

**Valeurs extrêmes du rayon spectral
du Laplacien sans signe avec un
invariant de distance fixé**

C. Lucas

G-2013-46

Juillet 2013

Valeurs extrêmes du rayon spectral du Laplacien sans signe avec un invariant de distance fixé

Claire Lucas

*GERAD & HEC Montréal
Montréal (Québec) Canada, H3T 2A7*

`claire.lucas@hec.ca`

Juillet 2013

Les Cahiers du GERAD

G-2013-46

Copyright © 2013 GERAD

Résumé : Cet article présente une caractérisation des graphes pour laquelle le rayon spectral du Laplacien sans signe q_1 est extrémal lorsqu'un invariant de distance est fixé. Pour un diamètre fixé D , le graphe maximal est une bestiole de diamètre D dont les longueurs respectives des chemins pendants sont les plus proches possible. Pour un rayon fixé r , le graphe maximal est, une exception près ($r = 2$), un sac de rayon r . Ces graphes sont les graphes extrêmes des conjectures 21 et 23 de [7]. Pour une valeur de la maille supérieure ou égale à 5 fixée, le graphe qui maximise q_1 est le navet $Tu_{n,g}$, et si g est inférieur à la moitié du nombre de sommets du graphe, le graphe qui minimise q_1 est la sucette $Lol_{n,g}$.

1 Introduction

La théorie spectrale des graphes étudie les propriétés des graphes à travers les valeurs des matrices représentant ce graphe. Parmi les matrices les plus étudiées, on note la matrice d'adjacence A , qui est sans doute la façon la plus naturelle de décrire un graphe simple, le Laplacien $L = D - A$ où $D = \text{diag}(d_{v_1}, \dots, d_{v_n})$ est la matrice des degrés, mais aussi la matrice de distance et plus récemment le Laplacien sans signe $Q = D + A$.

Cette dernière matrice a fait l'objet de nombreuses publications ces dernières années, on sait que les graphes qui sont déterminés par le spectre de L le sont par le spectre de Q . On ne sait pas en revanche si plus de graphes sont déterminés par le spectre de leur matrice d'adjacence que par le spectre de Q , bien que les tests effectués sur des graphes à peu de sommets laissent espérer que la réponse à cette question soit positive. Cvetković et Simić [4] ont commencé à discuter des interactions entre la théorie spectrale des graphes à travers les spectres des matrices A , L et Q , les résultats majeurs de ce travail étant les suivants :

- équivalence entre la théorie spectrale à travers A , L et Q pour les graphes réguliers ;
- équivalence entre la théorie spectrale à travers L et Q pour les graphes bipartis ;
- analogies la théorie spectrale à travers A et Q , en utilisant, en particulier, les *line graphs*, les graphes de subdivision.

Les résultats présentés dans cet article appuient ce dernier point. En effet, nous avons étudié les graphes connexes qui maximisent ou minimisent la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 en fixant des invariants de distance suivants, le diamètre D , le rayon r et la maille g . Les graphes maximaux obtenus dans les deux premiers cas sont les mêmes que ceux obtenus par Hansen et Stevanović dans [8] pour la maximisation de la plus grande valeur propre de la matrice d'adjacence λ_1 . Nous avons aussi recherché les graphes extrêmes pour q_1 lorsque la maille est fixée, ici deux familles de graphes extrêmes se détachent, les sucettes et les navets, qui sont exactement les graphes extrêmes du lemme 3.1 de l'article de Belardo, Li Marzi et Simić [1]. Ceci démontre à nouveau la forte analogie entre la théorie spectrale à travers la matrice d'adjacence et le Laplacien sans signe.

Notons que ce rapprochement a pu être effectué à l'aide du logiciel AutoGraphiX, non pas en fixant l'invariant de distance et en utilisant la recherche à voisinage variable, mais en maximisant ou minimisant $q_1 \cdot i$ où i est un invariant de distance parmi D , r et g et en extrapolant les résultats obtenus à d'autres valeurs de i que la valeur optimale pour $q_1 \cdot i$.

L'article est organisé de la façon suivante. Dans la section 2, nous présentons la définition de familles de graphes extrêmes peu usuels qui apparaissent dans ce papier, ainsi que quelques définitions usuelles de théorie des graphes. Suivent une série de lemmes qui précisent la nature des variations de la valeur de q_1 à l'issue d'une modification de l'ensemble des sommets ou des arêtes d'un graphe, et des bornes sur la valeur de q_1 en fonction d'invariants de degrés. Dans la section 3, on montre que les graphes maximaux pour q_1 lorsque le diamètre du graphe est fixé sont les bestioles $Bug_{n-D+2, \lfloor D/2 \rfloor, \lceil D/2 \rceil}$ si $D \geq 2$ ou le graphe complet, puis on détermine la famille des graphes qui maximisent $q_1 \cdot D$. Dans la section 4, on montre que les graphes maximaux pour q_1 lorsque le rayon du graphe est fixé sont, les sacs $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$, le graphe complémentaire d'un couplage parfait ou le complémentaire de $P_3 \cup \frac{n-3}{2}K_2$ selon les cas et on détermine la famille des graphes qui maximisent $q_1 \cdot r$. Dans la section 5, on montre que les graphes maximaux pour q_1 lorsque la maille du graphe est fixée sont les navets $Tu_{n,g}$ et que, si g est inférieur à la moitié du nombre de sommets du graphe, les graphes minimaux pour q_1 sont les sucettes $Lol_{n,g}$. Les familles de graphes extrêmes, minimaux et maximaux pour $q_1 \cdot g$ sont déjà définies dans [7]. Des conclusions et perspectives de ces travaux sont données dans la section 6.

2 Définitions et résultats préliminaires

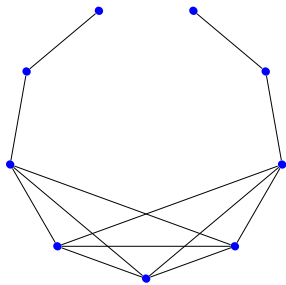
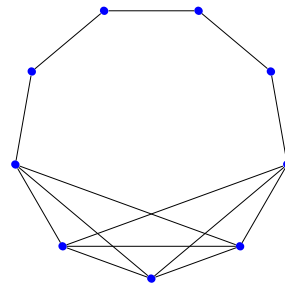
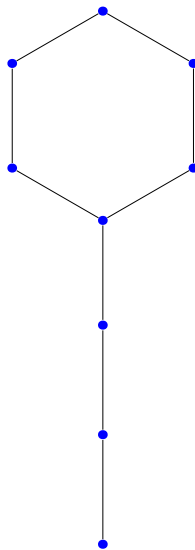
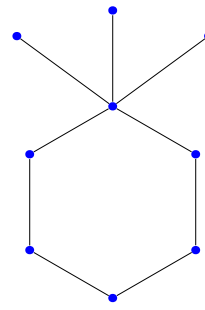
Les graphes qui maximisent la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 lorsque qu'un invariant de distance, parmi le diamètre, le rayon et la maille, est fixé appartiennent à des familles de graphes peu usuels, on rappelle donc leur définition.

Définition 1 Une bestiole $Bug_{p,s,t}$ est un graphe obtenu à partir du graphe complet à p sommets en supprimant une arête uv et en fusionnant le sommet u avec l'extrémité d'un chemin d'ordre s et le sommet v avec l'extrémité d'un chemin d'ordre t .

Un sac $Bag_{p,q}$ est un graphe obtenu à partir du graphe complet à p sommets en supprimant une arête uv et la remplaçant par un chemin d'ordre q .

Une sucette $Lol_{n,g}$ est un graphe à n sommets obtenu à partir d'un cycle g sommets en fusionnant un de ses sommets avec l'extrémité d'un chemin d'ordre $n - g + 1$.

Un navet $Tu_{n,g}$ est un graphe à n sommets obtenu à partir d'un cycle g sommets en attachant $n - g$ sommets pendants à un de ses sommets.

Figure 1 – $Bug_{5,3,3}$ Figure 2 – $Bag_{5,6}$ Figure 3 – $Lol_{9,6}$ Figure 4 – $Tu_{9,6}$

On utilise les notations usuelles de théorie des graphes telles que définies dans [5]. Le graphe complet à n sommets est noté K_n , le chemin à n sommets P_n , le cycle C_n , l'étoile S_n et le cerf-volant à n sommets avec une clique de taille k , obtenu en reliant un sommet pendant de P_{n-k+1} avec un sommet de K_k , $Ki_{n,k}$. Pour tout sommet u d'un graphe G , le degré de u est désigné par $d_{u,G}$ ou d_u , en l'absence d'ambiguïté. Les degrés maximum et moyens ont notés respectivement Δ et \bar{d} . Pour tout couple de sommets (u, v) , $d(u, v)$ désigne la distance, i.e. la longueur du plus court chemin, séparant u et v .

L'excentricité d'un sommet u d'un graphe G est le maximum des distances de u tout autre sommet de G , on la note $ecc(u)$. Le diamètre D de G est le maximum des excentricités des sommets de G et le rayon r est le minimum des excentricités des sommets de G . La maille g est la longueur du cycle le plus court de G , i.e. le nombre de sommet g du plus petit cycle C_g qui est un sous graphe de G .

