-conexo. Como todo  $T$ -corte em  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$  é uma inclusão minimal, no máximo uma face de  $G[X]$  (a face exterior) não é um triângulo. Consequentemente,  $G[X]$  é um remendo, para cada  $X \in \mathcal{F}$  tal que  $|X| > 1$ .

Portanto, um empacotamento de fossos de  $T$ -cortes pode ser considerado como um empacotamento de 1-, 3- e 5-fossos em  $G$ .

Provaremos inicialmente a versão dual do Problema da frustração bipartida de arestas para triangulações planares com grau no máximo 6.

**Lema 5.10** *Seja  $G$  uma triangulação planar com  $f$  faces e  $\Delta(G) \leq 6$ . Se  $T$  é o conjunto dos vértices de grau ímpar de  $G$ , então  $\tau(G, T) \leq \sqrt{12f/5}$ , com igualdade se, e somente se,  $f = 60k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ .*

*Demonstração.* Seja  $G^\Delta$  o refinamento de  $G$ . Assim  $G^\Delta$  é uma triangulação planar com  $4f$  faces e todos os vértices de graus 3, 4, 5 ou 6. Pelo Lema 5.3, existe um empacotamento de fossos  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ . Seja  $m_d$  o número de arestas em um  $d$ -fosso de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ , tal que  $0 < d < 6$ .

Definimos os vetores de incidência  $\vec{r}, \vec{s}, \vec{t} \in \mathbb{R}^{|T|}$  da seguinte maneira: para cada vértice de grau ímpar  $u \in T$ , sejam  $r_u, s_u, t_u$  a largura (ou raio) do 1-fosso centrado em  $u$ , a largura do 3-fosso ao redor de  $u$  e a largura do 5-fosso ao redor de  $u$ , respectivamente. Desta maneira, as coordenadas dos vetores  $\vec{r}, \vec{s}, \vec{t}$  guardam informações sobre as larguras dos tipos de fossos existentes em  $G^\Delta$ .

Definimos o *produto interno*  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  em  $\mathbb{R}^{|T|}$  por  $\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = \sum_{u \in T} (6 - d(u)) a_u b_u$ . Também definimos a *norma*  $\| \cdot \|$  por  $\| \vec{a} \| = \langle \vec{a}, \vec{a} \rangle$ . Além disso, a *desigualdade de*

*Cauchy-Schwarz* garante que dados  $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^{|T|}$  vale a relação  $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle^2 \leq \|\vec{u}\|^2 \cdot \|\vec{v}\|^2$  e a igualdade é válida quando os vetores forem linearmente dependentes.

Pelo Lema 5.3, temos que vale a relação,  $\tau(G, T) = \frac{1}{2}\nu(G^\Delta, T)$  sempre que  $G$  for uma triangulação plana e  $T$  um subconjunto de  $V(G)$  de cardinalidade par.

Portanto,

$$\tau(G, T) = \frac{1}{2}\nu(G^\Delta, T) = \frac{1}{2} \left\langle \vec{r} + \frac{1}{3}\vec{s} + \frac{1}{5}\vec{t}, \vec{1} \right\rangle, \quad (5.10)$$

Para provar a desigualdade no Lema 5.10, é suficiente encontrar uma cota superior para  $\langle \vec{r} + \frac{1}{3}\vec{s} + \frac{1}{5}\vec{t}, \vec{1} \rangle$  em função de  $f$ . Para fazer isto, computaremos cotas inferiores para  $m_1, m_3$  e  $m_5$  em função dos vetores  $\vec{r}, \vec{s}$ , e  $\vec{t}$ , e então usaremos o fato de que a soma  $m_1 + m_3 + m_5$  não pode exceder  $4f$ , que é o número de faces de  $G^\Delta$ . Cabe observar que o vetor  $\vec{1} \in \mathbb{R}^{|T|}$  e possui todas as entradas iguais a 1.

Inicialmente suponha que  $\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)$  é um 1-fosso de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ , ou simplesmente que  $\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)$  é um disco de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ , para algum  $u \in P$ . Lembre-se que pelo Lema 5.7,

$$|\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)| = 5(6 - d(u))r_u^2. \quad (5.11)$$

Somando sobre todos os 1-fossos,

$$m_1 = 5 \sum_{u \in T} (6 - d(u))r_u^2 = 5\|\vec{r}\|^2. \quad (5.12)$$

Para calcular  $m_3$ , suponha que  $\delta_{G^\Delta}^{s_u}(X)$  é um 3-fosso de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$  não-vazio. O grafo  $G^\Delta[X]$  contém  $|\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)|$  triângulos gerados por  $\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)$ , para cada  $u \in T \cap X$ . Todos os triângulos são dois-a-dois disjuntos, assim por (5.11) e pela desigualdade de Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} A(G^\Delta[X]) &\geq \sum_{u \in T \cap X} |\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)| = 5 \sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))r_u^2 \\ &\geq \frac{5 \left( \sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))r_u \right)^2}{\sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))} = \frac{5}{3} \left( \sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))r_u \right)^2. \end{aligned}$$

Consequentemente, pelo Corolário 5.9,

$$\begin{aligned} |\delta_{G^\Delta}^{s_u}(X)| &\geq 3s_u^2 + 2s_u \sqrt{3A(G^\Delta[X])} \\ &\geq 3s_u^2 + 2\sqrt{5}s_u \sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))r_u \\ &= \sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))s_u^2 + 2\sqrt{5} \sum_{u \in T \cap X} (6 - d(u))r_us_u. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Somando sobre todos os 3-fossos,

$$m_3 \geq \|\vec{s}\|^2 + 2\sqrt{5}\langle \vec{r}, \vec{s} \rangle. \quad (5.14)$$

Para calcular  $m_5$ , suponha que  $\delta_{G^\Delta}^{t_u}(Y)$  é um 5-fosso de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$  não-vazio. Pela laminaridade de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ ,  $G^\Delta[Y]$  contém no máximo um 3-fosso  $\delta_{G^\Delta}^{s_u}(X)$  de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ . O grafo  $G^\Delta[Y]$  contém  $|\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)|$  triângulos gerados por  $\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)$ , para cada  $u \in T \cap Y$ , bem como pelo menos  $|\delta_{G^\Delta}^{s_u}(X)|$  triângulos gerados por  $\delta_{G^\Delta}^{s_u}(X)$ . Todos os triângulos são dois-a-dois disjuntos, assim por (5.11), (5.13) e pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos:

$$\begin{aligned} A(G^\Delta[Y]) &\geq \sum_{u \in T \cap Y} |\delta_{G^\Delta}^{r_u}(u)| + \sum_{u \in T \cap Y} |\delta_{G^\Delta}^{s_u}(X)| \\ &\geq 5 \sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) r_u^2 + \sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) \left(2\sqrt{5}r_u s_u + s_u^2\right) \\ &= 5 \sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) \left(r_u + \frac{1}{\sqrt{5}}s_u\right)^2 \\ &\geq \frac{5 \left(\sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) \left(r_u + \frac{1}{\sqrt{5}}s_u\right)\right)^2}{\sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u))} \\ &= \left(\sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) \left(r_u + \frac{1}{\sqrt{5}}s_u\right)\right)^2, \end{aligned}$$

Usando novamente o Corolário 5.9,

$$\begin{aligned} |\delta_{G^\Delta}^{t_u}(Y)| &\geq t_u^2 + 2t_u \sqrt{A(G^\Delta[Y])} \\ &\geq t_u^2 + 2t_u \sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) \left(r_u + \frac{1}{\sqrt{5}}s_u\right) \\ &= \frac{1}{5} \sum_{u \in T \cap Y} (6 - d(u)) \left(t_u^2 + 2r_u t_u + \frac{2}{\sqrt{5}}s_u t_u\right). \end{aligned}$$

Somando sobre todos os 5-fossos,

$$m_5 \geq \frac{1}{5}\|\vec{t}\|^2 + 2\langle \vec{r}, \vec{t} \rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}\langle \vec{s}, \vec{t} \rangle. \quad (5.15)$$

O grafo  $G^\Delta$  tem  $4f$  triângulos, e os 1-fossos, 3-fossos e 5-fossos geram  $m_1$ ,  $m_3$  e  $m_5$  triângulos de  $G^\Delta$ , respectivamente. Estes triângulos são mutuamente disjuntos.

