

École Polytechnique
ParisTech

HEC Montréal
École affiliée à l'Université de Montréal

**Trois essais sur les relations entre les invariants structuraux des
graphes et le spectre du Laplacien sans signe**

par

Claire Lucas

Thèse présentée à l'École Doctorale de l'École Polytechnique en vue de l'obtention du
grade de Docteur de l'École Polytechnique

Thèse présentée à HEC Montréal en vue de l'obtention du grade de Docteur en
administration option Méthodes Quantitatives de Gestion

©Claire Lucas, 2013

Cette thèse intitulée :

Trois essais sur les relations entre les invariants structuraux des graphes et le spectre du Laplacien sans signe

soutenue le 27 novembre 2014 par

Claire Lucas

a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes:

Gilbert Laporte
(Président-rapporteur)

Pierre Hansen
(Co-directeur de recherche)

Leo Liberti
(Co-directeur de recherche)

Gilles Caporossi
(Membre du jury)

Ernesto Estrada
(Examineur externe)

Gunnar Grass
(Représentant du doyen de la FES)

Et tu finis ta thèse quand ?

Beaucoup de gens

Résumé

Le spectre du Laplacien sans signe a fait l'objet de beaucoup d'attention dans la communauté scientifique ces dernières années. La principale raison est l'intuition, basée sur une étude des petits graphes et sur des propriétés valides pour des graphes de toutes tailles, que plus de graphes sont déterminés par le spectre de cette matrice que par celui de la matrice d'adjacence et du Laplacien.

Les travaux présentés dans cette thèse ont apporté des éléments nouveaux sur les informations apportées par le spectre cette matrice. D'une part, on y présente des relations entre les invariants de structure et une valeur propre du Laplacien sans signe. D'autre part, on présente des familles de graphes extrêmes pour deux de ses valeurs propres, avec et sans contraintes additionnelles sur la forme de graphe. Il se trouve que ceux-ci sont très similaires à ceux obtenus dans les mêmes conditions avec les valeurs propres de la matrice d'adjacence. Cela aboutit à la définition de familles de graphes pour lesquelles, le spectre du Laplacien sans signe ou une de ses valeurs propres, le nombre de sommets et un invariant de structure suffisent à déterminer le graphe. Ces résultats, par leur similitude avec ceux de la littérature viennent confirmer l'idée que le Laplacien sans signe détermine probablement aussi bien les graphes que la matrice d'adjacence.

Tous les apports nouveaux de cette thèse ont été publiés dans des journaux scientifiques ou des rapports techniques et sont rapportés dans leur intégralité dans ce manuscrit.

Abstract

In the last five years, much attention was devoted to the signless Laplacian of a graph by the scientific community. One of the main reasons for this interest is the intuition, shared by many researchers on the basis of studies concerning small graphs, that more graphs are determined by their signless Laplacian spectrum than by those of the adjacency and Laplacian matrices.

Results presented in this thesis brought new elements on the informations hidden in the spectrum of this matrix. On the one hand, we present relations between structural graph invariants and an eigenvalue of the signless Laplacian. On the other hand, we present families of extremal graphs for two of its eigenvalues, with and without additional constraints on the shape of the graph. The families obtained for these problems are very similar to the ones defined in the same conditions for the adjacency matrix eigenvalues.

This lead to the definition of families of graphs for which the signless Laplacian spectrum or one of its eigenvalues together with the number of vertices and a structural invariant are sufficient to determine the graph. These results are very similar to those concerning the adjacency matrix spectrum and then support the idea that the signless Laplacian spectrum might determine graph at least as well as the adjacency matrix spectrum.

All the innovative contributions of this thesis were published in scientific journals or in technical reports and are reported entirely in this manuscript.

Remerciements

Je tiens d'abord à remercier mes directeurs, Pierre Hansen et Leo Liberti, pour le soutien, les conseils, et les suggestions qu'ils m'ont apportées, les connaissances et les idées qu'ils ont partagées. Ils m'ont permis de travailler sur des sujets passionnants, dans des cadres formidables, m'ont fait confiance et m'ont laissé une grande autonomie au long de ces quatre ans.

Merci aussi à Mustapha Aouchiche et Alberto Costa, avec qui j'ai collaboré avec grand plaisir. Leurs conseils, leur relectures et les discussions, scientifiques ou non, que nous avons eues m'ont souvent permis d'avancer.

J'ai pu enseigner à plusieurs reprises durant ces quatre années, ce fut une expérience très enrichissante, aussi bien humainement que professionnellement. Merci à Sylvain Perron, François Morain et Olivier Serre de m'avoir intégrée dans l'équipe enseignante de leurs cours.

J'aimerais aussi remercier les équipes administratives, en particulier les assistantes du LIX, du GERAD et de l'EDX, Evelyne, Carole, Marie, Valérie, Francine, Lise, Nathalie, Jennifer, Diane et Audrey. Elles ont eu fort à faire pour répondre aux exigences des règlements français et canadiens, m'aider à organiser mes déplacements et m'ont souvent été d'un grand secours.

Cette thèse a aussi été pour moi l'occasion de beaucoup de rencontres et de bons moments des deux côtés de l'Atlantique. Je crois avoir gagné de nombreux amis durant ces quatre ans et sans eux ces belles années d'études auraient été une rude épreuve.

Merci à tous ceux qui, par leur bonne humeur, leurs personnalités hautes en couleurs et leur enclin à discuter de tout, à tout moment, m'ont donné envie d'aller au labo chaque jour. Les cobureaux de tous les bureaux que j'ai occupés, Guillaume, Morgan, Daniel, Behnaz, Anthony, Cécile, Thomas, Chantal, Mélissandre, Medhi, Dominique, Tatiana et Michel, ceux avec qui j'ai bu des litres de café avec moi, Sébastien, Richard, Mouna, Mathilde, Julia, Nicolas, Guillaume ... toute l'équipe crypto en fait, ceux avec qui j'en ai bu des barils! Lê, Bertrand et Rémi. Merci à James et Guillaume de m'avoir montré

ce que les mots troll et informatique veulent dire, j'ai très bien compris. Merci à Olivier, qui a dit pas le physique, et désolée pour les cheveux blancs que ma cotutelle a causés et merci à Johanne, pour avoir relu ma thèse, une bonne partie de ma thèse, m'avoir souvent conseillée et désolée pour les cheveux blancs d'Olivier. Merci au sieur Dominique dont la voiture a avantageusement remplacé le RER B.

Je voudrais aussi remercier mes amis et cousines, avec qui au Québec comme en France, j'ai partagé des discussions, des voyages, des soirées, des loisirs, des appartements et des états d'âme, Lauriane, Aurore, Céline, Linda, Arabella, Nastasia, Marie, Claire, Antoine, Axel, Nicolas et mes amies et amis et la danse.

Enfin, je remercie mes proches qui, par leur patience et leur compréhension, m'ont beaucoup soutenue pendant cette thèse et sans qui les moments de temps libres ne seraient pas si beaux, mes parents, Odile et Jean-Marie, Hélène, Fanfan, Bernard, Nathalie, Thierry et leurs enfants et Rémi.

Table des symboles

- $G = (V, E)$: graphe G dont l'ensemble des sommets est V et celui des arêtes est E
- $\overline{G}$: graphe complémentaire du graphe G
- K_n : graphe complet à n sommets
- P_n : chemin à n sommets
- C_n : cycle à n sommets
- S_n : étoile à n sommets
- $SK_{k,\alpha}$: graphe éclaté complet à n sommets et stable d'ordre α
- $K_{p_1, \dots, p_k}$: graphe k -parti complet
- $Lol_{n,g}$: sucette à n sommets et de maille g
- $Tu_{n,g}$: navet à n sommets et de maille g
- $Bug_{p,s,t}$ bestiole à $p + s + t - 2$ obtenue à partir du graphe complet à p sommets, d'un chemin d'ordre s et chemin d'ordre t
- $Bag_{p,q}$ sac à $p + q - 2$ obtenu à partir du graphe complet à p sommets et un chemin d'ordre q .
- $B_{r,s}$: papillon à $2r + s + 1$ sommets constitué de r triangles et s arêtes pendantes
- $F_{r,s,t}$: libellule à $2r + s + 2t + 1$ sommets constituée de r triangles, s arêtes pendantes et t chemins pendant de longueur 2
- $S_{d,k}$: étoile étirée à $d + k$ sommets constituée de $d - k - 1$ arêtes pendantes et k chemins pendant de longueur 2.

- DS: déterminé par son spectre
- AGX: AutoGraphiX
- RVV: recherche à voisinage variable
- A : matrice d'adjacence
- R : matrice d'incidence
- L : Laplacien
- Q : Laplacien sans signe
- I : matrice identité
- J : matrice dont toutes les entrées sont des 1
- $q_1, q_2, \dots, q_n$, valeur propres du Laplacien sans signe dans l'ordre décroissant
- δ : degré minimum
- Δ : degré maximum
- $\bar{d}$: degré moyen
- $\bar{l}$: distance moyenne
- D : diamètre ou dans matrice diagonale de degrés, selon le contexte.
- r : rayon
- ecc : excentricité moyenne
- g : maille
- ν : connectivité des sommets
- κ : connectivité des arêtes
- a : connectivité algébrique
- α : nombre d'indépendance
- ω : nombre de clique
- β : nombre de domination
- χ : nombre chromatique

- μ : nombre couplage
- Ra : indice de Randić
- $\langle \cdot \rangle$: produit scalaire

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Théorie des graphes et théorie algébrique des graphes : notions de base .	4
1.1.1	Définitions et propriétés usuelles en théorie des graphes	4
1.2	Théorie spectrale des graphes à travers le Laplacien sans signe	11
1.2.1	Liens avec la matrice d'adjacence et le Laplacien	12
1.2.2	Opérations sur les graphes	15
1.3	Découverte automatisée en théorie des graphes	21
1.3.1	AutoGraphiX : outil de recherche de graphes extrêmes par re- cherche à voisinages variables	21
1.3.2	Principe de fonctionnement	22
1.3.3	Recherche de bornes supérieures et inférieures d'invariants gra- phiques	27
2	Inégalités et conjectures impliquant le rayon spectral du Laplacien sans signe	33
2.1	Bounds and conjectures for the signless Laplacian index of graphs . . .	36
2.1.1	Introduction	37
2.1.2	Preliminary results	39
2.1.2.1	Definitions and notations	39
2.1.2.2	Some useful lemmas	40
2.1.2.3	Signless Laplacian spectra of some graphs	43

2.1.3	Bounds using degrees	44
2.1.4	Bounds using metric invariants	46
2.1.5	Bounds using connectivity invariants	55
2.1.6	Bounds using subsets cardinality	57
2.1.7	Bounds using miscellaneous invariants	59
2.1.8	Conclusions	64
2.2	An inequality for the signless Laplacian index of a graph using the chromatic number	65
2.2.1	Introduction	65
2.2.2	Number of semi-edge walks and characteristic polynomial	66
2.2.3	Computation of the characteristic polynomial of a complete multipartite graph	67
2.2.4	Conclusions	68
2.3	Résolution et réfutation de conjectures concernant q_1	69
3	Valeurs extrêmes de q_1 avec un invariant de distance fixé	71
3.1	Introduction	72
3.2	Définitions et résultats préliminaires	73
3.3	Graphes maximisant q_1 avec un diamètre fixé	78
3.4	Graphes maximisant q_1 avec un rayon fixé	85
3.5	Graphes minimisant et maximisant q_1 avec une maille fixée	96
3.6	Conclusion	99
4	Valeurs extrêmes de q_2	101
4.1	Définitions préliminaires : diviseur d'un graphe	104
4.2	On the extremal values of the second largest Q-eigenvalue	107
4.2.1	Introduction	107
4.2.2	Graphs with q_2 at most 3	109
4.2.3	Graphs maximizing q_2	121
4.2.4	Simplification de la preuve à l'aide de résultats ultérieurs	130
4.3	Graphes peu denses maximisant la séparation du Laplacien sans signe	132

4.4 Conclusion	137
5 Conclusion	139
Bibliographie	143
Annexes	
A Signless Laplacian spectra of some particular graphs	A1
A.1 Computation of the spectrum of $SK_{n,\alpha}$	A1
A.2 Computation of the spectrum of a complete tripartite graph	A3
A.3 Computation of the spectrum of S_n^+	A4
A.4 Computation of the spectrum of $Ki_{n,n-1}$	A5
B Conjectures for the second largest eigenvalue of the signless Laplacian	B1
B.1 Bounds using degree invariants	B1
B.2 Bounds using metric invariants	B3
B.3 Bounds using connectivity invariants	B5
C Conjectures and simple bounds for the Signless Laplacian eigenvalues of graphs	C1
C.1 Bounds using degree invariants	C1
C.2 Bounds using metric invariants	C2
C.3 Bounds using connectivity invariants	C4
C.4 Bounds using subsets cardinality invariants	C6
C.5 Bounds using miscellaneous invariants	C7
C.6 Proofs of some simple properties	C8

Introduction

De nombreuses matrices permettant de décrire un graphe existent. La plus naturelle est, bien sûr la matrice d'adjacence A_{ij} , qui pour deux sommets v_i et v_j d'un graphe G indique si un arc ou une arête relie v_i à v_j . D'autres matrices, le Laplacien, le Laplacien sans signe, les matrices d'adjacence généralisées, etc. représentent elles aussi des graphes, dans le sens où la fonction qui, à un graphe G quelconque à n sommets, associe une matrice $M(G)$ parmi celles précitées, est injective. Ces représentations ont le désavantage d'être peu compactes et une façon de les réduire est de ne considérer que les spectres de ces matrices. Ainsi, à un graphe, est associé un vecteur s à n éléments. Le problème d'une telle représentation est qu'un même vecteur s peut être la représentation de plusieurs graphes non-isomorphes. On dit alors que ces graphes ne sont pas déterminés par leurs spectres pour la matrice M , notée non M -DS ou encore non-DS, lorsque cela ne présente pas d'ambiguïté. Dans le cas contraire, on dira qu'un graphe est déterminé par son spectre pour la matrice M , et on le notera M -DS ou encore DS.

La pertinence de la représentation d'un graphe par le spectre d'une matrice M dépend donc de la proportion de graphes non-DS pour cette matrice. Nous savons que tous les graphes ne sont déterminés par leur spectre, ni pour la matrice d'adjacence, ni pour le Laplacien, ni pour le Laplacien sans signe, toutefois la proportion de graphes DS et non-DS est inconnue.

La question de savoir quels graphes sont déterminés par leur spectre a d'abord concerné la matrice d'adjacence. Cette interrogation a été soulevée dès 1956, par Gün-

thard et Primas [62] dans le cadre de l'étude de la théorie de Hückel, une problématique de chimie, par le biais de la théorie spectrale des graphes. Un second exemple d'apparition de cette question provient de la physique, en 1966, en réponse à la question de Kac, “*Can one hear the shape of a drum ?*” [80], Fischer avait proposé une modélisation de la forme d'un tambour sous la forme d'un graphe, le son de celui-ci étant alors caractérisé par le spectre du Laplacien du graphe [58].

On connaît désormais de nombreuses familles de graphes cospectraux non isomorphes pour la matrice d'adjacence et le Laplacien. En particulier, on sait que presque tous les arbres sont cospectraux et pour la matrice d'adjacence [99] et pour le Laplacien [90]. De plus des transformations locales permettent, dans certains cas, dans certains cas, de construire des graphes cospectraux pour la matrice d'adjacence et le Laplacien [40, 61]. Cependant la fraction des graphes à n sommets non-DS identifiés pour ces matrices tend vers 0 lorsque n tend vers l'infini.

On a aussi identifié un certain nombre de familles de graphes déterminées par leur spectre : les graphes usuels comme le chemin ou le graphe complet pour la plupart des matrices utilisées en théorie spectral de graphes, les *starlike trees* pour la matrice d'adjacence, le Laplacien et, une partie, pour le Laplacien sans signe [19, 82, 95], les sucettes pour la matrice d'adjacence et le Laplacien sans signe [66, 112], les papillons pour la matrice d'adjacence, le Laplacien et le Laplacien sans signe [87, 107], etc. Là encore, la proportion de ces graphes parmi l'ensemble des graphes à n sommets tend vers 0 lorsque n tend vers l'infini.

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés au spectre du Laplacien sans signe. Le but poursuivi par les travaux qui y sont présentés est de déterminer les informations contenues par le spectre de cette matrice. Nous avons utilisée principalement trois approches.

Une première étape exploratoire a consisté à générer des conjectures mettant en relation une valeur propre du Laplacien sans signe, parmi la plus grande, la seconde plus grande et la plus petite, avec un invariant de structure du graphe et le nombre de ses sommets au moyen d'inégalités. Concernant la plus petite valeur propre, la non-bipartition du graphe a été imposée, pour éviter que les graphes extrêmes ne soient toujours les graphes bipartis. Seules les conjectures portant sur la plus grande valeur

propre ont été pour partie démontrées, ces résultats sont présentés dans le chapitre 2. Les conjectures concernant la seconde plus grande et la plus petite valeur propre sont énoncées en annexes B et C.

Dans un second temps, nous avons tenté de déterminer quels graphes maximisent ou minimisent une valeur propre q du Laplacien sans signe lorsqu'un invariant structurel i est fixé. Connaître la famille des graphes extrêmes peut permettre de borner q en fonction de l'invariant i fixé, ainsi connaître q permet d'encadrer i . À l'inverse, on peut parfois déterminer si un graphe est extrême pour q en connaissant q , i et le nombre de ses sommets, et ainsi savoir à quelle famille de graphes il appartient. Des résultats de ce type, portant sur la plus grande valeur propre avec un invariant de distance fixé, sont présentés dans le chapitre 3.

Enfin, nous avons cherché à déterminer les familles de graphes extrêmes pour des valeurs propres peu étudiées à l'époque, notamment la seconde plus grande, q_2 . Cette démarche s'inscrit dans la recherche des familles de graphes déterminées par leur spectre pour le Laplacien sans signe. En effet, connaître la valeur de q_2 permet de déterminer si un graphe appartient ou non à cette famille, le graphe exact peut ensuite être identifié à l'aide des autres valeurs propres. Ces travaux sont présentés dans le chapitre 4 de ce manuscrit.

La forme retenue pour la rédaction de ce manuscrit est celle de la thèse par articles. Les résultats présentés dans les chapitres 2, 3 et 4 ont été publiés, soit dans des revues scientifiques, soit dans des rapport techniques. Ils sont rapportés dans cette thèse dans leur version originale et dans leur intégralité. Aussi, certaines parties sont rédigées en langue anglaise et des considérations, définitions et résultats préliminaires sont répétés dans chaque introduction de section. Cette redondance et ces changements de langue sont inhérents au format choisi. Nous espérons que ces spécificités de rédaction ne gêneront pas le lecteur et nous l'invitons à ne pas s'appesantir sur ces introductions de section si cela ne lui semble pas nécessaire.

Dans la suite de cette introduction nous présenterons le contexte des travaux qui sont présentés dans cette thèse. Nous donnerons d'abord un aperçu des notions de base de la théorie des graphes en général et de la théorie algébrique des graphes en particulier. Ensuite, nous présenterons des outils et des méthodes pouvant aider à la recherche

de relations en théorie des graphes. Nous montrerons comment un logiciel permettant de résoudre heuristiquement des problèmes de calcul de graphes extrêmes peut être utilisé pour l'étude du spectre d'une matrice associée aux graphes, notamment pour la comparaison de ses valeurs propres avec d'autres invariants graphiques, structuraux ou algébriques.

1.1 Théorie des graphes et théorie algébrique des graphes : notions de base

1.1.1 Définitions et propriétés usuelles en théorie des graphes

Un graphe est une représentation de relations entre les éléments, appelés sommets, d'un ensemble discret V . Ces relations peuvent être orientées ou non, et sont, selon le cas, représentées par des arcs ou par des arêtes. Un arc est une paire ordonnée (u, v) d'éléments de V et traduit une relation asymétrique, ou orientée, entre les deux sommets u et v , alors qu'une arête est une paire non-ordonnée $\{u, v\}$ d'éléments de V et traduit une relation symétrique entre ces deux sommets. Un graphe ne contenant que des arcs est appelé graphe orienté, un graphe ne contenant que des arêtes est appelé graphe non-orienté. Notons qu'au sens le plus général, un graphe peut contenir des arcs et des arêtes multiples, ainsi que des boucles, c'est-à-dire des arêtes ou des arcs dont les deux extrémités sont identiques. On les représente souvent sous la forme d'une figure dans laquelle les points, ou nœuds, représentent des sommets, les flèches, des arcs et les traits simples des arêtes.

Selon les applications, on peut associer des poids aux arêtes ou aux arcs d'un graphe pour graduer la "force" des relations que ceux-ci représentent. On parle alors de graphe pondéré. Dans le cas contraire, si on considère qu'une relation entre deux sommets est binaire, un arc ou une arête ne peut qu'exister ou être absent, on parle alors de graphe non-pondéré.

Dans la suite de ce manuscrit, nous nous restreindrons à l'étude des graphes simples non-orientés, c'est-à-dire aux graphes non-orientés, non-pondérés, sans boucles ni arêtes multiples et ayant un nombre fini de sommets. En l'absence d'ambiguïté, nous utiliserons

le terme *graphes* plutôt que graphes simples pour désigner ces objets. On notera $G = (V, E)$, un tel graphe, V désignant l'ensemble de ses sommets et E , l'ensemble de ses arêtes. Les cardinaux de V et E seront notés respectivement $n = |V|$, le nombre de sommets, aussi appelé ordre, et $m = |E|$, le nombre d'arêtes, aussi appelé taille. Deux sommets reliés par une arête sont adjacents l'un à l'autre, et sont dits incidents à cette arête.

Les graphes peuvent être représentés à l'aide d'outils mathématiques. Nous nous restreindrons aux représentations matricielles, bien que d'autres structures de données, telles que les listes d'adjacence, permettent de représenter les graphes de façon tout à fait pratique et pertinente.

La matrice d'adjacence d'un graphe simple G non-orienté et non-pondéré est une matrice 0-1 carrée, $A(G) = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ de taille n dans laquelle $a_{ij} = 1$ si et seulement si les sommets v_i et v_j sont adjacents. Cette représentation peut être étendue aux graphes simples pondérés et/ou orientés : a_{ij} sera alors égal au poids de l'arête incidente à v_i et v_j ou au poids de l'arc sortant de v_i joignant v_i à v_j s'ils existent et sera nulle en l'absence d'arc entre v_i et v_j .

La matrice d'incidence R d'un graphe simple non-orienté est aussi une matrice 0-1. C'est une matrice rectangulaire à n lignes et m colonnes, dans laquelle $R_{ik} = 1$ si et seulement si le sommets v_i est incident à l'arête e_k . Encore une fois, cette représentation peut être étendue aux graphes pondérés et aux graphes orientés, graphes à arêtes multiples inclus : R_{ik} sera égal au poids de l'arête e_k incidente au sommet v_i , au poids de l'arc a_k entrant en v_i , ou à l'opposé du poids de l'arc a_k sortant de v_i s'ils existent et vaudra 0 sinon.

Dans un graphe simple G , le degré d'un sommet $v_i \in V$ est le nombre d_i d'arêtes qui y sont incidentes. Il est égal à la somme des éléments de la $i^{\text{ème}}$ ligne de la matrice d'adjacence ou de la matrice d'incidence du graphe. On notera $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ est la matrice diagonale. Les matrices $L = D - A$ et $Q = D + A$ sont appelées respectivement le Laplacien et le Laplacien sans signe d'un graphe. Nous donnerons plus de détails sur leurs propriétés dans la section suivante.

Un sous-graphe d'un graphe $G = (V, E)$ est lui-même un graphe $H' = (V', E')$, tel que $V' \subseteq V$ et $E' \subseteq E$. Le sous-graphe induit par G sur $V'' \subseteq V$ est le graphe

$H'' = (V'', E'')$ tel que $e \in E''$, si et seulement si les deux extrémités de e sont dans V'' et $e \in E$. La matrice d'adjacence de H'' est alors une sous-matrice de celle de G .

Un chemin entre deux sommets u et v de G est une suite d'arêtes consécutives $(\{u, u^{(1)}\}, \{u^{(1)}, u^{(2)}\}, \dots, \{u^{(k)}, v\})$ menant de u à v . La longueur d'un chemin est la longueur de cette suite, la distance $d(u, v)$ entre deux sommets u et v est le minimum des longueurs des chemins de u à v , si u et v sont distincts, et 0 si $u = v$. La distance maximale d'un sommet v aux autres sommets du graphe est appelée l'excentricité de v , on la note $ecc(v)$. Une composante connexe d'un graphe est le sous-graphe induit $H = (V', E')$, maximal au sens de l'inclusion, tel que, pour toute paire de sommets u et v de V' , il existe un chemin allant de u à v . Un graphe est connexe si et seulement si, il n'a qu'une composante connexe. Dans ce cas, on peut définir la matrice de distance $Dist = (dist_{ij})$. C'est la matrice $n \times n$ à valeurs dans $\mathbb{N}$ dont les entrées sont $dist_{ij} = dist(v_i, v_j)$.

Un certain nombre de graphes, tels que les arbres, les étoiles, les chemins, les cycles, les graphes complets, les graphes éclatés complets et les graphes multi-partis complets apparaissent souvent dans les théorèmes et les preuves de théorie des graphes. Ce sont, en particulier des graphes extrêmes ou des familles de graphes extrêmes pour de nombreux invariants graphiques. Nous donnerons, pour chacun d'eux, une définition formelle et une illustration.

Un arbre à n sommets est un graphe connexe à, exactement, $n - 1$ arêtes. Les étoiles et les chemins sont des arbres particuliers. L'étoile à n sommets est un arbre avec un sommet dominant, c'est-à-dire un sommet de degré $n - 1$; on la note $\mathcal{S}_n$. Le chemin P_n à n sommets est l'arbre dont les arêtes forment la séquence suivante : $(\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \dots, \{v_{n-1}, v_n\})$, à isomorphisme des sommets près.

Le cycle C_n est le graphe à n sommets et n arêtes formant (à renumérotation des sommets près) la séquence $(\{v_1, v_2\}, \{v_2, v_3\}, \dots, \{v_{n-1}, v_n\}, \{v_n, v_1\})$.

Le graphe complet à n sommets K_n est le graphe dans le lequel tous les sommets sont adjacents deux à deux. Le graphe éclaté complet $SK_{k,\alpha}$ est le graphe à $k + \alpha$ sommets obtenu à partir d'un graphe vide à α sommets et d'un graphe complet à k

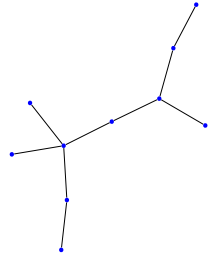
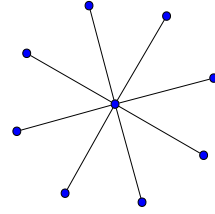
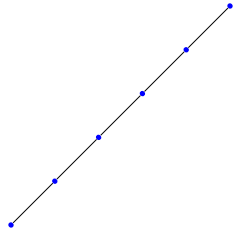
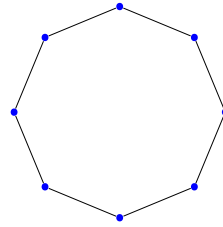
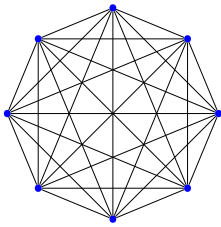
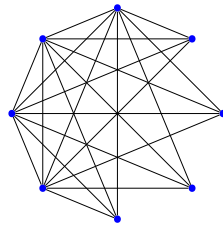
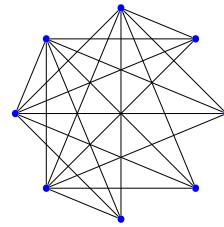


FIGURE 1.1 – Un arbre

FIGURE 1.2 – S_9 FIGURE 1.3 – P_6 FIGURE 1.4 – C_8

sommets en ajoutant toutes les arêtes possibles entre ces deux ensembles de sommets. Le graphe k -parti complet $K_{p_1, \dots, p_k}$, $k \geq 2$, est le graphe à $p_1 + \dots + p_k$ sommets, obtenu à partir de k graphes vides à $p_1, p_2, \dots, p_k$ sommets en ajoutant toutes les arêtes entre ces k graphes.

FIGURE 1.5 – K_8 FIGURE 1.6 – $SK_{4,4}$ FIGURE 1.7 – $K_{4,2,2}$

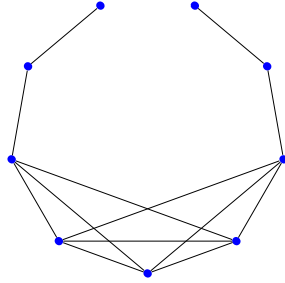
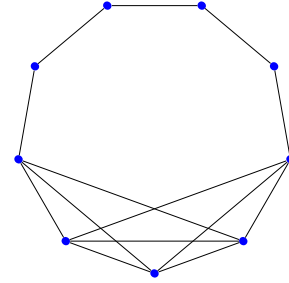
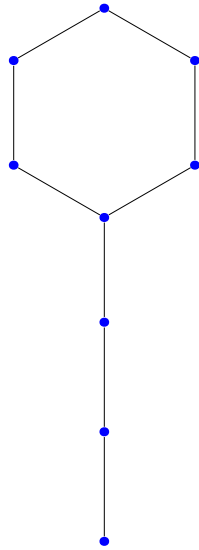
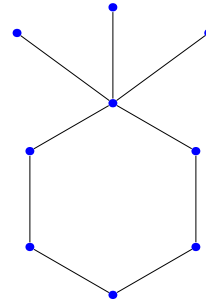
Enfin, des graphes moins usuels, les bestioles, les sac, les sucettes et les navets, sont souvent des graphes extrêmes, notamment pour des relations impliquant un invariant

de distance. 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.

Un isomorphisme de graphe est une bijection des sommets d'un graphe $G = (V, E)$ sur les sommets d'un graphe $H = (V', E')$, préservant l'adjacence des paires de sommets. Cela correspond en fait à une opération de renumérotation des sommets d'un graphe. Deux graphes G et H sont dits isomorphes s'il existe un isomorphisme ϕ tel que $\phi(G) = H$ (et donc $\phi^{-1}(H) = G$). Sur leur matrice d'adjacence, cela se traduit par l'existence d'une permutation π appartenant au groupe symétrique $\mathcal{S}_n$, le groupe de symétries contenant toutes permutations de n éléments, tel que le résultat d'une permutation des lignes puis des colonnes de $A(G)$ suivant π soit $A(H)$, c'est-à-dire $\pi A(G) \pi = A(H)$. Un isomorphisme φ tel que $\varphi(G) = G$ est appelé automorphisme du graphe G . L'ensemble de tous les automorphismes de graphe d'un graphe G est un groupe pour l'opération de composition et est appelé le groupe d'automorphisme de G .

Bien entendu, deux graphes isomorphes ont le même nombre de sommets et le même nombre d'arêtes. Beaucoup de propriétés des graphes, appelées invariants graphiques sont identiques pour deux graphes isomorphes. Formellement, un invariant graphique est une fonction f dont le domaine de définition est l'ensemble des graphes, satisfaisant, pour tout graphe $G = (V, E)$, et pour tout graphe H isomorphe à G , $f(G) = f(H)$. Lorsque cela ne prêterait pas à confusion, nous écrirons f au lieu de $f(G)$.

Les invariants graphiques ont fait l'objet de nombreuses études en théorie des graphes. Nous présentons ceux qui, dans cette thèse ont été utilisés pour étudier le spectre du Laplacien sans signe, à commencer par ceux qui sont en lien direct avec les notions que

FIGURE 1.8 – $Bug_{5,3,3}$ FIGURE 1.9 – $Bag_{5,6}$ FIGURE 1.10 – $Lol_{9,6}$ FIGURE 1.11 – $Tu_{9,6}$

nous venons d'introduire : les invariants de degré et les invariants de distance.

Les degrés minimum, maximum et moyen d'un graphe G (resp. $\delta(G)$, $\Delta(G)$, $\bar{d}(G)$) sont respectivement les valeurs minimum, maximum et moyenne des degrés des sommets de G .

La distance moyenne $\bar{l}$, est la moyenne des distances entre les paires de sommets dis-

tincts d'un graphe. La proximité et l'éloignement sont le minimum et le maximum des distances moyennes d'un sommet à tous les autres. Le diamètre D est la plus grande distance entre deux sommets d'un graphe G ; ou, de façon équivalente, l'excentricité maximum des sommets de G . Le rayon r et l'excentricité moyenne ecc sont respectivement le minimum et la moyenne des excentricités des sommets de G . Enfin, la maille g est la longueur du plus petit cycle du graphe; i.e. la longueur du plus court chemin de G (de longueur supérieure à 1) ayant des extrémités identiques.

La connectivité des sommets ν (respectivement la connectivité des arêtes κ) est le plus petit nombre de sommets (resp. arêtes) de G à supprimer pour rendre G non-connexe. Ce sont des indicateurs de la force de la connexité du graphe. Un autre invariant de connexité est la connectivité algébrique a , la seconde plus petite valeur propre du Laplacien, qui est nulle lorsque le graphe est non-connexe.

D'autres invariants sont basés sur la taille de certains sous-ensembles de sommets. Un stable est un ensemble de sommets non-adjacents deux à deux, une clique est un ensemble de sommets tous adjacents deux à deux. L'indice d'indépendance α et l'indice de clique ω sont respectivement les cardinaux du plus grand ensemble de sommets indépendants et de la plus grande clique. Le nombre de domination β est le cardinal du plus petit ensemble dominant S , au sens du nombre d'éléments; c'est-à-dire du plus petit ensemble de sommets tel que pour tout sommet v du graphe, soit $v \in S$, soit v est adjacent à un sommet u de S . Si $\beta = 1$, alors un des sommet du graphe est adjacent à tous les autres, on parle alors de sommet dominant.