On s'intéresse aux graphes qui maximisent q_1 avec un diamètre fixé, puis avec un rayon fixé, ainsi qu'aux graphes qui minimisent et aux graphes qui maximisent q_1 avec une maille fixée. Rappelons quelques propriétés ayant trait aux variations de la valeur de q_1 d'un graphe $G = (V, E)$ en fonction d'une modification de l'ensemble V ou de E .

Lemme 1 [2] *Soit G un graphe connexe, V l'ensemble de ses sommets, E l'ensemble de ses arêtes, $Q(G) = D(G) + A(G)$ son Laplacien sans signe et $q_1(G)$ la plus grande valeur propre de $Q(G)$.*

Soit G' le graphe obtenu à partir de G en supprimant une arête, alors $q_1(G') < q_1(G)$.

Lemme 2 [3, 9] *Soit G un graphe connexe, V l'ensemble de ses sommets, E l'ensemble de ses arêtes, $q_1(G)$ la plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe. et x le vecteur propre associé à $q_1(G)$.*

Soient u, v et w trois sommets de G tels que $uv \in E$ et $uw \notin E$ et $x_u \geq x_v$. Soit G' , le graphe obtenu à partir de G après rotation de l'arête uv autour de u vers la position vide uw , alors $q_1(G') > q_1(G)$.

Un chemin interne est une suite de $k \geq 3$ sommets u_1, \dots, u_k telle que $d_{u_1} \geq 3$, $d_{u_k} \geq 3$ et pour tout $i \in \{2, \dots, k-1\}$, $d_{u_i} = 2$. On appelle compression d'un chemin interne, le fait de remplacer deux arêtes consécutives, ou sans perte de généralité u_1u_2 et u_2u_3 par une seule arête u_1u_3 .

Lemme 3 [6] *Soit G un graphe connexe, V l'ensemble de ses sommets, E l'ensemble de ses arêtes et $q_1(G)$ la plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe.*

Soit G' le graphe obtenu à partir de G en compressant un chemin interne, alors $q_1(G') < q_1(G)$.

Soit G un graphe connexe, supposons qu'il existe un sommet u tel que le sous-graphe induit par G sur $V \setminus \{u\}$ soit non-connexe. Soit T_1, \dots, T_k , les composantes connexes de $G - u$ qui sont des arbres ou des sommets isolés. Les sous-graphe T induit par G sur l'ensemble de sommets U , où U est l'ensemble des sommets de T_1, \dots, T_k et u , est appelé un arbre pendant, si T est un chemin alors T est appelé un chemin pendant.

Lemme 4 [7] *Soit G un graphe connexe, V l'ensemble de ses sommets, E l'ensemble de ses arêtes et $q_1(G)$ la plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe. Soit T un arbre pendant de G à k sommets.*

Soit G' le graphe obtenu à partir de G en remplaçant T par un chemin pendant sur le même nombre de sommets, alors $q_1(G') < q_1(G)$.

Les bestioles et les libellules contiennent des chemins pendants, nous rappelons donc une propriété du vecteur propre de Perron du Laplacien sans signe qui sera utilisée pour montrer l'optimalité de ces graphes.

Lemme 5 [7] *Soit G un graphe tel que $\Delta \geq 3$ et soit P un chemin pendant de G . Soit x le vecteur propre de Perron associé à q_1 . Notons $P = v_0v_1 \dots v_k$ la séquence des sommets de P où v_0 est le sommet de degré $d_{v_0} \geq 3$ et v_k est le sommet pendant de degré $d_{v_k} = 1$. Alors*

$$x_{v_0} \geq x_{v_1} \geq \dots \geq x_{v_k}.$$

On termine ces remarques sur les variations de q_1 par un lemme inédit à notre connaissance.

Lemme 6 *Soit G un graphe connexe, V l'ensemble de ses sommets, E l'ensemble de ses arêtes, $q_1(G)$ la plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe. et x le vecteur propre associé à $q_1(G)$.*

Soit W un sous ensemble de sommets de G , et w un sommet de W tel que $x_w = \max_{v \in W} x_v$. Soit $N = \mathcal{N}(W) \setminus \mathcal{N}(w)$ l'ensemble des sommets qui sont adjacents à au moins un sommet de W et ne sont pas adjacents à w . Pour tout $u \in N$, on choisit arbitrairement un voisin v de u dans $W \setminus \{w\}$ et on effectue la rotation de l'arête uv vers uw .

Soit G' le graphe ainsi obtenu, alors $q_1(G') > q_1(G)$.

Preuve. On conserve toutes les notations de l'énoncé et on note E' l'ensemble des arêtes de G' . On sait que $q_1(G') = \max_{y \in \mathbb{R}^n, \|y\|=1} y^\top Q(G')y \geq x^\top Q(G')x$, où x est le vecteur de Perron de $Q(G)$. Or

$$\begin{aligned} x^\top Q(G')x - x^\top Q(G)x &= x^\top (Q(G') - Q(G))x \\ &= 2 \sum_{u \in N} x_u (x_w - x_{v(u)}) + (x_w^2 - x_{v(u)}^2) \\ &= \sum_{u \in N} (x_w - x_{v(u)}) (x_w^2 + x_{v(u)}^2 + 2x_u) \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

donc $q_1(G') \geq q_1(G)$. De plus si $q_1(G') = q_1(G)$ alors, comme Q est non-négative et irréductible, x est un vecteur propre de $Q(G')$ et

$$q_1 x_w = d_{w,G'} x_w + \sum_{uw \in E'} x_u > d_{w,G} x_w + \sum_{uw \in E} x_u = q_1 x_w.$$

C'est une contradiction, donc $q_1(G') > q_1(G)$. □

Enfin, on rappelle que pour tout graphe G , on peut encadrer q_1 à l'aide de son degré maximum et de son degré moyen.

Lemme 7 [2, 10] *Soit G un graphe connexe, $q_1(G)$ la plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe, Δ son degré maximum et \bar{d} son degré moyen, alors*

$$2\bar{d} \leq q_1 \leq 2\Delta,$$

Ces bornes sont atteintes si et seulement si G est un graphe régulier. De plus

$$\Delta + 1 \leq q_1 \leq \max_{u \in V} d_u + m_u,$$

où m_u désigne la moyenne des degrés des sommets adjacents à u . La borne inférieure est atteinte si et seulement si G est une étoile et la borne supérieure si et seulement si G est un graphe régulier.

3 Graphes maximisant q_1 avec un diamètre fixé

Dans cette partie, on montrera que les graphes qui, pour une valeur donnée du diamètre maximisent, la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 font partie de la famille des bestioles $Bug_{k,p,q}$ définie par Hansen et Stevanović dans [8]. Ces graphes sont obtenus à partir de la clique de taille k en supprimant une arête et en fusionnant une de ses extrémités avec l'extrémité d'un chemin d'ordre p et l'autre avec celle d'un chemin d'ordre q . Lorsque D est fixé, le graphe qui maximise q_1 est la bestiole $B^* = Bug_{\lceil n/2 \rceil, p, q}$ de diamètre $D = \lceil (n+1)/2 \rceil$, $p = \lfloor D/2 \rfloor$ and $q = \lceil D/2 \rceil$. Ce résultat est ensuite utilisé pour confirmer la conjecture 21.

Théorème 1 *Le graphe à n sommets qui maximise la plus grande valeur propre du Laplacien avec un diamètre D donné est*

- (i) le graphe complet si $D = 1$ pour tout $n \geq 2$,
(ii) la bestiole $Bug_{n-D+2, \lfloor D/2 \rfloor, \lceil D/2 \rceil}$ si $D \geq 2$ pour tout $n \geq 3$.

Preuve. Le cas où $D = 1$ est trivial puisque le graphe complet est l'unique graphe de diamètre 1.

Intéressons nous au cas où $D \geq 2$.

Soit $G^* = (V, E)$ un graphe à n sommets de diamètre D qui maximise q_1 . Supposons que G ne soit pas une bestiole et montrons que cela mène à une contradiction.

Soit $V(P)$ l'ensemble des sommets d'un chemin diamétral de G^* à $D+1$ sommets. Notons que tout sommet de $U = V \setminus V(P)$ est adjacent à au plus trois sommets de P et que ces trois voisins doivent nécessairement être consécutifs. Comme G^* maximise q_1 il est critique pour l'ajout d'arête, donc tous les sommets de U ont trois voisins consécutifs dans P . Soit x le vecteur de Perron du Laplacien sans signe de G^* , et w_1 un sommet de $V(P)$ tel que $x_{w_1} = \max\{x_v : v \in P\}$.

Pour tout sommet u de U , on choisit arbitrairement, dans P , un voisin $v(u)$ de u différent de w_1 . D'après le lemme 6, supprimer l'ensemble d'arêtes $\{uv(u), u \in U\}$ et le remplacer par l'ensemble d'arêtes $\{uw_1, u \in U\}$ augmente strictement la valeur de q_1 . On appelle G' le graphe obtenu et x' le vecteur de Perron de son Laplacien sans signe.