Usando (5.12), (5.14), (5.15),

$$\begin{aligned}
4f &\geq m_1 + m_3 + m_5 \\
&\geq 5\|\vec{r}\|^2 + \|\vec{s}\|^2 + 2\sqrt{5}\langle\vec{r}, \vec{s}\rangle + \frac{1}{5}\|\vec{t}\|^2 + 2\langle\vec{r}, \vec{t}\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}}\langle\vec{s}, \vec{t}\rangle \\
&= \left\| \sqrt{5}\vec{r} + \vec{s} + \frac{1}{\sqrt{5}}\vec{t} \right\|^2.
\end{aligned}$$

Consequentemente temos,

$$\sqrt{\frac{4f}{5}} \geq \left\| \vec{r} + \frac{1}{\sqrt{5}}\vec{s} + \frac{1}{5}\vec{t} \right\|. \quad (5.16)$$

Portanto, por (5.10), (5.16) e pela desigualdade de Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned}
\tau(G, T) &= \frac{1}{2} \left\langle \vec{r} + \frac{1}{3}\vec{s} + \frac{1}{5}\vec{t}, \vec{1} \right\rangle \\
&\leq \frac{1}{2} \left\| \vec{r} + \frac{1}{3}\vec{s} + \frac{1}{5}\vec{t} \right\| \|\vec{1}\| \quad (5.17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \left\| \vec{r} + \frac{1}{3}\vec{s} + \frac{1}{5}\vec{t} \right\| \sqrt{\frac{12}{4}} \quad (5.18) \\
&\leq \sqrt{\frac{12f}{5}}.
\end{aligned}$$

Para provar a parte final do Lema 5.10, suponha que  $\tau(G, T) = \sqrt{\frac{12}{5}f}$ . A igualdade deve manter-se em (5.14) e (5.15), assim pelo Corolário 5.9,  $\vec{s} = \vec{t} = 0$ . Além disso, a igualdade deve manter-se em (5.17), desta maneira  $r_u = r_v$  para cada  $u, v \in T$ . Portanto  $4f = 5 \cdot 12r_u^2$ , assim  $f = 15r_u^2$ . Como  $f$  é par, segue que  $r_u = 2k$ , e portanto  $f = 60k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ . Para ver que  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ , note que o grafo  $G$  pode ser construído a partir do icosaedro regular pela inserção em cada face de um 1-remendo da forma  $G[N^k[u]]$ .

Para a volta, se  $G$  é uma triangulação planar com  $f = 60k^2$  faces, com todos os vértices de graus 5 e 6, e  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ , então  $G$  pode ser construído a partir do icosaedro regular inserindo em cada face um 1-remendo da forma  $G[N^k[u]]$ . Como consequência  $d(u, v) \geq 2k$ , para cada par de vértices distintos em  $T$ , assim  $\tau(G, T) \geq 12k = \sqrt{\frac{12}{5}f}$ . □

O resultado central deste capítulo, apresentado a seguir, determina o número máximo de arestas que devem ser removidas de modo a obter um subgrafo gerador bipartido a partir de um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6).

**Teorema 5.11** *Se  $G$  é um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) com  $n$  vértices, então  $\tau_{\text{odd}}(G) \leq \sqrt{12n/5}$ , com igualdade se, e somente se, as faces de  $G$  são pentagonais ou hexagonais,  $n = 60k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ .*

Aplicando o Lema 5.10 ao grafo dual, obtemos a prova do Teorema 5.11.

**Prova do teorema 5.11.** Seja  $G$  um grafo planar, cúbico, 3-conexo com  $n$  vértices e com todas as faces de tamanho 3, 4, 5 ou 6. O grafo dual de  $G^*$  é uma triangulação planar com  $n$  faces e todos os vértices de graus 3, 4, 5 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 Lema 5.10,  $|J| = |J^*| \leq \sqrt{\frac{12n}{5}}$  com igualdade se, e somente se,  $n = 60k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ .  $\square$

Se um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) não contém faces pentagonais, então é possível reduzir a cota superior para o problema da frustração bipartida de arestas, obtida no Teorema 5.11. Inicialmente vamos abordar a versão dual do problema da frustração bipartida de arestas para grafos fulleróides-(3, 4, 6).

**Lema 5.12** *Seja  $G$  uma triangulação planar cujos vértices têm graus 3, 4 ou 6. 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  $\text{Aut}(G) \cong T_d$ .*

*Demonstração.*

Observe que em  $G$  existem apenas empacotamentos de 3-fossos pelas seguintes razões: os empacotamentos de 1-fossos eram obtidos por vértices de grau 5 que não estão presentes em  $G$ , por outro lado, os empacotamentos de 5-fossos de  $G$  seriam gerados por 1 vértice de grau 3, de curvatura  $\frac{3}{6}$ , e por 1 vértice de grau 4, de curvatura  $\frac{2}{6}$ . Neste contexto, para que tenhamos um grafo  $G$  com número arbitrário de vértices, deveríamos garantir que os vértices de grau 3 estejam entre si mais próximos do que a sua distância a qualquer vértice de grau 4. Desta maneira, não há em  $G$  empacotamentos de 1- e de 5-fossos.

Seja  $G^\Delta$  o refinamento de  $G$ . Assim  $G^\Delta$  é uma triangulação planar com  $4f$  faces e todos os vértices de graus 3, 4 ou 6. Pelo Lema 5.3, existe um empacotamento de 3-fossos  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ . Seja  $m_3$  o número de arestas em um 3-fosso de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ . O vetor de incidência  $\vec{s} \in \mathbb{R}^{|T|}$  é definido da seguinte maneira: para cada vértice  $u \in T$  a largura do 3-fosso ao redor de  $u$  será denotada por  $s_u$ .

Utilizaremos o *produto interno canônico* definido em  $\mathbb{R}^{|T|}$  e dado por  $\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = \sum_{u \in T} a_u b_u$  que corresponde a soma dos produtos das coordenadas correspondentes. Este produto interno canônico induz a *norma*  $\|\cdot\|$  dada por  $\|\vec{a}\| = \sqrt{\langle \vec{a}, \vec{a} \rangle}$ . Novamente vale destacar a *desigualdade de Cauchy-Schwarz* que nos afirma que para todo  $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^{|T|}$  vale  $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle^2 \leq \|\vec{u}\|^2 \cdot \|\vec{v}\|^2$ .

Novamente pelo Lema 5.3, temos que:

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

$$\tau(G^*, T) = \frac{1}{2}\nu(G^\Delta, T) = \frac{1}{2} \langle \vec{r}, \vec{1} \rangle, \quad (5.19)$$

Convém mencionar que o vetor  $\vec{1} \in \mathbb{R}^{|T|}$  e possui todas as coordenadas iguais a 1.

Suponha que  $\delta_{G^\Delta}^{s_u}(u)$  é um 3-fosso de  $\delta_{G^\Delta}(\mathcal{F})$ , para algum  $u \in T$ . Pelo Lema 5.7,

$$|\delta_{G^\Delta}^{s_u}(u)| = 3s_u^2,$$

logo somando sobre todos os 3-fossos,

$$m_3 = 3 \sum_{u \in T} s_u^2 = 3 \|\vec{s}\|^2. \quad (5.20)$$

O grafo  $G^\Delta$  possui  $4f$  faces triangulares, e, pela Propriedade 5.6, os 3-fossos de  $G^\Delta$  geram  $m_3$  faces triangulares em  $G^\Delta$ . Estas faces triangulares são mutuamente disjuntas.

Usando (5.20), obtemos,

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

Consequentemente temos,

$$\sqrt{\frac{4f}{3}} \geq \|\vec{s}\|. \quad (5.21)$$

Portanto, por (5.19), (5.21) e pela desigualdade de Cauchy-Schwarz, temos que:

$$\tau(G^*, T) = \frac{1}{2} \langle \vec{s}, \vec{1} \rangle \leq \frac{1}{2} \|\vec{s}\| \|\vec{1}\|. \quad (5.22)$$

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

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

Concluimos que,

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

Para provar a parte final do Lema 5.12, suponha que  $\tau(G, T) = \sqrt{\frac{4}{3}f}$ . Consequentemente as entradas do vetor  $\vec{s}$  devem ser todas iguais, digamos a  $s_u$ , para todo  $u \in T$  e  $\sqrt{\frac{4f}{3}} = \|\vec{s}\|$ . Portanto,  $4f = 3\|\vec{s}\|^2$  e após o cálculo da norma de  $\vec{s}$ , temos que  $4f = 3 \cdot 4s_u^2$ . Como  $f$  é par, segue que  $s_u = 2k$  e, finalmente,  $f = 12k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ . Para ver que  $\text{Aut}(G) \cong T_d$ , note que o grafo  $G$  pode ser construído a partir de algum tetraedro regular pela 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, 4 ou 6, e  $\text{Aut}(G) \cong T_d$ , 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  $\tau(G, T) \geq 4k = \sqrt{\frac{4}{3}f}$ .  $\square$

O Teorema 5.13 fornece uma cota superior para o problema da frustração bipartida de arestas para grafos fulleróides-(3, 4, 6), melhorando o resultado fornecido pelo Teorema 5.11.

**Teorema 5.13** *Se  $G$  é um grafo fulleróide-(3, 4, 6) com  $n$  vértices, então  $\tau_{\text{odd}}(G) \leq \sqrt{\frac{4}{3}n}$ . A igualdade mantém-se se e somente se  $n = 12k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong T_d$ .*

Novamente aplicando o Lema 5.12 ao grafo dual, obtemos a prova do Teorema 5.13.