Parmi les nombreux invariants existants, on avons aussi utilisé le nombre chromatique χ , nombre couplage μ et l'indice de Randić Ra . Le nombre chromatique est le plus petit nombre d'ensembles que peut contenir une partition des sommets V en ensembles de sommets indépendants. En d'autres termes, c'est le nombre minimum de couleurs que l'on peut attribuer aux sommets de G de manière que deux sommets adjacents ne soient pas de la même couleur. Cet invariant fait l'objet de beaucoup de théorèmes, notamment le très célèbre théorème des quatre couleurs, établissant le fait que les graphes planaires peuvent être colorés à l'aide de 4 couleurs. L'indice de couplage est le cardinal maximum des ensembles d'arêtes non-incidentes deux à deux. Pour finir, l'indice de Randić est la somme des poids des arêtes de G , lorsque le poids d'une des arêtes est

l'inverse de la racine carrée du produit des degrés de ses extrémités,

$$Ra = \sum_{\{ij\} \in E} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}}.$$

C'est un invariant très utilisé en chimie, qui estime la tendance du squelette d'atomes de carbone des hydrocarbures saturés à créer des liaisons.

Tous ces invariants procurent des informations sur la structure du graphe, nous les appellerons invariants structuraux ou invariants de structure dans la suite de ce manuscrit. Une partie de cette thèse présente des recherches de liens numériques entre ces invariants, maintenant relativement bien connus et des invariants algébriques, autrement dit des valeurs propres de matrices associées aux graphes.

1.2 Théorie spectrale des graphes à travers le Laplacien sans signe

Le but de la théorie spectrale des graphes est d'étudier les propriétés des graphes en utilisant leur spectre. Cela couvre des problématiques telles que l'identification de familles cospectrales, la reconstruction de graphes, la recherche de relations entre les invariants graphiques, des problèmes de combinatoire sur les graphes et le calcul de bornes pour des algorithmes d'approximation.

Dans cette thèse, nous nous intéresserons principalement au spectre d'une matrice, le Laplacien sans signe $Q = D + A$, ainsi que, lorsque la comparaison s'avère pertinente, à celui de deux autres matrices, la matrice d'adjacence A et le Laplacien $L = D - A$.

Rappelons que le spectre d'une matrice carrée de taille n à coefficients réels est l'ensemble des racines réelles et/ou complexes de son polynôme caractéristique :

$$P_M(\lambda) = |\lambda I - M|,$$

où I est la matrice identité. Dans l'ensemble de ce manuscrit les valeurs propres, $\lambda_1(M), \lambda_2(M), \dots, \lambda_n(M)$, d'une matrice symétrique de taille n à coefficients réels seront toujours indexés dans l'ordre décroissant :

$$\lambda_1(M) \geq \lambda_2(M) \geq \dots \geq \lambda_n(M),$$

et la plus grande valeur propre $\lambda_1(M)$ sera souvent appelée index de la matrice M . Le Laplacien sans signe a été introduit en 2005 par Dragos Cvetković. Depuis beaucoup d'attention a été portée par la communauté scientifique à l'étude son spectre et des dizaines d'articles ont été publiés sur ce thème. Beaucoup de ces résultats concernent les valeurs extrêmes d'une des valeurs propres du Laplacien sans signe et la détermination du graphe extrême correspondant lorsqu'un invariant de structure est fixé, par exemple, la séquence des degrés [111], le couplage [109], ou encore, le nombre de sommets pendants [51].

Nous ne présenterons dans cette partie, qu'une introduction succincte à la théorie algébrique des graphes à travers le Laplacien sans signe. Aussi, malgré l'intérêt de ces résultats, nous n'en feront pas l'exposé dans cette thèse. Le lecteur intéressé trouvera un très bon aperçu des résultats récents concernant le spectre du Laplacien sans signe dans l'un articles que lui a consacré Dragos Cvecković [38]. Les lemmes et théorèmes indispensables à la bonne compréhension de cette thèse seront énoncés lorsque leur utilisation sera requise.

1.2.1 Liens avec la matrice d'adjacence et le Laplacien

Pour démarrer cette introduction à la théorie spectrale des graphes, rappelons quelques résultats de base concernant le spectre du Laplacien sans signe. Avant toute chose, nous présenterons des résultats permettant de lier le spectre du Laplacien sans signe Q avec celui de la matrice d'adjacence A et du Laplacien L .

Tout d'abord, A , L et Q sont des matrices réelles symétriques, toutes leurs valeurs propres sont elles-aussi réelles. De plus, pour tout graphe $G = (V, E)$, le Laplacien et le

Laplacien sans signe sont des matrices semi-définies positives. En effet, pour tout $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned}
 x^\top Lx &= x^\top Dx - x^\top Ax \\
 &= \sum_{i \in V} d_i x_i^2 + 2 \sum_{\{i,j\} \in E} x_i x_j \\
 &= \sum_{i \in V} \sum_{j \sim i} x_i^2 - 2 \sum_{\{i,j\} \in E} x_i x_j \\
 &= \sum_{\{i,j\} \in E} x_i^2 - 2x_i x_j + x_j^2 \\
 &= \sum_{\{i,j\} \in E} (x_i - x_j)^2 \\
 &\geq 0,
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

et

$$\begin{aligned}
 x^\top Qx &= x^\top Dx + x^\top Ax \\
 &= \sum_{\{i,j\} \in E} (x_i + x_j)^2 \\
 &\geq 0.
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

La relation la plus évidente entre les spectres de ces trois matrices concerne les graphes réguliers. En effet, pour un tel graphe G , la matrice diagonale des degrés vaut $D = dI$ où d est le degré du graphe. Alors,

$$Q = dI + A = 2dI - L.$$

Pour un tel graphe, $q \in \mathbb{R}$ est une valeur propre de Q si et seulement si $q - d$ est une valeur propre de A et $2d - q$ est une valeur propre de L .

Pour les graphes bipartis les spectres du Laplacien et du Laplacien sans signe sont égaux. En effet, soit $G = (V, E)$ un graphe biparti et S_1 et S_2 deux stables de V tels que $S_1 \cap S_2 = \emptyset$ et $S_1 \cup S_2 = V$. Soit λ une valeur propre de L et x son vecteur propre associé. Nous noterons x_{S_1} (resp. x_{S_2}) les coordonnées de x correspondant aux sommets de S_1 (resp. S_2) et écrirons $x = (x_{S_1}, x_{S_2})$. Alors $x' = (x_{S_1}, -x_{S_2})$ est un vecteur propre de Q correspondant à la valeur propre λ .

Un parallèle est souvent établi entre la seconde plus petite valeur propre du Laplacien et la plus petite valeur propre du Laplacien sans signe. Il est, en partie, basé sur la similitude de leur valeurs lorsque le graphe a plusieurs composantes connexes d'une

part et plusieurs composantes biparties d'autre part.

La plus petite valeur propre du Laplacien est nulle pour tous les graphes, la seconde, souvent notée λ_2 et appelée connectivité algébrique, en revanche ne l'est pas toujours. La multiplicité de la plus petite valeur propre du Laplacien, 0, est égale au nombre k de composantes connexes du graphe G . Les k vecteurs propres sont les vecteurs indicateurs de chacune de ses composantes, autrement dit, ce sont les vecteurs dont les coordonnées sont valent 1 pour tous les sommets d'une même composante connexe et 0 pour tous les autres. Ils forment une base orthogonale du noyau du Laplacien. Remarquons que la multiplicité de 0 n'est pas supérieure à k . En effet, si $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ est un vecteur propre associé à la valeur propre 0, alors le long de tous les chemins du graphe, les coordonnées de x doivent être égales. Par conséquent, sur une composantes connexe du graphes, les coordonnées de x son égales et x est une combinaison linéaire des k vecteurs propres définis ci-dessus.

La plus petite valeur propre q_n du Laplacien sans signe d'un graphe G , est le pendant de la seconde plus petite valeur propre du Laplacien, en ce qui concerne la bipartition. En effet, q_n est une mesure de bipartition G , au même titre que λ_2 mesure sa connectivité [56]. Elle est bornée supérieurement et inférieurement par une fonction d'un paramètre ψ mesurant la non-bipartition d'un graphe. Soit S un sous-ensemble de V , $cut(S)$ le nombre d'arêtes ayant une extrémité dans S et une autre dans $V \setminus S$, et $e_m(S)$ le nombre d'arêtes à supprimer pour que le sous graphe induit par S soit biparti. Le paramètre ψ est défini comme étant le minimum de

$$\frac{e_m(S) + cut(S)}{|S|},$$

où S est parmi les sous ensemble de V . C'est à dire, le nombre minimum d'arêtes à ôter de G pour obtenir une composante bipartie, pondéré par la taille de cette composante. Cvetković a montré dans [34] que

$$\frac{\psi^2}{\Delta} \leq q_n \leq 4\psi.$$

La nullité de q_n correspond à l'existence d'une composante bipartie au sein du

graphe. Dans ce cas, sa multiplicité est égale au nombre de composantes connexes biparties du graphe, à l'instar de la plus petite valeur propre du Laplacien, qui est toujours nulle et dont la multiplicité est égale au nombre de composantes connexes du graphe. Les vecteurs dont les coordonnées valent 1 pour les sommets d'un stable d'une composante bipartie, -1 sur l'autre et 0 ailleurs forment une base orthogonale du noyau du Laplacien sans signe.

De plus, parmi les graphes non-bipartis, q_n atteint son unique minimum pour le graphe unicyclique de maille 3 obtenu à partir d'un chemin en attachant un triangle à l'une de ses extrémités [24].

Par ailleurs, pour tous les graphes, le Laplacien sans signe vérifie,

$$Q = RR^\top.$$

Comme

$$R^\top R = A(L(G)) + 2I,$$

les valeurs propres non-nulles de $A(L(G)) + 2I$, où $L(G)$ désigne le *line graph* de G , et Q coïncident. On obtient donc

$$P_{A(L)} = (x + 2)^{m-n} P_Q(x + 2). \quad (1.3)$$

Cette relation met en exergue le lien très fort entre la théorie spectrale basée sur la matrice d'adjacence et la théorie spectrale basée sur le Laplacien sans signe. Nous ne détaillons pas leur similitudes plus avant car nous aurons l'occasion de nous y attarder à nouveau au cours de ce manuscrit.

1.2.2 Opérations sur les graphes

Nous introduisons maintenant une série de résultats portant sur les variations de la valeur d'une valeur propre d'un graphe en réponse à une modification de celui-ci. Ce type de résultat est particulièrement utile dans des preuves d'extrémalité d'une valeur propre lorsque qu'un autre invariant est fixé.

Rappelons que, de façon générale, il n'est pas possible d'établir une comparaison a

priori des spectres de deux graphes. On peut parfois prédire les variations de certaines valeurs propres suite à une modification de sa structure, mais nous verrons que ce n'est pas toujours le cas, y compris pour des modifications très simples du graphe.

Par exemple, soit $G = (V, E_1 \cup E_2)$ l'union de deux graphes $G_1 = (V, E_1)$ et $G_2 = (V, E_2)$ partageant le même ensemble de sommets et ayant des ensembles d'arêtes disjoints. Alors, les matrices associées à G , $A(G)$, $L(G)$ et $Q(G)$ sont les sommes de celles de G_1 et G_2 . Les inégalités de Courant-Weyl fournissent des bornes sur les valeurs propres de la somme de deux matrices symétriques mais on ne peut pas pour autant savoir clairement si une valeur propre a augmenté ou non, et ce même lorsque les matrices en question sont non-négatives

Théorème 1.2.1 (Inégalités de Courant-Weyl). *Soit M_1 et M_2 deux matrices réelles symétriques de taille n . Soit $M = M_1 + M_2$, alors*

$$\lambda_{i+j+1}(M) \leq \lambda_{i+1}(M_1) + \lambda_{j+1}(M_2) \quad (1.4)$$

$$\lambda_{n-i-j}(M) \leq \lambda_{n-i}(M_1) + \lambda_{n-j}(M_2), \quad (1.5)$$

pour $0 \leq i, j, i + j + 1 \leq n$.

Cela permet de connaître le sens de variation d'une valeur propre du Laplacien ou du Laplacien sans signe d'un graphe lorsqu'une arête est ajoutée. En effet, pour un graphe à n sommets ayant une seule arête, $l_n = 0$ et $q_n = 0$. Ainsi d'après l'inégalité (1.5) on sait que, pour tout graphe, chaque valeur propre croît (pas nécessairement strictement) suite addition d'une arête. On peut donc formuler un théorème d'entrelacement pour L et Q [34].

Théorème 1.2.2 (Théorème d'entrelacement). *Soit G un graphe à n sommets et m arêtes, soit e une arête de G et $G - e$ le graphe obtenu à partir de G en supprimant l'arête e .*

Soient $l_1, l_2, \dots, l_n$ et $h_1, h_2, \dots, h_n$ les valeurs propres respectives du Laplacien de G et $G - e$. Alors,

$$0 \leq h_n \leq l_n \leq \dots \leq h_2 \leq l_2 \leq h_1 \leq l_1. \quad (1.6)$$

Soient $q_1, q_2, \dots, q_n$ et $s_1, s_2, \dots, s_n$ les valeurs propres respectives du Laplacien sans

signe de G et $G - e$. Alors,

$$0 \leq s_n \leq q_n \leq \cdots \leq s_2 \leq q_2 \leq s_1 \leq q_1. \quad (1.7)$$

Comme le spectre d'un graphe à n sommets et une arête est $(1, 0^{(n-2)}, -1)$, ces résultats ne peuvent, en général, pas être appliqués à la matrice d'adjacence. Pour cette matrice, les encadrements les plus précis que l'on puisse trouver, à l'aide des inégalités de Courant-Weil, sont les suivants :

$$\begin{aligned} \lambda_i(G - e) - 1 &\leq \lambda_i(G) \leq \lambda_i(G - e) + 1, \quad \forall 1 \leq i \leq n, \\ \lambda_{i+1}(G - e) &\leq \lambda_i(G) \leq \lambda_{i-1}(G - e), \quad \forall 2 \leq i \leq n - 1, \end{aligned}$$

ce qui ne permet pas de conclure quant au sens de variation d'une valeur propre de A suite à la suppression d'une arête.

La suppression d'un sommet (et de toutes ses arêtes incidentes) est aussi une modification courante des graphes. Elle provoque la décroissance de toutes les valeurs propres de valeurs propres de A , L et Q . C'est une conséquence directe des remarques précédemment énoncées pour L et Q , et du théorème de séparation de Cauchy-Poincaré, cf. [98], par exemple.

Théorème 1.2.3 (Théorème de séparation de Cauchy-Poincaré). *Soient M une matrice carrée hermitienne de taille n et $\lambda_1(M) \geq \lambda_2(M) \geq \cdots \geq \lambda_n(M)$, ses valeurs propres. Pour un entier donné r , $1 \leq r \leq n$, notons M_{n-r} , toute sous-matrice $n - r$ par $n - r$ principale de M (obtenue en supprimant $n - r$ lignes et les colonnes associées de M). Alors, pour tout $1 \leq i \leq n - r$,*

$$\lambda_i(M) \geq \lambda_i(M_{n-r}) \geq \lambda_{i+r}(M).$$

En appliquant ce théorème à A on obtient un théorème d'entrelacement pour la matrice d'adjacence.

Théorème 1.2.4. *Soit G un graphe à n sommets et m arêtes, soit v un sommet de G et soit $G - v$ le graphe obtenu à partir de G en supprimant le sommet v et toutes les arêtes qui y sont incidentes. Soit $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ et $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$, les valeurs propres des*

matrices respectives de d'adjacence de G et $G - v$. Alors,

$$0 \leq \mu_n \leq \lambda_n \leq \cdots \leq \mu_2 \leq \lambda_2 \leq \mu_1 \leq \lambda_1. \quad (1.8)$$

Dans le cas, très général, des graphes connexes, on a des informations plus précises sur les variations de λ_1 et q_1 . Ainsi, supprimer une arête ou un sommet d'un graphe connexe $G = (V, E)$ diminue strictement la valeur de q_1 , l'index du Laplacien sans signe et supprimer un sommet d'un graphe connexe, diminue strictement la valeur de λ_1 , l'index de la matrice d'adjacence. En effet, comme dans ce cas, $A(G)$ et $Q(G)$ sont des matrices irréductibles non-négatives on peut leur appliquer le théorème de Perron-Frobenius. On en déduit que leurs index respectifs sont des valeurs propres simples (i.e. de multiplicité 1) et que leurs vecteurs propres associés, appelés vecteurs propres de Perron, sont positifs.

Théorème 1.2.5 (Théorème de Perron-Frobenius). *Soit M une matrice carrée non-négative. Alors,*

- *son rayon spectral $\rho(M)$ est positif et est une valeur propre simple.*
- *les vecteurs propres associés à $\rho(M)$ à droite et à gauche sont positifs,*
- *pour toute autre valeur propre μ de M , $|\mu(M)| \leq \rho(M)$.*

On en déduit que

$$\lambda_1(G) = 2 \max_{x \in S^n} \sum_{\{ij\} \in E} x_i x_j > 2 \max_{x \in S^n} \sum_{\{ij\} \in E \setminus \{e\}} x_i x_j = \lambda_1(G - e)$$

et

$$q_1(G) = \max_{x \in S^n} \sum_{\{ij\} \in E} (x_i + x_j)^2 > \max_{x \in S^n} \sum_{\{ij\} \in E \setminus \{e\}} (x_i + x_j)^2 = q_1(G - e)$$

pour toute arête e de E . Le résultat pour la suppression d'un sommet suit.

Un raisonnement similaire permet de connaître, dans certaines conditions, la variation des valeurs de q_1 et λ_1 suite à la rotation d'une arête autour d'un sommet. La rotation d'une arête uv autour d'un sommet u est la suppression de l'arête uv suivie de l'addition d'une nouvelle arête incidente à u . Cette modification ne peut, bien sûr,

exister que si u n'est pas un sommet dominant, i.e. n'est pas adjacent à tous les autres sommets.

Lemme 1.2.6. (*[35] [76]*) Soit G' un graphe obtenu à partir d'un graphe connexe G à n sommets par la rotation d'une arête rs autour de r vers la position de l'arête non pré-existante rt . Soit $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ (resp. $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$) le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de $A(G)$ (resp. de $Q(G)$). Si $x_t \geq x_s$ alors $\lambda_1(G') > \lambda_1(G)$ et $q_1(G') > q_1(G)$.

Preuve : Soit x le vecteur propre de Perron de $A(G)$. Alors, on a $x^T A(G')x \leq \lambda_1(G')$ et

$$\lambda_1(G') - \lambda_1(G) \geq x^T A(G')x - x^T A(G)x = x_r(x_t - x_s) > 0.$$

La preuve pour q_1 est quasi-identique. □

La dernière modification locale de graphes que nous considérerons est la subdivision d'une arête. Cette transformation consiste à remplacer une arête uv par deux arêtes uw , wv , avec un nouveau sommet w . Le sens de variation des valeurs propres de A , L et Q suite à cette transformation du graphe n'est pas connu en général. Il est connu uniquement dans le cas de la subdivision d'une arête dans un chemin interne. Cette propriété, qui peut sembler marginale, s'avère en réalité très utile lorsque l'on cherche des relations entre une valeur propre d'un graphe et un invariant de distance.

Définition 1.2.7 (Chemin interne). Soit G un graphe. Un chemin interne de G est une séquence de sommets $v_0 v_1 \dots v_{k+1}$ $k \geq 2$, où $v_0, v_1, \dots, v_k$ sont distincts, v_{k+1} et v_0 sont de degré au moins 3, pas nécessairement distincts et $d_{v_i} = 2$, et v_{i-1} et v_i sont adjacents, pour $i = 1, \dots, k$.

Lemme 1.2.8. (*[52]*) Soit G un graphe connexe et uv une arête de G . Si on subdivise uv , c'est-à-dire, si on substitue à uv les arêtes uw , wv avec un nouveau sommet w , alors $\lambda_1(G_{uv}) \leq \lambda_1(G)$, où G_{uv} est le nouveau graphe obtenu par subdivision de uv . De plus si uv est sur un chemin interne, alors $q_1(G_{uv}) < q_1(G)$.

Nous nous intéressons maintenant à deux opérations sur des graphes ayant des ensembles de sommets disjoints, la somme directe et le produit complet. Soit $G_1 = (V_1, E_1)$

et $G_2 = (V_2, E_2)$ deux graphes ayant des ensembles de sommets disjoints. La somme directe de G_1 et G_2 est le graphe $G = (V_1 \cup V_2, E_1 \cup E_2)$. On le note $G = G_1 \dot{+} G_2$. Bien évidemment, le spectre (resp. le spectre du Laplacien et le spectre du Laplacien sans signe) de G est l'union des spectres (resp. spectre du Laplacien et spectre du Laplacien sans signe) de G_1 et G_2 . Le produit complet de G_1 et G_2 est le graphe $G = (V_1 \cup V_2, E)$ obtenu à partir de $G_1 \dot{+} G_2$ en ajoutant toutes les arêtes possibles entre V_1 et V_2 . On le note $G = G_1 \nabla G_2$. Par exemple, le produit complet, noté ∇ , du graphe sans arêtes E_n et du graphe complet K_n , $E_n \nabla K_n$, est $SK_{n,n}$ et $E_n \nabla E_n$ est $K_{n,n}$.

Le graphe complémentaire $\bar{G} = (V, \bar{E})$ d'un graphe $G = (V, E)$ est le graphe ayant le même ensemble de sommets V tel que deux sommets de $\bar{G}$ sont adjacents dans $\bar{G}$ si et seulement ils ne le sont pas dans G . Alors

$$\begin{aligned} A(\bar{G}) &= J - I - A(G), \\ L(\bar{G}) &= nI - J - L(G), \\ Q(\bar{G}) &= (n-2)I + J - Q(G), \end{aligned}$$

où J est la matrice carrée de taille n dont toutes les entrées sont égales à 1.

Les spectres de $A(\bar{G})$ et $L(\bar{G})$ peuvent pour partie être déduits de ceux de G . Si λ est une valeur propre de G de multiplicité $p > 1$, alors $-\lambda - 1$ est une valeur propre de $\bar{G}$ de multiplicité q , où $p-1 \leq q \leq p+1$ [40] (page 56). En ce qui concerne le Laplacien, le polynôme caractéristique $\mathcal{L}_{\bar{G}}$ de $L(\bar{G})$ est [40] (page 58) :

$$\mathcal{L}_{\bar{G}} = (-1)^n \frac{\lambda}{n-\lambda} \mathcal{L}_G(n-\lambda).$$

Notons que comme 0 est une valeur propre de $L(G)$, $n-\lambda$ divise $\mathcal{L}_G(n-\lambda)$ et n une valeur propre de $L(\bar{G})$ si et seulement si G est non-connexe.

Enfin, le *line* graphe L_G de $G = (V, E)$ est le graphe dont les sommets représentent les arêtes de G , tel que deux sommets de L_G sont adjacents si et seulement si les arêtes de G correspondantes sont incidentes à un même sommet dans G . Sa matrice d'adjacence

est reliée à la matrice d'incidence de G par la relation

$$R^T(G)R(G) = A(L_G) + 2I_m.$$

D'autres opérations sur les graphes et leurs incidences sur les spectres des différentes matrices associées aux graphes peuvent être consultées dans le deuxième chapitre de [40]. Leur connaissance n'est pas requise pour la compréhension des prochains chapitres de cette thèse.

1.3 Découverte automatisée en théorie des graphes

1.3.1 AutoGraphiX : outil de recherche de graphes extrêmes par recherche à voisinages variables

Une grande partie des résultats de cette thèse concernant le Laplacien sans signe ont été conjecturés en utilisant le logiciel d'aide à la découverte en théorie des graphes, AutoGraphiX, soit dans le cadre de l'étude systématique d'un type de relations, soit comme support pour la vérification d'une intuition [1, 4, 5, 7–9, 15, 20–23, 28, 65, 70]. Aussi, bien qu'il existe d'autres outils performants d'aide à la découverte, citons par exemple, *Graffiti* [47], *Graph Theorist* [46], ou encore *Ingrid* [44], nous nous restreindrons à la présentation de celui-ci.

Les principes généraux de fonctionnement de ce logiciel et les méthodes d'utilisation introduits succinctement dans cette partie devraient donner à un lecteur intéressé par ce système les bases lui permettant d'en tirer le meilleur parti pour la génération de conjecture en théorie algébrique des graphes. Le lecteur désirant un exposé plus détaillé sur le fonctionnement d'AGX et son fonctionnement, notamment pour un usage dépassant la théorie algébrique des graphes est invité à consulter les articles publiés sur ce sujet [1, 8, 22, 23].

Le système AutoGraphiX, aussi appelé AGX, repose sur une métaheuristique bien connue, la recherche à voisinage variable (RVV ou VNS, pour *variable neighborhood search*). L'idée de base de cette métaheuristique est celle d'une succession de descentes vers des optima locaux avec des définitions différentes de voisinages à chaque étape, dans

l'espoir d'aboutir à un optimum global, sans assurance que ce soit effectivement le cas. Dans AGX, la recherche à voisinage variable est adaptée pour résoudre les problèmes d'optimisation combinatoire correspondant à la maximisation ou à la minimisation d'un invariant graphique. Le système fournit des solutions heuristiques à des problèmes de recherche de graphes extrêmes et les utilise pour générer des conjectures.

AutoGraphiX a sans conteste rencontré un grand succès au sein de la communauté des théoriciens des graphes. En témoignent les nombreux articles basés sur des conjectures générées à l'aide de ce système durant les quinze dernières années. Une revue de littérature exhaustive sur ce sujet a été écrite par Mustapha Aouchiche, Gilles Caporossi, Pierre Hansen et moi-même [8]. Nous ne la reprendrons pas dans cette thèse, le lecteur intéressé par les résultats d'AGX est invité à s'y référer.

Cette partie est organisée comme suit. Dans la section 1.3.2, nous présentons une courte introduction à la recherche à voisinage variable en général et la façon dont elle a été adaptée à la recherche de graphes extrêmes dans la première version d'AGX et la suivante, AGX2. Ensuite, dans la section 1.3.3, nous montrerons comment AGX peut être utilisé pour rechercher des bornes supérieures et inférieures d'invariants graphiques.

1.3.2 Principe de fonctionnement

Considérons un problème d'optimisation combinatoire général :

$$\min f(x) \tag{1.9}$$

$$\text{sous contrainte (s.c)} \quad x \in X. \tag{1.10}$$

où f , la fonction objectif du problème est une fonction réelle et X est l'ensemble discret des solutions réalisables. Une solution optimale, si elle existe est un élément x^* de X tel que

$$f(x^*) \leq f(x), \quad \forall x \in X.$$

Un algorithme de résolution exacte est un algorithme qui calcule une solution exacte et donne la preuve de son optimalité ou prouve que le problème n'a pas de solution. De nombreux problèmes de recherche opérationnelle et de théorie des graphes peuvent être

exprimés sous cette forme, et des algorithmes exacts permettant de les résoudre peuvent être mis au point, i.e. par énumération, algorithme du simplexe, génération de colonnes, etc. Cependant, la taille des problèmes, autrement dit, la dimension de l'ensemble X et la complexité de tels algorithmes, rend souvent irréaliste toute tentative de résolution exacte en un temps raisonnable.

Pour éviter ce problème, on peut se contenter de rechercher une solution heuristique, i.e. solution obtenue à l'aide d'un algorithme heuristique. On appelle heuristique, un algorithme qui calcule, en un temps assez court, une solution réalisable dont la valeur objectif est de bonne qualité, c'est-à-dire, proche de la valeur optimale lorsque celle-ci existe. L'écart entre la valeur de cette solution et la valeur optimale du problème peut parfois être estimé, on parle alors d'algorithme d'approximation. Dans les cas des problèmes de recherche opérationnelle, une bonne solution heuristique est souvent suffisante. En effet, le problème d'optimisation à résoudre est lui même une approximation d'un problème pratique. Par conséquent, si la modélisation est valide, une solution exacte du modèle théorique est une bonne solution au problème pratique mais n'est pas nécessairement optimale. Dans le cas qui nous intéresse, celui de l'aide à la recherche de relations en théorie des graphes, on cherche à obtenir en un temps raisonnable des graphes probablement extrêmes et des inégalités probablement valides pour un nombre fini de valeurs d'un ou plusieurs paramètres, incluant souvent le nombre de sommets du graphe n . À partir de cela, on tente d'exprimer une conjecture pour toutes les valeurs possibles des paramètres et en vérifier l'exactitude théoriquement. Le calcul exact d'un graphe extrême est souvent long, même avec un nombre de sommets relativement faible. De plus, pour espérer exprimer une conjecture valide, on doit rechercher de tels graphes pour un nombre suffisant de valeurs des paramètres. Il est donc pertinent d'avoir recours à une heuristique, plutôt qu'à un algorithme exact pour résoudre le problème d'optimisation combinatoire sous-jacent.

Recherche à Voisinage Variable La recherche à voisinage variable est une métaheuristique, elle offre une trame pour la conception d'heuristiques de résolution de problèmes d'optimisation combinatoire. Elle exploite de façon systématique les trois observations suivantes :

- un minimum local pour un voisinage, ne l'est pas nécessairement pour un autre,
- un optimum global est un optimum local quel que soit le voisinage défini,
- dans de nombreux problèmes, on remarque que les optima locaux pour différents voisinages sont relativement proches les uns des autres.

La recherche à voisinage variable combine deux phases, la recherche d'un point de départ prometteur, dite *brassage*, et des phases de descente, dites *recherche locale*, toutes deux réalisées à l'aide de voisinages variables. La trame des heuristiques construites sur la RVV est présentée dans la figure 1.12. Pour une introduction étendue, des exemples d'applications diverses et des discussions sur l'efficacité de la recherche à voisinage variable, le lecteur est invité à se référer à l'un des articles de Hansen, Mladenović et al. sur ce sujet [71, 72, 92].

RVV pour la recherche de graphes extrêmes Les problèmes traités par AGX peuvent être écrit sous forme d'un problème d'optimisation combinatoire de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 & \min f(i_1, i_2, \dots, i_k, n, G) \\
 & \text{s.c} \quad i_1 \leq g_1(i_1, i_2, \dots, i_k, n, G) \\
 & \quad \quad i_2 \leq g_2(i_1, i_2, \dots, i_k, n, G) \\
 & \quad \quad \vdots \\
 & \quad \quad i_k \leq g_k(i_1, i_2, \dots, i_k, n, G) \\
 & \quad \text{ord}(G) = n \\
 & \quad G \text{ est un graphe.}
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

où n est le nombre de sommets du graphe G et $i_1, i_2, \dots, i_k$, des invariants graphiques.

L'usage de la recherche à voisinage variable pour la résolution d'un tel problème nécessite la définition de notions de voisinages idoines, le choix d'une solution initiale et de conditions d'arrêt. Nous présenterons les définitions de ces paramètres dans les deux versions d'AGX. La première, bien que désuète, est plus intuitive. Sa présentation permet de mieux comprendre la version 2 d'AGX (AGX2), c'est pourquoi nous ne l'avons pas omise.

Initialisation : Définir les ensembles $\mathcal{N}_k$, $k \in \{1, \dots, k_{max}\}$ et $\mathcal{M}_l$, $l \in \{1, \dots, l_{max}\}$ de structures de voisinage qui seront utilisées respectivement dans les phases de brassage et les phases de descente. Définir deux conditions d'arrêt, une pour la recherche à voisinage variable réduite (RVR), une pour le brassage et la descente à voisinage variable. Choisir une solution initiale x et la perturber à l'aide de la RVR :

Répéter jusqu'à ce que la première condition d'arrêt soit atteinte,

- (1) $k \leftarrow 1$,
- (2) **Tant que** $k \leq k_{max}$,
 - (a) Générer aléatoirement un point x' du k -ième voisinage de x , $\mathcal{N}_k$.
 - (b) Si $f(x') < f(x)$, effectuer les affectations $x \leftarrow x'$, et $k \leftarrow 1$ et recommencer la recherche, sinon $k \leftarrow k + 1$.

Répéter jusqu'à ce que la seconde condition d'arrêt soit atteinte,

- (1) $k \leftarrow 1$,
- (2) **Tant que** $k \leq k_{max}$,
 - (a) **Brassage :** Générer aléatoirement un point x' du k -ième voisinage de x , $\mathcal{N}_k$.
 - (b) **Recherche locale par descente à voisinage variable**
 - (b1) $l \leftarrow 1$,
 - (b2) **Tant que** $l \leq l_{max}$,
 - Explorer le voisinage l -ième voisinage $\mathcal{N}_l(x')$ de x' . Soit $x'' = \operatorname{argmax}_{y \in \mathcal{N}_l(x')} f(y)$
 - Si $f(x'') < f(x')$, effectuer l'affectation $x' \leftarrow x''$, $l \leftarrow l + 1$.
 - (b3) Si l'optimum local x' est meilleur que x , effectuer les affectations $x \leftarrow x'$ et $k \leftarrow 1$ et recommencer la recherche, sinon $k \leftarrow k + 1$.