On réitère l'opération à deux reprises. La première fois on remplace l'ensemble d'arêtes $\{uv(u), u \in U\}$ par l'ensemble d'arêtes $\{uw_2, u \in U\}$, où w_2 est un sommet de $V(P) \setminus \{w_1\}$ tel que $x_{w_2} = \max\{x'_v : v \in V(P) \setminus \{w_1\}\}$. On appelle G'' le graphe obtenu et x'' le vecteur de Perron de son Laplacien sans signe. La seconde fois, on remplace l'ensemble d'arêtes $\{uv(u), u \in U\}$ par l'ensemble d'arêtes $\{uw_3, u \in U\}$, où w_3 est un sommet de $V(P) \setminus \{w_1, w_2\}$ tel que $x_{w_3} = \max\{x''_v : v \in V(P) \setminus \{w_1, w_2\}\}$. On a donc obtenu un graphe dans lequel les seuls voisins des sommets de U sont w_1, w_2 et w_3 , mais il est possible que ces trois sommets ne soient pas consécutifs dans le chemin diamétral.

Supposons, quitte à renuméroter qu'il existe un chemin interne entre w_1 et w_2 et éventuellement entre w_2 et w_3 , en contractant ce chemin, on augmente strictement la valeur de q_1 . On ajoute ensuite successivement à une extrémité de P autant de sommets que la contraction du chemin interne en a supprimé. Cette opération augmente aussi strictement la valeur q_1 . On procède de même pour supprimer le chemin interne entre w_2 et w_3 . On ajoute ensuite toutes les arêtes possibles entre les sommets de $V \setminus V(P)$.

On a ainsi obtenu une bestiole $Bug_{n-D+2,p,D-p}$ tel que $q_1(Bug_{n-D+2,p,D-p}) > q_1(G^*)$, ce qui est une contradiction.

Il reste à trouver la valeur optimale p^* de p , on va montrer que $p^* = \lfloor D/2 \rfloor$.

Soit $Bug_{n-D+2,p,D-p}$ une bestiole telle que $1 \leq p \leq D-p$ et x le vecteur de Perron de son Laplacien sans signe. On appelle v_0 (resp. u_0) le sommet pendant de la branche de longueur $D-p$ (resp. p), v_i (resp. u_i) le sommet situé à distance i de v_0 (resp. u_0) pour $i \in \{1, \dots, D-p\}$ (resp. $i \in \{1, \dots, p\}$) et W l'ensemble des voisins communs à u_p et v_{D-p} .

Soit $i \in \{1, \dots, \lfloor D/2 \rfloor\}$. Les équations aux valeurs propres donnent

$$q_1 x_{v_0} = x_{v_0} + x_{v_1},$$

d'où $x_{v_1} > x_{v_0}$. Soit $i \in \{2, \dots, \lfloor D/2 \rfloor - 1\}$ si $x_{v_i} > x_{v_{i-1}}$

$$\begin{aligned} (q_1 - 3)x_{v_i} &= 2x_{v_i} + x_{v_{i-1}} + x_{v_{i+1}} - 3x_{v_i}, \\ &< x_{v_{i+1}}. \end{aligned}$$

D'une part, on a $q_1(Bug_{n-D+2,p,D-p}) > q_1(Bug_{n-D+2,p-1,D-p+1})$ équivaut à dire que la rotation de l'arête u_0, u_1 vers la position vide u_0, v_0 n'augmente pas q_1 . D'où $x_{u_1} > x_{v_0}$. D'autre part, on a $q_1(Bug_{n-D+2,p,D-p}) > q_1(Bug_{n-D+2,p+1,D-p-1})$ équivaut à dire que la rotation de l'arête v_0, v_1 vers la position vide v_0, u_0 n'augmente pas q_1 . D'où $x_{v_1} > x_{u_0}$. On déduit de ces inégalités que $x_{u_1} + x_{v_1} > x_{u_0} + x_{v_0}$

Soit $(\alpha_i)_{i \in \{1, \dots, D-p\}}$ la séquence de réels positifs tels que $v_i = \alpha_i v_0$, $i \in \{1, \dots, D-p\}$ et soit $(\beta_i)_{i \in \{1, \dots, p\}}$ la séquence de réels positifs tels que $u_i = \beta_i u_0$, $i \in \{1, \dots, p\}$. Vu que les équations aux valeurs propres sont les mêmes pour x_{u_i} et x_{v_i} pour $i \in \{0, \dots, p-1\}$, on a nécessairement $\alpha_i = \beta_i$ pour $i \in \{1, \dots, p\}$.

De plus, comme $x_{v_1} = (q_1 - 2)x_{v_1}$ et $x_{v_i} = (q_1 - 2 - 1/\alpha_{i-1})x_{v_{i-1}} > (q_1 - 3)x_{v_{i-1}}$, la séquence $(\alpha_i)_{i \in \{1, \dots, D-p\}}$ est strictement croissante et la séquence $C_i = \frac{\alpha_i}{\alpha_{i-1}}q_1 - 2 - 1/\alpha_{i-1} > q_1 - 3$ l'est aussi. D'après les équations aux valeurs propres, en v_{D-p} et u_p , on a

$$(q_1 - (n - D + 2))x_{v_{D-p}} = x_{v_{D-p-1}} + \sum_{w \in W} x_w \quad \text{et} \quad (q_1 - (n - D + 2))x_{u_p} = x_{v_{p-1}} + \sum_{w \in W} x_w$$

ce qui équivaut à

$$(q_1 - (n - D + 2))\frac{\alpha_{D-p}}{q_1 - 2}x_{v_1} = \frac{\alpha_{D-p-1}}{q_1 - 2}x_{v_1} + \sum_{w \in W} x_w$$

et

$$(q_1 - (n - D + 2))\alpha_p u_0 = \alpha_{p-1}x_{u_0} + \sum_{w \in W} x_w.$$

On obtient donc l'égalité

$$((q_1 - n + D - 3)\frac{\alpha_{D-p}}{q_1 - 2} + \frac{\alpha_{D-p} - \alpha_{D-p-1}}{q_1 - 2})x_{v_1} = ((q_1 - n + D - 3)\alpha_p + \alpha_p - \alpha_{p-1})x_{u_0}$$

et comme $\alpha_{D-p} - \alpha_{D-p-1} > 0$ et $C_{D-p-1} < C_{D-p} < q_1 - 2$, cela implique que

$$((q_1 - n + D - 3)\alpha_{D-p-1} + (\alpha_{D-p-1} - \alpha_{D-p-2}))x_{v_1} = ((q_1 - n + D - 3)\alpha_p + \alpha_p - \alpha_{p-1})x_{u_0}.$$

Enfin, en remplaçant α_{D-p-1} par $C_{D-p-1}\alpha_{D-p-2}$ et $\alpha_p = C_p\alpha_{p-1}$, on a

$$((q_1 - n + D - 3)\alpha_{D-p-1} + \alpha_{D-p-2}(C_{D-p-1} - 1))x_{v_1} = ((q_1 - n + D - 3)\alpha_p + \alpha_{p-1}(C_p - 1))x_{u_0}. \quad (1)$$

Si $D - p - 1 > p$ alors

- $\alpha_{D-p-1} > \alpha_p$,
- $\alpha_{D-p-2} > \alpha_{p-1}$,
- $C_{D-p-1} > C_p$,

et, pour que l'équation 1 soit vérifiée, on a nécessairement $x_{v_1} < x_{u_0}$. La rotation de l'arête v_0v_1 vers la position vide v_0u_0 augmente donc strictement q_1 et ce sans modifier le diamètre du graphe.

Ainsi, si $Bug_{n-D+2,p,D-p}$ est maximal alors $D - 2p \leq 1$, autrement dit $D - p = p$ si D est pair et $D - p = p + 1$ si D est impair. \square

Pour prouver la conjecture 21, il suffit de montrer pour quelle valeur de D , $q_1(Bug_{\lceil n/2 \rceil, \lfloor D/2 \rfloor, \lceil D/2 \rceil} \cdot D)$ atteint son maximum.

Théorème 2 Soit G un graphe connexe à $n \geq 9$ sommets, q_1 la plus grande valeur propre et D son diamètre. Alors, $q_1 \cdot D$ est maximum uniquement pour la bestiole $B^* = Bug_{\lceil n/2 \rceil, p, q}$ de diamètre $D = \lceil (n+1)/2 \rceil$, $p = \lfloor D/2 \rfloor$ and $q = \lceil D/2 \rceil$.

Preuve. Il est facile de voir que pour toute bestiole $B = Bug_{n,k,l}$, $q_1(B) < n - D + 1$. En effet, ajouter une arête entre les extrémités des deux pattes de B augmente strictement q_1 , on appelle $B + e$ le graphe obtenu. Ensuite la coalescence des sommets du seul chemin interne de $B + e$ jusqu'à ce qu'il soit réduit à une arête diminue aussi la valeur de q_1 . Le graphe obtenu à la suite de cette opération est K_{n-D+2} , le graphe complet à $n - D + 2$ sommets. On en déduit donc que

$$q_1(B) < 2(n - D + 1), \quad (2)$$

pour toute bestiole B de diamètre D .

Ainsi pour un nombre de sommet n et un diamètre D donnés, on a $q_1 \cdot D \leq 2D(n - D + 1)$ et, si n est fixé, cette borne supérieure atteint son maximum pour $D = (n + 1)/2$. On aura en fait besoin de bornes plus strictes, si on veut pouvoir faire une distinction entre les cas où $\frac{n-1}{2} \geq D \geq \frac{n+3}{2}$.