*Prova do Teorema 5.13.* Seja  $G$  um grafo planar, cúbico, 3-conexo com  $n$  vértices e com todas as faces de tamanho 3, 4 ou 6. O grafo dual de  $G$  é uma triangulação planar com  $n$  faces e todos os vértices de graus 3, 4 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 5.10,  $|J| = |J^*| \leq \sqrt{\frac{4n}{3}}$ , com igualdade se e somente se  $n = 12k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong T_d$ .  $\square$

A Tabela 5.2 fornece limites superiores para o problema da frustração bipartida de arestas para grafos fullerenes (Faria, Klein e Stehlík [12]), fulleróides-(3, 4, 6) e fulleróides-(3, 4, 5, 6) (Teoremas 5.11 e 5.13).

	Fulleróide-(5, 6)	Fulleróide-(3, 4, 6)	Fulleróide-(3, 4, 5, 6)
$\tau_{\text{odd}} \leq$	$\sqrt{\frac{12n}{5}}$	$\sqrt{\frac{4n}{3}}$	$\sqrt{\frac{12n}{5}}$

Tabela 5.2: Limites para o problema da frustração bipartida de arestas.

## 5.2 Conjuntos Independentes

Um conjunto de vértices  $X \subseteq V(G)$  é *independente* se o grafo induzido por  $X$  não tem arestas. O tamanho do maior conjunto independente de  $G$  é o *número de independência* de  $G$  denotado por  $\alpha(G)$ .

O teorema a seguir é consequência do Teorema 5.11 e estende o resultado de Faria, Klein e Stehlík [12], para grafos fuleróides-(3, 4, 5, 6).

**Corolário 5.14** *Se  $G$  é um grafo fuleróide-(3, 4, 5, 6) com  $n$  vértices, então  $\alpha(G) \geq n/2 - \sqrt{3n/5}$ . A igualdade mantém-se se, e somente se,  $n = 60k^2$  para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ .*

*Demonstração.*

Seja  $G$  um grafo planar, cúbico, 3-conexo com  $n$  vértices e com todas as faces de tamanho menor ou igual a 6. O grafo dual de  $G^*$  é uma triangulação planar com  $n$  faces e todos os vértices de graus menor ou igual a 6. Todo grafo  $G$  contém um conjunto transversal (de vértices) de ciclos ímpares  $U$  tal que  $|U| \leq \tau_{\text{odd}}(G)$ , logo  $\alpha(G) \geq \alpha(G-U) \geq \frac{1}{2}n - \frac{1}{2}\tau_{\text{odd}}(G)$ . Portanto, pelo Teorema 5.11,  $\alpha(G) \geq \frac{1}{2}n - \sqrt{\frac{3}{5}n}$ , para todo grafo fuleróide-(3, 4, 5, 6).

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 5.11, a igualdade mantém-se se, e somente se,  $n = 60k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $\text{Aut}(G) \cong I_h$ . □

Informalmente falando, o Corolário 5.14 diz que um grafo planar, 3-conexo, cúbico ou tem um conjunto independente “grande” ou tem uma face de tamanho “grande”. Apresentamos na Figura 5.16 um exemplo do menor fuleróide-(5, 6) que atinge os limites da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo dados pelo Teorema 5.11 e Corolário 5.14.

É possível, para grafos fuleróides-(3, 4, 6), aumentar o valor da cota superior para o problema do conjunto independente máximo fornecido pelo Corolário 5.14. O Corolário 5.15 decorre do Teorema 5.13.

**Corolário 5.15** *Se  $G$  é um grafo fuleróide-(3, 4, 6) contendo  $n$  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  $\text{Aut}(G) \cong T_d$ .*



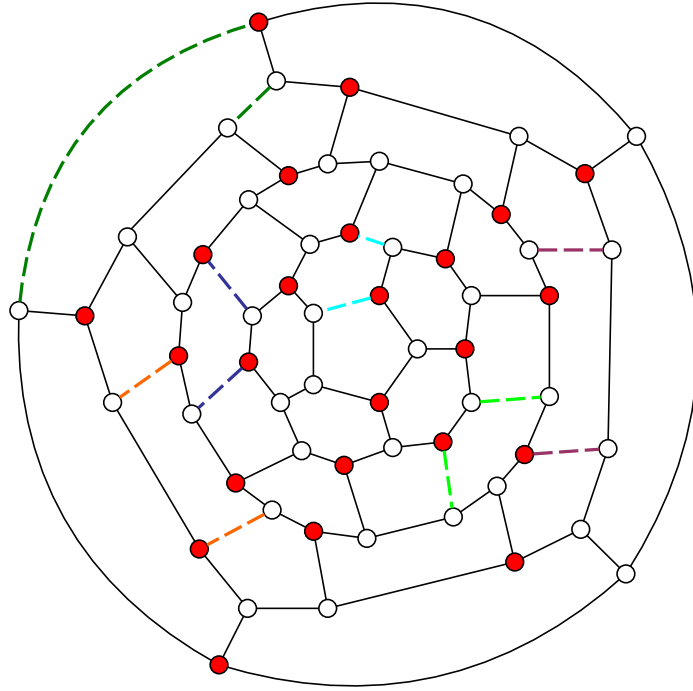


Figura 5.16:  $C_{60} = G_{1,1}$  = Grafo fulleróide-(5,6) contendo 60 vértices. As 12 arestas tracejadas e os 24 vértices de vermelho satisfazem os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo para o  $G_{1,1}$ :  $\tau_{odd}(G_{1,1}) = \sqrt{\frac{12 \cdot 60}{5}} = 12$  e  $\alpha(G_{1,1}) = \frac{60}{2} - \sqrt{\frac{3 \cdot 60}{5}} = 24$ .

*Prova do Corolário 5.15.*

Seja  $G$  um grafo planar, cúbico, 3-conexo com  $n$  vértices e com todas as faces de tamanho 3, 4 ou 6. O grafo dual de  $G$  é uma triangulação planar com  $n$  faces e todos os vértices de graus 3, 4 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 5.13,  $\alpha(G) \geq \frac{1}{2}n - \sqrt{\frac{1}{3}n}$ , para cada grafo fulleróide-(3, 4, 6).

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 5.13, a igualdade mantém-se se, e somente se,  $n = 12k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $Aut(G) \cong T_d$ .

□

A Figura 5.17 exibe um grafo fulleróide-(3, 4, 6) em que os limites estipulados nos Teorema 5.13 e Corolário 5.15 são alcançados.

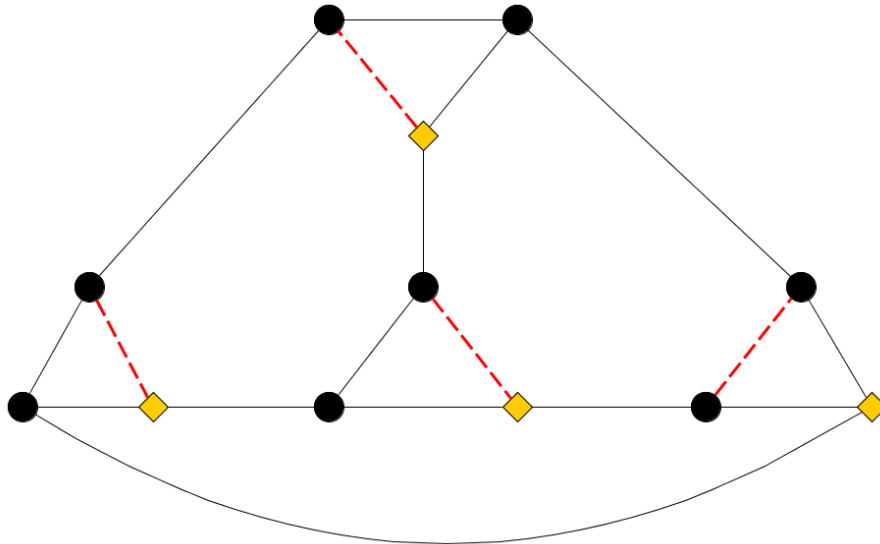


Figura 5.17: Grafo fulleróide-(3, 6) contendo 12 vértices. As arestas tracejadas e os vértices em forma de diamante satisfazem os problemas da frustração de arestas e do conjunto independente máximo para este grafo. Neste exemplo,  $\tau_{odd}(G) = \sqrt{\frac{4 \cdot 12}{3}} = 4$  e  $\alpha(G) = \frac{12}{2} - \sqrt{\frac{12}{3}} = 4$ .

A Tabela 5.3 fornece limites inferiores para o problema do conjunto independente máximo para grafos fullerenes (Faria, Klein e Stehlík [12]), fulleróides-(3, 4, 6) e fulleróides-(3, 4, 5, 6) (Corolários 5.14 e 5.15).

	Fulleróide-(5, 6)	Fulleróide-(3, 4, 6)	Fulleróide-(3, 4, 5, 6)
$\alpha \geq$	$n/2 - \sqrt{3n/5}$	$n/2 - \sqrt{n/3}$	$n/2 - \sqrt{3n/5}$

Tabela 5.3: Limites para o problema do conjunto independente máximo.