FIGURE 1.12 – Recherche à voisinage variable

Le graphe utilisé comme solution initiale du problème peut être soit choisi au hasard, soit défini par l'utilisateur, soit choisi parmi une liste de graphes qui sont souvent des graphes extrêmes, à savoir le chemin, le cycle, l'étoile, le graphe biparti complet, le complémentaire d'un couplage parfait, un graphe éclaté complet, le graphe complet, etc. Les voisinages $\mathcal{N}_k$, $k \in \{1, \dots, k_{max}\}$, utilisés pour le brassage, sont des perturbations de taille m_k , c'est-à-dire des déplacements de m_k -arêtes. La valeur minimale v_{min} et la valeur maximale v_{max} de m_k ainsi que l'écart e entre m_k et m_{k+1} sont définis par

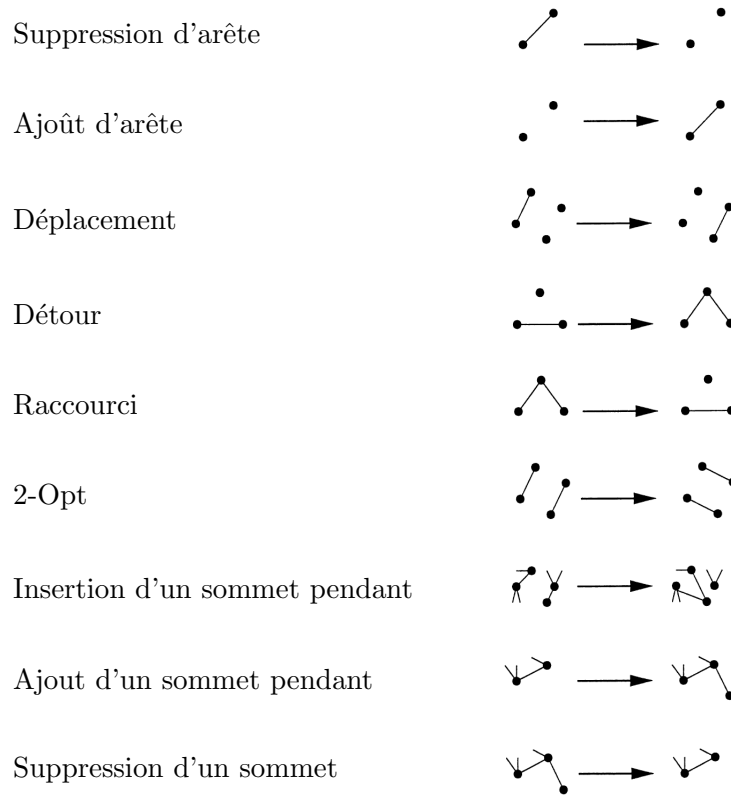


FIGURE 1.13 – Voisinages implémentés dans la première version d'AGX [22]

l'utilisateur.

Les voisinages définis pour la phase de descente dans la première version d'AGX correspondent à des transformations classiques du graphe, l'ajout ou la suppression d'une arête, l'ajout d'un sommet pendant, la suppression d'un sommet, et à une série de cinq transformations moins usuelles, baptisées mouvement, détour, raccourci, 2-Opt et insertion d'un sommet pendant. Une illustration en est présentée en figure 1.13. Ces voisinages sont utilisés dans la phase de descente à voisinage variable.

Dans la seconde version d'AGX, les voisinages sont définis au moyen de graphes étiquetés à quatre sommets. Une transformation correspond au remplacement d'un sous-graphe induit sur quatre sommets par un autre graphe à quatre sommets. Notons que ces graphes sont au nombre de 2^6 . Le remplacement du motif 60 par le motif 27 sur le sous graphe induit par les sommets 1,3,5 et 6 est présenté en figure 1.14. Pour éviter d'explorer systématiquement tous ces voisinages, la recherche locale, toujours effectué

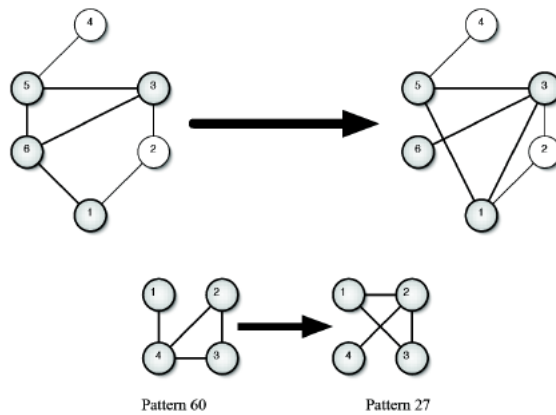


FIGURE 1.14 – Illustration de la transformation du motif 60 en motif 27 [8]

par descente à voisinage variable, est doublée d'un apprentissage des voisinages les plus pertinents. On parle alors de descente avec apprentissage. Concrètement, une matrice 64×64 $T_{ij} = t_{ij}$, représentant la performance du remplacement du motif i par le motif j est entretenue durant l'exécution de l'algorithme. Cette quantité est ensuite utilisée pour définir la probabilité $p_{ij} = \frac{1}{1+e^{-t_{ij}}}$ qu'une transformation du motif i en j soit testée par l'algorithme. Si elle l'est et améliore la valeur de la fonction objectif, la valeur de t_{ij} est augmentée. En revanche, si elle détériore la valeur de la fonction objectif, la valeur de t_{ij} est diminuée.

Enfin, les conditions d'arrêt sont définies par l'utilisateur, il s'agit d'un temps maximum sans amélioration et un temps total d'exécution. Si l'une de ces conditions est réalisée, l'optimisation s'arrête et la valeur de la fonction objectif et le graphe pour lequel cette valeur a été obtenue sont enregistrés.

1.3.3 Recherche de bornes supérieures et inférieures d'invariants graphiques

Le système AutoGraphiX a été développé pour déterminer des familles finies de graphes extrêmes $\mathcal{F} = \{G_{p_1, \dots, p_k} | p_1 \in E_1, \dots, p_k \in E_k\}$, où $p_1, \dots, p_k$ sont des paramètres du problème d'optimisation (en général p_1 est le nombre de sommets et, si $k \geq 2$, p_2 est le nombre d'arêtes du graphe) et $E_1, \dots, E_k$ leurs ensembles de réalisation, pour un invariant graphique classique donné ou une combinaison algébrique d'invariants. Une fois la famille

de graphes extrêmes déterminée, on cherche une borne supérieure, si on a formulé un problème de maximisation, ou inférieure, si on a formulé un problème de minimisation. Cette borne sera exprimée comme une fonction des paramètres $p_1, \dots, p_k$. Cette étape peut, bien sûr, être réalisée de façon autonome par l'utilisateur ou avec l'outil d'aide à la formulation de conjectures d'AGX. Celui-ci utilise alors une méthode numérique, basée sur l'analyse en composante principale pour déterminer en temps polynomial des relations affines entre des invariants définis par l'utilisateur et tenter de formuler une conjecture [23].

Il n'est pas rare que cette méthode échoue et que la formulation automatique de conjectures soit infructueuse. Dans ce cas, s'il est possible d'estimer les valeurs des invariants qui nous intéressent, en général en fonction de l'ordre n du graphe pour toute valeur de n , on peut formuler une inégalité stricte pour toute valeur de n . Si on peut borner de façon assez proche les invariants, on peut formuler une inégalité large, éventuellement stricte pour un nombre infini de valeurs de n . Enfin, si on ne sait pas calculer de borne suffisamment proche du maximum ou du minimum pour être pertinente, on se contente d'énoncer pour quelle famille de graphes, l'invariant ou la combinaison d'invariants atteint son optimum. Dans les deux premiers cas, on parle de conjecture algébrique, dans le dernier cas, on parle de conjecture structurelle.

C'est ce qui s'est produit, la plupart du temps lorsque nous avons utilisé AGX pour étudier le Laplacien sans signe des graphes. Les relations établies dans cette thèse, en particuliers les inégalités strictes atteintes par une famille de graphes, devraient permettre d'enrichir la base de données d'inégalités entre, une combinaison algébrique d'une valeur propre du Laplacien sans signe et un invariant graphique, et une fonction de l'ordre du graphe.

La variété des opérations, sous-ensembles de sommets, matrices et invariants pré-définis dans AGX laisse une grande liberté quant à la forme des problèmes d'optimisation combinatoire que l'on peut étudier, cf. page *Invariants* du site internet d'AGX <http://www.gerad.ca/agx>. Lorsqu'AGX est utilisé pour formuler de nouvelles conjectures dans une optique exploratoire, il convient de s'interroger sur la forme des conjectures que l'on désire générer. En premier lieu, quels invariants seront utilisés dans les bornes et donc quels paramètres aura le problème. Désire-t-on que le graphe satisfasse

certaines propriétés ? Auquel cas, il faudra ajouter des contraintes au problème d'optimisation correspondant. Enfin et surtout, quelle combinaison d'invariants voulons nous borner ?

Borne d'un invariant simple avec et sans contraintes Lorsque l'on cherche à générer des bornes sur un invariant $i(G)$ inédit ou peu étudié au préalable, la simple recherche d'une borne supérieure $\bar{b}(n)$ ou inférieure $\underline{b}(n)$ de celui-ci en fonction du nombre n de sommets peut avoir un intérêt. Les résultats numériques et structuraux intéressants ont ainsi été obtenus par AGX pour un certain nombre d'invariants de distance [10–13, 16]. Une fois qu'une famille de graphes extrêmes est déterminée, on peut chercher si la borne obtenue est atteinte par d'autres graphes que celui-ci, ou s'il existe une autre famille $\mathcal{F} = \{G_n, n \in \mathbb{N}\}$ de graphes non-extrêmes satisfaisant $i(G_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} b(n)$. Cette approche a permis de progresser sur la question des graphes maximisant la deuxième plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_2 . Cela nous a aussi permis de remarquer qu'aucune famille de graphes, autre que les étoiles et les étoiles auxquelles on a ajouté une arête, ne permettent d'approcher la borne inférieure de q_2 , $q_2(S_n) = 1$, et de remarquer itérativement qu'il en était de même pour toutes les valeurs de q_2 situées entre 1 et 3. Ces résultats sont présentés dans le chapitre 4.

Si l'on suppose qu'un lien fort doit exister entre deux invariants i_1 et i_2 , on peut fixer la valeur de l'un des deux, e.g. $i_2 = i_2^0$, et chercher à majorer i_1 en fonction de n ou tout simplement rechercher la famille de graphes extrêmes qui maximisent i_1 lorsque i_2 est fixé à i_2^0 . Parmi les résultats de la littérature, on trouve de nombreux exemples d'applications de cette démarche. Concernant la théorie algébrique des graphes, on peut citer, entre autres, des résultats portant sur les valeurs propres, de diverses matrices, matrice d'adjacence, Laplacien, Laplacien sans signe et distance, d'un arbre [50, 57, 63, 76, 88], d'un graphe unicyclique [17, 33, 49, 55, 77, 78, 85, 86, 100, 107], ou bicyclique [48, 75, 79, 84, 86, 96, 101, 110]. Les articles faisant état de tels résultats sont trop nombreux dans la littérature pour en donner une liste exhaustive. Insistons cependant sur le fait que, malgré leur profusion, beaucoup de ces résultats sont souvent cités et inspirent parfois d'autres études avec des choix de i_1 différents, des contraintes additionnelles, etc.

En fixant i_2 à différentes valeurs, on peut parfois déterminer des bornes intéressantes sur i_1 en fonction de n et i_2 . En utilisant cette méthode, nous avons pu formuler une conjecture reliant la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 et le nombre chromatique χ , pour des graphes connexes, ainsi que q_1 et le cardinal de la plus grande clique ω ,

$$q_1 \leq 2n\left(1 - \frac{1}{\chi}\right), \quad (1.12)$$

$$q_1 \leq 2n\left(1 - \frac{1}{\omega}\right). \quad (1.13)$$

Les preuves de ces résultats sont présentées dans la section 2.2. On peut ainsi borner des valeurs d'un graphe à l'aide d'invariants aussi divers que le degré maximum, moyen et minimum, le diamètre, le nombre d'indépendance, le nombre de clique ou le nombre chromatique.

Forme 1 d'AGX AutoGraphiX a été largement utilisé pour obtenir des résultats dit de la forme 1 d'AGX, c'est-à dire des bornes inférieures $\underline{b}(n)$ et/ou supérieures $\bar{b}(n)$ en fonction du nombre de sommets n , sur la somme, la différence, le produit ou le quotient de deux invariants i_1 et i_2 pour un ensemble de graphes donnés.

Forme 1 d'AGX et forme de Nordhaus-Gaddum

$$\underline{b}(n) \leq i_1 \oplus i_2 \leq \bar{b}(n), \quad (1.14)$$

$$\underline{b}(n) \leq i(G) \otimes i(\bar{G}) \leq \bar{b}(n). \quad (1.15)$$

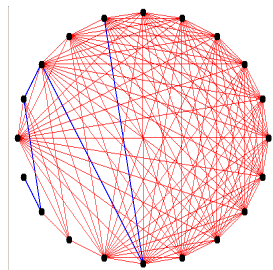
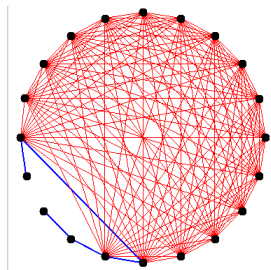
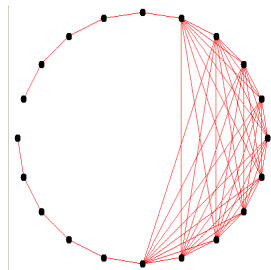
où $\oplus$ est l'une des opération $+$, $-$, $\times$, $/$ et $\otimes$ désigne $+$ ou $\times$.

Cette forme, à l'origine une extension de la forme de Nordhaus-Gaddum, permet de mettre en lien des invariants. On peut ainsi avoir une meilleure idée de la façon dont ils varient l'un par rapport à l'autre et si leurs valeurs restent proches ou non. C'est, en particulier un bon moyen d'étudier un invariant i_1 sur lequel on sait peu de choses. Le mettre en relation avec une série d'invariants permet d'en apprendre plus sur les informations contenues par i_1 .

Notons aussi que lorsque l'on cherche à maximiser (resp. minimiser) $i_1 \times i_2$, et que i_1

et i_2 varient dans des sens “différents”, i.e., lorsque la valeur maximale (resp. minimale) de i_1 lorsque i_2 est fixé, diminue (resp. augmente) si i_2 augmente (resp. diminue), on obtient un graphe qui fait un compromis entre les valeurs de i_1 et i_2 . La structure de ce graphe permet d’avoir une idée de la famille de graphes qui maximisent (resp. minimisent) i_1 lorsque i_2 est fixé. Cette approche permet parfois d’obtenir des résultats que l’on ne peut atteindre avec AGX en se contentant de fixer i_2 sans idée préalable car les voisinages n’ont pas toujours l’amplitude nécessaire pour faire augmenter i_1 tout en satisfaisant $i_2 = I$, $I \in \mathbb{R}$.

Ainsi pour la maximisation de q_1 parmi les graphes connexes à 20 sommets et de diamètre 5, la solution donnée par AGX est le graphe G_D^{heur} pour lequel $q_1 = 29,79$, voir figure 1.16, alors que la solution optimale est la bestiole $Bug_{17,2,1}$ pour lequel $q_1 = 31,89$, voir figure 1.16. En revanche, les graphes renvoyés par AGX pour la maximisation de $q_1 \times D$ parmi les graphes connexes sont bien des bestiole, voir conjecture 2.1.17. Pour $n = 20$, la solution trouvée par AGX pour ce problème est le sac $Bug_{10,5,5}$, voir figure 1.17.

FIGURE 1.15 – G_D^{heur} FIGURE 1.16 – $Bug_{17,2,1}$ FIGURE 1.17 – $Bug_{10,5,5}$

Les performances d’AGX sur la forme 1 d’AGX sont très satisfaisantes. Les invariants le plus souvent utilisés dans la forme 1 d’AGX sont les degrés minimum, moyen et maximum notés respectivement δ , $\bar{d}$ and Δ , la distance moyenne $\bar{l}$, le diamètre D , le rayon r , l’excentricité moyenne ecc , la maille g , la proximité Π , l’éloignement ρ , la connectivité des sommets ν , la connectivité des arêtes κ , la connectivité algébrique a , la cardinalité du plus grand ensemble stable α , la cardinalité de la plus grande clique ω , le nombre de domination β , le nombre chromatique χ , la taille du plus grand couplage μ et l’indice de Randić Ra . Une série de théorèmes et conjectures de la forme 1 d’AGX pour lesquels i_1 et i_2 sont des invariant de cette liste ont été générés. Un travail similaire

a été effectué avec i_1 et i_2 dans la précédente liste ou $i_1 = \lambda_1$ l'index de la matrice d'adjacence [3, 5] . Enfin durant cette thèse, on a généré des conjectures pour $i_1 = q_1$, $i_1 = q_2$ et $i_1 = q_n$ et i_2 dans la même liste les résultats. Ceux-ci sont présentés dans la section 2.1, pour $i_1 = q_1$ et dans les annexes B et C pour $i_1 = q_2$ et $i_1 = q_n$.

AutoGraphiX : quinze ans plus tard La première version d'AutoGraphiX a été implémentée par Gilles Caporossi au Groupe d'Études et de Recherches en Analyses des Décisions, en 1997 durant son doctorat. Cela fait maintenant quinze ans que les versions successives de ce logiciel sont à disposition de la communauté scientifique. Il a connu grand succès, en témoignent les nombreux articles qui découlent de son usage, ceux de la série *Variable Neighborhood Search for Extremal Graphs*, des articles faisant état de son usage, et quelques autres. Un article de synthèse sur ce sujet a récemment été soumis pour publication par Mustapha Aouchiche, Gilles Caporossi, Pierre Hansen et moi-même. [8]. Il peut être consulté dans les *Cahiers du GERAD* [8] jusqu'à son éventuelle publication.

Inégalités et conjectures impliquant le rayon spectral du Laplacien sans signe

La plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 présente des caractéristiques qui en font un point de départ incontournable dans l'étude du spectre de cette matrice. Rappelons que le Laplacien sans signe d'un graphe est une matrice semi-définie positive et que, pourvu que ce graphe n'ait pas plus d'une composante bipartie, elle est aussi non-négative et irréductible. Cela implique, d'une part, que son spectre est réel et non-négatif, donc que q_1 est le rayon spectral de la matrice, et d'autre part que le théorème de Perron-Fröbenius s'y applique, donc que q_1 est une valeur propre simple avec un vecteur propre associé positif.

Ces propriétés permettent de déterminer les variations strictes de la valeur de q_1 pour certaines opérations de base : la suppression d'un sommet, l'ajout et la suppression d'une arête, la rotation d'une arête ou encore la compression d'un chemin interne. Comme ces opérations font partie des voisinages définis dans AutoGraphiX, l'étude de la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe à l'aide de ce logiciel laisse espérer des résultats probants. De plus, vu que les variations dues à des opérations de base sont strictes, on s'attend à ce que les extrema locaux pour q_1 soient isolés.

Dans la section 2.1, on présente une série d'inégalités et de conjectures de la forme 1 d'AGX,

$$l(n) \leq q_1 \oplus i(G) \leq u(n) \tag{2.1}$$

impliquant la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 et un autre invariant graphique $i(G)$ parmi les suivants : degré minimum, degré moyen et degré maximum ; distance moyenne, diamètre, rayon, maille, proximité, éloignement ; connectivité des sommets, connectivité des arêtes et connectivité algébrique ; nombre de stabilité, nombre d'indépendance, clique maximum, nombre chromatique et le couplage ; indice de Randić. Les bornes inférieures et supérieures $l(n)$ et $u(n)$ sont des fonctions du nombre de sommets n du graphe considéré et sont atteintes quel que soit le nombre de sommets. Dans toutes les inégalités présentées dans cette section, le graphe extrême pour un nombre de sommets donné est unique.

Dans un certain nombre de cas les graphes extrêmes et les bornes obtenues sont triviaux. En effet, pour un nombre de sommets donné, le graphe qui minimise la valeur de q_1 est le chemin P_n de longueur $n-1$. Ainsi, si P_n minimise (respectivement maximise) $i(G)$, comme c'est le cas pour les invariants de degré, les invariants de connectivité, la clique maximum et le nombre chromatique (resp. les invariants de distance, sauf la maille, et le couplage), alors P_n minimise $q_1 + i(G)$ et $q_1 \cdot i(G)$ (resp. $q_1 - i(G)$ et $q_1/i(G)$). À l'inverse, pour un nombre de sommets n donné, le graphe qui maximise la valeur de q_1 est le graphe complet K_n , donc si K_n maximise (respectivement minimise) $i(G)$ alors K_n maximise $q_1 + i(G)$ et $q_1 \cdot i(G)$ (resp. $q_1 - i(G)$ et $q_1/i(G)$). C'est le cas si $i(G)$ est un invariant de degré, un invariant de connectivité, la clique maximum, le couplage, le nombre chromatique ou l'indice de Randić (resp. un invariant de distance ou le nombre de stabilité). Les inégalités qui résultent de ces observations sont triviales et ne sont pas énoncées ici.

Il arrive que la borne inférieure ou supérieure pour $q_1 \oplus i(G)$ ne soit pas calculée, mais qu'une famille de graphes extrêmes soit déterminée à l'aide d'AutoGraphiX. Dans ce cas le résultat ou la conjecture est dit structurel. Ce cas de figure est assez rare, il se produit, en général, lorsque la valeur du rayon spectral du graphe est particulièrement difficile à évaluer.

Dans certains cas, la recherche de graphes extrêmes à l'aide d'AutoGraphiX est infructueuse. Les graphes extrêmes obtenus sont disparates, et aucune structure de graphe extrême ne se dégage. Il y a trois raisons possibles à cela. En premier lieu, cela peut être dû à un effet de bord, le nombre de sommets est, en théorie, limité à 64, en

pratique, on a surtout étudié des graphes à moins de 20 sommets, pour des raisons de temps de calcul. Dans ce cas, les graphes obtenus par la recherche à voisinage variable sont peut-être les graphes extrêmes mais ne sont pas représentatifs de la famille des graphes extrêmes pour un nombre quelconque de sommets. Une autre raison possible est la multiplicité des extrema locaux. Dans ce cas, certains des graphes obtenus à l'aide d'AutoGraphiX ne sont pas des graphes extrêmes. Une solution, simple mais souvent efficace, à cela est de lancer la recherche à voisinage variable avec des points de départ différents, voire avec un des graphes obtenus heuristiquement lors d'un premier calcul d'AutoGraphiX pour un nombre de sommets différent. Cette technique n'est pas toujours probante et est accompagnée du risque de produire une conjecture fausse. En effet, en partant systématiquement proche du même extremum local, on court le risque de trouver des graphes appartenant à la même famille à l'aide de la recherche à voisinage variable, sans que ceux-ci soient réellement des optima globaux. Une autre solution consiste à adjoindre un critère secondaire dans la fonction objectif, dans le but d'orienter la recherche à voisinage variable [22].

Enfin, il est possible que l'invariant considéré n'ait aucun lien avec q_1 , dans ce cas il est normal qu'on ne puisse dégager aucune inégalité de la forme 1 d'AGX.

Ce travail a fait l'objet d'une publication dans la revue *Linear Algebra and its Applications* en juillet 2010, sous le titre original de *Bounds and conjectures for the signless Laplacian index of graphs* [69]. J'ai été chargée de générer des conjectures en utilisant AutoGraphiX et suis auteur de la plupart des preuves présentées dans cet article. En parallèle, j'ai travaillé à la preuve d'une inégalité concernant la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe q_1 et le nombre chromatique χ d'une autre forme que la forme 1 d'AGX,

$$q_1 \leq 2n(1 - \frac{1}{\chi}). \quad (2.2)$$

Cette dernière inégalité peut être exprimée de façon équivalente comme une borne inférieure sur la valeur de χ ,

$$\chi \geq 1 + \frac{q_1}{2n - q_1}. \quad (2.3)$$

Ce travail a été publié dans la revue *Graph Theory Notes of New-York* en décembre 2009, sous le titre *An inequality for the signless Laplacian index of a graph using the*

chromatic number [68].

La relation 2.2 a été conjecturée en même temps que les inégalités de la section 2.1, à l'aide d'AGX en fixant n et χ . Elle renforce la relation établie par Cvetković [40] pour la plus grande valeur propre de la matrice d'adjacence λ_1 ,

$$\lambda_1 \leq n(1 - \frac{1}{\chi}), \quad (2.4)$$

puisque $2\lambda_1 \leq q_1$.

L'inégalité 2.3 a depuis été améliorée en utilisant d'autres invariants spectraux et on a la chaîne d'inégalité suivante :

$$\chi \geq 1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \mu_1 - q_1} \geq 1 + \frac{q_1}{2\mu_1 - q_1} \geq 1 + \frac{q_1}{2n - q_1}. \quad (2.5)$$

La première borne de cette chaîne est due à Elphick et Wocjan [106] la seconde à Kolotilina [81].

Enfin, une inégalité plus forte sur q_1 impliquant l'indice de clique,

$$q_1 \leq 2n(1 - \frac{1}{\omega}), \quad (2.6)$$

est prouvée à l'issue de la section 2.2.

Les sections 2.1 et 2.2 sont présentées telles qu'elles ont été publiées, respectivement dans *Linear Algebra and its Applications* [69] et *Graph Theory Notes of New-York* [68]. Les mots *paper* et *section* doivent être perçus comme signifant *section* et *subsection*.

2.1 Bounds and conjectures for the signless Laplacian index of graphs

Using the AutoGraphiX system, we obtain conjectures of the form $l(n) \leq q_1 \oplus i(G) \leq u(n)$ where q_1 denotes the signless Laplacian index of graph G , $\oplus$ is one the four operations $+$, $-$, $\times$, $/$, $i(G)$ is another invariant chosen among minimum, average and maximum degree, average distance, diameter, radius, girth, proximity, remoteness, vertex, edge and algebraic connectivities, independence number, domination number, clique

number, chromatic number and matching number, Randić index, $l(n)$ and $u(n)$ are best possible lower and upper bounds function of the order n of G . Algebraic conjectures are obtained in 120 cases out of 152 and structural conjectures in 12 of the remaining cases. These conjectures are known, immediate or proved in this paper, except for 17 of them, which remain open.

2.1.1 Introduction

Spectral graph theory ([27, 40, 104]) studies properties of graphs using the spectrum of related matrices. Let $G = (V, E)$ denote a simple undirected graph without loops connected graph with $n = |V|$ vertices and $m = |E|$ edges. The oldest and most studied matrix associated with G appears to be the adjacency matrix $A = (a_{i,j})$ where $a_{i,j} = 1$ if vertices v_i and v_j of the graph G are adjacent and 0 otherwise. Another much studied matrix is the Laplacian, defined by $L = D - A$ where D is the diagonal matrix with degrees of the vertices on the main diagonal. Recently, increasing attention has been devoted to the signless Laplacian matrix defined by $Q = D + A$ [24, 26, 34, 35, 37–39]. One reason for this is that the signless Laplacian spectrum seems to be determine more graphs than the other commonly used graph matrices [35].

Before proving theorems, conjectures are needed. The computer can help in obtaining them, and in some cases do that job on its own. In the case of the signless Laplacian spectrum, two systems were used to obtain conjectures. On the one hand, NewGraph [102], developed by Stevanović, which is a new and streamlined version of the system GRAPH [32] developed by Cvetković and his collaborators, was used interactively. On the other hand, the system AutoGraphiX [1, 22, 23] developed in Montreal, was used more systematically. A first series of 29 conjectures were obtained by Aouchiche. They are presented, and several of them proved in [34], [30]. Some of these conjectures are on spectral eigenvalues of two and sometimes all three of the matrices described above, including in all cases the signless Laplacian. Although some of them could be proved, several appear to be difficult and are still open. Cvetković [31] suggested to use AGX in order to find relations on one or more eigenvalues of the signless Laplacian and one or more graphical invariants among the most studied. We begin this task in the present

paper. To that effect, we consider relations of the following form :

$$l(n) \leq q_1 \oplus i(G) \leq u(n) \quad (2.7)$$

where q_1 denotes the signless Laplacian index of graph G , $\oplus$ is one the four operations $+$, $-$, $\times$, $/$, $i(G)$ is another invariant chosen among minimum, average and maximum degree, average distance, average eccentricity diameter, radius, girth, proximity, remoteness, algebraic connectivity, vertex and edge connectivity, independence number, domination number, clique number, chromatic number, matching number, and Randić index, $l(n)$ and $u(n)$ are best possible lower and upper bounds function of the order n of G . This form corresponds to the so-called AGX form 1 [6] for conjectures, after fixing the first invariant at q_1 .

As observed by an anonymous referee AGX can also be used to obtain formulas which are non-linear in q_1 and possibly the second invariant i also. Reasons to consider relations of the form (2.7) only in the paper are (i) their simplicity, which could make them useful in automated proof systems such as the INGRID system [45] due to Brigham, Dutton and Gomez and the unnamed system of Gernert [60], (ii) their proximity to the form of the much studied Nordhaus-Gaddum relations i.e. $l(n) \leq i(G) \otimes i(\bar{G}) \leq u(n)$, where i is a graphical invariant, $\bar{G}$ is the complementary graph of G and $\otimes$ denotes the operation $+$ or $\times$.

The paper is organized as follows. Preliminary results are given in the next section. They concern the spectra of the signless Laplacian matrix of several families of extremal graphs, often encountered by AGX. We also recall there a few important results needed in the proofs. Section 2.1.3 compares the signless Laplacian index q_1 of G with its minimum, average and maximum degree, denoted respectively by δ , $\bar{d}$ and Δ . Section 2.1.4 compares q_1 with metric invariants : average distance $\bar{l}$, diameter D , radius r , average eccentricity ecc , girth g , proximity Π , and remoteness ρ . Recall that the eccentricity of a vertex is the largest distance (or length of a shortest path) from it to another one. The maximum eccentricity is the diameter and the minimum the radius. The girth is the length of the smallest cycle. Finally, the proximity is the minimum average distance from a vertex to all others, and the remoteness the maximum average distance from a

vertex to all others. In Section 2.1.5, q_1 is compared with connectivity invariants : vertex connectivity ν , edge connectivity κ and algebraic connectivity a . Recall that the vertex connectivity (respectively edge connectivity) is the smallest number of vertices (resp. edges) to be removed in order to disconnect G . The algebraic connectivity is the second smallest eigenvalue of the Laplacian matrix. In Section 2.1.6, q_1 is compared with invariants based on the size of subsets of G : the independence number α , the clique number ω , and the domination number β . Recall that the independence number is the largest number of pairwise non-adjacent vertices. The clique number is the largest number of pairwise adjacent vertices. The domination number is the smallest number of vertices in a set such that any vertex belongs to that set or is adjacent to a vertex of that set. Miscellaneous invariants are compared with q_1 in Section 2.1.7 : the chromatic number χ , the matching number μ and the Randić index Ra . Recall that the chromatic number is the smallest number of independent sets in a partition of V (or in other words, the minimum number of colors to be given to G 's vertices in order that no two adjacent vertices receive the same color). The matching number is the maximum number of pairwise non-incident edges. The Randić index is the sum of weights of the edges of G , defined by the inverse of the square root of the product of their end-degrees. Some easy results have been confined to a more detailed preliminary version of this paper ([67]). Brief conclusions are drawn in Section 2.1.8.

2.1.2 Preliminary results

In this section, we give a few more definitions and introduce the corresponding notations. We then gather results from the literature used in the proofs of the conjectures found. The simplest of these proofs will also use characterizations of extremal graphs for each of the invariants considered. A list of these invariants is given in [6].

2.1.2.1 Definitions and notations

In this paper, we denote the complete graph by K_n , the path by P_n , the cycle by C_n , and the star by S_n , where n is the number of vertices of the graph. We denote by $K_{p,q}$ the complete bipartite graph, p and q being the cardinalities of its independent sets.

We next define less usual graph classes which appear as extremal graphs in a number of conjectures. A lollipop $Lol_{n,g}$ is a graph obtained from a cycle on g vertices by attaching a pendant path on $n - g$ vertices to one of its vertices. A turnip $Tu_{n,g}$ is a graph obtained from a cycle on g vertices by attaching $n - g$ pendant edges to one of its vertices. A kite $Ki_{n,\omega}$ is a graph obtained from a clique on ω vertices by attaching a pendant path on $n - \omega$ vertices to one of its vertices. A bag $Bag_{p,q}$ is a graph obtained from a complete graph K_p by replacing an edge uv by a path P_q . A bug Bug_{p,q_1,q_2} is a graph obtained from a complete graph K_p by deleting an edge uv and attaching paths P_{q_1} and P_{q_2} at u and v , respectively. A complete split graph $SK_{n,\alpha}$ is a graph obtained from an empty graph on α vertices and a clique on $n - \alpha$ vertices by adding all edges between them.

2.1.2.2 Some useful lemmas

Lemma 2.1.1. (*[26]*) *Let G be a graph on $n \geq 4$ vertices. Then*

$$2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} \leq q_1 \leq 2n - 2,$$

with equality if and only if G is the path P_n for the lower bound, and if and only if G is the complete graph K_n for the upper bound.

Lemma 2.1.2. (*[35]*) *Let q_1 be the largest eigenvalue of the signless Laplacian of a graph G . The following statements hold :*

- (i) $q_1 = 0$ if and only if G has no edges,
- (ii) $0 < q_1 < 4$ if all the components of G are paths,
- (iii) for a connected graph G , we have $q_1 = 4$ if and only if G is a cycle or the complete bipartite graph $K_{1,3}$.

Lemma 2.1.3. (*[34]*) *Let T be a tree on n vertices. Then*

$$2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} \leq q_1 \leq n,$$

with equality if and only if G is the path P_n for the lower bound, and if and only if G is the star S_n for the upper bound.

Lemma 2.1.4. ([34]) Let S_n^+ denote the graph consisting of a star on n vertices and an additional edge. Let G be a unicyclic graph on n vertices. Then

$$4 \leq q_1 \leq q_1(S_n^+),$$

with equality if and only if G is the cycle C_n for the lower bound, and if and only if G is S_n^+ for the upper bound.

Lemma 2.1.5. ([35]) Let G be a graph on n vertices with minimum, average and maximum vertex degrees $\delta, \bar{d}$ and Δ . Then

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

The equalities hold if and only if G is regular.

Lemma 2.1.6. ([35]) Let G be a graph on n vertices with vertex degrees $d_1, d_2, \dots, d_n$. Then

$$\min_{i \sim j} (d_i + d_j) \leq q_1 \leq \max_{i \sim j} (d_i + d_j),$$

where (i, j) runs over all pairs of adjacent vertices of G (as indicated by the notation $i \sim j$). For a connected graph G , equality holds in either of these inequalities if and only if G is regular or semi-regular bipartite, i.e. is a bipartite graph such that all vertices of an independent set have the same degree.

Lemma 2.1.7. ([94]) Let G be a graph on n vertices. Then

$$q_1 \leq \max(d_i + m_i),$$

where i runs over the vertices of G , d_i denotes the degree of the vertex v_i and $m_i = \sum_{v_j \sim v_i} (d_j/d_i)$ denotes the average degree of the neighbors of v_i .