Soit $Bag_{p+2,3}$ le sac obtenu en remplaçant une arête de K_{p+2} par un chemin d'ordre 2. Par symétrie, on peut réduire les équations aux valeurs propres de $Q(Bag_{p+2,3})$ au système suivant,

$$\begin{cases} \lambda x_1 &= 2x_1 + 2x_2 \\ \lambda x_2 &= (p+1)x_2 + x_1 + px_3 \\ \lambda x_3 &= (p+1)x_3 + 2x_2 + (p-1)x_3 \end{cases} \quad (3)$$

Vu que le vecteur de Perron associé à q_1 est strictement positif, calculer $q_1(Bag_{p+2,3})$ équivaut à trouver la plus grande racine réelle de

$$P(\lambda) = \frac{1}{2p}(\lambda - 2p)((\lambda - p - 1)(\lambda - 2) - 2) - (\lambda - 2). \quad (4)$$

Par interpolation, on obtient l'inégalité suivante :

$$q_1(Bag_{p+2,3}) < 2 \left(p + 1 - \frac{1}{2p} \right). \quad (5)$$

Une borne plus stricte peut être obtenue pour $D \geq 5$. Soit $Bag_{p+2,4}$ le sac obtenu en remplaçant une arête de K_{p+2} par un chemin d'ordre 3. On a $q_1(Bag_{p+2,4}) < q_1(Bag_{p+2,3})$. On réduit les équations aux valeurs propres de $Q(Bag_{p+2,4})$ au système suivant,

$$\begin{cases} \lambda x_1 &= 2x_1 + x_1 + x_2 \\ \lambda x_2 &= (p+1)x_2 + x_1 + px_3 \\ \lambda x_3 &= (p+1)x_3 + 2x_2 + (p-1)x_3 \end{cases} \quad (6)$$

À nouveau, trouver la plus grande valeur réelle satisfaisant ce système équivaut à calculer la plus grande racine réelle de

$$P(\lambda) = \frac{1}{p}(\lambda - 2p)((\lambda - p - 1)(\lambda - 3) - 2) - 2(\lambda - 3), \quad (7)$$

et on obtient, par interpolation,

$$2 \left(p + 1 - \frac{1}{p+3} \right) < q_1 < 2 \left(p + 1 - \frac{1}{p+4} \right). \quad (8)$$

De façon similaire, on obtient un encadrement $q_1(Bug_{n,1,1})$. Les équations aux valeurs propres de $Q(Bug_{n,1,1})$ au système suivant,

$$\begin{cases} \lambda x_1 &= x_1 + x_2 \\ \lambda x_2 &= (p+1)x_2 + x_1 + px_3 \\ \lambda x_3 &= (p+1)x_3 + 2x_2 + (p-1)x_3 \end{cases} \quad (9)$$

Vu que le vecteur de Perron associé à q_1 est strictement positif, calculer $q_1(Bug_{p,2,2})$ équivaut à trouver la plus grande racine réelle de

$$P(\lambda) = \frac{1}{p}(\lambda - 2p)((\lambda - p - 1)(\lambda - 1) - 2) - 2(\lambda - 1). \quad (10)$$

Par interpolation, on obtient l'inégalité suivante :

$$2 \left(p + 1 - \frac{1}{p+3} \right) < q_1(Bug_{p,2,2}) < 2 \left(p + 1 - \frac{1}{p+4} \right). \quad (11)$$

On se place d'abord dans le cas où $n \geq 3$ est impair. Si $D = \frac{n+1}{2}$ alors

$$\begin{aligned} q_1(G_{(n+1)/2}^*) \cdot \frac{n+1}{2} &> 2\left(\frac{n+1}{2} - \frac{2}{n-1}\right) \frac{n+1}{2} \\ &> \frac{1}{2}\left(n^2 + 2n - 3 - \frac{8}{n-1}\right), \end{aligned}$$

En utilisant 5, on a

$$\begin{aligned} q_1(G_{(n-1)/2}^*) \cdot \frac{n-1}{2} &< 2\left(\frac{n+3}{2} - \frac{1}{n+1}\right) \frac{n-1}{2} \\ &< \frac{1}{2}\left(n^2 + 2n - 5 + \frac{4}{n+1}\right) \\ &< \left(n^2 + 2n - 3 - \frac{8}{n-1}\right), \end{aligned}$$

pour tout $n \geq 5$ et

$$\begin{aligned} q_1(G_{(n+3)/2}^*) \cdot \frac{n+3}{2} &< 2\left(\frac{n-1}{2} - \frac{1}{n-3}\right) \frac{n+1}{2} \\ &< \frac{1}{2}\left(n^2 + 2n - 5 - \frac{8}{n-3}\right) \\ &< \left(n^2 + 2n - 3 - \frac{8}{n-1}\right), \end{aligned}$$

pour tout $n \geq 5$.

Si $D \geq (n+5)/2$ ou $D \leq (n-3)/2$, alors $q_1(G_D^*) \cdot D < (n-3)(n+5)/2$. Comme $\frac{1}{2}(n-3)(n+5) = \frac{1}{2}(n^2 + 2n - 15) < \frac{1}{2}(n^2 + 2n - 3 - \frac{8}{n-1})$, le résultat suit.

Dans le cas où $n \geq 4$ est pair. Si $D = \frac{n}{2}$, en utilisant 11, on obtient

$$\begin{aligned} q_1(G_{n/2}^*) \cdot \frac{n}{2} &> 2\left(\frac{n+2}{2} - \frac{2}{n+6}\right) \frac{n}{2} \\ &> \frac{1}{2}\left(n^2 + 2n - 4 + \frac{24}{n+6}\right) \end{aligned}$$

Si $D = \frac{n+2}{2}$, en utilisant 8 on obtient

$$\begin{aligned} q_1(G_{(n+2)/2}^*) \cdot \frac{n+2}{2} &< 2\left(\frac{n}{2} - \frac{2}{n+6}\right) \frac{n+2}{2} \\ &< \frac{1}{2}\left(n^2 + 2n - 4 + \frac{16}{n+6}\right) \end{aligned}$$

Si $D \geq (n+4)/2$ ou $D \leq (n-2)/2$, alors $q_1(G_D^*) \cdot D < (n+4)(n-2)/2$. As $\frac{1}{2}(n+4)(n-2) = \frac{1}{2}(n^2 + 2n - 8) < \frac{1}{2}(n^2 + 2n - 4)$, le résultat suit. \square

4 Graphes maximisant q_1 avec un rayon fixé

On s'intéresse maintenant aux graphes qui, pour une valeur donnée du rayon maximisent la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 . Lorsque $r \geq 3$, ils appartiennent à la famille des sacs, $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$ définie par Hansen et Stevanović dans [8]. Ce sont les graphes obtenus à partir de la clique de taille $n-2r+3$ en remplaçant une arête par un chemin d'ordre $2r-1$. Une caractérisation du graphe extrême qui maximise q_1 est donné pour chaque valeur de r , ce qui permet de résoudre la conjecture 23.

Théorème 3 *Le graphe à n sommets qui maximise la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe avec de rayon r donné est*

- (i) *le graphe complet si $r = 1$ pour tout $n \geq 2$,*

- (ii) le graphe complémentaire d'un couplage parfait $\overline{\frac{n}{2}K_2}$ si $n \geq 4$ est pair et $\overline{P_3 \cup \frac{n-3}{2}K_2}$ si $n \geq 5$ est impair.
- (iii) le sac $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$ si $r \geq 3$ pour tout n tel que $n - 2r + 3 \geq 3$.

Preuve.

- (i) Cas $r = 1$. Vu que l'ajout d'arêtes dans un graphe augmente strictement la valeur de q_1 et que le rayon du graphe complet est 1, le graphe à n sommets et de rayon 1 qui maximise q_1 est évidemment le graphe complet K_n .
- (ii) Cas $r = 2$. Soit G un graphe à n sommets et de rayon $r = 2$. Comme $r = 2$, il est impossible que G ait un sommet dominant, donc $\Delta(G) \leq n - 2$ et par conséquent $q_1 \leq 2(n - 2)$.
- (a) Si n est pair, soit $H = \overline{(n/2)K_2}$, soit x le vecteur de Perron associé à q_1 . Comme les composantes de x sont strictement positive, par symétrie on a $x_u = x_v$ pour tous sommets u et v de H . D'où, pour tout sommet u de H , l'équation aux valeurs propres suivante :

$$q_1 x_u = (n - 2)x_u + (n - 2)x_u, \quad (12)$$

et, puisque $x_u > 0$, $q_1 = n - 2$. Ceci conclut le cas où n est pair et $r = 2$.