# Capítulo 6

## Complexidade Relacionada à Problemas Combinatórios em Fuleróides- $(3, 4, 5, 6)$

Convém observar que as pesquisas apresentadas neste capítulo estão ainda em progresso. Fornecemos ao leitor a ideia de alguns algoritmos que computam em tempo polinomial os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo em grafos fulerenes. Observamos que o algoritmo de Došlić e Vukičević [8] para o problema da frustração bipartida de arestas em grafos fulerenes pode ser estendido para grafos fuleróides- $(3, 4, 5, 6)$ . Apresentamos o problema da coloração total e o estado atual de nossas pesquisas em parceria com o professor Luerbio Faria e com as professoras Sulamita Klein e Diana Sasaki.

### 6.1 Problema da Frustração de Arestas

Vimos, no Capítulo 5, que o *problema da Frustração Bipartida de Arestas* consiste em determinar o menor número de arestas a serem deletadas de um grafo de modo a obter um subgrafo gerador bipartido. Vimos também que um *corte de aresta*  $\delta(X)$  de  $G$  é o conjunto de todas as arestas de  $G$  que têm exatamente uma extremidade em  $X$ , para algum  $X \subseteq V(G)$ . Dizemos que um corte  $C$  de um grafo  $G$  é máximo quando a cardinalidade do conjunto  $C$  é máxima, isto é, não existe em  $G$  um corte com mais arestas do que  $C$ . O *problema do Corte Máximo* consiste em determinar em um grafo um corte máximo.

O problema da *frustração bipartida de arestas* equivale ao problema do corte máximo, pois  $Opt_{MAXCUT}(G) = |E \setminus C|$ . Como o problema do corte máximo é  $NP$ -completo para grafos em geral [39], concluímos que o problema da frustração bipartida de arestas é, também,  $NP$ -completo para grafos em geral. Para grafos

fulerenes o problema da frustração bipartida de arestas pode ser computado em tempo polinomial através do algoritmo de Došlić e Vukičević [8] que descrevemos a seguir.

Vimos, no Capítulo 4, que o problema dual ao problema da frustração de arestas em um grafo  $G$  é o de determinar o número mínimo de arestas a serem removidas de  $G^*$  de modo que todos os vértices do grafo remanescente tenham grau par. Desta maneira, se  $G$  é um grafo planar, então  $\tau_{\text{odd}}(G)$  corresponde ao menor número de arestas deletadas de  $G^*$  de modo a obter um subgrafo gerador sem vértices de grau ímpar.

O Teorema 6.1 fornece a ideia central para a computação em tempo polinomial do problema da frustração bipartida de arestas em grafos fulerenes. Antes dado um grafo  $G$ , definimos o grafo distância pentagonal de  $G$ , representado por  $K_{12}(G)$ , da seguinte maneira:  $K_{12}(G)$  é o grafo obtido a partir do grafo dual de  $G$  de modo que os 12 vértices de  $K_{12}(G)$  correspondam aos 12 vértices de grau 5 de  $G^*$ . Além disso, atribuímos pesos a cada uma das arestas de  $K_{12}(G)$  de modo que a aresta  $(i, j)$  de  $K_{12}(G)$  tem peso  $d_{G^*}(i, j)$ , dado pela distância entre os vértices pentagonais em  $G^*$ .

**Teorema 6.1 (Došlić e Vukičević [8])** *Se  $G$  é um grafo fullerene e  $K_{12}(G)$  é seu grafo distância pentagonal, então o problema da frustração de arestas de  $G$  equivale ao problema do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$ .*

*Demonstração.* Sejam  $G$  um grafo fullerene e  $K_{12}(G)$  o seu correspondente grafo distância pentagonal. O conjunto de arestas de um emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$  fornecerá a quantidade mínima de arestas a serem removidas de  $G^*$  de modo que os vértices no remanescente grafo tenham todos grau par. Isto encerra a prova do teorema.  $\square$

Seja  $G$  um grafo fullerene com  $n$  vértices. Pelo Teorema 6.1, o principal esforço computacional em determinar  $\tau(G)$  está em obter os pesos das arestas de  $K_{12}(G)$ . Esta tarefa pode ser realizada em tempo linear aplicando um algoritmo de busca em largura para computar a distância entre os vértices de grau 5 em  $G^*$ . Como  $G$  é um grafo planar, o número de arestas é  $O(n)$  e o número de pentágonos em um fullerene é  $O(1)$ , conseqüentemente a complexidade de tempo desta etapa é  $O(n)$ .

Resta ainda encontrar o emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$ . Este problema equivale ao problema do emparelhamento de peso máximo também em  $K_{12}(G)$ . Para compreender a equivalência entre estes dois problemas basta realizarmos uma mudança nos pesos: para cada aresta  $(i, j)$  de  $K_{12}(G)$  troque seu peso  $d_{G^*}(i, j)$  por  $P + 1 - d_{G^*}(i, j)$ , onde  $P$  é o peso da aresta mais pesada de  $K_{12}(G)$ .

Além disso,  $K_{12}(G)$  é um grafo completo com número par de vértices, logo o emparelhamento de peso máximo em  $K_{12}(G)$  é um emparelhamento perfeito. Observe que após obtermos o emparelhamento perfeito em  $K_{12}$ , fica a pergunta: em

$G^*$ , os caminhos entre os vértices pentagonais, correspondentes às arestas deste emparelhamento perfeito, são disjuntos? A resposta é sim, pelo seguinte: suponha, por absurdo, que após obtermos o emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$  retornamos ao grafo dual  $G^*$  e haja intersecção entre 2 caminhos entre vértices pentagonais. Digamos, sem perda de generalidade, que a intersecção ocorra entre os caminhos entre os vértices pentagonais  $p_1$  à  $p_2$  e  $p_3$  à  $p_4$ . Se a intersecção for de exatamente 1 vértice  $h \in V(G^*)$ , então é possível obter um caminho, digamos entre  $p_1$  à  $p_3$  e outro de  $p_2$  à  $p_4$  de comprimento menor que o obtido através do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$ , gerando um absurdo. A Figura 6.1 ilustra a situação descrita.

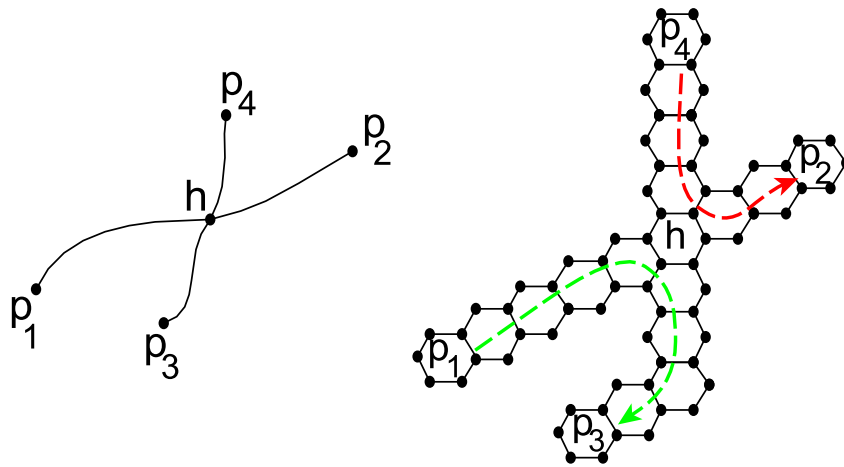


Figura 6.1: À esquerda, em  $G^*$ , os caminhos entre  $p_1$  e  $p_2$  e entre  $p_3$  e  $p_4$  obtidos a partir do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$ . Observe que caso haja algum vértice comum a ambos os caminhos, é possível obter uma soma menor entre os caminhos de  $p_1$  à  $p_3$  e de  $p_2$  à  $p_4$  que a soma obtida através do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$ , situação descrita à direita, em  $G$ .

A Figura 6.2 reitera a ideia de que a intersecção entre os caminhos, em  $G^*$ , obtidos através do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$  são disjuntos.

Edmonds [40] forneceu o primeiro algoritmo que em tempo polinomial ( $O(n^4)$ ) resolve o problema do emparelhamento ponderado em grafos gerais. Gabow [41] mostrou que o problema do emparelhamento ponderado em grafos completos  $K_p$  é resolvível em  $O(p^3)$ .

Došlić e Vukičević [8] observam ainda que como todos os grafos fullerênicos têm 12 faces pentagonais, o tempo necessário para determinar o emparelhamento perfeito de peso mínimo em seus grafos distância pentagonal não depende do número de vértices e simplesmente adiciona uma constante sobre a complexidade  $O(n)$  computada inicialmente.

Convém observar que o algoritmo polinomial descrito por Došlić e Vukičević [8] é válido também para grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6), bastando para isso observar a validade do Corolário 6.2 que decorre imediatamente do Teorema 6.1.