Lemma 2.1.8. [34] *Let G be a graph on n vertices with maximum degree Δ . Then*

$$q_1 \geq \Delta + 1.$$

Equality holds if and only if G is the star S_n .

Lemma 2.1.9. *Let G be a graph on n vertices. Then*

$$q_1 \leq \lambda_1 + \Delta,$$

where λ_1 denotes the spectral radius of G . The equality holds if and only if G is regular.

Proof : Let G be a graph on n vertices. Let Q , A and D be respectively its signless Laplacian, adjacency and degrees diagonal matrices, and x be a normalized eigenvector corresponding to q_1 . Then

$$\langle x, q_1 x \rangle = \langle x, Dx \rangle + \langle x, Ax \rangle \leq \lambda_1 + \Delta.$$

Moreover, as the adjacency matrix A is a non-negative irreducible matrix, its largest eigenvalue λ_1 is simple and has a positive eigenvector. Hence if $\langle x, Ax \rangle = \lambda_1$, and G is not regular then $\langle x, Dx \rangle < \Delta$. The equality when G is regular is obvious. $\square$

Lemma 2.1.10. ([34], [26]) *Let G be a graph on n vertices. Then*

$$2\lambda_1 \leq q_1,$$

where λ_1 denotes the spectral radius of G . The equality holds if and only if G is regular.

Lemma 2.1.11. (Interlacing theorem) ([34]) *Let G be a graph on n vertices and m edges and let e be an edge of G . Let $q_1, q_2, \dots, q_n$ ($q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$) and $s_1, s_2, \dots, s_n$ ($s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_n$) be the signless Laplacian eigenvalues of G and $G - e$ respectively. Then,*

$$0 \leq s_n \leq q_n \leq \dots \leq s_2 \leq q_2 \leq s_1 \leq q_1.$$

From the Perron-Frobenius theory on non-negative matrices (see for example [59]) follow further properties concerning q_1 . For a connected graph, q_1 is a simple eigenvalue

and its corresponding eigenvector is positive. Moreover, deleting an edge or a vertex of G strictly decreases q_1 .

Lemma 2.1.12. [35, 76] *Let G' be a graph obtained from a connected graph G (on n vertices) by rotating the edge rs around r to the position of a non-edge rt . Let $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ be the Perron-eigenvector associated to the largest Q -eigenvalue of G . If $x_t \geq x_s$ then $q_1(G') > q_1(G)$.*

Definition 2.1.13. ([55]) *Let G be a graph. An internal path of G is a sequence of vertices $v_0 v_1 \dots v_{k+1}$ $k \geq 2$, where $v_0, v_1, \dots, v_k$ are distinct, v_{k+1} and v_0 of degree at least 3 and not necessarily distinct, $d_{v_i} = 2$, and v_{i-1} and v_i are adjacent, for $i = 1, \dots, k$.*

Lemma 2.1.14. ([55]) *Let G be connected graph and uv be some edge on the internal path of G as defined above. If we subdivide uv , that is, substitute it by uw, wv , with a new vertex w , and denote the new graph by G_{uv} , then $q_1(G_{uv}) < q_1(G)$.*

2.1.2.3 Signless Laplacian spectra of some graphs

We now review or compute the signless Laplacian spectrum for several families of graphs.

The complete graph Let G be the complete graph K_n on n vertices. Its signless Laplacian is $Q = J + (n - 2)I$ and the Q -spectrum is composed of a simple eigenvalue $q_1 = 2(n - 1)$ and an eigenvalue $q_n = n - 2$ with multiplicity $n - 1$.

The complete bipartite graph The signless Laplacian spectrum of the complete bipartite graph $K_{p,q}$ is $(0)^1, (p)^{q-1}, (q)^{p-1}, (p+q)^1$. An eigenvector corresponding to 0 is $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, where $x_i = 1$ for $i = 1, 2, \dots, p$ and $x_i = -1$ for $i = p+1, p+2, \dots, n$. An eigenvector corresponding to n is $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, where $x_i = 1$ for $i = 1, 2, \dots, p$ and $x_i = \frac{p}{q}$ for $i = p+1, p+2, \dots, n$. The eigenspace V_p (resp V_q) corresponding to the eigenvalue p (resp q) is defined by $V_p = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{i=1}^p x_i = 0, x_i = 0 \text{ for } i \geq p+1\}$ (resp $V_q = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_i = 0 \text{ for } i \leq p, \sum_{i=p+1}^n x_i = 0\}$).

The complete split graph The signless Laplacian spectrum of the complete split graph $K_{n,\alpha}$ is $3n/2 - \alpha - 1 - \sqrt{n^2 + 4n\alpha - 4\alpha^2 - 4n + 4}$, $(n - \alpha)^{\alpha-1}$, $(n - 2)^{n-\alpha-1}$, $3n/2 - \alpha - 1 + \sqrt{n^2 + 4n\alpha - 4\alpha^2 - 4n + 4}$.

The short kite, $Ki_{n,n-1}$ The signless Laplacian spectrum of the kite $Ki_{n,n-1}$ is $(n - 3/2 - \sqrt{4n^2 - 20n + 33}/2)^1$, $(n - 3)^{n-3}$, $(n - 2)^1$, $(n - 3/2 + \sqrt{4n^2 - 20n + 33}/2)^1$.

The complete graph less an edge, $K_n - e$ The signless Laplacian spectrum of $K_n - e$ is $(3n/2 - 3 - \sqrt{n^2 + 4n - 12}/2)^1$, $(n - 2)^{n-2}$, $(3n/2 - 3 + \sqrt{n^2 + 4n - 12}/2)^1$.

The cycle Let G be the cycle C_n on n vertices. The signless Laplacian eigenvectors are $(1, \zeta, \zeta^2, \dots, \zeta^{n-1})^T$ where $\zeta^n = 1$, and the corresponding eigenvalues are $2 + \zeta + \zeta^{-1}$. So the signless Laplacian spectrum consists of the numbers $2 + 2\cos(2\pi j/n)$ ($j = 0, 1, 2, \dots, n-1$). When n is even then $2 + 2\cos(2\pi j/n) = 0$ for $j = n/2$, otherwise $2 + 2\cos(2\pi j/n) > 0$ for all $j \in \{0, 1, 2, \dots, n\}$.

The path Let G be the path P_n on n vertices. Its signless Laplacian spectrum consists of the numbers $2 + 2\cos(\pi j/n)$ ($j = 1, 2, \dots, n$).

2.1.3 Bounds using degrees

In this section, we begin the systematic study of bounds by considering, together with q_1 , the minimum, average and maximum degree, δ , $\bar{d}$ and Δ , respectively.

Proposition 2.1.15. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 , minimum degree δ and average degree $\bar{d}$. Then*

$$2 \leq q_1 - \delta \leq n - \frac{5}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}, \quad (2.8)$$

$$2 \leq q_1 - \bar{d}, \quad (2.9)$$

$$q_1/\delta \leq n - \frac{3}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}, \quad (2.10)$$

$$q_1/\bar{d} \leq \frac{n^2}{2n-2}. \quad (2.11)$$

The lower bounds for (2.8) and (2.9) are attained by and only by the cycle C_n .

The upper bounds for (2.8) and (2.10) are attained by and only by the kite $Ki_{n,n-1}$.

The upper bound for (2.11) is attained by and only by the star S_n .

Proof : Let G be a connected graph on n vertices.

- (a) Lower bound for (2.8). It is known that for any connected graph, $q_1 \geq 2\delta$, so the inequality is obvious when $\delta \geq 2$.

If G has minimum degree $\delta = 1$ then $q_1 - \delta \geq 1 + 2\cos(\pi/n) > 2$ for all $n \geq 4$. If $\delta = 2$ then $q_1 \geq 4$ and is minimum if and only if G is a cycle.

- (b) Lower bound for (2.9). It is known that $q_1 \geq 2\bar{d}$ [35]. The result is obvious for $\bar{d} \geq 2$. Let G be a connected graph with $\bar{d} < 2$, then G is a tree. In this case, $q_1 - \bar{d} \geq 2\cos(\pi/n) + 2/n$, which is attained for the path. The series $(u_n)_{n \geq 2}$ defined by $u_n = 2\cos(\pi/n) + 2/n$ decreases for $n \leq 9$ and increases for $n \geq 10$. Moreover $u_9 = 2.1016 > 2$ and $u_{10} = 2.1021 > 2$. This completes the proof.

- (c) Upper bound for (2.8). It is obvious that, for $\delta = 1$, q_1 is maximum for the kite $Ki_{n,n-1}$. Indeed, if G is not $Ki_{n,n-1}$, it is possible to strictly increase q_1 by adding edges, without changing δ . Moreover $q_1(Ki_{n,n-1}) = n - 3/2 + \sqrt{4n^2 - 20n + 33}/2 > 2n - 4$ by the interlacing theorem. Hence, for $\delta \geq 3$, $q_1 - \delta \leq 2n - 5 < q_1(Ki_{n,n-1}) - 1$.

For $\delta = 2$, q_1 is maximum for $Ki_{n,n-1}^+$, the graph obtained from $Ki_{n,n-1}$ by adding an edge. We have $q_1(Ki_{n,n-1}^+) = n - 1 + \sqrt{n^2 - 6n + 13} < 2n - 3$, for all $n \geq 5$. Hence $q_1(Ki_{n,n-1}^+) - 2 < 2n - 5 < q_1(Ki_{n,n-1}) - 1$.

For $n = 4$, $q_1(Ki_{n,n-1}) - 1 = 3.562$ and $q_1(Ki_{n,n-1}^+) - 2 = 3.236$.

- (d) Upper bound for (2.10). We use the same method as above.. We have $q_1(Ki_{n,n-1}) > 2n - 4$, and if $\delta \geq 2$, then $q_1/\delta \leq n - 1 < 2n - 4$.

- (e) Upper bound for (2.11). Let G be a graph on n vertices. If G is a tree $\bar{d} = 2 - 2/n$ and $q_1 \leq n$ with equality if and only if G is the star S_n , hence $q_1/\bar{d} \leq n^2/(2n - 2)$.

It is known that $q_1 - \bar{d} \leq n - 1$ (a known conjecture [34] recently proved by Feng [54])..

So we have

$$\frac{q_1}{\bar{d}} \leq \frac{n-1}{\bar{d}} + 1 \leq \frac{n+1}{2},$$

Now

$$\frac{(n+1)(2n-2)}{2n^2} = \frac{n^2-1}{n^2} < 1,$$

thus $q_1/\bar{d} \leq n^2/(n-2)$ with equality for and only for the star S_n . $\square$

Other known or easy results involving degrees are described in [67].

2.1.4 Bounds using metric invariants

In this section, we first consider bounds involving q_1 and several well-known metric invariants : average distance $\bar{l}$, diameter D , radius r , average eccentricity ecc , and girth g . We also consider two recently introduced invariants, proximity Π and remoteness ρ (citeaouchichephd,aouchiche2007vns20).

Proposition 2.1.16. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 , average distance $\bar{l}$, diameter D , radius r and eccentricity ecc . Then*

$$q_1 + \bar{l} \leq 2n - 1, \quad (2.12)$$

$$q_1 + D \leq \frac{3}{2}n - 1 + \frac{\sqrt{n^2 + 4n - 12}}{2}, \quad (2.13)$$

$$q_1 + r \leq 2n - 1, \quad (2.14)$$

$$q_1 + ecc \leq 2n - 1, . \quad (2.15)$$

The bounds for (2.12), (2.14) and (2.15) are attained by and only by the complete graph K_n . The bound for (2.13) is attained by and only by $K_n - e$, the graph obtained from K_n by deleting an edge.

Proof :

- (a) Upper bound for (2.12). From Lemma 2.1.9, we have $q_1 + \bar{l} = (q_1 - \lambda_1) + (\lambda_1 + \bar{l})$, where λ_1 denotes the index of the adjacency matrix of G . It is proved in [3] that $\lambda_1 + \bar{l} \leq n$, with equality if and only if G is a complete graph. Moreover, $q_1 - \lambda_1 \leq \Delta$ and equality holds in particular for the complete graph. The result follows.
- (b) Upper bound for (2.13). Let G be a graph on n vertices, with maximum degree Δ and diameter D .

If $D = 1$, $q_1 + D \leq 2n - 1$.

If $D = 2$, q_1 is maximum for $K_n - e$ and, for $n \geq 4$, we have

$$q_1(K_n - e) - 2 = \frac{3}{2}n - 1 + \frac{\sqrt{n^2 + 4n - 12}}{2} > 2n - 1.$$

If $D \geq 3$, as it is known [3] that $\Delta \leq n + 1 - D$, it follows that

$$q_1 + D \leq 2n + 2 - D \leq 2n - 1.$$

This completes the proof.

(c) Upper bound for (2.14). We have $q_1 + r = (q_1 - \Delta) + (\Delta - r)$. Moreover it is known that

$$q_1 - \Delta \leq n - 1 \quad \text{and} \quad \Delta + r \leq n.$$

In the first inequality the bound is reached by and only by the complete graph. In the second inequality ([3] p.193), the bound is reached if and only if G satisfies $\Delta = n - 1$ or $r = 2$ and $\Delta = n - 2$. Hence $q_1 - r \leq 2n - 1$ with equality if and only if G is the complete graph.

(d) Upper bound for (2.15). Let G be a graph on n vertices, with average degree $\bar{d}$ and diameter D . Let d_i and m_i denote respectively the degree of the vertex v_i and the average degree of the neighbors of v_i .

If $D = 1$, then G is the complete graph K_n , and $q_1 + ecc = 2n - 1$.

If G is not the complete graph, then $ecc \leq D - 1/n$. Hence, if $D \geq 3$, $q_1 + ecc \leq 2n - 1 - 1/n$.

If $D = 2$ and if $d_i + m_i$ is maximum for a non-dominating vertex v_i , then, from Lemma 2.1.7, $q_1 \leq d_i + m_i \leq 2n - 3$ and $q_1 + ecc \leq 2n - 1 - 1/n$.

If $D = 2$ and if $d_i + m_i$ is maximum for a dominating vertex v_i , then $q_1 \leq d_i + m_i \leq n - 1 + (n\bar{d} - (n - 1))/(n - 1) = n - 2 + \bar{d} + \bar{d}/(n - 1)$. Recall that $\bar{d} + ecc \leq n$ [3], hence $q_1 + ecc \leq n - 2 + \bar{d} + ecc + \bar{d}/(n - 1) \leq 2n - 2 + \bar{d}/(n - 1) < 2n - 1$, as $\bar{d} < n - 1$. □

Conjecture 2.1.17. *Let G be a connected graph on $n \geq 9$ vertices with signless Laplacian index q_1 and diameter D . Then, $q_1 \cdot D$ is maximum for and only for the bug $Bug_{\lceil n/2 \rceil, p, q}$ with diameter $D = \lceil (n+1)/2 \rceil$, $p = \lfloor D/2 \rfloor$ and $q = \lceil D/2 \rceil$.*

Conjecture 2.1.18. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and radius r . Then, if $n \geq 13$, $q_1 \cdot r$ is maximum for and only for the bag $Bag_{n-2r+3, 2r-1}$ with radius $r = \lfloor (n+3)/4 \rfloor$.*

Moreover, if $4 \leq n \leq 12$, $q_1 \cdot r$ is maximum for and only for the complement of a perfect matching if n is even, and for and only for the complement of a perfect matching on $n-3$ vertices and a triangle on the 3 remaining vertices if n is odd.

Some further easy results involving metric invariants are given in [67]

Before discussing relations on the girth, we present two preliminary results which may be of interest in their own right.

Proposition 2.1.19. *Let G be a graph such that $\Delta \geq 3$ with an induced pending path P . Let $x = (x_1, x_2 \dots x_n)$ be the Perron-eigenvector corresponding to q_1 . Let $P = v_1 v_2 \dots v_k$ where v_1 is a pending vertex. Then*

$$x_{v_1} \leq x_{v_2} \leq \dots \leq x_{v_k}.$$

Proof : We prove this by induction on j ($j = 1, 2, \dots, k$). For $j = 1$ the eigenvalue equation applied to the vertex v_1 gives

$$q_1 x_{v_1} = x_{v_1} + x_{v_2},$$

as x is the Perron-eigenvector, $x_i \geq 0$ for $i = 1, 2, \dots, n$, and

$$x_{v_2} = (q_1 - 1)x_{v_1} \geq \Delta x_{v_1} > x_{v_1}.$$

Now suppose that $x_{v_{j-1}} \leq x_{v_j}$. From the eigenvalue equation we have,

$$q_1 x_{v_j} = 2x_{v_j} + x_{v_{j-1}} + x_{v_{j+1}},$$

hence,

$$x_{v_{j+1}} = (q_1 - 2)x_{v_j} - x_{v_{j-1}},$$

By our induction hypothesis $x_{v_{j-1}} \leq x_{v_j}$, we have

$$x_{v_{j+1}} \geq (q_1 - 2)x_{v_j} - x_{v_j} = (q_1 - 3)x_{v_j} > x_{v_j} \quad (\text{as } q_1 > 4).$$

The result follows. $\square$

Proposition 2.1.20. *Let G be a graph with an induced subgraph T which is a pending tree and not a path. Let G' be the graph obtained from G by replacing the tree T by a path P with an equal number of edges, then $q_1(G) > q_1(G')$.*

Proof : Let v be a vertex of T with degree $d_v \geq 3$ different from the root v_r of T such that, for all vertices u ($\neq v$) reachable from v_r via v , $d_u \leq 2$. We denote by v_1 the vertex adjacent to v in one of the paths attached to v and by v_2 the pending vertex of another such path.

Let G' be a graph obtained G by rotating the edge v_1v around v_1 to the position of a non-edge v_1v_2 . Let $x' = (x'_1, x'_2 \dots x'_n)$ be the Perron eigenvector of $Q(G')$ corresponding to q_1 . From lemma 2.1.19, we have $x_v \geq x_{v_2}$, hence from lemma 2.1.12, $q_1(G) > q_1(G')$. It is possible to repeat this operation until obtaining a path. This completes the proof. $\square$

Theorem 2.1.21. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and girth g . Then*

$$4 - n \leq q_1 - g \leq 2n - 5, \quad (2.16)$$

$$q_1(Ki_{n,3}) + 3 \leq q_1 + g \leq 2n + 1, \quad (2.17)$$

$$\frac{4}{n} \leq q_1/g \leq (2n - 2)/3, \quad (2.18)$$

$$3q_1(Ki_{n,3}) \leq q_1 \cdot g \leq \begin{cases} 6n - 6, & \text{if } 4 \leq n \leq 15 \\ q_1(Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2})(\lfloor n/2 \rfloor + 2), & \text{if } n \geq 16 \\ \text{or } q_1(Tu_{n, n/2 + 1})(n/2 + 1), & \text{if } n \geq 16 \\ & \text{and } n \text{ is even.} \end{cases} \quad (2.19)$$

The lower bounds for (2.16) and (2.18) are attained by and only by the cycle C_n . The lower bounds for (2.17) and (2.19) are attained by and only by the kite $Ki_{n,3}$.

The upper bounds for (2.16), (2.17) and (2.18) are attained by and only by the complete graph K_n . The upper bound for $q_1 \cdot g$ is attained by the complete graph K_n , if $4 \leq n \leq 15$. Moreover, $q_1 \cdot g$ is maximal for and only for the turnip $Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}$ with girth $g = \lfloor n/2 \rfloor + 2$, if $n \geq 17$ and n is odd, and for the turnip $Tu_{n, n/2+2}$ or possibly for $Tu_{n, n/2+1}$, if $n \geq 16$ is even.

Proof :

- (a) The upper bounds for (2.16) and (2.18) and the characterizations of the corresponding extremal graphs are immediate.
- (b) Lower bounds for (2.16) and (2.18). For the girth to be defined G is not a tree. Then, q_1 is minimum for the cycle and g is maximum for the cycle. The results follow.
- (c) Upper bound for (2.17). We have $q_1 + g = (q_1 - \Delta) + (\Delta + g)$. Moreover it is known that

$$q_1 - \Delta \leq n - 1 \quad \text{and} \quad \Delta + g \leq n + 2.$$

In the first inequality, the bound is reached by and only by the complete graph. In the second inequality, the bound is reached by the complete graph, among others. The result follows.

- (d) Lower bounds for (2.17) and (2.19). It is easy to see that $q_1 + g$ and $q_1 \cdot g$ are minimal for $g = 3$. Indeed, from lemma 2.1.6, $q_1(Ki_{n,3}) < \max(d_i + d_j) = 5$, and for $g \geq 4$, $q_1 + g \geq 8 > q_1(Ki_{n,3}) + 3$ and $q_1 \cdot g \geq 16 > 3q_1(Ki_{n,3})$.

Moreover, it is well known that $q_1 \geq \Delta + 1$, with equality for and only for the star. Then, for a connected graph on n vertices with $g = 3$ and $\Delta \geq 4$, we have $q_1 > 5$. Hence, if G is a connected graph on $n \geq 3$ vertices with $g = 3$ whose largest eigenvalue q_1 is minimal, then $\Delta = 3$.

It is obvious that the graph that minimizes q_1 , under the constraints $g = 3$, is a unicyclic graph, otherwise it is possible to strictly decrease q_1 by removing edges

without changing g . In what follows we consider a unicyclic connected graph G on n vertices, with $\Delta = 3$ and $g = 3$. We regard G as constructed from the cycle C_3 by attaching a (possibly trivial) rooted tree to each vertex. Let T_i be the rooted tree attached by its root r_i to the i -th vertex of C_3 ($i = 1, 2, 3$). If q_1 is minimal for G then, T_i is a path ($i=1,2,3$), this is a direct consequence of proposition 2.1.20.

Moreover, G does not contain as an induced subgraph a triangle with a pending edge attached to each vertex (denoted by G_1), or a triangle with two paths of length 2 attached to two distinct vertices (denoted by G_2). Indeed G_1 has largest Q -eigenvalue $q_1 = 5.236 > 5 > q_1(Ki_{n,3})$ and G_2 has largest Q -eigenvalue $q_1 = 5.022 > 5 > q_1(Ki_{n,3})$.

Finally, let G_3 be the graph G on n vertices, obtained from $Ki_{n-1,3}$ by attaching a pending edge to one vertex of degree 2 of the triangle. Let the vertices in $Ki_{n,3}$ be labelled as follows (possibly after renumbering), the vertices v_4 and v_5 are the two vertices of degree v_2 in the triangle, the vertex v_3 is the vertex of degree 3, the vertex v_2 is the vertex in the path that is adjacent to v_3 and the vertex v_1 is the vertex in the path that is adjacent to v_2 .

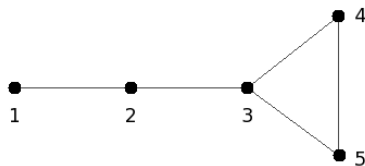


FIGURE 2.1 – Labels in $Ki_{n,3}$

Let $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ be the Perron eigenvector corresponding to q_1 . From the eigenvalue equation we have

$$q_1 x_2 = 2x_2 + x_1 + x_3, \quad (2.20)$$

$$q_1 x_4 = 2x_4 + x_3 + x_5, \quad (2.21)$$

$$q_1 x_5 = 2x_5 + x_3 + x_4. \quad (2.22)$$

As $q_1 > 2$ we deduce from (2.21) and (2.22) that $x_4 = x_5$. Hence $x_3 = (q_1 - 3)x_4$.

Moreover, from proposition 2.1.19, we have $x_1 \leq x_2$, hence

$$(q_1 - 3)x_2 \leq x_3 = (q_1 - 3)x_4.$$

We obtain G_3 from $Ki_{n,3}$ by rotating the edge v_1v_2 around v_1 to the position of a non-edge v_1v_4 . We have $x_2 \leq x_4$, hence, from proposition 2.1.12, $q_1(G_3) > q_1(Ki_{n,3})$.

Moreover, among the graphs on n vertices with girth $g = 3$, q_1 is minimal for $Ki_{n,3}$. This completes the proof.

(e) Upper bound for (2.19) when $4 \leq n \leq 15$ and $n \geq 17$ odd.

(e1) We first give a lower bound on $q_1 \cdot g$ for the turnip $Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}$ which will be compared with upper bounds obtained later. Using the fact that $q_1 \geq \Delta + 1$ [34], simple computations give :

$$q_1(Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}) \cdot g \geq (\Delta + 1)g = \begin{cases} ((n+3)^2 - 1)/4, & \text{if } n \text{ is even,} \\ (n+3)^2/4, & \text{if } n \text{ is odd.} \end{cases}$$

(e2) We next examine conditions for the extremal graph to be unicyclic. Let G be a graph on $n \geq 7$ vertices, with girth $g \geq 4$ and C of length $g_c \geq g$ a cycle containing the two adjacent vertices v_k and v_l such that $\max(d_i + d_j)_{i \sim j}$. If G contains another cycle C' of length g' , then $g'_c \geq g$. Consider G' , the subgraph of G induced by $C \cup C'$. We can assume, without loss of generality, that C' has at most $\lfloor \max(g_c, g'_c)/2 \rfloor + 1$ vertices in common with C . Hence $|G \setminus G_1| \leq n - 2g + \lfloor g/2 \rfloor + 1$. It is not possible to link a vertex of $G \setminus G_1$ to a pair of adjacent vertices of G_1 .

We first consider the case where C and C' have at most two common vertices. Then $|G \setminus G_1| \leq n - 2g + 6$. As, from Lemma 2.1.6, $q_1 \leq \max(d_i + d_j)_{i \sim j}$, we obtain $q_1 \cdot g \leq g(2 + |G \setminus G_1|) \leq g(n - 2g + 8) \leq (n + 8)^2/8$. For $n \geq 10$, we have $(n + 8)^2/8 < ((n + 3)^2 - 1)/4$. If C and C' have more than 3 vertices in common, then no two adjacent vertices in G' have degree 3. Hence $q_1 \leq 5 + |G \setminus G_1|$, and, $q_1 \cdot g \leq g(n - 3g/2 + 6) \leq (n + 6)^2/6$. For $n \geq 11$, we have $(n + 6)^2/6 < ((n + 3)^2 - 1)/4$.

Hence if G is a graph on $n \geq 11$ vertices with $g \geq 4$ and maximal value for $q_1 \cdot g$, then G is unicyclic.

(e3) Now we show that an extremal unicyclic graph is a turnip. Let G be a unicyclic graph on $n \geq 5$, vertices with fixed girth $g \geq 4$ and maximal value for q_1 , then G is a turnip. This last result can be obtained by adapting the proof technique of theorem 1.1 in [55]. From [94], we have $q_1(Tu_{n,g}) \leq \max(d_i + m_i)$ where m_i is the average degree of the neighbors of the vertex i . Let G be $Tu_{n,g}$, the turnip on n vertices with girth g .

If v_i is a vertex of degree 2, then $d_i + m_i \leq 2 + (n - g + 4)/2$. If v_i is a vertex of degree 1, then $d_i + m_i = n - g + 3$. If v_i is the vertex of degree $n - g + 2$, then $d_i + m_i = n - g + 3 + 2/(n - g + 2)$. So we have $\max(d_i + m_i) = n - g + 3 + 2/(n - g + 2)$.

Hence $q_1 \cdot g \leq g \cdot (n - g + 3 + 2/(n - g + 2))$. The series defined by $u_n(g) := g \cdot (n - g + 3 + 2/(n - g + 2))$ is increasing until $g = (n + 3)/2$ and decreasing after. Computing gives $u_n(n/2) < (n + 3)^2/4 - 1/4$, $u((n + 8)/2) \leq (n + 3)^2/4 - 1/4$, and $u_n((n + 7)/2) < (n + 3)^2/4$. Hence, if n is odd and $g \leq (n - 1)/2$ or $g \geq (n + 7)/2$, then $q_1(Tu_{n,g}) \cdot g \leq q_1(Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}) \cdot g$. If n is even and $g \leq n/2$ or $g \geq (n + 8)/2$, then $q_1(Tu_{n,g}) \cdot g \leq q_1(Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}) \cdot g$.

Moreover, from lemma 2.1.14, we have $q_1(Tu_{n,g}) \leq q_1(S_{n-g+3}^+)$. Then computing the characteristic polynomial for (S_{n-g+3}^+) and majorizing gives the upper bound $q_1(S_{n-g+3}^+) \leq n - g + 3 + 1/(2(n - g + 3))$ for $n - g \geq 8$. Hence for $n \geq 17$, $q_1(Tu_{n, (n+1)/2}) \leq (n + 5)/2 + 1/(n + 5)$ and $q_1(Tu_{n, (n+1)/2}) \cdot (n + 1)/2 < (n + 3)^2/4$. For $n \geq 21$, $q_1(Tu_{n, (n+5)/2}) \leq (n + 1)/2 + 1/(n + 1)$ and $q_1(Tu_{n, (n+5)/2}) \cdot (n + 5)/2 < (n + 3)^2/4$. For $n \geq 22$, $q_1(Tu_{n, (n+6)/2}) \leq n/2 + 1/n$ and $q_1(Tu_{n, (n+6)/2}) \cdot (n + 6)/2 < (n + 3)^2/4 - 1/4$.

Computing remaining particular values with AGX gives, for n odd, $q_1(Tu_{17,11}) \times 11 = 99.40$, $q_1(Tu_{17,10}) \times 10 = 100.20$, $q_1(Tu_{19,12}) \times 12 = 120.34$, and $q_1(Tu_{19,11}) \times 11 = 121.25$. For n even, $q_1(Tu_{16,10}) \times 10 = 90.37$, $q_1(Tu_{16,11}) \times 11 = 88.54$, $q_1(Tu_{18,11}) \times 11 = 110.31$, $q_1(Tu_{18,12}) \times 12 = 108.44$, $q_1(Tu_{20,12}) \times 12 = 132.27$, $q_1(Tu_{20,13}) \times 13 = 130.36$.

Hence, among the unicyclic graphs on $n \geq 5$ vertices, if n odd, $q_1 \cdot g$ is maximal for the turnip $Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}$, if n is even, $q_1 \cdot g$ is maximal for the turnip $Tu_{n, n/2+2}$ or $Tu_{n, n/2+1}$.

- (e4) Finally, we consider the case $g = 3$. If $g = 3$, q_1 is maximal for the complete graph and $q_1 \cdot g \leq 6n - 6$. For $n \geq 16$, $6n - 6 \leq (n + 3)^2/4 - 1/4$. Hence for $n \geq 17$, n odd, $q_1 \cdot g$ is maximal for the turnip $Tu_{n, \lfloor n/2 \rfloor + 2}$, and for $n \geq 16$, and even, $q_1 \cdot g$ is maximal for the turnip $Tu_{n, n/2+2}$ or $Tu_{n, n/2+1}$.

For $4 \leq n \leq 15$, we have $6n - 6 \geq u_n((n + 3)/2)$. As $q_1 \cdot g \leq u_n(n + 3)/2$ for all unicyclic graph G on $n \geq 4$ vertices with $g \geq 4$, we have $q_1 \cdot g \leq 6n - 6$, for all graphs on $11 \leq n \leq 15$ vertices and for all unicyclic graphs on $4 \leq n \leq 10$ vertices. If G is a graph on $n = 4$ or $n = 5$ vertices with $g \geq 4$, then G is unicyclic. Now, let G be a non-unicyclic graph on $6 \leq n \leq 10$ vertices with $g \geq 4$. We have $q_1 \cdot g \leq g(n - 3g/2 + 6) \leq g(16 - 3g/2) \leq 42 - 1/3$. Hence, for $8 \leq n \leq 10$, $q_1 \cdot g$ is maximal for the complete graph. For $n = 6$, if G is not unicyclic, then $g = 4$, and $q_1 \cdot g \leq 24 \leq 3q_1(K_6) = 30$. For $n = 7$, if G is not unicyclic, then $g = 4$ or $g = 5$, and $q_1 \cdot g \leq 28 \leq 3q_1(K_7) = 36$. Hence, for all graphs G on $4 \leq n \leq 15$ vertices, $q_1 \cdot g \leq 6n - 6$, and equality holds if and only if G is the complete graph K_n . $\square$

Remark 2.1.22. *We have checked that the turnip $Tu_{n, n/2+2}$ gives a larger value to $q_1 \cdot g$ than $Tu_{n, n/2+1}$, for $16 \leq n \leq 64$ and even.*

The study of the proximity Π and the remoteness ρ gave the two following conjectures. Easy results were found for the lower and upper bounds of $q_1 - \Pi$, q_1/Π , $q_1 - \rho$ and q_1/ρ [67].

Conjecture 2.1.23. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and proximity Π . Then, for $4 \leq n \leq 13$,*

$$q_1 \cdot \Pi \leq 2n - 2. \quad (2.23)$$

The bound is attained by and only by the complete graph K_n .

For $n \geq 14$, $q_1 \cdot \Pi$ is maximum for and only for the kite $Ki_{n, \lfloor n/2 \rfloor}$.

Conjecture 2.1.24. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and remoteness ρ . Then*

$$4 + \begin{cases} \frac{n+1}{4}, & \text{if } n \text{ is odd} \\ \frac{n^2}{4(n-1)}, & \text{if } n \text{ is even} \end{cases} \leq q_1 + \rho \quad (2.24)$$

$$(2.25)$$

The bound for (2.24) is attained by and only by the cycle C_n .

For, $n \geq 10$, $q_1 \cdot \rho$ is maximum for and only for the kite $Ki_{n, \lceil n/2 \rceil + 3}$ or the kite $Ki_{n, \lceil n/2 \rceil + 2}$

2.1.5 Bounds using connectivity invariants

We next consider bounds involving q_1 and three well-known connectivity invariants : vertex connectivity ν , edge connectivity κ , and algebraic connectivity a .

Proposition 2.1.25. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and vertex connectivity ν . Then*

$$2 \leq q_1 - \nu \leq n - \frac{5}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}, \quad (2.26)$$

$$2 \leq q_1/\nu \leq n - \frac{3}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}, \quad (2.27)$$

The lower bound for (2.26) is attained by and only by the cycle C_n . The lower bound for (2.27) is attained by C_n, K_n for all n , the complete bipartite graph $K_{n/2, n/2}$, when n is even, and possibly others.