- (b) Si n est impair, soit $H = \overline{((n-1)/2)K_2 \cup P_3}$. On a $\bar{d}(H) = n - 2 - 1/n$, d'où $q_1(H) > 2(n - 2 - 1/n)$. On en déduit que le graphe $G^* = (V, E)$ à n et de rayon $r = 2$ qui maximise q_1 est de degré maximum $\Delta(G^*) = n - 2$. De plus, puisque

$$q_1 \leq \max_{v \in V} d_v + \sum_{w \sim v} \frac{d_w}{d_v},$$

il existe un sommet v de G^* tel que

$$d_v + \sum_{w \sim v} \frac{d_w}{d_v} > 2(n - 2 - \frac{1}{n}). \quad (13)$$

Ceci implique que $d_v = n - 2$ et que $\sum_{w \sim v} \frac{d_w}{n-2} > n - 2 - \frac{2}{n}$. Or, si plus de deux voisins de v sont de degré inférieur ou égal à $n - 3$, alors

$$\begin{aligned} \sum_{w \sim v} \frac{d_w}{n-2} &< n - 4 + 2 \frac{n-3}{n-2} \\ &= n - 2 - \frac{2}{n-2} \\ &< n - 2 - \frac{2}{n}. \end{aligned}$$

On en déduit donc que v a $n - 3$ voisins de degré $n - 2$ et un voisin w de degré $n - 2$ ou $n - 3$, notons $\mathcal{N}(v)$ l'ensemble des voisins de v . Supposons dans un premier temps que $d(w) = n - 3$. Soit u l'unique sommet qui n'est pas voisin de v . Alors u est voisin de w , autrement on pourrait ajouter l'arête uw tout en gardant une excentricité supérieure ou égale à 2 pour u et w . On en déduit donc, puisque $d(w) = n - 3$, que u a deux voisins w_1 et w_2 qui ne sont pas des voisins de w et sont par conséquent des voisins de v .

Intéressons nous maintenant aux voisins de v de degré $n - 2$ autres que w_1 et w_2 , si v a un voisin de degré $n - 3$, et à tous ses voisins sinon. On peut les séparer en deux ensembles disjoints : A contenant ceux qui sont adjacents à tous les sommets de $\mathcal{N}(v)$ (et ne sont donc pas adjacents à u) et B ceux qui sont adjacents à u (qui ne sont donc pas adjacents à un unique sommet de B auquel ils peuvent être appariés).

Par symétrie, on sait que les coordonnées du vecteur de Perron correspondant à un sommet de A (resp. B et $\{w_1, w_2\}$) sont toutes identiques. Notons que v appartient à A . On a donc, pour $v_a \in A$ et $v_b \in B$:

$$q_1 x_a = (n-2)x_a + (|A|-1)x_a + |B|x_b + x_w + 2x_{w_1}, \quad (14)$$

$$q_1 x_b = (n-2)x_b + (|B|-2)x_b + |A|x_a + x_u + x_w + 2x_{w_1}, \quad (15)$$

$$q_1 x_u = (|B|+3)x_u + |B|x_b + x_w + 2x_{w_1}, \quad (16)$$

$$q_1 x_w = (n-3)x_w + |A|x_a + |B|x_b + x_u, \quad (17)$$

$$q_1 x_{w_1} = (n-2)x_{w_1} + |A|x_a + |B|x_b + x_u + x_{w_1}. \quad (18)$$

Montrons maintenant qu'il est impossible que $x_w \geq x_u$. En effectuant la différence de 14 et 18, on obtient,

$$(q_1 - n + 3)(x_a - x_{w_1}) = x_w - x_u. \quad (19)$$

En effectuant la différence entre 17 et 16, on a

$$q_1(x_w - x_u) = (n-4)x_w - (|B|+2)x_u + |A|x_a - 2x_{w_1}.$$

ce qui est équivalent à

$$(q_1 - |B| - 2)(x_w - x_u) = (n - |B| - 6)x_w + (|A| - 2)x_a + \frac{2}{q_1 - n + 3}(x_w - x_u).$$

Pour finir on a,

$$(q_1 - |B| - 2 - \frac{2}{q_1 - n + 3})(x_w - x_u) = (n - |B| - 6)x_w + (|A| - 2)x_a. \quad (20)$$

Si $|B| \leq n - 7$, alors $|A| \geq 2$ et $q_1 - |B| - 2 - \frac{2}{q_1 - n + 3} \geq n + 2$, comme le vecteur de Perron x est strictement positif, on en déduit que $x_w > x_u$. La rotation de l'arête $w_1 u$ autour de w_1 vers la position inoccupée $w_1 w$ augmente strictement la valeur de q_1 , ce qui contredit la maximalité de G^* . On en conclut que G^* a $n - 1$ sommets de degré $n - 2$. Le sommet restant, que l'on appellera u , est nécessairement de degré inférieur ou égal à $n - 3$, sans quoi le graphe aurait soit un sommet de degré $n - 1$, ce qui est interdit par la valeur du rayon $r = 2$, soit $m = \frac{(n-2)n}{2}$ arêtes, ce qui n'est pas un nombre entier.

On va, en conséquence, séparer les sommets de G en trois ensembles disjoints : le singleton $\{u\}$, A l'ensemble des sommets $V \setminus \{u\}$ qui ne sont pas adjacents pas adjacents à u et B l'ensemble des sommets $V \setminus \{u\}$ qui sont adjacents à u . Par symétrie, on sait que les coordonnées du vecteur de Perron correspondant à un sommet de A (resp. B) sont toutes identiques. On a donc, pour tous $v_a \in A$ et $v_b \in B$:

$$q_1 x_a = (n-2)x_a + (n - |B| - 2)x_a + |B|x_b, \quad (21)$$

$$q_1 x_b = (n-2)x_b + (|B| - 2)x_b + (n - |B| - 1)x_a + x_u, \quad (22)$$

$$q_1 x_u = |B|x_u + |B|x_b. \quad (23)$$

En tenant compte du fait que $x > 0$, on en déduit que q_1 est la plus grande racine réelle positive de :

$$P_b(x) = x^3 - (b + 3n - 8)x^2 + ((3n - 8)b + 2n^2 - 12n + 16)x - 2b^2 - 2bn^2 + 14bn - 20b, \quad (24)$$

avec $b = |B|$. Soit b et b' deux entier positifs, tels que $b \leq b' \leq n - 2$ alors, pour tout $x \in \mathbb{R}^+$,

$$\frac{P_{b'}(x) - P_b(x)}{b' - b} = -x^2 + (3n - 8)x - 2(b' + b) - 2(n^2 - 7n + 10).$$

Rappelons que nous nous intéressons qu'aux graphes tels que $2n - 4 - 2/n < q_1 < 2n - 4$ On peut donc se restreindre au cas où $x \in]2n - 4 - 2/n, 2n - 4[$. Si $n \geq 4$, la fonction $f(x) = -x^2 + (3n - 8)x$ est décroissante dans cet intervalle. D'où,

$$\begin{aligned} \frac{P_{b'}(x) - P_b(x)}{b' - b} &\geq -(2n - 4)^2 + (3n - 8)(2n - 4) - 2(b' + b) - 2(n^2 - 7n + 10), \\ &= 2(n - 2) - 2(b' + b) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \frac{P_{b'}(x) - P_b(x)}{b' - b} &\leq -(2n - 4 - \frac{2}{n})^2 + (3n - 8)(2n - 4 - \frac{2}{n}) - 2(b' + b) - 2(n^2 - 7n + 10), \\ &= 2(n - 2) - 2(b' + b) - \frac{4}{n^2} \end{aligned}$$

Ainsi, si $(b' + b) \geq (n - 2)$, $P_{b'}(x) < P_b(x)$ pour tout $x \in]2n - 4 - \frac{2}{n}, 2n - 4[$, ce qui implique que $q_1(G_B)$ augmente strictement avec $|B|$ dès que $|B| \geq \frac{n-3}{2}$ ($b' = \frac{n-3}{2}$ et $b = \frac{n-1}{2}$).

Il nous reste donc deux candidats pour l'optimalité de q_1 sous la contrainte $r = 2$: celui pour lequel $|B| = n - 3$, $\overline{P_3 \cup \frac{n-3}{2}K_2}$ et celui pour lequel $|B| = 2$, $\overline{S_{n-2} \cup K_2}$. On ne peut pas avoir de plus grande (resp. de plus faible valeur de $|B|$) que $n - 3$ (resp. 2) et avoir simultanément $r = 2$. Il nous reste donc à évaluer q_1 pour chacun de ces graphes.

Encadrons d'abord $q_1(\overline{S_{n-2} \cup K_2})$. C'est la plus grande racine réelle de

$$P_2(x) = x^3 - (3n - 6)x^2 + (2n^2 - 6n)x - 4n^2 + 28n - 48, \quad (25)$$

d'où $2n - 4 - \frac{2}{n} < q_1(\overline{S_{n-2} \cup K_2}) < 2n - 4 - \frac{1}{n}$, $n \geq 5$.

On procède de la même façon pour encadrer $q_1(\overline{P_3 \cup \frac{n-3}{2}K_2})$. C'est la plus grande racine réelle de

$$P_{n-3}(x) = x^3 - (4n - 11)x^2 + (5n^2 - 29n + 40)x - 2(n^3 - 9n^2 + 25n - 21). \quad (26)$$

d'où $2n - 4 - \frac{1}{n} < q_1(\overline{S_{n-2} \cup K_2}) < 2n - 4$, $n \geq 5$.

Ceci conclut le cas où n est impair et $r = 2$.

- (iii) On montre en premier lieu que le degré le plus élevé des sommets d'un graphe à n sommets et de rayon r maximisant q_1 est $\Delta = n - 2r + 2$. D'après [8], on sait que pour qu'un graphe soit de rayon r , on doit avoir $\Delta \leq n - 2r + 2$.