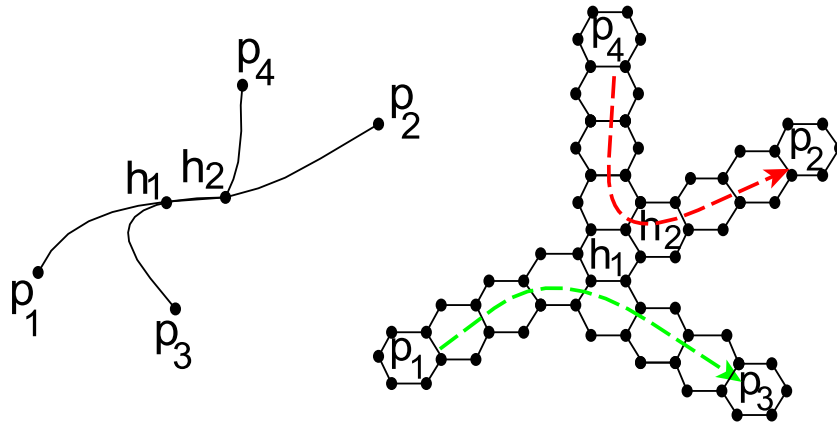


Figura 6.2: À esquerda, em  $G^*$ , os caminhos entre  $p_1$  e  $p_2$  e entre  $p_3$  e  $p_4$  obtidos a partir do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{12}(G)$ . Se houvesse aresta comum a ambos os caminhos, então mais uma vez melhorariamos (diminuiríamos) o peso do emparelhamento perfeito obtido em  $K_{12}(G)$ , como observado à direita, em  $G$ .

**Corolário 6.2** *Sejam  $G$  um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6),  $G^*$  o grafo dual de  $G$  e  $T$  o conjunto dos vértices de grau ímpar de  $G^*$ . Se  $K_{|T|}(G)$  é o grafo distância  $T$ -agonal de  $G$ , então o problema da frustração de arestas de  $G$  equivale ao problema do emparelhamento perfeito de peso mínimo em  $K_{|T|}(G)$ .*

A Figura 6.3 ilustra o Corolário 6.2.

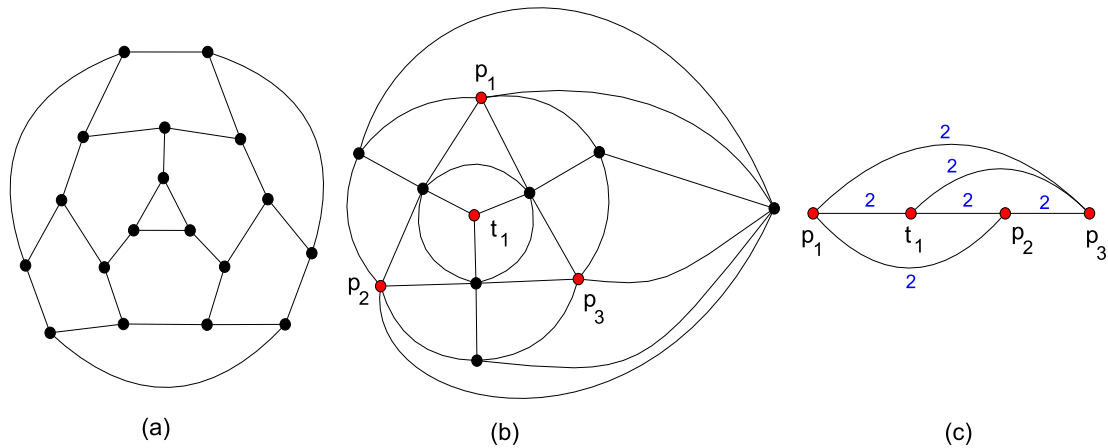


Figura 6.3: Em (a), o grafo  $G =$  fulleróide-(3, 4, 5, 6). Em (b), o grafo dual  $G^*$  do grafo  $G =$  fulleróide-(3, 4, 5, 6). Destacamos, de vermelho, os 4 vértices de grau ímpar de  $G^*$ . Em (c), o grafo  $K_4$  ponderado representando o grafo distância pentagonal de  $G$ .

Observe, na Figura 6.3, que o emparelhamento perfeito  $M = \{p_1t_1, p_2p_3\}$  de  $K_4$  tem peso mínimo igual a 4 e fornece a quantidade de arestas a serem removidas de  $G^*$  para que o remanescente grafo tenha apenas vértices de grau par. Conseqüentemente, em  $G$ , devemos remover no máximo 4 arestas de modo a obter um subgrafo gerador bipartido.

## 6.2 Problema do Conjunto Independente Máximo

O problema do conjunto independente máximo de vértices é *NP*-completo para grafos em geral, inclusive para grafos cúbicos e planares. Nesta seção descreveremos brevemente o algoritmo de Daugherty [18] que computa em tempo polinomial ( $O(n)$ ) o problema do conjunto independente máximo em grafos fulerenes e é uma generalização do algoritmo de Graver [42].

**Definição 6.3** *Um campo desobstruído de dimensões  $(x, y)$ ,  $x \geq 1$ ,  $y \geq 0$  é um circuito (ou ciclo) no grafo dual de um fulerene que possui  $2x + 2y$  arcos tais que o circuito e sua região interior (região do lado direito do circuito) contêm exatamente dois vértices  $a$  e  $b$  de grau 5.*

De acordo com Daugherty [18] o termo *campo desobstruído* (do inglês *clear field*) foi escolhido porque todos os conjuntos independentes máximos de fulerenes e a correspondente coloração de Graver devem ser livres de pentágonos exceto os dois pentágonos que serão combinados.

Observe que alguns hexágonos podem contribuir com menos de 3 vértices para o conjunto independente máximo, dependendo da maneira que o conjunto de vértices independente foi selecionado da fronteira de um campo desobstruído. Tais hexágonos são chamados de hexágonos deficientes e a *penalidade* de um campo desobstruído é dada pelo número de hexágonos deficientes causados pelo campo desobstruído adicionado de 1 unidade. A Figura 6.4 retirada de [18] mostra um exemplo de campo desobstruído e suas possíveis penalidades.

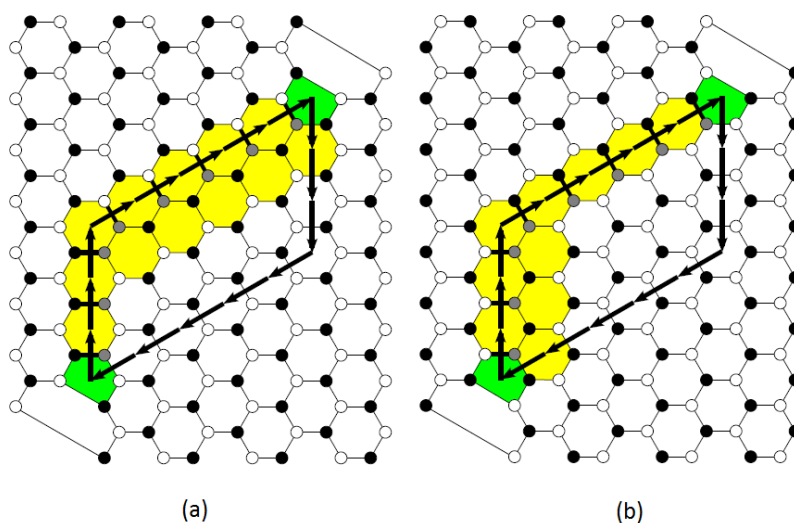


Figura 6.4: Dois campos desobstruídos de dimensões  $(5, 3)$ . Os arcos dos campos desobstruídos estão representados pelas setas. Hexágonos com menos de três vértices no conjunto independente estão de amarelo. A penalidade do campo desobstruído em (a) é de  $2 \cdot 5 + 3 = 13$ , enquanto a penalidade do campo desobstruído em (b) é de  $5 + 2 \cdot 3 = 11$ .

Um *subgrafo campo desobstruído* de um determinado campo desobstruído é o subgrafo primal induzido pelas faces correspondentes aos vértices do dual que pertencem a este campo desobstruído ou ao interior deste campo desobstruído. Um *campo desobstruído próprio* de dimensões  $(x, y)$  é um campo desobstruído em que seu correspondente subgrafo campo desobstruído contém  $(x + 1)(y + 1)$  faces únicas, ou seja, um campo desobstruído próprio é aquele que não se sobrepõe a nenhum outro campo desobstruído.

O algoritmo de Daugherty [18] é descrito em 4 fases:

- Descobrir todos os campos desobstruídos próprios pelas suas dimensões e localizações no fullerene;
- Determinar se um par de campos desobstruídos próprios compartilham um vértice dual;
- Encontrar uma combinação ótima considerando cada conjunto de seis campos desobstruídos próprios tais que nenhum dos campos desobstruídos compartilhem um mesmo vértice dual;
- Construir um conjunto independente máximo usando a combinação ótima descoberta na fase 3.

O algoritmo de Daugherty baseia-se nos Teoremas 6.4, 6.5 e 6.6 e suas demonstrações podem ser encontradas em [18].