The upper bound for (2.26) and (2.27) are attained by and only by the kite $Ki_{n, n-1}$.

Proof :

(a) Upper bound for (2.26) and (2.27). Let G be a connected graph on n vertices.

If $\nu = 1$, then q_1 is maximum for a graph formed by two cliques with a common vertex. Indeed, from any graph with $\nu = 1$ it is possible to obtain such a graph

and increase q_1 by adding edges. Then it is not possible to add an edge without changing ν .

Let ω be the cardinality of the maximum clique of this graph, from lemma 2.1.6 we have $q_1 < \max(d_i + d_j) = n + \omega - 2$. Then, for $\omega \leq n - 2$, $q_1 < 2n - 4$. Moreover, by the interlacing theorem, $q_1(Ki_{n,n-1}) > q_1(K_{n-1}) = 2n - 4$. Hence, for $\nu = 1$, q_1 is maximum for $Ki_{n,n-1}$.

If $\nu \geq 2$, then $q_1/\nu \leq n - 1$. This completes the proof for (2.27).

If $\nu = 2$, then q_1 is maximum for a graph obtained from two cliques on n_1 and n_2 vertices ($n = n_1 + n_2 + 2$, $n_1 \leq n_2$) and two isolated vertices, by linking each isolated vertex to all the other vertices. We have $q_1 \leq \max(d_i + m_i) = n - 1 + (n - 1 + n_1(n_1 + 1) + (n - n_1 - 2)(n - n_1 - 1))/(n - 1)$, which is maximum for $n_1 = 1$. Then, for $n \geq 3$ and $\nu = 2$, $q_1 - \nu \leq 2n - 6 + 4/(n - 1) \leq 2n - 5$.

If $\nu \geq 3$, then $q_1/\nu \leq 2n - 5$. This completes the proof for (2.26).

- (b) Lower bound for (2.26). Let G be a connected graph on n vertices. Recall that for all graphs, $\delta \geq \nu$.

If $\nu = 1$, then $q_1 - \nu \geq 1 + 2\cos(\pi/n)$ with equality for and only for the path P_n . Hence $q_1 - \nu = 2$ for P_3 and $q_1 - \nu > 2$ for $n \geq 4$.

If $\nu = 2$, then $q_1 - \nu \geq 2$ with equality for and only for the cycle C_n .

If $\nu \geq 3$, then $q_1 - \nu \geq 2\delta - \nu \geq \delta \geq 3$.

- (c) Lower bound for (2.27). For all graphs we have, $q_1/\nu \geq 2\delta/\nu \geq 2$. For the cycle C_n and for the complete graph K_n , $q_1/\nu = 2$. When n is even, for the complete bipartite graph $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}$ we also have $\frac{q_1}{\nu} = 2$.

□

Turning to the edge connectivity κ we obtain the same lower and upper bounds than for ν . All of them are proved in [67] with arguments similar to those of the proof of Proposition 2.1.25.

Easy results are obtained in five cases for the algebraic connectivity [67].

Conjecture 2.1.26. *Let G be a connected graph on $n \geq 5$ vertices with signless Laplacian index q_1 and algebraic connectivity a . Then*

$$2 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} \leq q_1 - a \leq n - \frac{5}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}. \quad (2.28)$$

The lower bound is attained by and only by the cycle C_n and the upper bound is attained by and only by the kite $Ki_{n,n-1}$.

Moreover, q_1/a is maximum for and only for the kite $Ki_{n,\lceil n/3 \rceil + 1}$, for all $n \geq 6$.

2.1.6 Bounds using subsets cardinality

In this section we study bounds involving q_1 and three well-known invariants expressed as cardinalities of subsets of vertices of G : the independence number α , the clique number ω and the domination number β .

Proposition 2.1.27. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 , independence number α and domination number β . Then*

$$q_1 + \alpha \leq \begin{cases} \frac{3n-2\sqrt{2n^2-4n+4}}{2} & \text{if } n \text{ is even,} \\ \frac{3n-2\sqrt{2n^2-6n+3}}{2} & \text{if } n \text{ is odd,} \end{cases} \quad (2.29)$$

$$q_1 + \beta \leq 2n - 1, \quad (2.30)$$

$$q_1 \cdot \alpha \leq n(n - 1) \quad (2.31)$$

$$n \leq q_1 \cdot \beta. \quad (2.32)$$

The lower bound for (2.32) is attained by and only by the star S_n .

The upper bound for (2.29) is attained by and only by the complete split graph $SK_{n,n/2}$ if n is even, and the complete split graphs $SK_{n,\lfloor n/2 \rfloor}$ and $SK_{n,\lceil n/2 \rceil}$ if n is odd. The upper bound for (2.31) is attained by and only by the star S_n . The upper bound for (2.30) is attained by and only by the complete graph K_n .

Proof :

- (a) Upper bound for (2.29) and (2.31). It is obvious that, for a given independence number α , the graph that maximizes q_1 is the complete split graph $SK_{n,\alpha}$. For

$SK_{n,\alpha}$, we have

$$q_1 = \frac{\sqrt{n^2 + 4n(\alpha - 2) - 4\alpha^2 + 4} + 3n - 2\alpha - 2}{2}.$$

Hence $q_1 + \alpha$ is maximum for $\alpha = n/2$ if n is even, and for $\alpha = \lfloor n/2 \rfloor$ and $\alpha = \lceil n/2 \rceil$ if n is odd. Moreover, $q_1 \cdot \alpha$ is maximum for $\alpha = n - 1$, i.e., for the star S_n .

(b) Upper bound for (2.30). Let G be a graph on n vertices with signless Laplacian index q_1 , maximum degree Δ and domination number β . It is known [18] that $\Delta + \beta \leq n$, with equality if G is the complete graph. Moreover, $q_1 \leq 2\Delta$, with equality for and only for regular graphs. The result follows.

(c) Lower bound for (2.32). It is a direct consequence of the fact that $\beta \geq n/(\Delta + 1)$. $\square$

Conjecture 2.1.28. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and independence number α . Then*

$$4 + \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \leq q_1 + \alpha, \quad \text{if } n \text{ is odd,} \quad (2.33)$$

$$2n - 2 \leq q_1 \cdot \alpha. \quad (2.34)$$

The bound for (2.33) is attained by and only by the cycle C_n when n is odd. Moreover, if n is even, then $q_1 + \alpha$ is minimal for the graph on $n \geq 8$ vertices obtained from two cycles of cardinality $2\lfloor n/6 \rfloor + 1$ by linking them by a path.

The bound for (2.34) is attained by the complete graph K_n , and the odd cycle C_n when n is odd.

Proposition 2.1.29. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and clique number ω . Then*

$$q_1(Ki_{n,3}) - 3 \leq q_1 - \omega, \quad (2.35)$$

$$\frac{q_1(Ki_{n,3})}{3} \leq q_1/\omega, \quad . \quad (2.36)$$

The bounds are attained by and only by the kite $Ki_{n,3}$.

Proof : Minimal graphs for (2.35) and (2.36). If $\omega = 3$, q_1 is minimal for the kite $Ki_{n,3}$. Let G_1 be the graph on 7 vertices obtained from $Ki_{6,3}$ by attaching a pending vertex to the penultimate vertex of the pending path. From Lemmas 2.1.14 and 2.1.20, for all $n \geq 7$ we have $q_1(Ki_{n,3}) \leq q_1(G_1) < 4.71$ and $q_1(Ki_{n,3})/3 \leq 1.57$. If $\omega \geq 4$, we have $q_1 - \omega \geq \omega - 2 \geq 2$. If $\omega = 2$, q_1 is minimal for the path, and for $n \geq 6$, $q_1(P_n) - 2 = 2 \cos(\pi/n) \geq 1.73 \geq q_1(Ki_{n,3}) - 3$.

In the same way, if $n \geq 5$, we have $q_1/\omega \geq 2 - 2/\omega \geq 1.6$. if $\omega = 2$ and $n \geq 6$, $q_1/\omega \geq 1 + \cos(\pi/n) \geq 1.86$. Finally, let G_2 be the graph on five vertices consisting of a clique on four vertices and a pendant edge. Then, for all graphs on $n \geq 5$ vertices, with $\omega = 3$, $q_1\omega \geq q_1(G_2)/4 > 1.59$. $\square$

Conjecture 2.1.30. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and clique number ω . Then*

$$q_1 - \omega \leq \frac{3}{2}n - 4, \quad \text{if } n \geq \text{is even}, \quad (2.37)$$

$$q_1/\omega \leq \frac{n}{2}. \quad (2.38)$$

The bound for (2.37) is attained by and only by the complement of a perfect matching when $n \geq 6$ is even. Moreover, when $n \geq 9$ is odd, $q_1 - \omega$ is maximum for and only for the complement of a perfect matching on $n-3$ vertices and a triangle on the 3 remaining vertices. The bound for (2.38) is attained by and only by the complete bipartite graphs $K_{p,q}$.

Some further easy results involving α , β and ω are described in [67].

2.1.7 Bounds using miscellaneous invariants

Finally, in this section, we consider bounds involving three well-known invariants : the chromatic number χ , the matching number μ and the Randić index Ra .

Proposition 2.1.31. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and chromatic number χ . Then*

$$1 \leq q_1 - \chi, \quad (2.39)$$

$$\frac{4}{3} \leq q_1/\chi \leq \frac{n}{2}. \quad (2.40)$$

The lower bounds for (2.39) and (2.40) are attained by and only by the odd cycle C_n when n is odd.

The upper bound for (2.40) is attained by and only by the complete bipartite graphs $K_{p,q}$.

Proof :

(a) Lower bounds for (2.39) and (2.40).

If $\chi = 2$, $q_1 - \chi \geq 2 \cos(\pi/n) > 1$ and $q_1/\chi \geq 1 + \cos(\pi/n) > 4/3$ for all $n \geq 4$.

If $\chi = 3$, then G is not a path and $q_1 \geq 4$. If n is odd, the bound is reached for an odd cycle. If n is even the bound cannot be reached.

If $\chi \geq 4$, it is known that $\lambda_1 \geq \chi - 1$ [103]. Thus

$$q_1 - \chi \geq 2\lambda_1 - \chi \geq \chi - 2 \geq 2 \text{ and } \frac{q_1}{\chi} \geq \frac{2\lambda_1}{\chi} \geq 2 - \frac{2}{\chi} \geq \frac{3}{2}.$$

Hence $q_1 - \chi \geq 1$ and $q_1/\chi \geq 4/3$. The equalities hold if and only if G is an odd cycle

(b) Upper bound for (2.40).

If $\chi = 2$, q_1 is obviously maximum for the complete bipartite graphs and $q_1(K_{p,q}) = n$.

If $\chi = 3$, then $q_1 \leq 4/3$ and $q - 1/\chi \leq 4n/9 < n/2$.

If $\chi \geq 4$, then $q - 1/\chi \leq (n - 1)/2$. This completes the proof.. $\square$

Remark 2.1.32. In fact, it is possible to identify the extremal graphs for (2.39) and (2.40) when n is even. Let G be the connected graph on $n \geq 4$ vertices, n even, that minimizes $q_1 - \chi$. Then G is a unicyclic graph consisting of a cycle on $n - 1$ vertices and a pending edge $Lol_{n,n-1}$.

First, for a lollipop $Lol_{n,g}$ different from C_n ,

$$q_1 - \chi < \max_{i \sim j} (d_i + d_j) - \chi = 2,$$

where (i, j) runs over all pairs of adjacent vertices of G and $d_1, d_2, \dots, d_n$ denote vertex degrees of G .

Second, from Lemma 2.1.14, it is possible to strictly reduce q_1 by subdividing an edge of the cycle and deleting a pending vertex. For any initial unicyclic graph G which is not a cycle, it is possible to obtain $Lol_{n,n-1}$ by repeating this operation. Hence for n even and $\chi = 3$, q_1 is minimum for $Lol_{n,n-1}$.

Conjecture 2.1.33. *Let G be a connected graph on $n \geq 6$ vertices with signless Laplacian index q_1 and chromatic number χ . Then*

$$q_1 - \chi \leq \frac{3}{2}n - 4 \quad \text{if } n \text{ is even.} \quad (2.41)$$

The bound is attained by and only by the complement of a perfect matching when n is even. Moreover, when $n \geq 9$ is odd, $q_1 - \chi$ is maximum for and only for the complement of a perfect matching on $n - 3$ vertices and a triangle on the three remaining vertices.

Lemma 2.1.34. [109] *Let G be a graph on n vertices with signless Laplacian index q_1 and matching number μ . Then,*

- (i) *If $n = 2\mu$, or $2\mu + 1$, then $q_1(G) \leq q_1(K_n) = 2n - 2$, with equality if and only if G is K_n .*
- (ii) *If $2\mu + 2 \leq n \leq (5\mu + 3)/2$, then $q_1(G) \leq 4\mu$. Moreover if $n \neq (5\mu + 3)/2$ the equality holds for a disconnected graph.*
- (iii) *If $n > (5\mu + 3)/2$, then $q_1(G) \leq (n - 2 + 2\mu + \sqrt{(n - 2 + 2\mu)^2 - 8\mu^2 + 8\mu})/2$.*

Proposition 2.1.35. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and matching number μ . Then*

$$q_1 - \mu \leq 2(n-1) - \lfloor \frac{n}{2} \rfloor \quad (2.42)$$

$$q_1/\mu \leq n, \quad (2.43)$$

$$n \leq q_1 \cdot \mu \quad (2.44)$$

The lower bound for (2.44) is attained by and only by the star S_n .

The upper bound for (2.42) is attained by and only by the complete graph K_n . The upper bound for (2.43) is attained by and only by the star S_n .

Proof :

(a) Upper bound for (2.42). Let G be a connected graph on n vertices.

If $n = 2\mu$ or $2\mu + 1$, we have $2n - 2 - \lfloor n/2 \rfloor$.

If $2\mu + 2 \leq n \leq (5\mu + 3)/2$, from lemma 2.1.34, we have $q_1 \leq 4\mu$. Then, since G is connected, $q_1 - \mu \leq 3\mu(2n - 2 - n/2)$. If $n > (5\mu + 3)/2$, then from lemma 2.1.34

$$\begin{aligned} q_1 - \mu &\leq \frac{1}{2}(n - 2 + 2\mu + \sqrt{(n - 2 + 2\mu)^2 - 8\mu^2 + 8\mu}) - \mu \\ &\leq (n - 2 + 2\mu) - \mu, \quad \text{since } \mu^2 - \mu \geq 0, \\ &< n - 2 + \frac{2n - 3}{5} = 1.4n - 2.6, \\ &< 2n - 2 - \lfloor \frac{n}{2} \rfloor. \end{aligned}$$

This completes the proof of (2.42).

(b) Upper bound for (2.43). Let G be a connected graph on n vertices. If $\mu = 1$, G is the star S_n and $q_1/\mu = n$. If $\mu \geq 2$, then $q_1/\mu \leq n - 1$. Hence q_1/μ is maximal for and only for the star S_n .

(c) Lower bound for (2.44). Let G be a connected graph on n vertices with matching number μ . Then G has a spanning tree which has the same matching number and a not larger q_1 . So the extremal graph is a tree.

Let T be a tree on n vertices and M a matching on T obtained with the following greedy algorithm : beginning with $M = \emptyset$, at each iteration we select a pending edge uv , where v is a pending vertex, add it to M and delete all edges incident with u . This removes at most Δ edges from the $n - 1$ edges of T . Hence $\mu \geq |M| \geq \lceil (n - 1)/\Delta \rceil \geq (n - 1)/\Delta \geq n/(\Delta + 1) \geq n/q_1$, as $q_1 \geq \Delta + 1$ [34]. Substituting this bound for q_1 yields the result. The last inequality is sharp for and only for the star S_n . $\square$

Proposition 2.1.36. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and Randić index Ra . Then*

$$\left. \begin{array}{ll} \frac{7}{2} + 2 \cos \frac{\pi}{n} - \frac{n}{2} - \sqrt{2} & \text{if } n \leq 10 \\ 4 - \frac{n}{2} & \text{if } n \geq 11 \end{array} \right\} \leq q_1 - Ra \quad (2.45)$$

$$\left. \begin{array}{ll} \frac{4+4 \cos(\pi/n)}{n-3+2\sqrt{2}} & \text{if } n \leq 14 \\ \frac{8}{n} & \text{if } n \geq 15 \end{array} \right\} \leq q_1/Ra. \quad (2.46)$$

The bounds for (2.45) (resp (2.46)) are attained by and only by the path P_n for $n \leq 10$ (resp $n \leq 14$) , and the cycle C_n for $n \geq 11$ (resp $n \geq 15$).

Proof :

(a) Lower bounds for (2.45) and (2.46). It is known that q_1 is minimum for the paths and that, among the trees, the Randić index is maximum for the paths. Hence, for all trees,

$$q_1 - Ra \geq 2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} - \frac{n}{2} + \frac{3}{2} - \sqrt{2} \quad \text{and} \quad \frac{q_1}{Ra} \geq \frac{4 + 4 \cos(\pi/n)}{n - 3 + 2\sqrt{2}}.$$

If $m \geq n$, the cycle maximizes the Randić index and minimizes q_1 . Hence, under that constraint,

$$q_1 - Ra \geq 4 - \frac{n}{2}, \quad \text{and} \quad \frac{q_1}{Ra} \geq \frac{8}{n}.$$

We now have to compare 2 with $2 \cos(\pi/n) + 3/2 - \sqrt{2}$, and $(4 + 4 \cos(\pi/n))/(n - 3 + 2\sqrt{2})$ with $8/n$.

The series $(u_n)_{n \geq 2}$ defined by $u_n = 2 \cos(\pi/n) - 1/2 - \sqrt{2}$ is increasing. Now $u_{10} =$

-0.012 and $u_{11} = 0.04$. The series $(v_n)_{n \geq 2}$ defined by $v_n = (4 + 4 \cos(\pi/n))/(n - 3 + 2\sqrt{2}) - 8/n$ is increasing. Now $v_{14} = -0.0001$ and $v_{15} = 0.0003$. The result follows. $\square$

Conjecture 2.1.37. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and Randić index Ra . Then*

$$q_1 - Ra \leq \frac{3}{2}n - 2, \quad (2.47)$$

$$\frac{1}{2} + 2 \cos \frac{\pi}{n} + \frac{n}{2} + \sqrt{2} \leq q_1 + Ra, \quad (2.48)$$

$$q_1/Ra \leq \begin{cases} \frac{4n-4}{n}, & \text{if } 4 \leq n \leq 12, \\ \frac{n}{\sqrt{n-1}}, & \text{if } n \geq 13, \end{cases} \quad (2.49)$$

$$(1 + \cos \frac{\pi}{n})(n - 3 + 2\sqrt{2}) \leq q_1 \cdot Ra. \quad (2.50)$$

The lower bounds for (2.48) (resp (2.50)) are attained by and only by the path P_n .

The upper bound for (2.47) is attained by and only by the complete graph K_n . The upper bound for (2.49) is attained by and only by the complete graph K_n if $4 \leq n \leq 12$, and by and only by the star S_n if $n \geq 13$.

Easy results involving χ , μ and Ra are given in [67].

2.1.8 Conclusions

In this paper, we begin a systematic study of bounds and conjectures on the signless Laplacian spectrum involving also various classical graph invariants. More precisely, we consider relations the form AGX 1 [6] involving the index of the signless Laplacian and several graph invariants, one at a time. For each of them we consider an expression of the form $q_1 \oplus i(G)$ and use the AGX system to find best possible lower and upper bounds as functions of the order n of G . This often succeeds. Indeed, we obtain algebraic conjectures in 120 cases out of 152. Moreover, we obtain structural conjectures, i.e., descriptions of the extremal graph, in 12 of the remaining cases. In 20 cases, the graph obtained by AGX were too disparate to lead to conjectures. Observe that this happens mostly for lower bounds on the sum $q_1 + i(G)$ and for lower and upper bounds on the

product $q_1 \cdot i(G)$. Moreover this mostly happens with metric invariants. Among the conjectures found, 73 were known or were easily proved by checking if the adequate list of extremal graphs for q_1 and $i(G)$ have non-empty intersection. Proofs are also given in 42 cases, and 17 conjectures remain open. Results go from straightforward proof of observations to somewhat longer proofs of propositions and a long proof for a theorem. AGX thus appears to provide notable help in the study of the signless Laplacian index.

2.2 An inequality for the signless Laplacian index of a graph using the chromatic number

Abstract Let $Q = D + A$ denote the signless Laplacian matrix of a graph G of order n , where D is the diagonal matrix of the degrees and A the adjacency matrix of G . Let q_1 denote the index of Q and χ the chromatic number of G . In this note we prove that $q_1 \leq 2n(1 - 1/\chi)$.

2.2.1 Introduction

The signless Laplacian matrix of a graph G is defined by $Q = D + A$, where D is the diagonal matrix of the vertex degrees and A the adjacency matrix of G . Recently, properties of the spectrum of Q have attracted much attention, see e.g. [35]–[69]. Recall that the clique number ω of G is the largest number of pairwise adjacent vertices of G and the chromatic number χ is the minimum number of colors to be assigned to the vertices of G such that no two adjacent vertices receive the same color. Obviously $\omega \leq \chi$. The system AutoGraphiX [22]–[1] was used to find extremal graphs for the index q_1 of Q , given the number of vertices n and the clique number ω . This led to the following conjecture :

Conjecture 2.2.1. *Let G be a graph on n vertices with largest signless Laplacian q_1 and clique number ω . Then*

$$q_1 \leq 2n(1 - 1/\omega) \tag{2.51}$$

Moreover, the bound is sharp if and only if G is a complete regular ω -partite graph.

While at present we don't have a proof of this conjecture, we prove in this note a weaker result obtained by substitution of ω by χ . This result strengthens a result of Cvetković ([40] p.92) : $\lambda_1 \leq n(1 - 1/\chi)$, where λ_1 is the index of the adjacency matrix A of G .

2.2.2 Number of semi-edge walks and characteristic polynomial

Let G be a graph with signless Laplacian matrix Q . In this section we establish a relation between the number of semi-edge walks of G , the characteristic polynomial P_G of Q , and the characteristic polynomial $P_{\bar{G}}$ of the signless Laplacian matrix $\bar{Q}$ of the complement $\bar{G}$ of G .

We first recall a definition and a result from Cvetković *et al.* [35].

Definition 2.2.2. *A semi-edge walk of length k in an undirected graph G is an alternating sequence $v_1, e_1, v_2, e_2, \dots, v_k, e_k, v_{k+1}$ of vertices $v_1, v_2, \dots, v_k, v_{k+1}$ and edges $e_1, e_2, \dots, e_k$ such that for any $i = 1, 2, \dots, k$ the vertices v_i and v_{i+1} are, not necessarily distinct, end-vertices of the edge e_i .*

Theorem 2.2.3. [35] *Let Q be the signless Laplacian matrix of a graph G with vertices $v_1, v_2, \dots, v_n$. Let $Q^k = (q_{i,j}^{(k)})$ and $N_k(i, j)$ denote the number of semi-edge walks of length k starting at vertex v_i and terminating at the vertex v_j . Then*

$$N_k(i, j) = (q_{i,j}^{(k)}) \quad (k = 1, 2, \dots).$$

In the sequel we denote by *sum* M the sum of all entries of a matrix M .

Let N_k denote the total number of semi-edge walks of length k in G . Then $N_k = \text{sum} Q^k$.

Since

$$\sum_{k=0}^{\infty} Q^k t^k = (I - tQ)^{-1} \quad (|t| < q_1^{-1}),$$

we obtain

$$\sum_{k=0}^{\infty} N_k t^k = \sum_{k=0}^{\infty} \text{sum} Q^k t^k = \text{sum} (I - tQ)^{-1}, \quad (|t| < q_1^{-1}).$$

Let M be a non-singular square matrix of order n and J the square matrix with all entries equal to 1. Then for an arbitrary number x , the determinant $|M + xJ| = |M| +$

$x|M| \text{sum } M^{-1}$ ([40], p.92). Applying this equality to $M = Q - 1/t I$ and $x = -1$ gives,

$$\begin{aligned} \text{sum } ((Q - 1/t I)^{-1}) &= \frac{|Q - 1/t I| - |Q - 1/t I - J|}{|Q - 1/t I|} \\ &= 1 - \frac{|(n - 2 - 1/t)I - \bar{Q}|}{|Q - 1/t I|} \quad \text{as } \bar{Q} = (n - 2)I + J - Q. \\ &= 1 - (-1)^n \frac{P_{\bar{G}}(n - 2 - 1/t)}{P_G(1/t)}. \end{aligned}$$

As $\text{sum } (I - tQ)^{-1} = -(1/t)(\text{sum } ((Q - 1/t I)^{-1}))$, we have the following result.

Theorem 2.2.4. *Let G be a graph with complement $\bar{G}$, and let $H_G(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} N_k t^k$ be the generating function of the number of semi-edge walks of length k in G . Then*

$$H_G(t) = \frac{1}{t} \left[(-1)^n \frac{P_{\bar{G}}(n - 2 - 1/t)}{P_G(1/t)} - 1 \right], \quad (|t| < q_1^{-1}). \quad (2.52)$$

By setting $\lambda = n - 2 - 1/t$ in (2.52), we have

$$P_G(\lambda) = (-1)^n \left[(n - 2 - \lambda)^{-1} H_{\bar{G}} \left(\frac{1}{n - 2 - \lambda} \right) + 1 \right] P_{\bar{G}}(n - 2 - \lambda) \quad (2.53)$$

for $\lambda \in] - \infty, n - 2 - q_1[\cup] n - 2 + q_1, +\infty[$.

2.2.3 Computation of the characteristic polynomial of a complete multi-partite graph

Let $G_1 = (V_1, E_1)$ and $G_2 = (V_2, E_2)$ be two graphs. We denote by $G_1 \cup G_2$ the disjoint union of G_1 and G_2 , i.e., the graph with set of vertices $V_1 \cup V_2$ and with set of edges $E_1 \cup E_2$. We obviously have $H_{G_1 \cup G_2} = H_{G_1} + H_{G_2}$ and $P_{G_1 \cup G_2} = P_{G_1} \cdot P_{G_2}$.

For a complete graph K_p on p vertices, the number of semi-edge walks of length k is $N_k = p2^k(p - 1)^k$. Hence

$$H_{K_p}(t) = \frac{p}{1 - 2(p - 1)t}.$$

Moreover, $P_{K_p}(\lambda) = (2p - 2 - \lambda)(p - 2 - \lambda)^{p-1}$. Now, as a complete multi-partite graph $K_{n_1, n_2, \dots, n_\chi}$ with chromatic number χ is the complement of the disjoint union of the complete graphs $K_{n_1}, K_{n_2}, \dots, K_{n_\chi}$, we can use (2.53) to compute its characteristic

polynomial for $\lambda \in]-\infty, n-2-q_1[\cup]n-2+q_1, +\infty[$. Then

$$P_{K_{n_1, n_2, \dots, n_\chi}}(\lambda) = \left[\sum_{i=1}^{\chi} \left(\frac{n_i}{n-2n_i-\lambda} \right) + 1 \right] \prod_{i=1}^{\chi} [(\lambda - n + 2n_i)(\lambda - n + n_i)^{n_i-1}]. \quad (2.54)$$

As both sides of the equality are polynomials, the equality holds for $\lambda \in \mathbb{R}$.

It is well known that the signless Laplacian matrix of a graph has at most one eigenvalue greater than $n-2$.

For $\lambda > n-2$ given and $\sum_{i=1}^{\chi} n_i = n$, $\sum_{i=1}^{\chi} \frac{n_i}{n-2n_i-\lambda}$ attains its minimum when all the n_i are equal. Moreover, for $\lambda = 2n(1 - 1/\chi)$ and $n_1 = n_2 = \dots = n_\chi = n/\chi$, $\sum_{i=1}^{\chi} \frac{n_i}{n-2n_i-\lambda} + 1 = 0$. By studying the sign of $P_{K_{n_1, n_2, \dots, n_\chi}}$, we obtain $P_{K_{n_1, n_2, \dots, n_\chi}}(\lambda) \leq 0$, for $n-2 < \lambda \leq 2n(1 - 1/\chi)$.

Then

$$q_1(K_{n_1, n_2, \dots, n_\chi}) \leq 2n(1 - \frac{1}{\chi}).$$

Now from the interlacing theorem for Q [35], we know that for all graphs G on n vertices with largest signless Laplacian q_1 and chromatic number χ , $q_1 \leq q_1(K_{n_1, n_2, \dots, n_\chi})$. This proves the following theorem.

Theorem 2.2.5. *Let G be a graph on n vertices with largest signless Laplacian eigenvalue q_1 and chromatic number χ . Then*

$$q_1 \leq 2n(1 - \frac{1}{\chi}). \quad (2.55)$$

The equality holds if and only if G is a regular complete χ -partite graph

2.2.4 Conclusions

We have obtained an upper bound on the index q_1 of Q which is sharp for an infinity of values of n and of χ . We conjecture that a similar bound holds when ω is substituted for χ . However, the proof strategy used in this note does not extend to that case. Indeed, while it is easy to find extremal graphs for q_1 given n and χ , i.e., complete multi-partite graphs, it is not so for given n and ω .

Motzkin and Strauss [93] gave the following result : $\max_{x \in S} \langle x, Ax \rangle = 1 - 1/\omega$, where S is the simplex in $\mathbb{R}^n$. Minimizing $\|x\|$ on S leads to $\lambda_1 \leq n(1 - 1/\omega)$. Clearly this implies the result of Cvetković cited in the introduction. However, again the proof technique cannot be easily extended to prove conjecture 2.2.1. Indeed $\max_{x \in S} \langle x, Qx \rangle \geq \Delta$, where Δ is the maximum vertex degree of G . Then minimizing $\|x\|$ on S leads to $q_1 \leq n\Delta$, which is worse than the well known bound $q_1 \leq 2\Delta$.

2.3 Résolution et réfutation de conjectures concernant le rayon spectral du Laplacien sans signe

Dans l'article *Bounds and conjectures for the signless Laplacian index of graphs* [69] qui fait l'objet de la section précédente, 17 inégalités de la forme 1 d'AGX sont conjecturées. Depuis la parution de cet article, une partie d'entre elles ont été soit prouvées soit réfutées. Dans cette section, on présente les résultats de la littérature sur les conjectures de [69] et [68] puis on présente la réfutation d'une autre de ces conjectures.

La conjecture 2.2.1, exprimée dans l'article *An inequality for the signless Laplacian index of a graph using the chromatic number* [68] est confirmée par les résultats de He, Jin et Zhang [74].

Théorème 2.3.1. *Soit G un graphe connexe d'ordre n et ω la taille de la plus grande clique contenue, en temps que sous-graphe, dans G , alors*

$$q_1 \leq \frac{(3\omega - 4)k + 3r - 2 + \sqrt{k^2\omega^2 + [(2r + 4)\omega - 8r]k + (r - 2)^2}}{2} \quad (2.56)$$

où $n = k\omega + r$, $0 \leq r < \omega$. L'égalité est atteinte par les graphe bipartis pour $\omega = 2$ et les graphes de Turán $T_{n,\omega}$ pour $\omega \geq 3$.

Cette inégalité implique 2.51 et réfute la conjecture 2.1.30, la preuve de cette affirmation est incluse dans le même article.

De plus, le théorème 2.2.5 vient contredire la conjecture 2.1.33. Une rapide étude

permet de le démontrer. D'après l'équation 2.55, on a

$$q_1 - \chi \leq 2n - \frac{2n}{\chi} - \chi.$$

Soit G un graphe χ -parti complet à $n = k^2/2$ sommets, $k \in \mathbb{N}^*$, tel que $\chi = \sqrt{2n}$. Alors G vérifie

$$q_1(G) - \chi(G) = 2n - 2\sqrt{2n}.$$

Or pour tout $n > 0$, $n/2 + 4 > \sqrt{2n}$ d'où

$$q_1(G) - \chi(G) > \frac{3n}{2} - 4.$$

Certaines des conjectures proposant des inégalités de la forme 1 d'AGX impliquant q_1 et un invariant de distance sont traitées dans le chapitre suivant. Les conjectures 2.1.17 et 2.1.18 concernant respectivement le diamètre et le rayon sont résolues. En revanche, les conjectures 2.1.23 et 2.1.24 concernant la proximité et l'éloignement sont toujours ouvertes.

Les neuf autres conjectures émises dans [69] n'ont pas été étudiées à notre connaissance.

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

Les résultats obtenus pour le diamètre et le rayon, ainsi que ceux obtenus pour la maille dans [69] mettent en évidence l'existence d'une structure de graphe pour laquelle le rayon spectral 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, à une exception près ($r = 2$), un sac de rayon r . Ces graphes sont les graphes extrêmes des conjectures 2.1.17 et 2.1.18. Pour une valeur de la maille 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 $Lol_{n,g}$. Ces graphes sont présentés dans les figures 3.1 à 3.4.

Les résultats présentés dans ce chapitre ont fait l'objet d'un rapport technique dans les *Cahiers du GERAD* [89]. Dans la suite de ce chapitre, on présente la version française, dans laquelle le mot *article* doit être perçu comme signifiant *chapitre*.

3.1 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 [37] 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 renforcent 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 [73] 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 [17]. 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 3.2, 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 3.3, on montre que les graphes maximaux pour q_1 lorsque le diamètre du graphe est fixé sont les bestioles $Bug_{n-D+2, \lfloor D/2 \rfloor, \lfloor D/2 \rfloor}$ si $D \geq 2$ ou le graphe complet, puis on détermine la famille des graphes qui maximisent $q_1 \cdot D$. Dans la section 3.4, 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 3.5, 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 [69]. Des conclusions et perspectives de ces travaux sont données dans la section 3.6.

3.2 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 usuelles, on rappelle donc leur définition.

Définition 3.2.1. *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.

On utilise les notations usuelles de théorie des graphes telles que définies dans [40]. 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 pendent 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 .