Le sac $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$ à pour rayon r et contient $K_{n-2r+3} - e$ comme un sous-graphe induit. La plus grande valeur propre de ce dernier graphe est

$$\begin{aligned} q_1(K_{n-2r+3} - e) &= \frac{3}{2}(n - 2r + 3) - 3 + \frac{\sqrt{(n - 2r + 3)^2 + 4(n - 2r + 3) - 12}}{2} \\ &> 2(n - 2r + 3) - 3, \end{aligned}$$

on a donc

$$q_1(Bag_{n-2r+3, 2r-1}) > 2n - 4r + 3.$$

Soit G un graphe à n sommets et de rayon r maximisant la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe, alors G satisfait aussi $q_1(G) > 2n - 4r + 3$, d'où, puisque $2\Delta > q_1$,

$$\Delta(G) \geq n - 2r + 2. \quad (27)$$

On cherche maintenant un graphe de rayon r et degré maximum $\Delta \geq n - 2r + 2$ qui soit critique vis-à-vis de l'ajout d'arêtes, autrement dit, tel que l'ajout d'une arête quelconque réduise strictement son rayon.

Un tel graphe a au moins un arbre couvrant T obtenu à partir d'une étoile de degré Δ en remplaçant deux arêtes par des chemins d'ordre s r et $r - 1$. Soit v_0 le sommet de plus haut degré de ce graphe, $U = \{u_i, i = 1, \dots, \Delta - 2\}$, les sommets pendants adjacents à v_0 , $V^+ = \{v_i, i = 1, \dots, r\}$ (resp. $V^- = \{v_{-i}, i = 1, \dots, r - 1\}$) les sommets d'un des chemins (resp. de l'autre chemin) de longueur r attachés à v_0 où $d(v_0, v_i) = i$ (resp. $d(v_0, v_{-i}) = i$).

Un certain nombre d'ajouts d'arêtes sont interdits car ils diminuent strictement le rayon de T . En particulier, on ne peut donc pas ajouter une arête entre

- deux sommets de $\{v_0\} \cup V^+ \cup V^-$, à l'exception de v_{-r} et v_r ,
- un sommet de U et un sommet v_i de V^+ ou v_{-i} de V^- , où $i \geq 3$.

Tout autre ajout d'une seule arête est possible et ne modifie pas le rayon. Cependant tout sommet de U lié à v_2 ne peut être relié à un sommet de U lié à v_{-2} , car la distance entre v_{-2} et v_2 passerait de 4 à 3, et le rayon serait diminué d'autant. Mis à part ces restrictions, toutes les arêtes peuvent être ajoutées.

On obtient ainsi un graphe tel que $U = L \sqcup C \sqcup R$ où

- les sommets de L sont adjacents à v_0, v_{-1}, v_{-2} à ceux de C et entre eux,
- les sommets de C sont adjacents à v_{-1}, v_0, v_1 à ceux de L , ceux de R et entre eux,
- les sommets de R sont adjacents à v_0, v_1, v_2 à ceux de C et entre eux,
- $v_{-(r-1)}$ et v_r sont adjacents.

Notons que cette construction suppose que $r \geq 3$. Dans le cas contraire, v_2 ou v_{-2} n'existerait pas.

On notera ces graphes $G_{L,C,R}$. Ce sont par construction les seuls graphes de rayon r et de degré maximal $\Delta = n - 2r + 3$ maximaux pour l'ajout d'arête et donc les seuls candidats pour la maximisation de q_1 pour un rayon donné. Pour montrer que les graphes qui maximisent effectivement q_1 avec un rayon donné sont les sacs $Bag_{n-2r+3,2r-1}$, il suffit de montrer que L et R sont vides à l'optimum.

Soit $G^* = G_{L,C,R}$ un graphe qui maximise q_1 .

Supposons en premier lieu que $R = \emptyset$. Supposons aussi que L et C sont non vides. Déplacer un sommet l de L à C revient à effectuer une rotation de l'arête (l, v_{-2}) vers l'arête inexistante (l, v_1) . À l'inverse déplacer un sommet c de C à L revient à effectuer une rotation de l'arête (c, v_1) vers l'arête inexistante (c, v_{-2}) . Soit x le vecteur de Perron associé à q_1 , comme $x_{v_{-2}} \leq x_{v_1}$ ou $x_{v_1} \leq x_{v_{-2}}$, d'après la proposition 2, un de ces deux déplacements augmente strictement la valeur de q_1 . Puisque G^* maximise q_1 , c'est une contradiction et L ou C doit être vide et G^* est bien le sac $Bag_{n-2r+3,2r-1}$.

Supposons maintenant que L et R sont non-vides. Soit l un sommet de L , si $x_{v_{-2}} \leq x_{v_1}$, alors la rotation de l'arête (l, v_{-2}) vers l'arête inexistante (l, v_1) augmente strictement la valeur de q . À nouveau, c'est une contradiction. On a donc nécessairement

$$x_{v_{-2}} > x_{v_1}, \quad (28)$$

et de la même façon

$$x_{v_2} > x_{v_{-1}}. \quad (29)$$

D'après les équations aux valeurs propres, pour $i \in \{-r, \dots, -3\} \cup \{3, \dots, r\}$,

$$4x_r < q_1 x_r = 2x_i + x_{r-1} + x_{-(r-1)},$$

autrement dit

$$2x_r < x_{r-1} + x_{-(r-1)},$$

On procède par induction pour montrer que $x_{-3} + x_3 < x_{-2} + x_2$. Supposons que

$$x_{-i-1} + x_{i+1} < x_{-i} + x_i \quad (30)$$

Si les sommets v_{-i} et v_i sont de degré 2, alors

$$2(x_{-i} + x_i) < (x_{-i+1} + x_{-i-1}) + (x_{i-1} + x_{i+1}),$$

et d'après l'hypothèse de récurrence (30), on obtient

$$x_{-i} + x_i < x_{-i+1} + x_{i-1}.$$

Le derniers sommets de degré 2 le long de la maille sont v_3 et v_{-3} , et on a bien

$$x_{-3} + x_3 < x_{-2} + x_2. \quad (31)$$

Traitons maintenant le cas des indices $-1, 0$ et 1 . L'addition de 28 et 29 donne

$$x_{-2} + x_2 > x_{-1} + x_1. \quad (32)$$

On suppose sans perte de généralité que $\max(|L|, |R|) = |R|$. Les équations aux valeurs propres pour x_{-2} et x_2 donnent

$$\begin{aligned} q_1(G^*)(x_{-2} + x_2) &= (|R| + 2)(x_{-2} + x_2) + (x_{-3} + x_3) + (x_{-1} + x_1) \\ &\quad + \sum_{l \in L} x_l \sum_{r \in R} x_r - (|R| - |L|)x_{-2} \\ &< (|R| + 2)(x_{-2} + x_2) + 2(x_{-2} + x_2) + \sum_{l \in L} x_l \sum_{r \in R} x_r, \end{aligned}$$

d'où

$$(q_1 - |R| - 4)(x_{-2} + x_2) < \sum_{l \in L} x_l \sum_{r \in R} x_r. \quad (33)$$

Les équations aux valeurs propres pour x_{-1} et x_1 donnent

$$\begin{aligned} q_1(G^*)(x_{-1} + x_1) &= (|L| + |C| + |R| + 2)(x_{-1} + 2x_0 + x_1) + (x_{-2} + x_2) + \\ &\quad \sum_{l \in L} x_l + 2 \sum_{c \in C} x_c + \sum_{r \in R} x_r \\ &< (|L| + |C| + |R| + 2)(x_{-1} + x_1) + 2x_0 + (q_1 - |R| - 3)(x_{-2} + x_2). \end{aligned}$$

Comme $x_{-2} + x_2 > x_{-1} + x_1$, et $q_1 > \Delta + 1 = |L| + |C| + |R| + 3$ on obtient

$$(1 - |L| - |C|)(x_{-2} + x_2) > 2x_0. \quad (34)$$

Comme x_{-2} , x_2 et x_0 sont strictement positifs, cette expression n'est vraie que si L et C sont vides. Ce qui contredit nos hypothèses.

Le seul cas restant est le cas où L et R sont vides, autrement le cas où $G^* = \text{Bag}_{n-2r+3, 2r-1}$.

□

On va maintenant utiliser ce résultat pour prouver la conjecture 23.

Proposition 1 *Soit G un graphe connexe à $n \geq 4$ sommets, soit q_1 la plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe et r son rayon. Alors, si $n \geq 9$, $q_1 \cdot r$ est maximal uniquement pour le sac $\text{Bag}_{n-2r+3, 2r-1}$ de rayon $r = \lfloor (n+3)/4 \rfloor$.*

De plus, si $4 \leq n \leq 8$, $q_1 \cdot r$ est maximum uniquement pour le graphe complémentaire d'un couplage parfait si n est pair et le graphe complémentaire de $P_3 \cup \frac{n-3}{2}$ si n est impair, et si $1 \leq n \leq 3$ $q_1 \cdot r$ est maximum uniquement pour K_n .

Preuve. Si $r = 1$ alors $q_1 \cdot r \leq 2n - 2$ et la borne est atteinte par le graphe complet.