**Teorema 6.4 (Daugherty [18])** *Os seis subgrafos campos desobstruídos que surgem de algum conjunto independente máximo de um fullerene não têm faces em comum.*

**Teorema 6.5 (Daugherty [18])** *Os campos desobstruídos que correspondem a um conjunto independente máximo de um fullerene devem ser campos desobstruídos próprios.*

**Teorema 6.6 (Daugherty [18])** *O número de campos desobstruídos próprios é  $O(\log_2 n)$ .*

Graver [42] mostrou que para grafos fulerenes com simetria icosaedral o número de independência pode ser calculado em tempo  $O(1)$ . O algoritmo de Daugherty [18], descrito nesta seção, determina em tempo  $O(n)$  o número de independência para qualquer grafo fullerene.



### 6.3 Problema da Coloração Total

Uma  $k$ -coloração-total de um grafo  $G = (V, E)$  é uma função  $C^T : V \cup E \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$  tal que dois elementos adjacentes ou incidentes do grafo  $G$  não têm a mesma imagem (a mesma cor). O número cromático total de  $G$ , denotado por  $\chi''(G)$ , é o menor inteiro  $k$  tal que  $G$  possui uma  $k$ -coloração-total e, obviamente,  $\chi''(G) \geq \Delta(G) + 1$ . Behzad [43] conjecturou que para todo grafo  $G$ ,  $\chi''(G) \leq \Delta(G) + 2$ . Esta conjectura foi concisamente provada por Feng e Lin [44] para grafos cúbicos (consequentemente válida para grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6)).

Um grafo cúbico  $G$  é Tipo 1 se  $\chi''(G) = \Delta(G) + 1 = 4$  e é Tipo 2 se  $\chi''(G) = \Delta(G) + 2 = 5$ .

Dado um inteiro  $k$ , o problema de decidir se um grafo possui uma coloração total com no máximo  $k$  cores é  $NP$ -completo [45]. McDiarmid e Sánchez-Arroyo [46, 47] mostraram que este problema é  $NP$ -completo mesmo para grafos cúbicos bipartidos.

Em cooperação com Sasaki, Faria e Klein iniciamos a busca por grafos fullerenes Tipo 1 e por grafos fullerenes Tipo 2. Após exaustivas tentativas, conseguimos exibir apenas exemplos de grafos fullerenes Tipo 1 (um exemplo é oferecido através da Figura 6.5). Como observado por Sasaki [3] para mostrar que um grafo cúbico é Tipo 1, basta exibirmos uma coloração total com 4 cores, porém, para mostrar que um grafo cúbico é Tipo 2, precisamos mostrar que este não possui nenhuma coloração total com apenas 4 cores. Isto torna a busca por grafos cúbicos Tipo 2 naturalmente mais complicada.

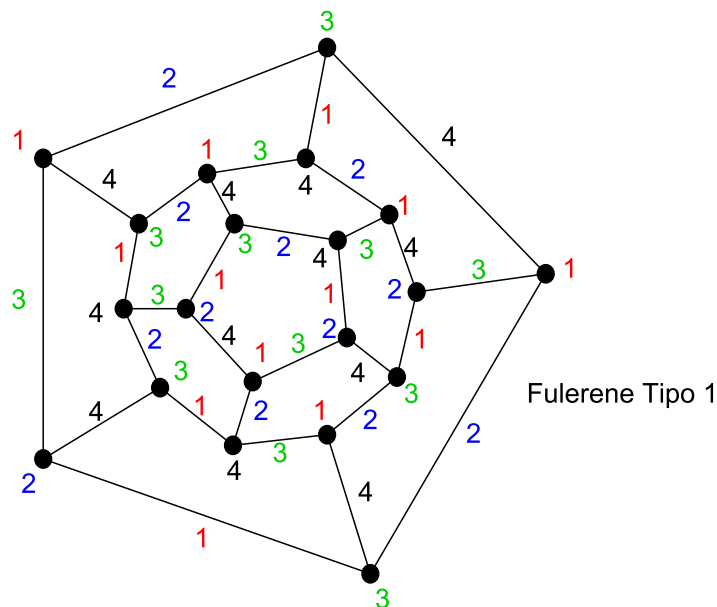


Figura 6.5: Grafo Fullerene  $G$  com  $\chi''(G) = 4$ .

Este insucesso na busca por fullerenes Tipo 2 nos fez reajustar a classe de grafos

estudada, isto é, passamos a procurar grafos fulleróides-(3, 4, 6), Tipo 1 e Tipo 2. Sasaki, em sua tese de doutoramento [3], exibiu os dois grafos da Figura 6.6: em (a), exibimos a 4-coloração total do grafo, proposta por Sasaki; em (b), o grafo é Tipo 2 e foi obtido a partir de 2 cópias do grafo em (a).

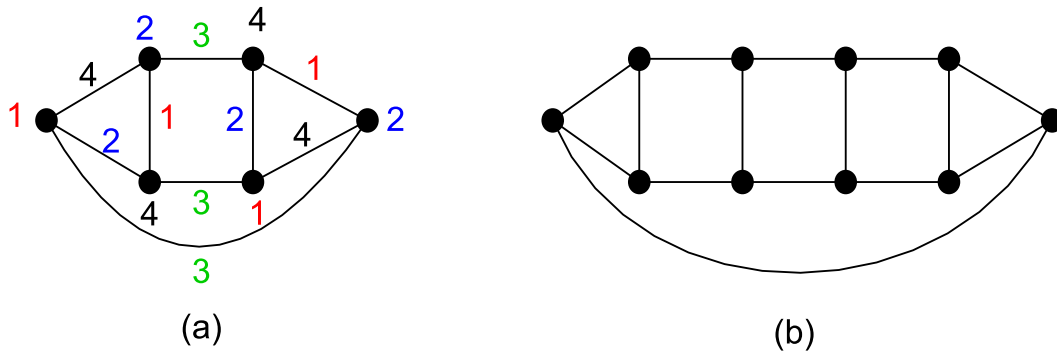


Figura 6.6: Grafo Tipo 1, em (a). Em (b), um grafo Tipo 2, provado por Sasaki [3, Propriedade 11].

A existência de grafos fulleróides-(3, 4, 6), Tipo 1 e Tipo 2 nos fez começar a investigar, em parceria com Faria, Klein e Sasaki se o problema de decidir se um grafo fulleróide-(3, 4, 6) possui coloração total com  $k$  cores é  $NP$ -completo. Este trabalho encontra-se em andamento.

A Tabela 6.1 mostra a complexidade de alguns problemas abordados neste trabalho e traduz a dificuldade de encontrarmos potenciais problemas  $NP$ -completos sobre os grafos fullerenes e fulleróides-(3, 4, 5, 6).

<i>Grafos</i> \ <i>Problema</i>	<b>Corte Máx</b>	<b>Frust. Bipart Arestas</b>	<b>Conj Indep Máx</b>	<b>Ciclo Hamilt</b>	<b>Coloração Arestas</b>	<b>Coloração Total</b>
<b>Geral</b>	NPc [39]	NPc [39]	NPc [48]	NPc [48]	NPc [49]	NPc [47]
<b>Cúbicos</b>	NPc [48]	NPc [48]	NPc [48]	NPc [48]	NPc [49, 49]	NPc [47]
<b>Planares</b>	P [50]	P [50]	NPc [48]	NPc [48]	P [51]	open
<b>Cúbicos e Planares</b>	P [50]	P [50]	NPc [48]	NPc [48]	P [51]	open
<b>Cúbicos, Planares e 3-Conexos</b>	P [50]	P [50]	NPc [48]	NPc [48]	P [51]	open
<b>Fulerenes</b>	P [50]	P [50]	P [18]	NPc [48]	P [51]	open
<b>Fuleróides-(3, 4, 5, 6)</b>	P [50]	P [50]	open	NPc	P [51]	open

Tabela 6.1: Complexidade de alguns problemas envolvendo subclasses dos grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6). A palavra open indica que o problema encontra-se em aberto para aquela classe específica de grafo. A classe dos problemas P é aquela para os quais existe um algoritmo tal que o seu consumo de tempo no pior caso é limitado por um polinômio no tamanho das instâncias do problema. A classe dos problemas NP é aquela para as quais podemos verificar, em tempo polinomial, se uma dada solução é correta. A classe NPc indica a subclasse dos problemas NP tal que se pudermos resolver um desses problemas em tempo polinomial, então todos os demais problemas em NP também podem ser resolvidos em tempo polinomial.

# Capítulo 7

## Conclusão e Trabalhos Futuros

Neste trabalho, vimos que o conceito de curvatura combinatória é definido como sendo uma função que mede, localmente, a dificuldade de ladrilhar (preencher sem superposição ou buracos) parte do plano por faces de um grafo. Este conceito é versátil e se aplica tanto aos vértices de um grafo planar, quanto às suas faces. É importante destacar que existem outros conceitos de curvatura combinatória. Podemos pensar, por exemplo, que se  $G$  é um grafo cúbico, então a curvatura combinatória de um vértice  $u$  de  $G$  é dada por  $\phi_G(u) = (6 - d(u))\frac{\pi}{3}$ . Esta e outras definições de curvatura combinatória devem convergir para a mesma compreensão da estrutura combinatória do grafo.