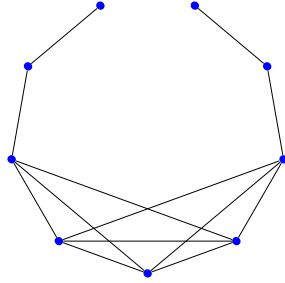
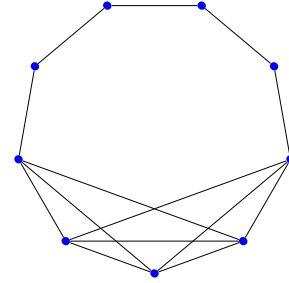
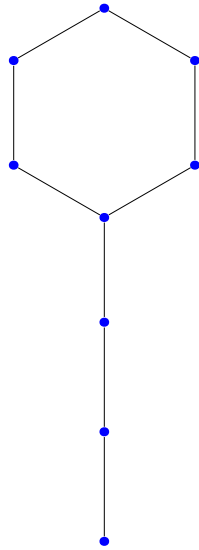
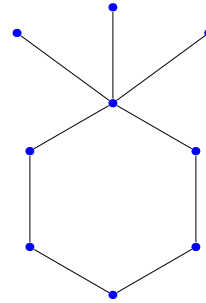
L'excentricité d'un sommet u d'un graphe G est le maximum des distances de u tout autre sommet de G , on la note $ecc(u)$. Le diamètre D de G est le maximum des excentricités des sommets de G et le rayon r est le minimum des excentricités des sommets de G . La maille g est la longueur du cycle le plus 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 3.2.2. [34] 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 3.2.3. [35, 76] 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 $q_1(G)$.

FIGURE 3.1 – $Bug_{5,3,3}$ FIGURE 3.2 – $Bag_{5,6}$ FIGURE 3.3 – $Lol_{9,6}$ FIGURE 3.4 – $Tu_{9,6}$

Soient u , v et w trois sommets de G tels que $uv \in E$ et $uw \notin E$ et $x_w \geq x_v$. 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 3.2.4. [55] *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 3.2.5. [69] *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 3.2.6. [69] *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 3.2.7. *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

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

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 3.2.8. [34, 94] 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.

3.3 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 [73]. 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 2.1.17.

Théorème 3.3.1. *Le graphe à n sommets, avec un diamètre D donné, qui maximise la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe 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'arêtes, 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 3.2.7, 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 $Bug_{n-D+2,p,D-p}$ telle 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 $i \in \{1, \dots, D/2\}$. 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 $i \in \{2, \dots, D/2 - 1\}$ 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 $q_1(\text{Bug}_{n-D+2,p,D-p}) > q_1(\text{Bug}_{n-D+2,p-1,D-p+1})$ 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 $q_1(\text{Bug}_{n-D+2,p,D-p}) > q_1(\text{Bug}_{n-D+2,p+1,D-p-1})$ 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

$$\begin{aligned} ((q_1 - n + D - 3)\alpha_{D-p-1} + \alpha_{D-p-2}(C_{D-p-1} - 1))x_{v_1} \\ = ((q_1 - n + D - 3)\alpha_p + \alpha_{p-1}(C_p - 1))x_{u_0}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

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 3.1 soit vérifiée, on a nécessairement $x_{v_1} < x_{u_0}$. La rotation de l'arête $v_0 v_1$ vers la position vide $v_0 u_0$ 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 2.1.17, il suffit de montrer pour quelle valeur de D , $q_1(Bug_{\lceil n/2 \rceil, \lfloor D/2 \rfloor, \lfloor D/2 \rfloor}) \cdot D$ atteint son maximum.

Théorème 3.3.2. *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 $D = \lceil (n+1)/2 \rceil$, $p = \lfloor D/2 \rfloor$ et $q = \lceil D/2 \rceil$.*

Preuve : Il est facile de voir que pour toute bestiole $B = Bug_{n,k,l}$, de diamètre D , $q_1(B) < 2(n - D + 1)$. 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

$$q_1(B) < 2(n - D + 1), \quad (3.2)$$

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,

$$\begin{cases} \lambda x_1 &= 2x_1 + 2x_2 \\ \lambda x_2 &= (p+1)x_2 + x_1 + px_3 \\ \lambda x_3 &= (p+1)x_3 + 2x_2 + (p-1)x_3 \end{cases} \quad (3.3)$$

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

$$P(\lambda) = \frac{1}{2p}(\lambda - 2p)((\lambda - p - 1)(\lambda - 2) - 2) - (\lambda - 2). \quad (3.4)$$

Par interpolation, on obtient l'inégalité suivante :

$$q_1(Bag_{p+2,3}) < 2 \left(p + 1 - \frac{1}{2p} \right). \quad (3.5)$$

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,

$$\begin{cases} \lambda x_1 &= 2x_1 + x_1 + x_2 \\ \lambda x_2 &= (p+1)x_2 + x_1 + px_3 \\ \lambda x_3 &= (p+1)x_3 + 2x_2 + (p-1)x_3 \end{cases} \quad (3.6)$$

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

$$P(\lambda) = \frac{1}{p}(\lambda - 2p)((\lambda - p - 1)(\lambda - 3) - 2) - 2(\lambda - 3), \quad (3.7)$$

et on obtient, par interpolation,

$$2\left(p + 1 - \frac{1}{p+3}\right) < q_1 < 2\left(p + 1 - \frac{1}{p+4}\right). \quad (3.8)$$

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,

$$\begin{cases} \lambda x_1 &= x_1 + x_2 \\ \lambda x_2 &= (p+1)x_2 + x_1 + px_3 \\ \lambda x_3 &= (p+1)x_3 + 2x_2 + (p-1)x_3 \end{cases} \quad (3.9)$$

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

$$P(\lambda) = \frac{1}{p}(\lambda - 2p)((\lambda - p - 1)(\lambda - 1) - 2) - 2(\lambda - 1). \quad (3.10)$$

Par interpolation, on obtient l'inégalité suivante :

$$2\left(p + 1 - \frac{1}{p+3}\right) < q_1(Bug_{p,2,2}) < 2\left(p + 1 - \frac{1}{p+4}\right). \quad (3.11)$$

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 3.5, 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 3.11, 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 3.8 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. $\square$

3.4 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 [73]. 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 2.1.18.

Théorème 3.4.1. *Le graphe à n sommets, avec un rayon r donné, qui maximise la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe 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 :

$$q_1 x_u = (n-2)x_u + (n-2)x_u, \quad (3.12)$$

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

$$d_v + \sum_{w \sim v} \frac{d_w}{d_v} > 2(n-2-\frac{1}{n}). \quad (3.13)$$

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 $v_b \in B$:

$$q_1 x_a = (n - 2)x_a + (|A| - 1)x_a + |B|x_b + x_w + 2x_{w_1}, \quad (3.14)$$

$$q_1 x_b = (n - 2)x_b + (|B| - 2)x_b + |A|x_a + x_u + x_w + 2x_{w_1}, \quad (3.15)$$

$$q_1 x_u = (|B| + 3)x_u + |B|x_b + x_w + 2x_{w_1}, \quad (3.16)$$

$$q_1 x_w = (n - 3)x_w + |A|x_a + |B|x_b + x_u, \quad (3.17)$$

$$q_1 x_{w_1} = (n - 2)x_{w_1} + |A|x_a + |B|x_b + x_u + x_{w_1}. \quad (3.18)$$

Montrons maintenant qu'il est impossible que $x_w \geq x_u$. En effectuant la différence de 3.14 et 3.18, on obtient,

$$(q_1 - n + 3)(x_a - x_{w_1}) = x_w - x_u. \quad (3.19)$$

En effectuant la différence entre 3.17 et 3.16, 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,

$$(q_1 - |B| - 2 - \frac{2}{q_1 - n + 3})(x_w - x_u) = (n - |B| - 6)x_w + (|A| - 2)x_a. \quad (3.20)$$

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_1u autour de w_1 vers la position inoccupée w_1w 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 $v_b \in B$:

$$q_1 x_a = (n-2)x_a + (n-|B|-2)x_a + |B|x_b, \quad (3.21)$$

$$q_1 x_b = (n-2)x_b + (|B|-2)x_b + (n-|B|-1)x_a + x_u, \quad (3.22)$$

$$q_1 x_u = |B|x_u + |B|x_b. \quad (3.23)$$

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

$$P_b(x) = x^3 - (b+3n-8)x^2 + ((3n-8)b+2n^2-12n+16)x - 2b^2 - 2bn^2 + 14bn - 20b, \quad (3.24)$$

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,

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

et

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

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

$$P_2(x) = x^3 - (3n - 6)x^2 + (2n^2 - 6n)x - 4n^2 + 28n - 48, \quad (3.25)$$

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

$$P_{n-3}(x) = x^3 - (4n - 11)x^2 + (5n^2 - 29n + 40)x - 2(n^3 - 9n^2 + 25n - 21). \quad (3.26)$$

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 [73], 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 $2\Delta > q_1$,

$$\Delta(G) \geq n - 2r + 2. \quad (3.27)$$

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 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 1.2.6, un de ces deux déplacements 1.2.6 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

$$x_{v_{-2}} > x_{v_1}, \quad (3.28)$$

et de la même façon

$$x_{v_2} > x_{v_{-1}}. \quad (3.29)$$

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

$$x_{-i-1} + x_{i+1} < x_{-i} + x_i \quad (3.30)$$

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 (3.30), 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

$$x_{-3} + x_3 < x_{-2} + x_2. \quad (3.31)$$

Traitons maintenant le cas des indices $-1, 0$ et 1 . L'addition de 3.28 et 3.29 donne

$$x_{-2} + x_2 > x_{-1} + x_1. \quad (3.32)$$

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

$$(q_1 - |R| - 4)(x_{-2} + x_2) < \sum_{l \in L} x_l \sum_{r \in R} x_r. \quad (3.33)$$

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

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

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

$$(1 - |L| - |C|)(x_{-2} + x_2) > 2x_0. \quad (3.34)$$

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 $G^* = Bag_{n-2r+3, 2r-1}$. $\square$

On va maintenant utiliser ce résultat pour prouver la conjecture 2.1.18.

Proposition 3.4.2. *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 $Bag_{n-2r+3,2r-1}$ 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,

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

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

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

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 3.3.2 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 3.11, on obtient

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

Si $2r - 1 = \frac{n+2}{2}$, en utilisant 3.8 on obtient

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

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 3.11, on obtient

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

Si $2r - 1 = \frac{n+3}{2}$, en utilisant 3.8 on obtient

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

Si $2r - 1 = \frac{n-1}{2}$, en utilisant 3.8 on obtient

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

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 $\overline{PM} = B$. $\square$

3.5 Graphes minimisant et maximisant q_1 avec une maille fixée

Théorème 3.5.1. *Le graphe connexe à n sommets, avec une maille $g \geq n/2$ donnée, qui minimise la plus grande valeur propre du Laplacien 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 3.2.5, 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 3.2.6,

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

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 3.5.2. *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, si $g = 4$ 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 de 2.1.21 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 il 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 $\Delta(G^*) \leq n - g + 2$. On note m_u la moyenne de degrés d'un sommet u de V

Soit G un graphe tel que $2 < \Delta(G^*) \leq n - g + 1$ et que $g \leq n - 2$. Soit u un sommet de l'unique cycle C de G , alors $d_u + m_u \leq d_u + \frac{d_u + 2 + (n - g - d_u + 2)}{d_u} = d_u + \frac{n - g + 4}{d_u}$. Or $d_u + \frac{n - g + 4}{d_u}$ décroît pour $2 \leq d_u \leq \sqrt{n - g + 4}$ et croît pour $\sqrt{n - g + 4} \leq d_u \leq n - g + 1$, donc $\max_{u \in C} d_u + m_u = \max(d_u + \frac{n - g + 4}{d_u}) \leq \max(2 + \frac{n - g + 4}{2}, n - g + 1 + \frac{n - g + 4}{n - g + 1}) \leq n - g + 2 + \frac{3}{n - g + 1} \leq n - g + 3$.

La même démarche est utilisée lorsque u n'est pas un sommet de C , on obtient alors $\max_{u \in V \setminus C} d_u + m_u \leq n - g + 3$. D'où $\max_{u \in V} d_u + m_u \leq n - g + 3$

On sait que $q_1(G) < \max_{u \in V} d_u + m_u$, donc si $2 < \Delta \leq n - g + 1$, $q_1(G) \leq n - g + 3$. 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 $Tu_{n,g}$.

De plus si $\Delta = 2$ alors G^* est un cycle, donc c'est un navet, si $n - g = 1$ alors G^* est une sucette de maille $n - 1$, et c'est à nouveau un navet.

Il est montré, dans la preuve du théorème 2.1.21, que si un graphe G de maille g

contient au moins deux cycles alors $q_1(G) \leq n - 3g/2 + 6$. Ce résultat permet de montrer que le graphe qui maximise q_1 avec $g \geq 5$ fixé est unicyclique et est par conséquent le navet.

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 $g = 5$, soit un graphe non unicyclique G de maille 5 et soit G' un sous-graphe de G contenant deux cycles. Notons que deux cycles de G de longueur 5, partagent au plus trois sommets communs, sinon $g = 4$. Si G ne contient pas deux cycles de longueur cinq partageant au moins deux sommets alors :

- soit G' est constitué de deux cycles de longueur 5 ayant un seul sommet commun ; dans ce cas $|G'| = 8$ et $q_1 \leq \max_{v_i \sim v_j} d_{v_i} + d_{v_j} = n - 8 + 3 + 2 = n - 3$
- soit G' est constitué d'un cycle de longueur 5 et un cycle de longueur 6 ayant trois sommets communs ; dans ce cas $|G'| = 8$ et $q_1 \leq \max_{v_i \sim v_j} d_{v_i} + d_{v_j} = n - 8 + 2$. (le cas de deux cycles de tailles 5 et 7 ayant 4 sommets communs se ramène à ce cas en considérant dans G' le plus grand cycle et le cycle de taille 5)
- soit $|G| \geq 9$ et $\max_{v_i \sim v_j} d_{v_i} + d_{v_j} = n - 9 + 3 + 3 = n - 3$.

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 $\max_{v_i \sim v_j} d_{v_i} + m_{v_i} = n - 3 + \frac{n-1}{n-3} > n - 2$. $\square$

3.6 Conclusion

Les résultats obtenus pour le diamètre et le rayon, ainsi que ceux obtenus pour la maille dans [69] 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 2.1.17 et 2.1.18. 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 2.1.23 et 2.1.24 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.

Valeurs extrêmes de la seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe

Les résultats présentés dans les sections 4.2.1 à 4.2.3 de ce chapitre ont fait l'objet d'une publication dans la revue *Linear Algebra and its applications* en 2011, sous le titre original de *On the extremal values of the second largest Q -eigenvalue* [14]. Ce travail s'inscrit naturellement dans le sillage du chapitre précédant puisqu'il porte sur la seconde valeur propre du Laplacien sans signe, q_2 . Un premier travail exploratoire a consisté à générer une série d'inégalités de la forme 1 d'AGX impliquant q_2 avec la même méthode que celle utilisée précédemment pour la plus grande valeur propre du Laplacien sans signe, q_1 [69]. Les bornes supérieures et inférieures ainsi obtenues ont, en général, une forme plus simple que celles obtenues pour q_1 . En revanche déterminer de façon exhaustive la famille des graphes extrêmes est une tâche plus ardue. En effet, des actions simples comme la suppression d'une arête ou d'un sommet ne sont pas des transformations strictement monotones pour q_2 . Rechercher une famille de graphes extrêmes demande donc souvent de définir une ou des familles de graphes critiques tels que l'ajout ou la suppression d'une arête entraîne une violation de l'inégalité. C'est ce que nous avons fait dans ce chapitre pour les valeurs extrêmes de q_2 .

Ma contribution technique correspond principalement à la section 4.2.2, intitulée *Graphs with q_2 less than 3*. J'ai mené les recherches préliminaires, et suis à l'origine de l'énoncé des théorèmes et des preuves qui y sont présentés. Les résultats principaux de cette section sont notamment une caractérisation de tous les graphes dont la seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe est inférieure ou égale à 3, ainsi que la preuve qu'à deux exceptions près, ceux-ci sont entièrement déterminés par leur spectre.

Théorème. 4.2.7 *Soit G un graphe connexe à $n \geq 7$ sommets, soit q_2 la seconde plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe. Alors,*

- (i) $q_2 = 1$ si et seulement si G est une étoile,
- (ii) $\frac{3+\sqrt{5}}{2} - \frac{1}{n} < q_2 < \frac{3+\sqrt{5}}{2}$ si et seulement si $G = S_{n-1,1}$, l'étoile étirée ayant une seule branche de longueur 2,
- (iii) $q_2 = \frac{3+\sqrt{5}}{2}$ si et seulement si $G = S_{n-k,k}$, avec $k \geq 2$,
- (iv) $3 - \frac{2.5}{n} < q_2 < 3$ si et seulement si G est une libellule à un seul triangle,
- (v) $q_2 = 3$ si et seulement si G est une libellule à au moins deux triangles.

Théorème. 4.2.8 *Les graphes à au moins sept sommets dont la seconde plus grande valeur propre est inférieure ou égale à 3 sont déterminés par le spectre de leur Laplacien sans signe.*

Deux théorèmes donnant les valeurs maximales, pour les graphes unicycliques et bicycliques, de la séparation du Laplacien sans signe, i.e. la différence entre la plus grande valeur propre et la seconde, viennent clore cette section.

Théorème. 4.2.12 *Soit G un graphe bicyclique connexe à $n \geq 7$, soient q_1 et q_2 respectivement la plus grande et seconde plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe. Alors $q_1 - q_2$ est maximal si et seulement si G est S_n^+ , le graphe obtenu à partir d'une étoile en ajoutant une arête.*

Théorème. 4.2.13 *Soit G un graphe bicyclique connexe à $n \geq 7$ soient q_1 et q_2 respectivement la plus grande et seconde plus grande valeur propre de son Laplacien sans signe. Alors $q_1 - q_2$ est maximal si et seulement si G est le graphe obtenu à partir d'une étoile en ajoutant deux arêtes non adjacentes.*

Ces deux derniers résultats complètent les résultats obtenus dans le cas général et pour les arbres par Das [41].

Théorème 4.0.1. [41]. *Soit $G = (V, E)$ un graphe à n sommets, soit q_1 (resp. q_2) la plus grande (resp. seconde plus grande) valeur propre de son Laplacien sans signe alors :*

$$q_1 - q_2 \leq n. \quad (4.1)$$

Cette borne est atteinte uniquement par les graphes complets. Si, de plus, G est un arbre alors

$$q_1 - q_2 \leq n - 1. \quad (4.2)$$

Dans ce cas la borne est atteinte uniquement par les étoiles.

La section 4.3, postérieure à l'article, présente une généralisation récente de ces résultats à tous les graphes connexes à $n \geq 9$ sommets et m arêtes pour toutes les valeurs m comprises entre $n - 1$ et $\left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$.

La section 4.2.3, intitulée *Graphs maximizing q_2* , présente trois familles de graphes connexes critiques pour la propriété $q_2 = n - 2$, autrement dit de graphes de taille minimale pour lesquels la valeur de q_2 est maximale. Une famille de graphes extrêmes ainsi qu'une condition suffisante avaient préalablement été définies par Wang et al. [105].

Théorème. 4.2.19 *Le graphe biparti complet $K_{2,n-2}$ avec $n \geq 5$ est minimal pour $q_2 = n - 2$.*

Proposition. 4.2.24 *Pour un entier $n \geq 2$, Soit DK_n le graphe obtenu à partir de deux cliques à $n/2$ sommets reliés par une arête. Alors DK_n est minimal parmi les graphes satisfaisant la propriété $q_2 = n - 2$.*

Théorème. 4.2.26 *Soit $a \geq 2$ et $b \geq 2$ deux entiers et $n = a + b - 1$. Le graphe $G_{a,b}$ est critique pour la propriété $q_2 = n - 2$ si et seulement si $a \neq b + 1$.*

La définition des graphes critiques est restée une question ouverte un certain temps. Elle est résolue dans un article de De Lima et Nikiforov [43].

Théorème 4.0.2. [43] *Si G est un graphe d'ordre $n \geq 2$, alors $q_2(G) = n - 2$, si et seulement si le graphe complémentaire $\bar{G}$ de G a une composante bipartie équilibrée*

(i.e. dont les deux ensembles de sommets indépendants sont de même ordre) ou deux composantes biparties.

Les graphes présentés dans la section 4.2.3 apparaissent évidemment critiques puisque supprimer une arête revient soit à rompre la connexité, soit à ajouter une arête dans le graphe complémentaire entraînant la violation de la condition de ce théorème.

4.1 Définitions préliminaires : diviseur d'un graphe

La notion de diviseur d'un graphe est très utilisée pour factoriser le polynôme caractéristique de la matrice d'adjacence d'un graphe. Cette représentation permet de réduire considérablement la taille d'un graphe, en particulier lorsque celui-ci a un grand groupe de symétrie. Son usage facilite grandement le calcul ou, à défaut, l'approximation des valeurs propres d'un graphe. Les preuves présentées dans ce chapitre font usage à plusieurs reprises de cette représentation pour calculer les valeurs propres du *line graphs* d'un graphe simple G , ou des intervalles les contenant. Cela permet ensuite d'estimer les valeurs propre du Laplacien sans signe du graphe initial, G .

Définition 4.1.1 (Diviseur d'un graphe). *Un graphe orienté et pondéré (avec éventuellement des boucles) $D = (V_D, W_D)$ est le diviseur d'un graphe simple non-orienté et non-pondéré $G = (V, E)$ si et seulement si il existe un morphisme injectif φ des sommets de G sur les sommets de D tel que :*

- (i) $\forall u, v \in V, \varphi(u) \sim \varphi(v)$ dans D si et seulement si $u \sim v$ dans G ,
- (ii) $\forall u \in V, \forall \omega \sim \varphi(u)$, le poids de l'arc $(\varphi(u), \omega)$ est $|\{v \in V | v \sim u\} \cap \varphi^{-1}(\omega)|$, i.e. le nombre de voisin de u qui sont envoyés sur ω par φ .

On dit alors que D divise G et on écrit $D|G$. Pour faciliter la compréhension, cette définition est illustrée dans la figure 4.1 .

En pratique, on confond souvent le diviseur d'un graphe, qui est un graphe lui-même, et la matrice d'adjacence du diviseur d'un graphe. Lorsque que cela ne présente pas d'ambiguïté, on nommera *diviseur* indifféremment le graphe diviseur et sa matrice d'adjacence.

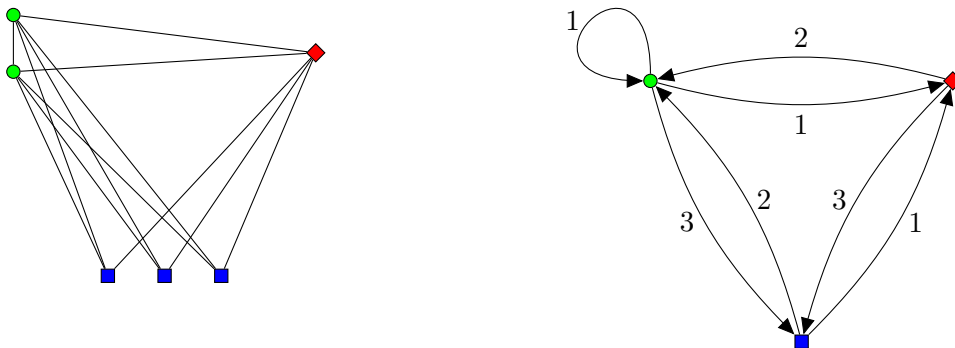


FIGURE 4.1 – Un graphe et son diviseur

Une propriété importante du diviseur d'un graphe est que ses valeurs propres sont aussi des valeurs propres du graphe initial

Théorème 4.1.2. *Soit G un graphe simple non-orienté et non-pondéré et D un diviseur de G . Alors*

$$P_D(\lambda) | P_G(\lambda).$$

Preuve : Soit G un graphe simple non-orienté et non-pondéré à n sommets, D un de ses diviseurs et φ l'isomorphisme décrit dans la définition 4.1.1. Soit $\lambda(D)$ une valeur propre de D et $x^{(D)}$ un vecteur propre associé. Soit $x \in \mathbb{R}^n$ le vecteur défini par

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, x_i = x_{\varphi(v_i)}^{(D)}.$$

On voit facilement que $A(G)x = \lambda(D)x$, et que, par conséquent, $\lambda(D)$ est une valeur propre de $A(G)$ et $\lambda - \lambda(D)$ divise $P_G(\lambda) = |\lambda I - A(G)|$. Cette assertion est vraie pour toutes les valeurs propres et les vecteurs propres de D , d'où $P_D(\lambda)$ divise $P_G(\lambda)$. $\square$

Les partitions des sommets qui permettent à la construction d'un diviseur sont appelées des partitions équitables.

Définition 4.1.3 (Partition équitable). *Soit $G = (V, E)$ un graphe. Une partition équitable des sommets V de G est une partition ordonnée $\mathcal{P} = (V_1, \dots, V_n)$ telle que, pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$, on a $\deg(v, V_j) = \deg(w, V_j)$, $\forall v, w \in V_i$ et $j \in \{1, \dots, n\}$.*

Un diviseur peut être obtenu en représentant chaque ensemble d'une partition équi-

table par un sommet et en pondérant les arcs (k, l) par la valeur $\deg(v, V_l)$, où $v \in V_k$

Il est assez facile de voir que la partition constituée des orbites du groupe d'automorphisme d'un graphe, ou d'un de ses sous-groupes, est une partition équitale, et peut donc être utilisée pour construire un diviseur de ce graphe.

Le concept de diviseur peut être généralisé aux graphes orientés et pondérés, permettant ainsi de définir une relation d'ordre partielle sur ce type de graphes.

Définition 4.1.4 (Diviseur d'un graphe orienté et pondéré). *Un graphe orienté et pondéré, avec éventuellement des boucles, $D = (V_D, W_D)$ est un diviseur d'un graphe orienté et pondéré $G = (V, E)$ si et seulement si il existe un morphisme injectif φ des sommets de G sur les sommets de D tel que :*

- (i) $\forall u, v \in V, \varphi(u) \sim \varphi(v)$ dans D si et seulement si $u \sim v$ dans G ,
- (ii) $\forall u \in V, \forall \omega \sim \varphi(u)$, le poids d'un arc $(\varphi(u), \omega)$ est la somme des poids des arêtes sortantes de u qui sont incidentes à un sommet envoyé sur ω par φ .

On écrit alors $D|G$. Ce diviseur d'un graphe orienté et pondéré est parfois appelé *diviseur sortant* dans la littérature, pour éviter toute confusion avec les *diviseurs entrants* [40]. Comme nous ne ferons pas usage de ce dernier type de diviseurs, la définition n'en est pas donnée ici et on utilisera toujours le terme de diviseur pour des raisons de lisibilité.

La relation $G'|G$ est une relation d'ordre partielle sur les graphes orientés et pondérés, un graphe est minimal pour cette relation d'ordre si et seulement si il est son unique diviseur.

Soit $\Sigma(G)$ le groupe d'automorphismes d'un graphe G et $\Sigma(G) = \Sigma^{(0)} \geq \Sigma^{(1)} \geq \Sigma^{(2)} \geq \dots \geq \{Id\}$ une chaîne de sous-groupes de $\Sigma(G)$. Soit $D_{\Sigma^{(i)}}$ le diviseur obtenu à partir de la partition équitale constituée par les orbites de $\Sigma^{(i)}$. Une conséquence directe du théorème 4.4 de [40] est

Théorème 4.1.5. [40] *Soit G un graphe connexe simple, $\Sigma(G)$ son groupe d'automorphisme et Σ' un sous-groupe de $\Sigma(G)$. Alors*

$$D_{\Sigma(G)}|D_{\Sigma'}|G,$$

et

$$Sp(D_{\Sigma(G)}) \subseteq Sp(D_{\Sigma'}) \subseteq Sp(G),$$

où $Sp(D_{\Sigma(G)})$, $Sp(D_{\Sigma'})$ sont les spectres respectifs de $D_{\Sigma(G)}$, $D_{\Sigma'}$ et G .

Dans les preuves de ce chapitre, on utilisera uniquement des diviseurs minimaux de *line graphs* pour l'ordre partiel $|$, de façon à réduire au maximum la taille des matrices dont on calcule explicitement le polynôme caractéristique et les valeurs propres. Les autres valeurs propres du Laplacien sans signe du graphe initial sont calculées en déterminant directement des vecteurs propres lorsque c'est possible.

4.2 On the extremal values of the second largest Q -eigenvalue

4.2.1 Introduction

Spectral graph theory is a fast growing branch of algebraic graph theory. Within spectral graph theory, studying the properties of a graph using its signless Laplacian became recently the most dynamic area of research. Indeed, a recent “bibliography on the signless Laplacian eigenvalues : first one hundred references“ due to Cvetković, shows that more than half the papers cited appeared in the last year or are in the process of publication. More over the paper “Signless Laplacians of finite graphs“ by Cvetković, Rowlinson and Simić [35] published in “Linear Algebra and its Applications“ is, with 50 citations, currently the second most cited paper of that journal to have appeared in the last 5 years. The paper “Eigenvalue bounds for the signless Laplacian” by Cvetković, Rowlinson and Simić [35], which appeared in the same year in ‘Publications de l’Institut Mathématique (Beograd)’, was also much cited. It contains, among others, a series of thirty conjectures on the signless Laplacian eigenvalues, specially the largest and second largest eigenvalues. These conjectures were obtained by the use of the AutoGraphiX system for conjecture-making in graph theory [1, 6, 22, 23]. Recently, Cvetković and Simić defined in a series of three papers [37–39], entitled “towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian”, the fundamentals of the *spectral theory of graphs based on the signless Laplacian*. In these papers, the authors also discuss the proofs [25, 35, 37, 41, 53] (and in one case refutation [35]) and the current status of the thirty conjectures. Prior to

the development of the signless Laplacian based theory, other ones were studied, based on the adjacency matrix A (see, for example [40, Lemma 2.2.]), the Laplacian matrix L (see, for example [40]), the normalized Laplacian matrix $\hat{L}$ (see [27]) and the Seidel matrix S (see [40]). According to the matrix M on which it is based, the theory is called M -theory, *e.g.* the Q -theory is that based on the signless Laplacian matrix Q . Since these matrices represent the same graph, there must be interactions between all these theories. Actually, Cvetković and Simić [37] discussed the following interactions :

- equivalence between A -theory, L -theory and Q -theory for regular graphs ;
- equivalence between L -theory and Q -theory for bipartite graphs ;
- general analogies between A -theory and Q -theory ;
- analogies between A -theory and Q -theory via line graphs ;
- analogies between A -theory and Q -theory via subdivision graphs..

The most studied problems within each M -theory, are those of lower and upper bounding some particular eigenvalues such as the largest, the second largest or the smallest M -eigenvalues, as well as the characterization of the extremal graphs corresponding to each bound. It is along these lines that our present work is done. Indeed, we study extremal graphs for the extremal values of the second largest Q -eigenvalue of a connected graph. We first characterize all simple connected graphs with second largest signless Laplacian eigenvalue at most 3. By the way, we correct and complete the results obtained by Petrović and Milekić [97], concerning the characterization of the graphs with second largest A -eigenvalue at most 1, as well as those obtained by Wang *et al.* [105], concerning the characterization of the graphs with second largest Q -eigenvalue at most 3. The second part of the present paper is devoted to the study of the graphs that maximize the second largest Q -eigenvalue. We construct families of such graphs and prove that some of these families are minimal for the fact that they maximize the second largest signless Laplacian eigenvalue. Within this study we correct the proof, given by Das [41], of the characterization of the graphs maximizing the difference between the second largest Q -eigenvalue and the minimum degree of a simple connected graph.

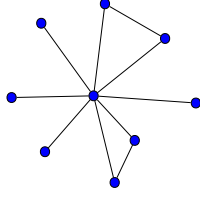
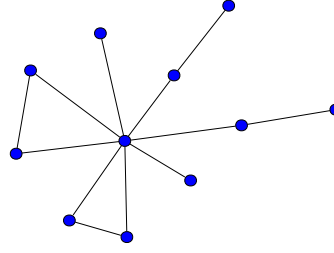
We begin by recalling some definitions. In this paper, we consider only simple and finite graph, *i.e.*, graphs on a finite number of vertices without multiple edges or loops. A graph is (usually) denoted by $G = G(V, E)$, where V is its vertex set and E its edge set. The *order* of G is the number $n = |V|$ of its vertices and its *size* is the number $m = |E|$ of its edges. The *adjacency matrix* of G is a 0–1 $n \times n$ -matrix indexed by the vertices of G and defined by $a_{ij} = 1$ if and only if $ij \in E$. Then $Q = \text{Diag} + A$, where Diag is the diagonal matrix whose diagonal entries are the degrees in G , is called *the signless Laplacian* of G . Denote by $(q_1, q_2, \dots, q_n)$ the Q -spectrum of G , *i.e.*, the spectrum of the signless Laplacian of G , and assume that the eigenvalues are labeled such that $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$ of G . Let Δ and δ denote the maximum and minimum degrees of G , respectively. As usual, we denote by P_n the path, by C_n the cycle, by S_n the star, by $K_{a,n-a}$ the complete bipartite graph and by K_n the complete graph, each on n vertices.

4.2.2 Graphs with q_2 at most 3

In this section, we give a characterization of all graphs with second largest signless Laplacian eigenvalue at most 3. Similar problems have been widely studied for the adjacency matrix ([29, 36, 64, 107]). Wang *et al.* addressed this problem in [105]. Their resolution relies on a theorem of Petrović and Milekić [97], which unfortunately involves a too small family in the characterization of connected line graphs with second largest A -eigenvalue at most 1. Specifically, these authors consider the family of line graphs of *butterflies*. As defined by Wang *et al.* [105], a *butterfly graph* $B_{r,s}$ is a graph on $2r + s + 1$ vertices that consist of r triangles and s pendant edges sharing a common vertex. We correct Lemma 6, Theorem 2 and Theorem 3 of [97] as well as Theorem 4.1 and Theorem 4.2 of [105] by showing that one needs to consider the larger family of *fireflies*, defined below. Butterflies and fireflies are illustrated in Figures 4.2 and 4.3, respectively.