Si $r = 2$ alors $q_1 \cdot r \leq 4n - 8$, et la borne est atteinte pour le graphe complémentaire d'un couplage parfait si n est pair. De plus, $q_1 \cdot r \geq 4n - 8 - \frac{2}{n}$ pour le graphe complémentaire de $P_3 \cup \frac{n-3}{2}$ si n est impair.

Si $r \geq 3$ alors $q_1 \cdot r \geq 2\lfloor (n+3)/4 \rfloor (n - 2\lfloor (n+3)/4 \rfloor + 2) \geq \frac{n(n+1)}{4}$ pour tout sac de rayon $r = \lfloor (n+3)/4 \rfloor$.

Montrons que pour $n \geq 13$, $q_1 \cdot r$ n'est maximal ni pour $r = 1$ ni pour $r = 2$. D'abord,

$$\begin{aligned} 2 \min \left(q_1 \left(P_3 \cup \frac{n-3}{2} K_2 \right), q_1 \left(\frac{n}{2} K_2 \right) \right) - q_1(K_n) &\geq (4n - 8) - \frac{2}{n} - (2n - 2) \\ &= 2n - 10 - \frac{2}{n} \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

pour tout $n \geq 6$, et, dans ce cas, $q_1 \cdot r$ n'est maximal pas pour $r = 1$. Ensuite

$$\begin{aligned} \lfloor \frac{n+3}{4} \rfloor q_1 \left(Bag_{n-2\lfloor \frac{n+3}{4} \rfloor + 3, 2\lfloor \frac{n+3}{4} \rfloor - 1} \right) &= 2 \max \left(q_1 \left(P_3 \cup \frac{n-3}{2} K_2 \right), q_1 \left(\frac{n}{2} K_2 \right) \right) \\ &\geq \frac{n(n+1)}{4} - 4n + 8 \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

si et seulement si $n^2 - 15n + 32 \geq 0$, ce qui est vrai pour tout $n \geq 13$, et, dans ce cas, $q_1 \cdot r$ n'est maximal pas pour $r = 2$.

Les inégalités sur de la preuve de la proposition 2 peuvent être intégralement reprises dans celle-ci. En effet, d'une part, les bornes inférieures sont obtenues pour des sous graphes de $Bug_{n-D+3, \lfloor D/2 \rfloor, \lceil D/2 \rceil}$ qui sont aussi des sous-graphes de $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$, elles sont donc valides pour ce dernier. D'autre part les bornes supérieures sont obtenues pour, le graphe complet K_{n-1} , $Bag_{n-1,3}$ et $Bag_{n-2,4}$ qui peuvent être obtenus à partir de $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$, pour $r \geq 3$.

D'où, si n est pair et $2r - 1 = \frac{n}{2}$, en utilisant 11, on obtient

$$\begin{aligned} q_1(Bag_{\frac{n}{2}+2, \frac{n}{2}}) \cdot \frac{n}{2} &> \left(\frac{n+2}{2} - \frac{2}{n+6} \right) \frac{n}{2} \\ &> \frac{1}{4} \left(n^2 + 2n - 4 + \frac{24}{n+6} \right) \end{aligned}$$

Si $2r - 1 = \frac{n+2}{2}$, en utilisant 8 on obtient

$$\begin{aligned} q_1(Bag_{\frac{n}{2}+1, \frac{n}{2}+1}) \cdot \frac{n+2}{2} &< \left(\frac{n}{2} - \frac{2}{n+6} \right) \frac{n+2}{2} \\ &< \frac{1}{4} \left(n^2 + 2n - 4 + \frac{16}{n+6} \right) \end{aligned}$$

Si $2r - 1 \geq (n+4)/2$ ou $2r - 1 \leq (n-2)/2$, alors $q_1(Bag_{n-2r+3, 2r-1}) \cdot r < (n+4)(n-2)/4$. As $\frac{1}{4}(n+4)(n-2) = \frac{1}{4}(n^2 + 2n - 8) < \frac{1}{4}(n^2 + 2n - 4 + \frac{24}{n+6})$. Cela conclut la preuve pour n pair.

Si n est impair et $2r - 1 = \frac{n+1}{2}$, en utilisant 11, on obtient

$$\begin{aligned} q_1(Bag_{\frac{n-1}{2}+2, \frac{n+1}{2}}) \cdot \frac{n+1}{2} &> \left(\frac{n+1}{2} - \frac{2}{n+5} \right) \frac{n+1}{2} \\ &> \frac{1}{4} \left(n^2 + 2n - 3 + \frac{16}{n+5} \right). \end{aligned}$$

Si $2r - 1 = \frac{n+3}{2}$, en utilisant 8 on obtient

$$\begin{aligned} q_1(Bag_{\frac{n-1}{2}+1, \frac{n+3}{2}}) \cdot \frac{n+2}{2} &< \left(\frac{n-1}{2} - \frac{2}{n+5} \right) \frac{n+3}{2} \\ &< \frac{1}{4} \left(n^2 + 2n - 7 + \frac{8}{n+6} \right). \end{aligned}$$

Si $2r - 1 = \frac{n-1}{2}$, en utilisant 8 on obtient

$$\begin{aligned} q_1(Bag_{\frac{n-1}{2}+3, \frac{n-1}{2}}) \cdot \frac{n+2}{2} &< 2 \left(\frac{n+3}{2} - \frac{2}{n+7} \right) \frac{n-1}{2} \\ &< \frac{1}{4} \left(n^2 + 2n - 4 + \frac{32}{n+7} \right). \end{aligned}$$

Si $2r - 1 \geq (n+5)/2$ ou $2r - 1 \leq (n-3)/2$, alors $q_1(Bag_{n-2r+3, 2r-1}) \cdot r < (n-3)(n+5)/4$. As $\frac{1}{4}(n-3)(n+5) = \frac{1}{4}(n^2 + 2n - 15) < \frac{1}{4}(n^2 + 2n - 3 + \frac{16}{n+5})$, le résultat, pour $r \geq 3$ et donc $n \geq 13$ suit.

Pour $1 \leq n \leq 12$, on teste les valeurs de $q_1 \cdot D$ pour le graphe complet, \overline{PM} , où $PM = \frac{n}{2} K_2$ si n est pair et $PM = P_3 \cup \frac{n-3}{2} K_2$ si n est impair, et $B = Bag_{n-2\lfloor (n+3)/4 \rfloor + 3, 2\lfloor (n+3)/4 \rfloor - 1}$

n	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$q_1(K_n)$	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22
$2 \cdot q_1(\overline{PM})$	-	-	8	11,56	16	19,59	24	27,65	32	35,70	40
$\lfloor \frac{n+3}{4} \rfloor q_1(B)$	-	3	8	11,56	15,52	19,54	23,58	29,21	35,30	41,37	47,43

Les cas d'égalité correspondent aux valeurs de n pour lesquelles $\overline{PM} = B$. □

5 Graphes minimisant et maximisant q_1 avec une maille fixée

Théorème 4 *Le graphe connexe à n sommets qui minimise la plus grande valeur propre du Laplacien avec une maille $g \geq n/2$ donnée est la sucette $Lol_{n,g}$.*

Preuve. Le graphe G^* qui minimise q_1 avec une maille fixée est nécessairement unicyclique puisque la suppression d'une arête diminue strictement la valeur de q_1 . G^* est donc constitué d'un cycle auquel sont attachés des arbres pendants. Par le lemme 4, on sait que ces arbres pendants doivent être des chemins. Montrons que pour que q_1 soit minimum, il ne doit y avoir qu'un seul chemin pendant attaché au cycle de G^* .

Soit G un graphe unicyclique à n sommet et de maille g constitué d'un cycle et $p \geq 1$ de chemins pendants, et x le vecteur propre de Perron associé à q_1 . Soit $P = v_0 v_1 \dots v_k$ un chemin pendant de G de longueur k , où v_k est un sommet pendant et v_0 un sommet du cycle, d'après le lemme 5,

$$x_{v_0} \leq x_{v_1} \leq \dots \leq x_{v_k}.$$

Soit $u = w_l$ un sommet du cycle de G degré 3 à distance l de v_0 , tel que tous les sommets entre v_0 et u soient de degré 2. On définit la suite $(\alpha_i)_{i=1, \dots, \min(k,l)}$ par $\alpha_i = \frac{x_{w_i} - x_{v_i}}{x_{w_1} - x_{v_1}}$. On a bien sur $\alpha_1 = 1$, et puisque

$$(q_1 - 2)(x_{w_1} - x_{v_1}) = (x_{w_2} - x_{v_2}),$$

$\alpha_2 = q_1 - 2 > 2$. Ensuite comme

$$(q_1 - 2)(x_{w_i} - x_{v_i}) = (x_{w_{i-1}} - x_{v_{i-1}}) + (x_{w_{i+1}} - x_{v_{i+1}}),$$

on a $\alpha_{i+1} = (q_1 - 2)\alpha_i - \alpha_{i-1} > 2\alpha_i - \alpha_{i-1}$. Puisque $\alpha_2 > \alpha_1$ et que $\alpha_i > \alpha_{i-1}$ implique que $\alpha_{i+1} > \alpha_i$, on peut conclure que la suite $(\alpha_i)_{i=1, \dots, \min(k,l)}$ est strictement croissante.