A partir do conceito de curvatura combinatória, visto no Capítulo 2, discutimos a validade da Conjectura de Andova e Škrekovski [1], Capítulos 3 e 4, e refletimos sobre o problema da frustração bipartida de arestas, Capítulo 5.

Mostramos, no Capítulo 3, que a Conjectura de Andova e Škrekovski não vale para nenhum *nanodisco de fullerene* com no mínimo 300 vértices. Provamos que o diâmetro de todo nanodisco de fullerene,  $D_{r,t}$ , contendo  $n$  vértices, é no máximo igual a  $\sqrt{\frac{4n}{3}}$ .

Andova e Škrekovski [1] determinaram que o diâmetro dos grafos fulerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,j}$ , para  $i = 0$  ou  $i = j$ , é igual a  $4i + 6j - 1$ . Mostramos, no Capítulo 4, que existem infinitas classes de *grafos fulerenes* que satisfazem a Conjectura de Andova e Škrekovski. Provamos que os grafos fulerenes com simetria icosaedral do tipo  $G_{i,2i+p}$  têm diâmetro pelo menos igual a  $14i + 6p - 1$ , para todo  $0 < i, p$ , e estabelecemos que estes grafos fulerenes satisfazem a referida conjectura.

A Questão a seguir, sugere uma nova cota inferior para o diâmetro de todos os grafos fulerenes. Esta questão encontra-se em aberto.

**Questão 1.** Se  $F$  é um grafo fullerene com  $n$  vértices, então  $\text{diam}(F) \geq \sqrt{\frac{2n}{3}}$ ?

No capítulo 5, obtivemos limites para os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo em grafos cúbicos, planares, 3-conexos cujas faces têm tamanhos no máximo 6 (grafos fulleróides-(3, 4, 5, 6)). Mostramos que se  $F$  é um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) contendo  $n$  vértices, então  $\tau_{odd}(F) \leq \sqrt{\frac{12n}{5}}$  e  $\alpha(F) \geq \frac{n}{2} - \sqrt{\frac{3n}{5}}$ , com igualdade se, e somente se,  $n = 60k^2$  para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $Aut(F) \cong I_h$ . Estes resultados estendem os trabalhos de Faria, Klein e Stehlík [12] que estabelece cotas semelhantes para ambos os problemas, porém restritos aos grafos fulleróides-(5, 6) (ou, simplesmente, grafos fullerenes).

Se restringirmos o estudo aos grafos fulleróides-(3, 4, 6), então obtemos cotas melhores para os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo, obtendo  $\tau_{odd}(F) \leq \sqrt{\frac{4n}{3}}$  e  $\alpha(F) \geq \frac{n}{2} - \sqrt{\frac{n}{3}}$ , com igualdade se, e somente se,  $n = 12k^2$ , para algum  $k \in \mathbb{N}$ , e  $Aut(F) \cong T_d$ .

Desejamos, em breve, dedicar nossas atenções às seguintes questões:

**Questão 2.** Se  $G$  é um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6) contendo  $n$  vértices,  $p$  faces pentagonais,  $s$  faces quadrangulares e  $t$  faces triangulares, então  $\tau_{odd}(G) \leq \sqrt{\frac{(p+s+t)^2}{5p+4s+3t}n}$  e  $\alpha(G) \geq \frac{n}{2} - \sqrt{\frac{(p+s+t)^2}{5p+4s+3t} \frac{n}{4}}$ .

**Questão 3.** Quais os limites para os problemas da frustração bipartida de arestas e do conjunto independente máximo para grafos fulleróides( $f_1, f_2, \dots, f_k$ ) quando  $f_i > 6$ , para algum  $i$ , e qual classes de grafos os atinge?

Por fim, discutimos no Capítulo 6 a dificuldade de encontrar um problema  $NP$ -difícil quando a entrada é um grafo fullerene ou um grafo fulleróide-(3, 4, 5, 6). Detectamos a existência de grafos fulleróides-(3, 4, 6) Tipo 1 e Tipo 2. A partir daí, começamos a pesquisar, em parceria com os professores Luerbio Faria, Sulamita Klein e Diana Sasaki, o seguinte problema:

**Questão 4.** O problema de decidir se um grafo fulleróide-(3, 4, 6) é tipo 1 é  $NP$ -completo?

# Referências Bibliográficas

- [1] ANDOVA, V., ŠKREKOVSKI, R. “Diameter of Fullerene Graphs with Full Icosahedral Symmetry”, *MATCH Communications in Mathematical and Computer Chemistry*, v. 70, pp. 205–220, 2013.
- [2] BRINKMANN, G., DELGADO FRIEDRICHS, O., LISKEN, S., et al. “CaGe — a virtual environment for studying some special classes of plane graphs — an update”, *MATCH Communications in Mathematics and Computer Chemistry*, v. 63, n. 3, pp. 533–552, 2010. Disponível em: <<http://caagt.ugent.be/CaGe>>.
- [3] SASAKI, D. *Sobre Coloração Total de Grafos Cúbicos*. Ph.D. Thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2013.
- [4] GIBNEY, E. “Buckyballs in space solve 100-year-old riddle”. 2015. Disponível em: <<http://www.nature.com/news/buckyballs-in-space-solve-100-year-old-riddle-1.17987#/b2>>.
- [5] CAMPBELL, E. K., HOLZ, M., MAIER, J. P. “Laboratory confirmation of C60(+) as the carrier of two diffuse interstellar bands”, *Nature*, v. 523, n. 5, 2015.
- [6] KROTO, H. W., HEATH, J. R., O’BIEN, S. C., et al. “C60: Buckminsterfullerene”, *Nature*, v. 318, pp. 162–163, 1985.
- [7] “The Nobel Prize in Chemistry 1996”. Disponível em: <[http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1996/press.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1996/press.html)>.
- [8] DOŠLIĆ, T., VUKIČEVIĆ, D. “Computing the bipartite edge frustration of fullerene graphs”, *Discrete Applied Mathematics*, v. 155, n. 10, pp. 1294–1301, 2007.
- [9] ROCHA-FILHO, R. “Os Fullerenes e sua espantosa geometria molecular”. 1996. Disponível em: <<http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc04/atual.pdf>>.

- [10] HOLME, P., LILJEROS, F., EDLING, G., et al. “Network bipartivity”, *Physical Review E*, v. 68, pp. 056107, 2003.
- [11] LEMOS, T. H. A. *Comparação de invariantes da teoria dos grafos na previsão da estabilidade de fulerenos*. Mestrado, PPGInf/UFPR, abril 2015. Disponível em: <<http://hdl.handle.net/1884/38378>>.
- [12] FARIA, L., KLEIN, S., STEHLÍK, M. “Odd cycle transversals and independent sets in fullerene graphs”, *SIAM Journal of Discrete Mathematics*, v. 48, n. 3, pp. 1458–469, 2012.
- [13] NICODEMOS, D. S., STEHLÍK, M. “Fullerene Graphs of Small Diameter”, *MATCH - Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, v. 77, pp. 725–728, 2017.
- [14] NICODEMOS, D. S., FARIA, L., KLEIN, S. “Diameter of a Fullerene Graph with Icosahedral Symmetry”. In: *Latin American Workshop on Cliques in Graphs, 2014 November 9-12 Pirenópolis-GO, Brazil*, 2014.
- [15] NICODEMOS, D. S., FARIA, L., KLEIN, S. “Frustração de Arestas em (3, 6)-Fullerenes”. In: *CSBC 2016, XXXVI Congresso da Sociedade Brasileira de Computação PUCRS PORTO ALEGRE-RS*, 2016.
- [16] NICODEMOS, D. S., FARIA, L., KLEIN, S. “Frustração de Arestas e Conjuntos Independentes de (3, 6)-Fullerenes”. In: *Anais do XLVIII SBPO Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional Vitória, ES, 27 a 30 de setembro de 2016*, 2016.
- [17] NICODEMOS, D. S., FARIA, L., KLEIN, S. “(3, 4, 6)-Fullerene Graphs, Combinatorial Curvature Concept, Bipartite Edge Frustration and Maximum Independent Set”. In: *Latin American Workshop on Cliques in Graphs, 2016 November 8-11 La Plata, Argentina*, 2016.
- [18] DAUGHERTY, S. *Independent Sets and Closed-Shell Independent Sets of Fullerenes*. Ph.D. Thesis, University of Victoria, 2009.
- [19] BONDY, J. A., MURTY, U. S. R. *Graph theory with applications*. Canada, Macmillan/Elsevier, 1976.
- [20] HIGUCHI, Y. “Combinatorial Curvature for Planar Graphs”, *Journal of Graph Theory*, v. 121, n. 4, pp. 183–254, 38.
- [21] GROMOV, M. “Hyperbolic groups, Essays in Group Theory, S. M. Gersten, (Editor)”, *Mathematical Sciences Research Institute Publications*, v. 8, pp. 75–263, 1987.