We also show that fireflies are determined by their signless Laplacian spectrum.

Definition 4.2.1. A *firefly graph* $F_{r,s,t}$ is a graph on $2r + s + 2t + 1$ vertices that consists of r triangles, s pendant edges and t pendant paths of length 2, sharing a common vertex.

FIGURE 4.2 – $B_{2,4}$ FIGURE 4.3 – $F_{2,2,2}$

We also need the following two definitions.

Definition 4.2.2. We call *subdivision*, the transformation of a graph consisting of replacing an edge uv by two edges uw, vw , with a new vertex w .

Definition 4.2.3. A *stretched star* $S_{d,k}$ is the graph on $d + k$ vertices obtained from a star S_d on d vertices by subdividing k of its edges.

In the following $\mathcal{F}$ represents the set of all firefly graphs $F_{r,s,t}$, where r, s and t are real numbers. Note that $\mathcal{F}$ contains all the stars ($r = t = 0$), stretched stars ($r = 0$), friendship graphs ($s = t = 0$) and butterfly graphs ($t = 0$).

The next two well known theorems in matrix theory will be used in the proofs of our results.

Theorem 4.2.4. (Cauchy-Poincaré Separation Theorem) [98] Let M be an n -by- n Hermitian matrix with eigenvalues $\lambda_1(A) \geq \lambda_2(A) \geq \dots \geq \lambda_n(A)$. For a given integer r , $1 \leq r \leq n$, let A_r , denote any r -by- r principal submatrix of A (obtained by deleting $n - r$ rows and the corresponding columns from A). Then for each $1 \leq i \leq r$,

$$\lambda_i(A) \geq \lambda_i(A_r) \geq \lambda_{i+n-r}(A).$$

Applying this inequality to the adjacency matrix of line graphs leads to the following result.

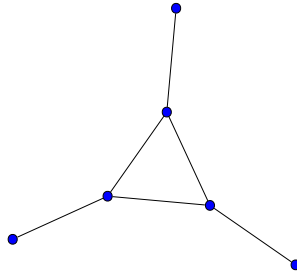
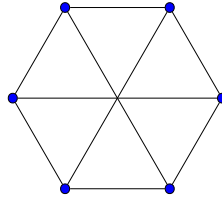
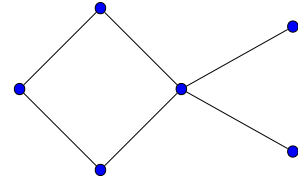
Theorem 4.2.5. (Interlacing theorem) [35] Let G be a graph on n vertices and m edges and let e be an edge of G . Let $q_1, q_2, \dots, q_n$ ($q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$) and $s_1, s_2, \dots, s_n$

$(s_1 \geq s_2 \geq \cdots \geq s_n)$ be the signless Laplacian eigenvalues of G and $G - e$ respectively. Then,

$$q_1 \geq s_1 \geq q_2 \geq s_2 \geq \cdots q_n \geq s_n \geq 0.$$

Lemma 4.2.6. *Let G be a connected graph on n vertices and let q_2 be its second largest signless Laplacian eigenvalue.*

- (i) *If $n = 2$, then $q_2 = 0$.*
- (ii) *If $n = 3$, then $q_2 = 1$.*
- (iii) *If $n = 4$ and G is not a star, then $q_2 = 2$. Moreover if $q_2 = 2$, then $n = 4$ and G is not a star.*
- (iv) *If $n = 5$, then $q_2 \leq 3$.*
- (v) *If $n = 6$, then $q_2 \leq 3$ if and only if G is a subgraph of G_6^1 , G_6^2 or G_6^3 (given in Figures 4.4, 4.5 and 4.6), or a firefly on 6 vertices.*

FIGURE 4.4 – G_6^1 FIGURE 4.5 – G_6^2 FIGURE 4.6 – G_6^3

Proof :

- (i) As G is a connected graph only its least eigenvalue can be null.
- (ii) G is either a triangle or a path of length 2, computation gives $q_2 = 1$ in both cases.

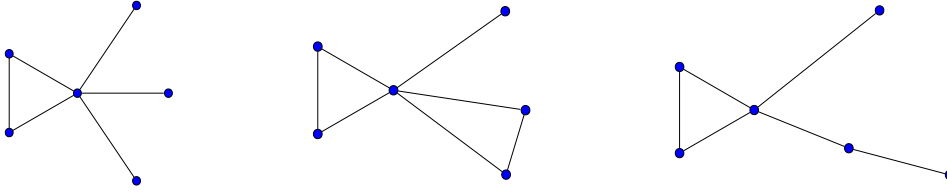


FIGURE 4.7 – Fireflies on six vertices

- (iii) From Theorem 4.2.5, if G' is a subgraph of G , then $q_2(G) \geq q_2(G')$. If G has 4 vertices and is not a star, then G contains P_4 as a subgraph and $q_2(G) \geq q_2(P_4) = 2$. As $q_2(K_4) = 2$, we have $q_2(G) = 2$.
If G has at least 5 vertices and is not a star, then G contains P_5 or $S_{4,1}$ as a subgraph. Then $q_2(G) \geq \min\{q_2(P_5), q_2(S_{4,1})\} \approx 2.31111$.
- (iv) If G has 5 vertices then q_2 is a subgraph of K_5 and $q_2(K_5) = 3$. For a complete enumeration of the Q -spectra of graphs on 5 vertices, see [35]
- (v) This result was obtained by enumeration of all the possible values of q_2 for the graphs on 6 vertices, see [30]. □

Theorem 4.2.7. *Let G be a connected graph on $n \geq 7$ vertices and q_2 its second largest signless Laplacian eigenvalue. Then,*

- (i) $q_2 = 1$ if and only if G is a star,
- (ii) $\frac{3+\sqrt{5}}{2} - \frac{1}{n} < q_2 < \frac{3+\sqrt{5}}{2}$ if and only if $G = S_{n-1,1}$,
- (iii) $q_2 = \frac{3+\sqrt{5}}{2}$ if and only if $G = S_{n-k,k}$, with $k \geq 2$,
- (iv) $3 - \frac{2.5}{n} < q_2 < 3$ if and only if G is a firefly with one triangle,
- (v) $q_2 = 3$ if and only if G is a firefly and has at least two triangles.

Proof :

- (i) It is an immediate consequence of Theorem 3.2 in [108]

(ii) Computing the characteristic polynomial of $S_{n-1,1}$ gives

$$Q_n(\lambda) = \lambda(1 - \lambda)^{n-4}(\lambda^3 - \lambda^2(n+2) + \lambda(3n-2) - n).$$

As $q_2(S_{n-1,1}) > 1$, we only consider the polynomial $P_n(\lambda) = \lambda^3 - \lambda^2(n+2) + \lambda(3n-2) - n$.

We have : $P_n(0) = -n < 0$, $P_n(\frac{3+\sqrt{5}}{2} - \frac{1}{n}) = -1 + \sqrt{5} - \frac{5\sqrt{5}+7}{2n} + \frac{5+3\sqrt{5}}{2n^2} - \frac{1}{n^3} > 0$, $P_n(\frac{3+\sqrt{5}}{2}) = -1 < 0$ and $P_n(n) = n(n-3) > 0$, for all $n \geq 7$.

Then $\frac{3+\sqrt{5}}{2} - \frac{1}{n} < q_2(S_{n-1,1}) < \frac{3+\sqrt{5}}{2}$, for all $n \geq 7$.

(iii) Consider a stretched star $S_{n-k,k}$, with $k \geq 2$ and $n \geq 7$ vertices, with signless Laplacian matrix Q . Let L_1 and C_1 be the line and column associated to the vertex with maximal degree. The matrix Q_{n-1} , obtained from Q by deleting L_1 and C_1 , is a block-diagonal matrix. This matrix can have at most two types of blocks :

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}.$$

The corresponding eigenvalues are $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$, $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$ and 1.

Let $q_1, q_2, \dots, q_n$ ($q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$) and $s_1, s_2, \dots, s_n$ ($s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_n$) be the eigenvalues of Q and Q_{n-1} respectively. From Theorem 4.2.4, we have $q_2 \leq s_1$. Hence $q_2 \leq \frac{3+\sqrt{5}}{2}$. Moreover as $k \geq 2$, $S_{n-k,k}$ contains the path P_5 as a subgraph and $q_2(S_{n-k,k}) \geq q_2(P_5) = \frac{3+\sqrt{5}}{2}$. Hence $q_2(S_{n-k,k}) = \frac{3+\sqrt{5}}{2}$.

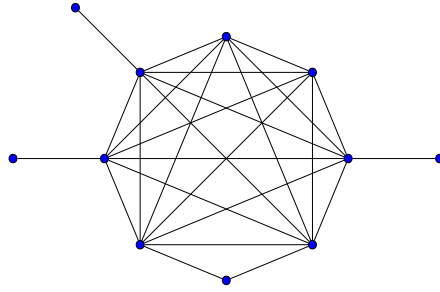
(iv) Computing the characteristic polynomial of S_n^+ gives

$$Q_n(\lambda) = \lambda(1 - \lambda)^{n-3}(-\lambda^3 + (n+3)\lambda^2 - 3n\lambda + 4).$$

Again, we only consider the polynomial $P_n(\lambda) = -\lambda^3 + (n+3)\lambda^2 - 3n\lambda + 4$.

For $n \geq 7$, we have : $P_n(0) = 4 > 0$, $P_n(-5/2n) = -7/2 + 115/4n - 75/2n^2 + 125/n^3 < 0$, $P_n(3) = 4 > 0$ and $P_n(n+1) = -n(n-1) + 6 < 0$.

Then $3 - 5/2n < q_2(S_n^+) < 3$, for all $n \geq 7$.

FIGURE 4.8 – Line graph of $F_{1,2,3}^+$

It is shown later that the second largest of any graph in $\mathcal{F}$ is not more than 3.

Here we prove a tighter inequality for $F_{1,s,t}$ with $t \geq 1$.

The divisor of $L(F_{1,s,t})$, the line graph of $F_{1,s,t}$ (see Figure 4.8 for the case $s = 2$ and $t = 3$), is

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & s & t & 0 \\ 0 & 2 & s-1 & t & 0 \\ 0 & 2 & s & t-1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

whose characteristic polynomial is $P_{L(F_{1,s,t})}(\lambda) = -\lambda^5 + \lambda^4(s+t-1) + 2\lambda^3(s+t+2) - \lambda^2(2s+t-5) - \lambda(3s+2t+1) + 2(s-1)$.

It has 5 real roots if $s \geq 1$ or if $t \geq 2$, which correspond to all possible values of s and t , when $n \geq 7$.

Moreover it is easy to see that $(3 + \sqrt{5})/2$, $(3 - \sqrt{5})/2$ and 1 are Q -eigenvalues of $F_{1,s,t}$, with respective multiplicities $t-1$, $t-1$ and s . Hence $q \notin \{(3 + \sqrt{5})/2, (3 - \sqrt{5})/2, 1\}$ is a Q -eigenvalue of $F_{1,s,t}$ if and only if $q-2$ is a root of $P_{L(F_{1,s,t})}$.

As $P_{L(F_{1,s,t})}(1) = 4$, we deduce that $q_2(F_{1,s,t}) < 3$.

To find a lower bound on $q_2(F_{1,s,t})$, we only have to find a number λ such that $P_{L(F_{1,s,t})}(\lambda - 2)$ is negative.

$$P_{L(F_{1,s,t})}(1 - \frac{5}{2n}) = -7/2 + \frac{55}{n} - \frac{275}{n^2} + \frac{7625}{16n^3} - \frac{5625}{16n^4} + \frac{3125}{32n^5} - \frac{25k(6n-5)^2}{16n^4}$$

As $\frac{25k(6n-5)^2}{16n^4} \geq 0$, for all n , and we want to check if $P_{L(F_{1,s,t})}(1 - \frac{5}{2n}) < 0$, we will consider the smallest value of k . That is $k = 1$. In this case, $P_{L(F_{1,s,t})}(1 - \frac{5}{2n}) < 0$, for $n \geq 1$.

Hence $3 - 5/2n < q_2(S_{n-k,k}^+) < 3$, for all $n \geq 7$.

- (v) Let G be a graph of $\mathcal{F}$ with signless Laplacian matrix Q . Let L_1 and C_1 be the line and column associated to the vertex with maximal degree. The matrix Q_{n-1} , obtained from Q by deleting L_1 and C_1 , is a block-diagonal matrix. This matrix can have at most three type of blocks :

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}.$$

The corresponding eigenvalues are $3, \frac{3+\sqrt{5}}{2}, \frac{3-\sqrt{5}}{2}$ and 1 .

Let $q_1, q_2, \dots, q_n$ ($q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$) and $s_1, s_2, \dots, s_n$ ($s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_n$) be the eigenvalues of Q and Q_{n-1} respectively. From Theorem 4.2.4, we have $q_2 \leq s_1$. Hence $q_2 \leq 3$.

Moreover if $G \in \mathcal{F}$ has at least 2 triangles, then G contains the graph constituted by two triangles with a common vertex, and $q_2(G) \geq 3$.

We will now show that there are no other graphs on at least seven vertices such that $q_2 \leq 3$.

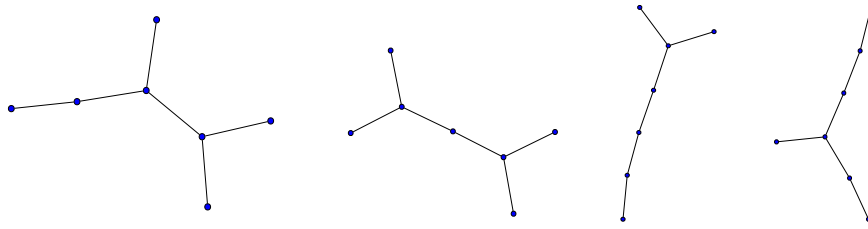
If G has at least seven vertices and $G \notin \mathcal{F}$, then G has one of the following properties

Case 1 $\Delta = 2$, then G is a cycle or a path and $q_2(G) = 2 + 2\cos(2\pi/g) \geq 2 + 2\cos(2\pi/7) \approx 3.2470$

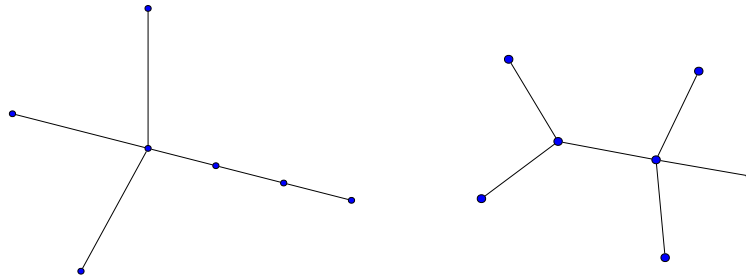
Case 2 $\Delta = 3$. then G contains the graph S_4^1 (see Figure 4.9), if two adjacent vertices have degree 3, the graph S_4^2 (see Figure 4.9), if two vertices with degree 3 are joint by a path of length 2, and S_4^3 or S_4^4 (see Figure 4.9) otherwise.

Hence $q_2(G) \geq \min\{q_2(S_4^1), q_2(S_4^2), q_2(S_4^3), q_2(S_4^4)\} = 3.116884$.

Case 3 $4 \leq \Delta < (n-1)/2$, then there are not enough pendant vertices in S_Δ to attach one of the remaining vertices to each of them. Hence, G contains the graph S_5^1

FIGURE 4.9 – $S_4^1, S_4^2, S_4^3, S_4^4$

or S_5^2 (illustrated in Figure 4.10) and $q_2(G) \geq \min\{q_2(S_5^1), q_2(S_5^2)\} = 3.116884$.

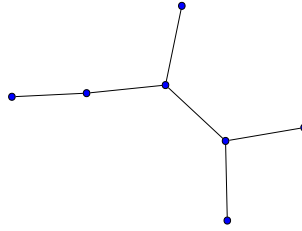
FIGURE 4.10 – S_5^1, S_5^2

Case 4 $\Delta \geq (n-1)/2$. If G does not contain S_5^1 or S_5^2 , then G is obtained from a stretched star by adding edges. Then, G contains either the graph S_5^3 (illustrated in Figure 4.11) and $q_2(G) \geq q_2(S_5^3)$, or a cycle of length 4 or 5. In this last case, cutting one of its edges adjacent to the maximum degree vertex shows that S_5^1 is also a subgraph of G . $\square$

Theorem 4.2.8. *Graphs on at least seven vertices with second largest signless Laplacian eigenvalue less than 3 are determined by their signless Laplacian spectrum.*

Proof :

Let G be a graph on $n \geq 7$ vertices with second largest signless Laplacian eigenvalue $q_2 \leq 3$. Then $G = F_{r,s,t}$ is a firefly. To prove that fireflies are determined by their Q -spectrum, we will compute a part of their spectra and show that it is sufficient to determine the values of r , s and t . We write multiplicities of the eigenvalues as exponents.

FIGURE 4.11 – S_5^3

In the following, the set of vertices of G , $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ will be ordered such that : v_1 is the vertex with maximal degree, for $i = 1, 2, \dots, r$, v_{2i} and v_{2i+1} are two adjacent vertices of a triangle, for $i = 1, \dots, s$, v_{2r+1+i} is a pendant vertex attached to v_1 , for $i = 1, 2, \dots, t$, $v_{2r+s+2i}$ and $v_{2r+s+2i+1}$ are respectively the vertices of degree 2 and 1 of a pending path of length 2.

First, suppose that $3 - 5/2n < q_2 \leq 3$, then G has at least one triangle and $r \geq 1$. If r , s and t are not null, we can easily find $2r + s + 2t - 4$ eigenvectors of Q .

The eigenvalue 1 has multiplicity at least $r + s - 1$. The corresponding eigenvectors are the $r + s - 1$ vectors $x \in \mathbb{R}^n$ such that :

- (i) $x_{2r+2} = 1$,
- (ii) $x_{2r+1+s_0} = -1$
- (iii) $x_i = 0$ otherwise,

where $s_0 \in \{2, 3, \dots, s\}$, or

- (i) $x_{2r_0} = 1$,
- (ii) $x_{2r_0+1} = -1$
- (iii) $x_i = 0$ otherwise,

where $r_0 \in \{1, 2, \dots, r\}$.

The eigenvalue $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$ has multiplicity at least $t - 1$. The corresponding eigenvectors are the $t - 1$ vectors $x \in \mathbb{R}^n$ such that

- (i) $x_{2r+s+2} = \frac{1-\sqrt{5}}{1}$ and $x_{2r+s+3} = 1$,
- (ii) $x_{2r+s+2t_0} = -\frac{1-\sqrt{5}}{1}$ and $x_{2r+s+2t_0+1} = -1$
- (iii) $x_i = 0$ otherwise,

where $t_0 \in \{2, 3, \dots, t\}$.

The eigenvalue $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$ has multiplicity at least $t - 1$. The corresponding eigenvectors are the $t - 1$ vectors $x \in \mathbb{R}^n$ such that

- (i) $x_{2r+s+2} = \frac{1+\sqrt{5}}{1}$ and $x_{2r+s+3} = 1$,
- (ii) $x_{2r+s+2t_0} = -\frac{1+\sqrt{5}}{1}$ and $x_{2r+s+2t_0+1} = -1$
- (iii) $x_i = 0$ otherwise,

where $t_0 \in \{2, 3, \dots, t\}$.

The eigenvalue 3 has multiplicity at least $r - 1$. The corresponding eigenvectors are the $r - 1$ vectors $x \in \mathbb{R}^n$ such that :

- (i) $x_2 = 1$ and $x_3 = 1$,
- (ii) $x_{2r_0} = -1$ and $x_{2r_0+1} = -1$
- (iii) $x_i = 0$ otherwise,

where $r_0 \in \{2, 3, \dots, r\}$.

To find the five remaining eigenvalues, we will use the divisor of the line graph of G .

The divisor of $L(F_{r,s,t})$ is

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2r-1 & s & t & 0 \\ 0 & 2r & s-1 & t & 0 \\ 0 & 2r & s & t-1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Its characteristic polynomial is

$$\begin{aligned} P_{L(F_{r,s,t})}(\lambda) &= -\lambda^5 + \lambda^4(2r + s + t - 3) + 2\lambda^3(2r + s + t) - \lambda^2(2s + t - 5) \\ &\quad - \lambda(2r + 3s + 2t - 1) + 2(s - 1). \end{aligned}$$

Evaluating $P_{L(F_{r,s,t})}$ at -1 , $\frac{-1-\sqrt{5}}{2}$, $\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$ and 1 , shows that these value are not roots of $P_{L(F_{r,s,t})}$.

Hence, if $G = F_{r,s,t}$, with $r \neq 0$, $s \neq 0$ and $t \neq 0$, its spectrum is $1^{(s+r-1)}$, $\frac{3-\sqrt{5}}{2}^{(t-1)}$, $\frac{3+\sqrt{5}}{2}^{(t-1)}$, $3^{(r-1)}$ and five other eigenvalues.

We can apply this method to compute the spectrum of $G = F_{r,s,t}$ for the other values of r , s and t .

If $r \neq 0$, $s \neq 0$ and $t = 0$, the spectrum of $Q(F_{r,s,0})$ is $1^{(s+r-1)}$, $3^{(r-1)}$ and three other eigenvalues different from $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$ and $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$.

If $r \neq 0$, $s = 0$ and $t \neq 0$, the spectrum of $Q(F_{r,0,t})$ is $1^{(r)}$, $\frac{3-\sqrt{5}}{2}^{(t-1)}$, $\frac{3+\sqrt{5}}{2}^{(t-1)}$, $3^{(r-1)}$ and four other eigenvalues.

If $r \neq 0$, $s = 0$ and $t = 0$, the spectrum of $Q(F_{r,0,0})$ is $1^{(r)}$, $3^{(r-1)}$ and two other eigenvalues different from $\frac{3-\sqrt{5}}{2}$ and $\frac{3+\sqrt{5}}{2}$.

This shows that, when G is a graph on $n \geq 7$ vertices, with $3 - 5/2n < q_2 \leq 3$, i.e. G is a firefly $F_{r,s,t}$ with $r \geq 1$, we can find the values of r , s and t by analyzing the spectrum of G . Hence all graphs on at least seven vertices with $3 - 5/2n < q_2 \leq 3$, are determined by their spectrum.

Now if $n \geq 7$ and $q_2 \leq \frac{3+\sqrt{5}}{2}$, then G is a stretched star $S_{d,k}$. We only have to study the case $k \geq 2$ as $q_2 = 1$ if and only if $k = 0$ and $\frac{3+\sqrt{5}}{2} - \frac{1}{n} < q_2 < \frac{3+\sqrt{5}}{2}$ if and only if $k = 1$. If $2 \leq k \leq d-2$, the spectrum of $S_{d,k}$ is $0^{(1)}$, $1^{(d-k-2)}$, $\frac{3-\sqrt{5}}{2}^{(k-1)}$, $\frac{3+\sqrt{5}}{2}^{(k-1)}$ and three other eigenvalues.

If $k = d-1$, the spectrum of $S_{d,k}$ is $0^{(1)}$, $\frac{3-\sqrt{5}}{2}^{(k-1)}$, $\frac{3+\sqrt{5}}{2}^{(k-1)}$ and two other eigenvalues different from 1 . So it is possible to determine the value of d and k , from the spectrum of $S_{d,k}$.

This concludes the proof. □

Corollary 4.2.9. *Fireflies are determined by their signless Laplacian spectrum.*

Proof :

According to the tables of Q -spectra of graphs with up to six vertices ([35], [30]), only two graphs have $q_2 \leq 3$ and are co-spectral. Neither of these graphs is a firefly.

For graphs on at least seven vertices, the result follows from the fact that fireflies satisfy

$q_2 \leq 3$ and Theorem 4.2.8. □

Lemma 4.2.10. ([35]) *Let G be a graph on n vertices with vertex degrees $d_1, d_2, \dots, d_n$. Then*

$$\min_{i \sim j} (d_i + d_j) \leq q_1 \leq \max_{i \sim j} (d_i + d_j),$$

where (i, j) runs over all pairs of adjacent vertices of G (as indicated by the notation $i \sim j$). For a connected graph G , equality holds in either of these inequalities if and only if G is regular or semi-regular bipartite.

Lemma 4.2.11. ([91], [94]) *Let G be a graph on n vertices. Then*

$$q_1 \leq \max(d_i + m_i),$$

where i runs over the vertices of G , d_i denotes the degree of the vertex v_i and $m_i = \sum_{v_j \sim v_i} (d_j/d_i)$ denotes the average degree of the neighbors of v_i .

Theorem 4.2.12. *Let G be a unicyclic connected graph on $n \geq 7$ vertices with signless Laplacian index q_1 and second largest signless Laplacian eigenvalue q_2 . Then $q_1 - q_2$ is maximal if and only if G is S_n^+ , the graph obtained from a star by adding an edge.*

Proof :

From Theorem 5.7 of [35], the unicyclic connected graph for which the signless Laplacian index is maximum is S_n^+ .

As S_n^+ contains the graph S_n as a subgraph, we have $q_1(S_n^+) > n$. Moreover from Theorem 4.2.7, $q_2(S_n^+) < 3$. $q_1(S_n^+) - q_2(S_n^+) > n - 3$.

As $q_1(G) < q_1(S_n^+)$ and $q_2(G) > 3 > q_2(S_n^+)$ if G is a unicyclic connected graph and not a firefly, we restrict ourselves to the study of fireflies.

Let $F_{1,s,t}$ be a firefly on $n = s + 2t + 3$ vertices. From Lemma 4.2.10 we know that $q_1(F_{1,s,t}) \leq \max_{i \sim j} (d_i + d_j) = s + t + 4 = n - t + 1$ and from 4.2.7, $q_2(F_{1,s,t}) > 3 - 5/2n$. Hence, if $t \geq 2$ and $n \geq 3$, we have $q_1(F_{1,s,t}) - q_2(F_{1,s,t}) < n - t - 2 + 5/2n < n - 3 < q_1(S_n^+) - q_2(S_n^+)$.

Let $F_{1,s,1}$ be a firefly on $n = s+5$ vertices. From Lemma 4.2.11 we know that $q_1(F_{1,s,1}) \leq q_1 \leq \max(d_i + m_i) = s + 3 + \frac{6+s}{s+3} = n - 2 + \frac{n+1}{n-2} = n - 1 + \frac{3}{n-2}$ and from 4.2.7, $q_2(F_{1,s,t}) > 3 - 5/2n$. Hence, if $n \geq 7$, we have $q_1(F_{1,s,1}) - q_2(F_{1,s,t}) < n - 4 + \frac{3}{n-2} + \frac{5}{2n} < q_1(S_n^+) - q_2(S_n^+)$.

The result follows. $\square$

Adapting this proof to the case of bicyclic graphs leads to the following theorem.

Theorem 4.2.13. *Let G be a bicyclic connected graph on $n \geq 7$ vertices with signless Laplacian index q_1 and second largest signless Laplacian eigenvalue q_2 . Then $q_1 - q_2$ is maximal if and only if G is the graph obtained from a star by adding two non-adjacent edges.*

4.2.3 Graphs maximizing q_2

The maximum value of q_2 over the set of all graphs is determined by Wang *et al.* in the next theorem.

Theorem 4.2.14 ([105]). *Let G be a connected graph of order n . Then $q_2(G) \leq n - 2$. If the equality holds, then the complement $\overline{G}$ of G has at least one bipartite component.*

In addition to the upper bound on q_2 , the above theorem gives a necessary condition on a graph G for which the bound is reached. The complete characterization of the extremal graphs for the bound remains an open problem. Such a characterization seems to be difficult, except for the class of bipartite graphs where a complete characterization is given below, since there are a large number of graph families for which the bound is reached. Actually, even if we fix, in addition to the order, some graph invariant, the bound can be reached. Indeed, if we fix the clique number, the chromatic number or the independence number, the maximum value $q_2 = n - 2$ can always be reached as it is stated in the following observations..

Observation 4.2.15. *For any two integers n and ω such that $2 \leq \omega \leq n$, there exists at least one graph G on n vertices with clique number ω for which $q_2(G) = n - 2$.*

For example, one can take $G \cong SK_{n,n-\omega+1}$, the complete split graph (the complement of the graph composed of a clique $K_{n-\omega+1}$ together with $\omega - 1$ isolated vertices).

Observation 4.2.16. *For any two integers n and χ such that $2 \leq \chi \leq n$, there exists at least one graph G on n vertices with chromatic number χ for which $q_2(G) = n - 2$.*

For example, one can take $G \cong SK_{n,n-\chi+1}$, the complete split graph.

Observation 4.2.17. *For any two integers n and α such that $1 \leq \alpha \leq n-2$, there exists at least one graph G on n vertices with independent number α for which $q_2(G) = n - 2$.*

For example, one can take $G \cong SK_{n,\alpha}$, the complete split graph.

Since, the complete characterization of the graphs with second largest signless Laplacian eigenvalue $q_2 = n - 2$ appears to be difficult, it is natural to think of finding or characterizing minimal graphs with that property. In fact, this problem was posed by Wang *et al.* [105]. They suggested the study of that problem after they had proved the following theorem.

Theorem 4.2.18 ([105]). *Let G be a graph obtained from K_n by deleting at most $n - 2$ edges, or obtained from $K_{2,n-2}$ by adding some edges. Then $q_2(G) = n - 2$.*

In this section, we construct some families of minimal graphs with second largest signless Laplacian eigenvalue $q_2 = n - 2$.

First note that for any connected graph G on n vertices with $2 \leq n \leq 4$ such that $G \not\cong S_4$, $q_2(G) = n - 2$.

In Theorem 4.2.18, Wang *et al.* stated that for any super graph G of $K_{2,n-2}$, $q_2(G) = n - 2$. In fact, $K_{2,n-2}$ is a minimal graph for $q_2 = n - 2$, as is next proved.

Theorem 4.2.19. *The complete bipartite graph $K_{2,n-2}$ with $n \geq 5$ is a minimal graph for $q_2 = n - 2$.*

Proof : To prove the result, it suffices to prove that $n - 2$ is not a Q -eigenvalue of $K_{2,n-2}^-$, the graph obtained from $K_{2,n-2}$ by the deletion of an edge. It is possible to label the vertices of $K_{2,n-2}^-$ such that its Q -polynomial can be written as

$$P_Q(t) = \det \left(\begin{bmatrix} M & N^T \\ N & R \end{bmatrix} \right)$$

where M is the $(n-3) \times (n-3)$ diagonal matrix $\text{diag}(t-2, t-2, \dots, t-2)$, R and N are the 3×3 and $3 \times (n-3)$ matrices defined by

$$R = \begin{bmatrix} t-(n-3) & 0 & 0 \\ 0 & t-(n-2) & -1 \\ 0 & -1 & t-1 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad N = \begin{bmatrix} -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

and N^T is the transpose of N .

Observe that

$$NM^{-1}N^T = \frac{1}{t-2} \begin{bmatrix} n-3 & n-3 & 0 \\ n-3 & n-3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Using properties of the determinants (see for example [40, Lemma 2.2.])

$$\begin{aligned} P_Q(t) &= \det(M) \cdot \det(R - NM^{-1}N^T) \\ &= (t-2)^{(n-3)} \cdot \begin{vmatrix} t-(n-3) - \frac{n-3}{t-2} & -\frac{n-3}{t-2} & 0 \\ -\frac{n-3}{t-2} & t-(n-2) - \frac{n-3}{t-2} & -1 \\ 0 & -1 & t-1 \end{vmatrix} \\ &= t(t-2)^{(n-4)} \cdot (t^3 - 2(n-1)t^2 + (n+1)(n-2)t - n(n-3)). \end{aligned}$$

Now, we have

$$\begin{aligned} P_Q(n-2) &= (n-2)(n-4)^{(n-4)} \cdot ((n-2)^3 - 2(n-1)(n-2)^2 \\ &\quad + (n+1)(n-2)^2 - n(n-3)) \\ &= -(n-2)(n-4)^{(n-3)}. \end{aligned}$$

Thus, $P_Q(n-2) \neq 0$ for all $n \geq 5$. This completes the proof. $\square$

The following corollary is a characterization of the bipartite graphs that maximize the second largest Q -eigenvalue.

Corollary 4.2.20. *If G is a connected bipartite graph then $q_2(G) = n-2$ if and only if $G \cong K_{n-2,2}$ or G is the path P_4 .*

Proof :

Let G be a connected bipartite graph. If $G \cong P_4$, we are done. Thus assume that $G \not\cong P_4$.

If G is the star S_n , then $q_2(G) = 1$.

If G is a subgraph of $K_{n-2,2}$, by Theorem 4.2.19, $q_2(G) \leq n - 2$ with equality if and only if $G \cong K_{n-2,2}$.

If G is not a subgraph of $K_{n-2,2}$ and not the star S_n , there exists an integer k with $3 \leq k \leq n/2$ and such that G is a subgraph of $K_{n-k,k}$. Thus $q_2(G) \leq q_2(K_{n-k,k}) = n - k < n - 2$. $\square$

Das [41] proved the following theorem.

Theorem 4.2.21 ([41]). *Let G be a connected graph on $n \geq 2$ vertices with minimum degree δ and second largest Q -eigenvalue q_2 . Then*

$$q_2 - \delta \leq n - 3$$

with equality if and only if G is the kite $KI_{n,n-1}$.

There was a mistake in the characterization of the extremal graphs of the above theorem. Within the proof, Das [41] stated "... we have $q_2(G) = n - 2 > n - 3 = q_2(K_{n-1})$... we conclude that G is a super graph of K_{n-1} ." This is not true in general. Indeed, for $n = 4$, the path P_4 satisfies $q_2 = n - 2 > n - 3 = q_2(K_3)$, while P_4 is not a super graph of K_3 . Moreover, P_4 is an extremal graph for the bound in Theorem 4.2.21 and $P_4 \not\cong KI_{4,3}$. In fact, the theorem remains true for $n \geq 5$. For the case $2 \leq n \leq 4$, $q_2 - \delta = n - 3$ for all graphs with $\delta = 1$, except for the star S_4 . When $n \geq 5$, the result is proved in the next theorem, which is the characterization of the extremal graphs corresponding to the bound of Theorem 4.2.21. In addition, these extremal graphs are also minimal graphs for $q_2 = n - 2$.