Si $l > k$ alors

$$\begin{aligned} (q_1 - 1)x_{v_k} &= x_{v_{k-1}} \\ (q_1 - 2)x_{w_k} &= x_{w_{k-1}} + x_{w_{k+1}} \end{aligned}$$

ce qui implique que $(q_1 - 2)(x_{w_k} - x_{v_k}) = (x_{w_{k-1}} - x_{v_{k-1}}) + (x_{w_{k+1}} - x_{v_k})$ et par suite que

$$(q_1 - 3 - \frac{\alpha_{k-1}}{\alpha_l})(x_{w_k} - x_{v_k}) = (\frac{\alpha_{k+1}}{\alpha_k} - 1)x_{w_l} > 0.$$

Si $k \geq l$ alors, on a

$$\begin{aligned} (q_1 - 2)x_{v_{l-1}} &= x_{v_{l-2}} + x_l \\ (q_1 - 3)x_{w_l} &= x_{w_{l-1}} + x_s + x_t. \end{aligned}$$

ce qui implique que $(q_1 - 3)x_{v_l} < x_{v_{l-2}}$ et par suite,

$$(q_1 - 4)(x_{w_{l-2}} - x_{v_{l-2}}) > (\frac{\alpha_{l-1}}{\alpha_{l-2}} - 1)x_{w_{l-2}} > 0.$$

Ainsi pour tout $i \in \{1, \dots, k\}$, $x_{w_i} > x_{v_i}$ et toute rotation de $v_{i+1}v_i$ vers $v_{i+1}w_i$ augmente strictement q_1 .

On en conclut que si G contient deux chemins pendants séparés par un chemin interne de longueur inférieure ou égale à la taille du plus long des deux, alors G n'est pas minimal. Si $g \leq n/2$ alors $n - g \geq g$, donc par la règle des tiroirs de Dirichlet-Schläfli, si G a plus de deux chemins pendants, on pourra en trouver une paire satisfaisant cette propriété, et G n'est donc pas minimal. \square

Théorème 5 *Le graphe connexe à n sommets qui maximise la plus grande valeur propre du Laplacien avec une maille g le graphe complet si $g = 3$, l'ensemble des graphes biparti complets, à l'exception de l'étoile, $n = 4$ et le navet $Tu_{n,g}$ dans tous les autres cas.*

Preuve. Le cas $g = 3$ est évident. Si $g \geq 4$, il est montré dans la preuve du théorème 27 de [7] que tout graphe contenant au moins deux cycles satisfait $q_1 \leq n - 3\lceil g/2 \rceil + 6$ pour un nombre de sommets n et une maille égale à g donnés.

Pour $g = 4$, on a $q_1 \leq n$, l'égalité est vérifiée si et seulement si G est un graphe biparti complet $K_{n-p,p}$, $p \geq 2$. Dans le cas contraire, soit G est biparti non-complet et $q_1 < n$, soit G contient un cycle de longueur impaire. Soient v_k et v_l les sommets adjacents satisfaisant $d_{v_k} + d_{v_l} = \max v_i \sim v_j d_{v_i} + d_{v_j}$. Soit ils sont sur le cycle de longueur impaire et $d_{v_k} + d_{v_l} \leq 2 + 2 + (n - 5) = n - 1$ soit ils sont sur un cycle de longueur paire et dans ce cas $d_{v_k} + d_{v_l} \leq 2 + 2 + (n - 4 - 1) = n - 1$.

Montrons que le graphe unicyclique qui maximise q_1 est le navet $Tu_{n,g}$ et que dans le cas où $g \geq 5$ Soit $G^* = (V, E)$ un graphe unicyclique à n sommets et de maille g qui maximise q_1 . Notons que $\Delta(G^*) \leq n - g + 2$. Soit u un sommet du cycle, alors $d_u + m_u \leq d_u + \frac{d_u + 2 + (n - g - d_u - 2)}{d_u} = d_u + \frac{n - g}{d_u}$. Or $d_u + \frac{n - g}{d_u}$ décroît pour $2 \leq d_u \leq \sqrt{n - g}$ et croît pour $\sqrt{n - g} \leq d_u \leq n - g + 2$, donc $d_u + m_u \leq \max(2 + \frac{n - g + 2}{d_u}, \Delta + \frac{n - g + 2}{\Delta}) \leq n - g + 3$.

On sait que $q_1(G^*) < \max_{u \in V} d_u + m_u$, donc si $\Delta \leq n - g + 1$, $q_1(G^*) < n - g + 1 + \frac{n - g + 2}{n - g + 1} < n - g + 2$. On sait aussi que $q_1(Tu_{n,g}) > \Delta(Tu_{n,g}) + 1 = n - g + 3$, donc, puisque G^* est maximal, $\Delta(G^*) = n - g + 2$. Autrement dit G^* est le navet $Tu_{n,g}$.

Si $g = 4$, alors $q_1(Tu_{n,g}) < \max v_i \sim v_j d_{v_i} + d_{v_j} = n - 1 = q_1(K_{n-p,p})$ $p \geq 2$. Si $g \geq 6$, $q_1(Tu_{n,g}) > n - g + 3 \geq n - 3g/2 + 6$, alors le navet est le graphe de maille g qui maximise q_1 . Si $g = 5$, si soit un graphe non unicyclique G , si G ne contient pas deux cycles de longueur cinq partageant au moins deux sommets alors, soit G' un sous-graphe de G contenant deux cycles. On a $|G| = 8$ et $q_1 \leq \max v_i \sim v_j d_{v_i} + d_{v_j} = n - 8 + 3 + 2$ ou $|G| \geq 9$ et $\max v_i \sim v_j d_{v_i} + d_{v_j} = n - 9 + 3 + 3$. Le même raisonnement implique que si G contient plus de deux cycles alors $q_1 \leq n - 3$. Il reste donc deux cas à considérer, celui où les deux cycles ont deux sommets communs et celui où ils en ont trois. Si les deux cycles ont seulement deux sommets communs alors, $\max v_i \sim v_j d_{v_i} + m_{v_i} = n - 5 + \frac{n - 1}{n - 5} < n - 3$. S'il en ont trois alors $\max v_i \sim v_j d_{v_i} + m_{v_i} = n - 3 + \frac{n - 1}{n - 3} > n - 2$. \square

6 Conclusion

Les résultats obtenus pour le diamètre et le rayon, ainsi que ceux obtenus pour la maille dans [7] mettent en évidence l'existence d'une structure de graphe pour laquelle le rayon spectral est extrémal lorsque qu'un invariant de distance est fixé. Pour un diamètre fixé D , le graphe maximal est une bestiole de diamètre D dont les chemins pendants dont les longueurs respectives sont les plus proches possible. Pour un rayon fixé r , le graphe maximal est, une exception près ($r = 2$), un sac de rayon r . Ces graphes étaient les graphes extrêmes des conjectures 21 et 23. Enfin, pour une valeur de la maille fixée, le graphe qui minimise q_1 est le navet $Tu_{n,g}$ et, si $g \leq n/2$ le graphe qui minimise q_1 est la sucette $Lol_{n,g}$.

D'après les conjectures 29 et 31 de [7] sur la proximité Π et l'éloignement ρ , on s'attend à ce que les cerfs-volants soient des graphes extrêmes pour la maximisation de q_1 avec Π ou ρ fixé à une valeur, pourvu qu'il existe un cerf-volant ayant cette proximité ou cet éloignement.

Références

- [1] Francesco Belardo, Enzo Maria Li Marzi, and Slobodan K. Simić. Some results on the index of unicyclic graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 416(2-3) :1048–1059, 2006.
- [2] Dragoš Cvetković, Peter Rowlinson, and Slobodan K. Simić. Eigenvalue bounds for the signless Laplacian. *Publ. Inst. Math. (Beograd) (N.S.)*, 81(95) :11–27, 2007.
- [3] Dragoš Cvetković, Peter Rowlinson, and Slobodan K. Simić. Signless Laplacians of finite graphs. *Linear Algebra Appl.*, 423(1) :155–171, 2007.
- [4] Dragos Cvetkovic and Slobodan K. Simic. Towards a spectral theory of graphs based on the signless laplacian, i. *Publication de l'Institut Mathématique (Beograd)*, 85(99) :19–33, 2009.
- [5] Dragoš M. Cvetković, Michael Doob, and Horst Sachs. *Spectra of graphs, theory and applications*. Johann Ambrosius Barth, Heidelberg, third edition, 1995.
- [6] Lihua Feng and Guihai Yu. The signless Laplacian spectral radius of unicyclic graphs with graph constraints. *Kyungpook Math. J.*, 49 :123–131, 2009.
- [7] Pierre Hansen and Claire Lucas. Bounds and conjectures for the signless laplacian index of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 432(12) :3319–3336, 2010.
- [8] Pierre Hansen and Dragan Stevanović. On bags and bugs. *Discrete Applied Mathematics*, 156(7) :986 – 997, 2008. GRACO 2005, 2nd Brazilian Symposium on Graphs, Algorithms and Combinatorics.
- [9] Yuan Hong and Xiao-Dong Zhang. Sharp upper and lower bounds for largest eigenvalue of the Laplacian matrices of trees. *Discrete Math.*, 296(2-3) :187–197, 2005.
- [10] CS Oliveira, L.S. Lima, N.M.M. Abreu, and P. Hansen. Bounds on the index of the signless Laplacian of a graph. to appear in *Discrete Applied Math.*, 2009.