- [22] CARMO, M. P. *Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies*. Rio de Janeiro, SBM, 2014.
- [23] LIMA, E. L. *Introdução à Topologia Diferencial*. Rio de Janeiro, IMPA, 1961. Disponível em: <[http://www.impa.br/opencms/pt/biblioteca/pm/PM\\_02.pdf](http://www.impa.br/opencms/pt/biblioteca/pm/PM_02.pdf)>.
- [24] DEMAINE, E. D., O'ROURKE, J. *Geometric Folding Algorithms*. New York, Cambridge University Press, 2007.
- [25] VIANA, M. “Conjectura de Poincaré Geometria para entender o Universo”. Disponível em: <<http://w3.impa.br/~viana/out/cpcg.pdf>>.
- [26] SCHWERDTFEGER, P., WIRZ, L. N., AVERY, J. “The topology of fullerenes”, *WIREs Comput Mol Sci*, v. 5, pp. 96–145, 2015.
- [27] GRÜNBAUM, B., MOTZKIN, T. S. “The number of hexagons and the simplicity of geodesics on certain polyhedra”, *Canad. J. Math*, v. 15, pp. 744–751, 1963.
- [28] GOLDBERG, M. “A class of multisymmetric polyhedra”, *Tohoku Mathematical Journal.*, v. 43, pp. 104–108, 1939.
- [29] ALEXANDROV, A. D. *Die innere Geometrie der konvexen Flächen*. Akademie-Verlag, Berlin, 1955.
- [30] GRAVER, J., MONACHINO, I. A. “Highly symmetric fullerenes and nanotubes”, *Symmetry Culture Science*, v. 19, n. 4, pp. 317–340, 2008.
- [31] NICODEMOS, D. S., STEHLÍK, M. “Packing and covering odd cycles in cubic plane graphs with small faces”, *European Journal of Combinatorics*, 2017.
- [32] THOMASSEN, C. “On the max-cut problem for a planar, cubic, triangle-free graph, and the Chinese postman problem for a planar triangulation”, *Journal of Graph Theory*, v. 53, n. 4, pp. 261–269, 2006.
- [33] COOK, W. J., CUNNINGHAM, W. H., PULLEYBLANK, W. R., et al. *Combinatorial Optimization*. Wiley Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization. New York, Wiley, 1998.
- [34] LOVÁSZ, L., PLUMMER, M. D. *Matching Theory*, v. 121, *North-Holland Mathematics Studies*. Amsterdam, North-Holland Publishing Co., 1986. ISBN: 0-444-87916-1. Annals of Discrete Mathematics, 29.



- [35] SCHRIJVER, A. *Combinatorial optimization: Polyhedra and efficiency*, v. 24, *Algorithms and Combinatorics*. Berlin, Springer-Verlag, 2003. ISBN: 3-540-44389-4.
- [36] SEYMOUR, P. “On odd cuts and plane multicommodity flows”, *Proceedings London Mathematical Society*, v. 42, n. 1, pp. 178–192, 1981.
- [37] FIORINI, S., HARDY, N., REED, B., et al. “Approximate min-max relations for odd cycles in planar graphs”, *Mathematical Programming, Series B*, v. 110, n. 1, pp. 71–91, 2007.
- [38] JUSTUS, C. *Boundaries of Triangle-Patches and the Expander Constant of Fullerenes*. Ph.D. Thesis, Universität Bielefeld, 2007.
- [39] KARP, R. M. *Reducibility among combinatorial problems*, In R.E. Miller and J.M. Thatcher, editors. Complexity of Computer Computations. New York, Springer, 1972. ISBN: 9781468420036.
- [40] EDMONDS, J. “Paths, trees and flowers”, *Canadian Journal of Mathematics*, v. 17, pp. 449–467, 1965.
- [41] GABOW, H. “Data structures for weighted matching and nearest common ancestors with linking”, *SIAM Journal of Discrete Mathematics*, pp. 434–443, 1990.
- [42] GRAVER, J. “The independence number of fullerenes and benzenoids”, *European Journal of Combinatorics*, v. 27, pp. 850–863, 2006.
- [43] BEHZAD, M. *Graphs and Their Chromatic Number*. Ph.D. Thesis, Michigan State University, 1965.
- [44] FENG, Y., LIN, W. “A concise proof for total coloring subcubic graphs”, *Inform. Process. Lett.*, v. 113, pp. 664–665, 2013.
- [45] SZWARCFITER, J. “Grafos e Algoritmos Computacionais”, v. 2, 1988.
- [46] MCDIARMID, C., SÁNCHEZ-ARROYO, A. “Total colouring regular bipartite graphs is NP-hard”, *Discrete Mathematics*, v. 124, pp. 155–162, 1994.
- [47] SÁNCHEZ-ARROYO, A. “Determining the total colouring number is NP-hard”, *Discrete Mathematics*, v. 78, pp. 315–319, 1989.
- [48] GAREY, M. R., JOHNSON, D. R. *Computers and Intractability; A Guide to the Theory of NP-Completeness*. New York, W. H. Freeman and Company, 1990.

- [49] HOLYER, Y. “The NP-Completeness of Edge-Colouring”, *SIAM Journal on Computing*, v. 10, pp. 718–720, 1981.
- [50] HADLOCK, F. “Finding a maximum cut of a planar graph in polynomial time”, *SIAM Journal on Computing*, v. 4, n. 3, pp. 221–225, 1975.
- [51] APPEL, K., HAKEN, W. “Every planar map is four colorable”, *Bulletin of the American Mathematical Society*, v. 82, n. 5, pp. 7110–712, 1976.

# Índice Remissivo

- Camada, 24
- Caminho, 6
- Caminho Geodésico, 6, 25
- Ciclo ou circuito, 6
- Conjectura
  - de Alexandrov, 21
  - de Andova e Škrekovski, 2, 21, 31
- Conjunto Independente, 73
- Corte de Aresta, 56, 76
- Curvatura Combinatória, 12, 20, 59
- Curvatura Total, 13
  
- Desigualdade de Cauchy-Schwarz, 67, 70
- Desigualdade Isoperimétrica, 60
- Diâmetro, 2, 6, 21, 31
- Distância, 6, 22
  
- Empacotamento, 56, 66
- Empacotamento de Fossos, 66
- Equações de Goldberg, 36
  
- Face
  - Hexagonal, 7, 22
  - Pentagonal, 7, 22, 43
  - Quadrangular, 7
  - Triangular, 7, 28, 32
- Faces
  - Pentagonais Antipodais, 37
- Família Laminar, 58, 66
- Fosso
  - Classificação, 61
  - Definição, 60
  - Ideia, 61
- Fronteira ou Ciclo Exterior, 7, 22, 33, 59
  
- Grafo
  - Bipartido, 3, 6
  - Cúbico, 5
  - Completo, 5
  - Conexo, 6
  - Dual, 7
  - Finito, 5
  - Fuleróide-(3, 4, 5, 6), 7, 51
  - Fulerene, 2, 7, 20, 31
  - Fulerene com Simetria Icosaedral, 21, 33
  - Fulerene com Simetria Icosaedral Completa ou Cheia, 2, 21
  - Infinito, 5
  - Planar, 6
  - Subcúbico, 5, 22
- Grau
  - de um vértice, 5
  - de uma face, 7
  
- Icosaedro Regular, 31, 33
- Inclusão Minimal, 58, 66
- Isometria, 9
  
- Latitude, 24
  
- Malha Hexagonal, 31
- Molécula de Fulerene, 2
  
- Número de Independência, 73
- Nanodisco de Fulerene, 3, 22
- Norma, 66, 70
  
- Paralelogramo Gerado por 2 Vértices, 41
- Poliedros, 9

Problema  
   do Corte Máximo, 76  
   da Frustração Bipartida de Arestas, 50, 76  
   da Frustração Bipartida de Arestas - Versão Dual, 52  
   do Conjunto Independente Máximo, 73  
   Hexagonais, 7  
   Pentagonais, 7, 43  
   Pentagonais Antipodais, 46  
   Vetor de Goldberg, 31  
   Vetores Unitários, 31  
   Vizinhança  
     Aberta, 6  
     Fechada, 6

Produto Interno, 66  
 Produto Interno canônico, 70

Propriedade  
   Cardinalidade dos Fossos, 61  
   do Remendo Hexagonal, 41

Refinamento, 57

Regra do Pentágono Isolado, 2

Relação de Euler, 7, 63

Remendo  
   Área, 59  
   Definição, 59

Remendo Hexagonal, 41

Remendo hexagonal, 47

Sólido com Simetria Icosaedral, 31, 33

T-Corte, 56, 66

T-Junção, 55

Tamanho de uma Face, 7

Teorema  
   do Aperto de Mãos, 5  
   de Justus, 60  
   do Nanodisco, 29  
   Egregium de Gauss, 9

Transversal de Ciclos Ímpares, 50

Triangulação, 5, 22, 51, 66

Vértice  
   à direita de uma face, 41  
   à esquerda de uma face, 41

Vértices  
   Defeituosos, 51