Theorem 4.2.22. *Let G be a connected graph on $n \geq 2$ vertices with minimum degree δ and second largest Q -eigenvalue q_2 . If $\delta = 1$ and $q_2 = n - 2$, then G is the path P_4 , or G is the kite $KI_{n,n-1}$.*

Proof :

If $2 \leq n \leq 3$, the only graphs with minimum degree $\delta = 1$ are $K_2 \cong KI_{2,1}$ and

$P_3 \cong KI_{3,2}$, for which the bound is reached.

If $n = 4$, there are exactly three graphs with $\delta = 1$. They are the star S_4 , the path P_4 and the kite $KI_{4,3}$. For these graphs, we have $q_2(P_4) = q_2(KI_{4,3}) = 2$ and $q_2(S_4) = 1$.

If $n \geq 5$, any graph G on n vertices with $\delta = 1$ which is not $KI_{n,n-1}$ is a subgraph of H , the graph obtained from $KI_{n,n-1}$ by deleting an edge incident to the pending edge, or of H' , the graph obtained from $KI_{n,n-1}$ by deleting an edge not incident to the pending edge. Thus to be done, and in view of the interlacing theorem, it suffices to prove that $q_2(H) < n - 2$ and $q_2(H') < n - 2$.

It is possible to label the vertices of H such that its Q -polynomial can be written as

$$P_{Q_H}(t) = \det \left(\begin{bmatrix} M & N^T \\ N & R \end{bmatrix} \right)$$

where M is the $(n-3) \times (n-3)$ matrix of which all diagonal entries are equal to $t - (n-2)$ and all non-diagonal entries are equal to -1 , R and N are 3×3 and $3 \times (n-3)$ matrices defined by

$$R = \begin{bmatrix} t - (n-3) & 0 & 0 \\ 0 & t - (n-2) & -1 \\ 0 & -1 & t - 1 \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad N = \begin{bmatrix} -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

and N^T is the transpose of N . Note that $\det(M) = P_{Q_{K_{n-3}}}(t-2) = (t-2n+6) \cdot (t-n+3)^{(n-4)}$, where $P_{Q_{K_{n-3}}}(t)$ denotes the Q -characteristic polynomial of K_{n-3} . The inverse of M is $M^{-1} = \frac{1}{a}M'$, where $a = (t - (n-3)) \cdot (t - 2(n-3))$ and M' is the $(n-3) \times (n-3)$ matrix whose diagonal entries are all equal to $(t+1-2(n-3))$, and all the non-diagonal entries are equal to 1. Thus, we have

$$R - NM^{-1}N^T = \begin{bmatrix} t - (n-3) & 0 & 0 \\ 0 & t - (n-2) & -1 \\ 0 & -1 & t - 1 \end{bmatrix} - \frac{n-3}{t-2(n-3)} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Therefore, we have

$$\begin{aligned}
 P_{Q_H}(t) &= \det(M) \cdot \det(R - NM^{-1}N^T) \\
 &= (t - n + 3)^{(n-4)} \cdot (t^4 - (4n - 11)t^3 + (5n^2 - 28n + 38)t^2 \\
 &\quad - (2n - 1)(n - 3)(n - 4)t + (n - 3)(2n^2 - 16n + 31)).
 \end{aligned}$$

Now, evaluating $P_{Q_H}(t)$ for $t = n - 2$, we have

$$P_{Q_H}(n - 2) = 3n^2 - 21n + 37 > 0$$

for all n . Thus if G is a subgraph of H , then $q_2(G) < n - 2$.

Consider now the graph H' . It is possible to label the vertices of H' such that its Q -polynomial can be written as

$$P_{Q_{H'}}(t) = \det \left(\begin{bmatrix} M & N^T \\ N & R \end{bmatrix} \right)$$

where M is the $(n-4) \times (n-4)$ matrix of which all diagonal entries are equal to $t - (n-2)$ and all non-diagonal entries are equal to -1 , R and N are 4×4 and $4 \times (n-4)$ matrices defined by

$$R = \begin{bmatrix} t - (n - 3) & 0 & -1 & 0 \\ 0 & t - (n - 3) & -1 & 0 \\ -1 & -1 & t - (n - 1) & -1 \\ 0 & 0 & -1 & t - 1 \end{bmatrix}$$

and

$$N = \begin{bmatrix} -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix},$$

and N^T is the transpose of N . Note that $\det(M) = P_{Q_{K_{n-4}}}(t - 3) = (t - 2n + 7) \cdot (t - n + 3)^{(n-5)}$, where $P_{Q_{K_{n-4}}}(t)$ denotes the Q -characteristic polynomial of K_{n-4} . The

inverse of M is $M^{-1} = \frac{1}{a}M'$, where $a = (t - (n - 3)) \cdot (t - 2(n - 3) + 1)$ and M' is the $(n - 3) \times (n - 3)$ matrix whose diagonal entries are all equal to $(t - 2(n - 4))$, and all the non-diagonal entries are equal to 1. Thus, we have

$$R - NM^{-1}N^T = \begin{bmatrix} t - (n - 3) & 0 & -1 & 0 \\ 0 & t - (n - 3) & -1 & 0 \\ -1 & -1 & t - (n - 1) & -1 \\ 0 & 0 & -1 & t - 1 \end{bmatrix} - \frac{n - 4}{t - 2n + 7} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Therefore,

$$\begin{aligned} P_{Q'_H}(t) &= \det(M) \cdot \det(R - NM^{-1}N^T) \\ &= (t - n + 3)^{(n-5)} \cdot (t^5 - (5n - 13)t^4 + (9n^2 - 47n + 59)t^3 \\ &\quad - (7n^3 - 53n^2 + 123n - 79)t^2 + (n - 3)(2n^3 - 11n^2 + 5n + 32)t \\ &\quad - 2(n - 4)(n - 3)^3). \end{aligned}$$

Now, evaluating $P_{Q'_H}(t)$ for $t = n - 2$, we have

$$P_{Q'_H}(n - 2) = -4.$$

Thus if G is a subgraph of H' , then $q_2(G) < n - 2$.

In conclusion, in all cases $q_2(G) < n - 2$. □

The following lemma, proved by Cvetković and Simić [37], is used in the proof of the next theorem.

Lemma 4.2.23 ([37]). *Let G and H be two disjoint graphs. Let u be a vertex of G and v a vertex of H . Denote by $GuvH$ the graph obtained from G and H by adding the edge uv , $G + v$ the graph obtained from G by adding the pending edge uv , and $H + u$ the graph obtained from H by adding the pending edge vu . Then, we have*

$$P_{Q_{GuvH}}(t) = \frac{1}{t} (P_{Q_{G+v}}(t) \cdot P_{Q_H}(t) + P_{Q_G}(t) \cdot P_{Q_{H+u}}(t) - (t-2) \cdot P_{Q_G}(t) \cdot P_{Q_H}(t))$$

where $P_{Q_G}(t)$ denotes the Q -characteristic polynomial of G .

Proposition 4.2.24. *For an even integer $n \geq 2$, let DK_n be the graph obtained from two disjoint cliques on $n/2$ vertices each by adding an edge between them. Then DK_n is a minimal graph, among connected graphs, for the property $q_2 = n - 2$.*

Proof : First, let us prove that $q_2(DK_n) = n - 2$. Let e denote the edge connecting the cliques of DK_n . It is easy to see that $q_1(DK_n - e) = q_2(DK_n - e) = n - 2$. Using the interlacing theorem, $q_1(DK_n - e) = n - 2 \geq q_2(DK_n) \geq q_2(DK_n - e) = n - 2$. Thus, we have $q_2(DK_n) = n - 2$.

Now, it remains to prove that $n - 2$ is not a signless Laplacian eigenvalue of DK_n^- , the graph obtained from DK_n by the deletion of an edge other than e . For $n = 2$ or $n = 4$, the result is trivial, so assume that $n \geq 6$. Using the notation of Lemma 4.2.23 with G is the complete graph $K_{\frac{n}{2}}$ and H is the graph $K_{\frac{n}{2}}^-$ obtained from $K_{\frac{n}{2}}$ by the deletion of an edge, we have $GuvH \cong DK_n^-$, where $uv = e$. Thus

$$\begin{aligned} P_{Q_{DK_n^-}}(n-2) &= \frac{1}{n-2} \left(P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}+v}}(n-2) \cdot P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}^-}}(n-2) \right. \\ &\quad \left. + P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}}}(n-2) \cdot P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}^-+u}}(n-2) \right. \\ &\quad \left. - (n-4) \cdot P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}}}(n-2) \cdot P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}^-}}(n-2) \right). \end{aligned}$$

Since $n - 2$ is an eigenvalue of $K_{\frac{n}{2}}$ but not of $K_{\frac{n}{2}} + v$ or $K_{\frac{n}{2}}^-$, we have

$$P_{Q_{DK_n^-}}(n-2) = \frac{1}{n-2} \left(P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}+v}}(n-2) \cdot P_{Q_{K_{\frac{n}{2}}^-}}(n-2) \right) \neq 0.$$

Thus $n - 2$ is not an eigenvalue of DK_n^- . This completes the proof. $\square$

Observation 4.2.25. *Let $a \geq 2$ and $b \geq 2$ be integers and $n = a + b - 1$. Consider the graph $G_{a,b}$ of order n obtained from K_a and K_b by the coalescence of two vertices, one from each clique. Then $q_2(G_{a,b}) = n - 2$ with multiplicity 1.*

Using the same technique as above, one can calculate the Q -characteristic polynomial of $G_{a,b}$, and get

$$P_{Q_{G_{a,b}}}(t) = (t - a + 3)^{a-2} \cdot (t - b + 3)^{b-2} \cdot (t - n + 2) \cdot (t^2 - (2n - 3)t + 4ab + 8 - 6a - 6b).$$

It is easy to see that one of the Q -eigenvalues of $G_{a,b}$ which are solutions of $t^2 - (2n - 3)t + 4ab + 8 - 6a - 6b = 0$, is greater than $n - 3/2$, and the other is less than $n - 2$. Thus, the Q -eigenvalue $q_2(G_{a,b}) = n - 2$ is simple.

Theorem 4.2.26. *Let $a \geq 2$ and $b \geq 2$ be integers and $n = a + b - 1$. The graph $G_{a,b}$ is critical with respect to $q_2 = n - 2$ if and only if $a \neq b + 1$.*

Proof :

Let $G_{a,b}^1$ be the graph obtained from $G_{a,b}$ by deleting an edge from the clique K_a incident to the dominating vertex. The Q -characteristic polynomial of $G_{a,b}^1$ is

$$\begin{aligned} P^1(t) = & (t - a + 2)^{(a-3)} \cdot (t - b + 2)^{(b-2)} \cdot \{t^4 + (4a + 3b - 12)t^3 \\ & + [(2a^2 + 6ab - 25a - 17b + 49) + (3a + 2b - 9)n]t^2 \\ & - (a - 2)[(2a + 6b - 14)n + 4ab - 11a - 27b + 51]t \\ & + 2(a - 2)(a + b - 4)(2ab - 3a - 5b + 7)\}. \end{aligned}$$

After simplifying with the use of Maple software, we get

$$P^1(n - 2) = (1 - b) \cdot (a - b - 1),$$

which is zero if and only if $a = b + 1$, i.e., $n - 2$ is a Q -eigenvalue of G^1 if and only if $a = b + 1$.

Let $G_{a,b}^2$ the graph obtained from $G_{a,b}$ by deleting an edge from the clique K_a not incident to the dominating vertex. The Q -characteristic polynomial of $G_{a,b}^2$ is

$$\begin{aligned}
 P^2(t) = & (t - a + 2)^{(a-4)} \cdot (t - b + 2)^{(b-2)} \cdot \{t^5 - (5a + 3b - 14)t^4 \\
 & + (9a^2 + 2b^2 + 14ab - 51a - 33b + 63)t^3 - [7a^3 + (23b - 66)a^2 \\
 & + (8c^2 - 100c + 160)a - (18c^2 - 98c + 90)]t^2 + [2a^4 + (16b - 35)a^3 \\
 & + (10c^2 - 99c + 137)a^2 - (40c^2 - 170c + 138)a + (36c^2 - 56c - 40)]t \\
 & - 2(a - 2)[(2b - 3)a^3 + (2c^2 - 12c + 14)a^2 - (7c^2 - 12c + 4)a \\
 & + (4c^2 + 16c - 32)]\}.
 \end{aligned}$$

We have

$$P^2(n-2) = P^2(a+b-3) = 2(b-1)^{(a-3)} \cdot (a-1)^{(b-2)} \cdot [(c+1)a^2 - (2c^2+2c+4)a + (c^3+3c^2-2c+4)].$$

The above expression is not zero for all integers a and b such that $a, b \geq 2$. Thus $n - 2$ is not a Q -eigenvalue of $G_{a,b}^2$.

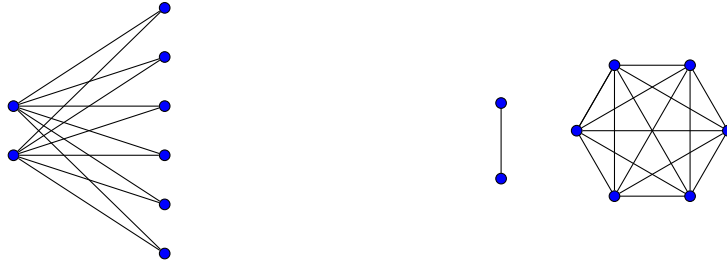
To conclude, $G_{a,b}$ is critical for the property $q_2 = n - 2$ except for $a = b + 1$. $\square$

4.2.4 Simplification de la preuve à l'aide de résultats ultérieurs

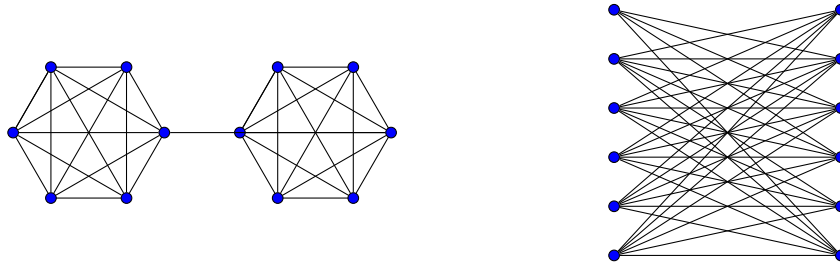
La preuve de ces résultats peut être simplifiée a posteriori, à l'aide du théorème 4.0.2.

Le graphe biparti complet $K_{2,n-2}$ a pour complémentaire l'union (disjointe) d'une clique sur $n - 2$ sommets et d'une arête. Il a bien une composante connexe bipartie équilibrée, l'arête $K_{1,1}$, on a bien $q_2\left(K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}}\right) = n - 2$. Supprimer une arête dans G , équivaut à ajouter une arête dans $\bar{G}$. Le graphe $\bar{G}$ devient alors connexe et non biparti et $q_2 \neq n - 2$.

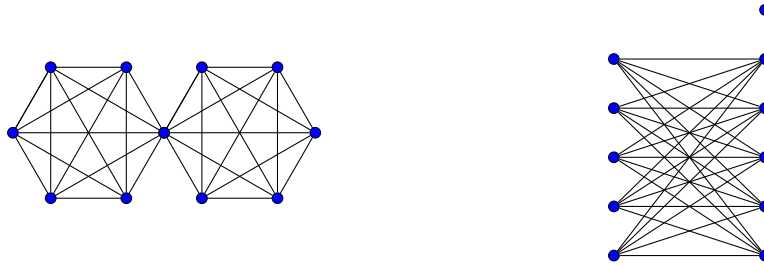
Le complémentaire de DK_n est le graphe biparti complet moins une arête $K_{\frac{n}{2}, \frac{n}{2}} - e$. C'est un graphe biparti équilibré donc $q_2(DK_N) = n - 2$. Supprimer l'arête entre les deux cliques entraîne la séparation du graphes en deux composantes. Supprimer une arête dans une des cliques revient à ajouter une arête dans un des ensembles de sommets indépendants de $\bar{G}$ et le graphe résultant de cette transformation n'est pas biparti. Le

FIGURE 4.12 – $K_{2,6}$ et son complément

graphe DK_n est donc critique pour la propriété $q_2 = n - 2$

FIGURE 4.13 – DK_{12} and its complement

Enfin le complémentaire du graphe $G_{a,b}$ est l'union du graphe biparti complet $K_{a-1,b-1}$ et d'un sommet isolé. Il a donc deux composantes biparties $K_{a-1,b-1}$ et $K_{1,0}$ et $q_2(G_{a,b}) = n - 2$. Supprimer une arête revient à ajouter une arête dans $\bar{G}$ entre le sommet isolé et $K_{a-1,b-1}$. Le graphe obtenu est connexe et biparti, on peut supposer, sans perte de généralité que ses ensembles stables ont respectivement $a-1$ et b sommets. À moins que $a = b + 1$, ce n'est pas un graphe biparti équilibré et $G_{a,b}$ est critique pour la propriété $q_2 = n - 2$.

FIGURE 4.14 – $G_{6,6}$ and its complement

4.3 Graphes peu denses maximisant la séparation du Laplacien sans signe

Des conjectures de la forme AGX1 concernant la seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe, pour tous les graphes à n sommets ou pour des familles infinies de graphes, ont été générées à l'aide d'AutoGraphiX et soumises à la communauté scientifique [2, 34]. Elles impliquent majoritairement q_2 et un invariant de degré ou une valeur propre du Laplacien ou du Laplacien sans signe. Elles sont maintenant toutes résolues.

Théorème 4.3.1. *Soit G un graphe connexe à $n \geq 4$ sommets, soit q_2 la seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe, λ_1 la plus grande valeur propre de la matrice d'adjacence, a la connectivité algébrique, δ , $\bar{d}$ et Δ respectivement, les degrés minimum, moyen et maximum. Alors*

- $q_2 - \bar{d} \geq -1$, avec égalité si et seulement si $G = K_n$, [41]
- $q_2 - \bar{d} \leq n - 6 + 8/n$, avec égalité si et seulement si $G = K_{n-2,2}$,
- $q_2 - \delta \geq -1$, avec égalité si et seulement si $G = K_n$, [41]
- $q_2 - \delta \leq n - 3$, avec égalité si et seulement si $G = Ki_{n,n-1}$, [41]
- $\Delta - q_2 \leq n - 2$, avec égalité si et seulement si $G = S_n$,
- $q_2 - \lambda_1 \geq 1 - \sqrt{n-1}$, avec égalité si et seulement si $G = S_n$, [42]
- $q_2 - \lambda_1 \leq n - 2 - \sqrt{2n-4}$, avec égalité si et seulement si $G = K_{n-2,2}$, [42]
- $q_2 - a \geq -2$, avec égalité si et seulement si $G = K_n$, [37]
- si $G \neq K_n$ alors $q_2 - a \geq 0$. [37, 41]

Une question ouverte par les théorèmes 4.2.12 et 4.2.13 est de savoir quel graphe maximise l'écart entre les deux plus grandes valeurs propres de Q pour n et m donnés.

Au vu des résultats obtenus pour les arbres, les graphes unicycliques et bicycliques, on a avancé la propriété suivante concernant la séparation du Laplacien sans signe.

Theorem 4.3.2. Soit $\mathcal{G}(n, m)$ l'ensemble des graphes connexes à $n \geq 7$ sommets et m arêtes, avec $m \leq \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$. Soit $G^* \in \mathcal{G}(n, m)$, $q_1(G^*) - q_2(G^*) = \max_{G \in \mathcal{G}} q_1(G) - q_2(G)$ si et seulement si G^* est le papillon à n sommets et m arêtes.

Preuve : Les cas $m = n - 1$ et $m = n$ sont déjà connus. On s'intéresse donc uniquement aux cas $n + 1 \geq m \leq \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$. Soit $G = (V, E)$ un graphe à n sommets et $n + 1 \geq m \leq \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$ arêtes, on a :

$$\begin{aligned} q_1 &\leq \max_{v \in V} d_v + m_v \\ &\leq \max_{v \in V} d_v + \frac{3(n-1) - d_v - (n-1-d_v)}{d_v} \\ &\leq \max_{v \in V} d_v + \frac{2(n-1)}{d_v} \end{aligned}$$

Cette fonction est croissante pour tout $d_v \geq 1$ donc $q_1 \leq n + 1$, pour tout les valeurs entières de n .

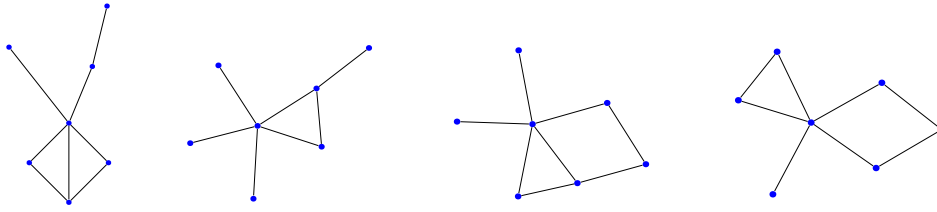
Pour tous les papillons à au moins deux triangles, $q_1 > \Delta + 1 = n$ et $q_2 = 3$, la valeur maximale de l'écart $q_1 - q_2$ est strictement supérieure à $n - 3$. En conséquence, les graphes satisfaisant $q_2 \geq 4$ sont des sous-graphes interdits pour la propriété G maximise $q_1 - q_2$ sous la contrainte $m \leq \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$.

Montrons préalablement que si G est un graphe à $n \geq 9$ sommets et $m \geq n + 1$ arête qui maximise l'écart alors G a un sommet dominant. D'abord, si $\Delta(G) \leq n - 3$ alors

$$\begin{aligned} q_1 &\leq \max_{v \in V} d_v + \frac{2(n-1)}{d_v} \\ &\leq n - 3 + \frac{2(n-1)}{n-3} \\ &\leq n - 1 + \frac{4}{n-3} \end{aligned}$$

et $q_1 - q_2 \leq n - 3$ pour tout $n \geq 7$ n'est pas maximal.

Si $\Delta(G) = n - 2$ et si G n'est pas une libellule, alors l'un des graphes $G'_{8,1}$, $G'_{8,2}$, $G'_{8,3}$ et $G'_{8,4}$, est un sous graphe de G , d'où $q_2(G) \geq \min(q_1(G'_{8,1}), q_1(G'_{8,2}), q_1(G'_{8,3}), q_1(G'_{8,4})) > 3,316$.

FIGURE 4.15 – $G'_{8,1} - G'_{8,4}$

Dans le premier cas, comme pour tout $n \geq 9$,

$$\begin{aligned}
 q_1 &\leq \max_{v \in V} d_v + \frac{2(n-1)}{d_v} \\
 &\leq n-3 + \frac{2(n-1)}{n-2} \\
 &\leq n + \frac{2}{n-2} \\
 &\leq n + \frac{2}{7}
 \end{aligned}$$

on a alors $q_1 - q_2 < n - 3$ et l'écart n'est pas maximal pour un tel graphe. Les cas $n = 7$ et $n = 8$ sont traités par énumération. Les cas $n = 7$ et $n = 8$ sont traités par énumération. Ils ne sont pas maximaux.

Si G est une libellule qui n'a pas de sommet dominant, alors un chemin de longueur 2 est rattaché au sommet principal. Soit p , u et v respectivement le sommet principal de degré $n - 2$, l'extrémité du chemin et le sommet intermédiaire de degré 2. On a le système d'équations aux valeurs propres suivant :

$$(n-2)x_p + x_v + C = q_1 x_p \quad (4.3)$$

$$2x_v + x_p + x_u = q_1 x_v \quad (4.4)$$

$$x_u + x_v = q_1 x_v \quad (4.5)$$

$$(4.6)$$

où x_p , x_u , x et C sont des réels strictement positifs. On déduit très facilement des

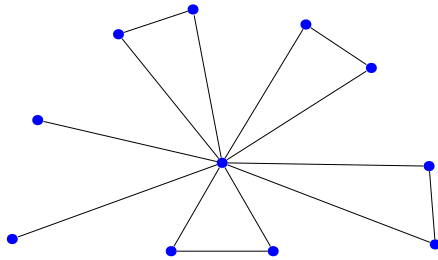
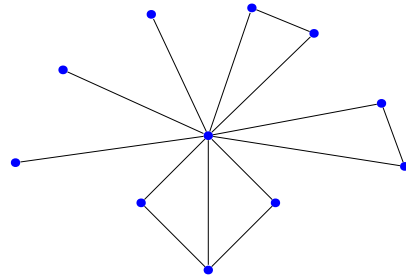
équations (4.5) et (4.6) que $x_v > x_u$. En soustrayant (4.5) à (4.4) on obtient

$$\begin{aligned} (n-2)x_p - x_v - x_u + C &= q_1(x_p - x_v) \\ (n-2)x_p - 2x_v &< q_1(x_p - x_v) \\ (n-4)x_p &< (q_1 - 2)(x_p - x_v). \end{aligned}$$

On en déduit que $x_p > x_v$ et la rotation de l'arête uv autour de u vers la position up augmente strictement la valeur de q_1 , tandis que q_2 est constant et égal à 3. L'écart n'est donc pas non plus maximal pour un tel graphe.

Un graphe maximal pour l'écart entre les deux plus grandes valeurs propres du Laplacien sans signe, pour les valeurs de n et m énoncées a donc un sommet dominant. De plus, son second plus haut degré Δ_2 est nécessairement inférieur ou égal à 3 et le troisième, Δ_3 , inférieur ou égal à 2. Dans le cas contraire on aurait $q_2 \geq 4$, ce qui est interdit.

Pour n et m donnés, il reste donc deux cas à étudier : le papillon $B_{m-n+1,3(n-1)-2m}$ et le graphe $F_{n,m}$ obtenu à partir du papillon $B_{m-n+2,3(n-1)-2m+2}$ en ajoutant une arête entre un triangle et un sommet pendant.

FIGURE 4.16 – $B_{4,3}$ FIGURE 4.17 – $F_{11,14}$

Pour toutes les valeurs de $n \geq 8$ et $m \geq n + 1$, $F_{n,m}$ a pour sous-graphe $F_{8,9}$, d'où $q_2(F_{n,m}) \geq q_2(F_{8,9}) > 3.49$. Par ailleurs si n est pair, alors pour tout $m \leq \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$, $F_{n,m}$ est un sous graphe de $F_{n, \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor}$. Si n est pair, le diviseur du *line graph* de $F_{n, \frac{3n-2}{2}}$

est

$$D = \begin{pmatrix} n-5 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ n-4 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ n-4 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

La plus grande valeur propre de cette matrice est $n-2 < d_1 < n-2 + \frac{3,5}{n}$, on en déduit donc que $q_1(F_{n,m}) < n-2 + \frac{3,5}{n}$. Pour tout $n \geq 7$ pair, on a donc $q_1(F_{n,m}) - q_2(F_{n,m}) < n-3$.

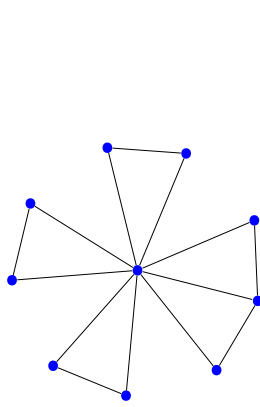


FIGURE 4.18 – $F_{10,14}$

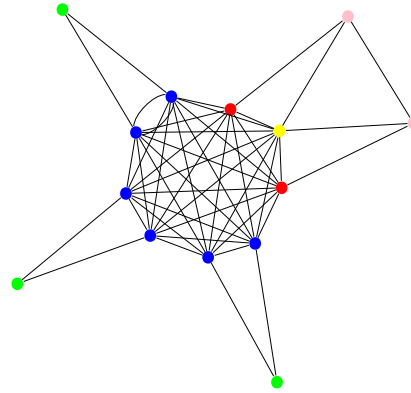


FIGURE 4.19 – *Line graph* de $F_{10,14}$

Si n est pair, le diviseur du *line graph* de $F_{n, \frac{3n-2}{2}}$ est

$$D = \begin{pmatrix} n-6 & 2 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ n-5 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ n-5 & 2 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ n-5 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

La plus grande valeur propre de cette matrice est $n - 2 < d_1 < n - 2 + \frac{3,1}{n}$, on en déduit donc que $q_1(F_{n,m}) < n - 2 + \frac{3,1}{n}$. Pour tout $n \geq 7$, on a donc $q_1(F_{n,m}) - q_2(F_{n,m}) < n - 3$, et ce graphe n'est donc pas maximal pour l'écart.

On peut donc conclure que $q_1 - q_2$ est maximum pour le papillon $B_{m-n+1,3(n-1)-2m}$ pour n et $m \leq \left\lfloor \frac{3(n-1)}{2} \right\rfloor$ donnés. $\square$

Il est évident que, pour $m = \frac{n(n-1)}{2}$ et $m = \frac{n(n-1)}{2} - 1$, les graphes qui maximisent $q_1 - q_2$ sont respectivement le graphe complet et le graphe complet moins un arête, puisque que ce sont les seuls à avoir ce nombre d'arêtes. Pour les autre valeurs de n et m , la question reste ouverte et aucune conjecture n'a pu être formulée à l'aide d'AutoGraphiX. Il semble que la séparation du Laplacien sans signe admette beaucoup d'optima locaux, ce qui rend inefficace la recherche à voisinages variables.

4.4 Conclusion

On a obtenu une caractérisation des graphes connexes avec une seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe au plus 3, qui, pourvu qu'ils aient au moins 7 sommets, appartiennent tous à la famille des libellules. On a ensuite démontré que ces graphes vérifient deux propriétés fortes, ils sont déterminés par le spectre de leur Laplacien sans signe et s'ils appartiennent à la sous-famille des papillons, ce sont les seuls graphes à maximiser la séparation du Laplacien sans signe pour un nombre de sommets et un nombre d'arêtes, suffisamment faible, donnés. Une partie de ces résultats et les techniques de preuves ont été repris par Li et al. récemment pour la seconde plus grande valeur propre du Laplacien ordinaire μ_2 [83]. Ils y montrent que les graphes à plus de 7 sommets satisfaisant $\mu_2 \leq 3$, sont les mêmes que dans le cas du Laplacien sans signe et sont caractérisés par le spectre de leur Laplacien et que les papillons sont aussi les graphes maximaux, parmi les graphes unicycliques et bicycliques, pour la séparation du Laplacien. Le cas plus général des graphes peu denses maximisant la séparation du Laplacien reste ouvert.

Nous avons aussi étudié les graphes qui maximisent la seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe. En particulier, nous avons construit des familles de graphes minimaux pour la propriété de maximisation de cette valeur propre. Ces résul-

tats sont confirmés et complétés par le récent article De Lima et Nikiforov [43] donnant une caractérisation complète des graphes maximisant la seconde plus grande valeur propre du Laplacien sans signe.

Conclusion

À l'issue de cette thèse, nous espérons avoir convaincu le lecteur, d'une part de l'intérêt de l'étude du spectre du Laplacien sans signe et d'autre part de l'utilité des logiciels d'aide à la recherche de conjecture.

Dans la première partie de cette thèse, nous avons obtenu des conjectures de la forme 1 d'AGX pour l'index du Laplacien sans signe, à l'aide du logiciel AutoGraphiX. Parmi les 59 conjectures non-triviales générées, plus des deux tiers se sont révélées exactes et sont aujourd'hui prouvées.

Cette première étude exploratoire a permis d'obtenir des intuitions sur le Laplacien sans signe, notamment la forme des graphes extrêmes avec un invariant de distance fixé mais aussi une inégalité impliquant q_1 et le nombre chromatique d'une forme plus exotique ainsi qu'une conjecture, prouvée depuis impliquant le nombre de clique. De plus c'est en cherchant, toujours à l'aide d'AGX, les graphes extrêmes pour écart $q_1 - q_2$, que nous avons observé de redondances de formes de ces graphes extrêmes. Les familles ainsi obtenues sont en fait celles dont la valeur de q_2 est inférieure ou égale à 3 et qui sont déterminées par leur spectre.

Insistons aussi sur le fait que l'outil de calcul interactif d'un invariant graphique a été d'un grand secours pour vérifier des intuitions sur les nombreux cas particuliers des preuves présentées dans cette thèse.

Du point de vue de la théorie des graphes, nous avons déterminé des familles de graphes pour lesquelles le spectre du Laplacien sans signe suffit à déterminer le graphe.

Nous avons aussi trouvé des familles de graphes extrêmes pour q_1 lorsque certains invariants de distance sont fixés. Ces familles de graphes extrêmes sont déterminées par q_1 , le nombre de sommets et l'invariant donné. Dans les deux cas, les familles de graphes déterminées sont les mêmes que pour le spectre de la matrice d'adjacence.

Tous les résultats présentés dans cette thèse ont été publiés, dans des revues scientifiques pour les chapitres 2 et 4, [14, 68, 69], dans un rapport technique pour le chapitre 3, [89]. Ceux qui ont été publiés dans des revues ont été augmentés par d'autres chercheurs en théorie de graphes, témoignant de l'intérêt qu'ils ont suscité dans cette communauté scientifique. Le dernier article écrit [89] est trop récent pour avoir été commenté.

Enfin, nous insisterons sur le fait que les résultats présentés dans cette thèse vont dans le sens de l'intuition émise par Cvetković, selon laquelle, le Laplacien sans signe ne détermine pas moins de graphes que la matrice d'adjacence et le Laplacien [35]. Cette observation conjuguée avec celles de Cvetković sur les petits graphes [35] et les nombreux résultats de la littérature publiés sur le Laplacien sans signe devraient éveiller l'intérêt du lecteur pour l'étude du spectre de cette matrice.

Conclusion

By the end of this manuscript, we hope that the reader is convinced, on the one hand, of the interest of studying the signless Laplacian spectrum, and on the other hand, of the usefulness of conjecture-making softwares.

In the first part of this thesis, we have obtained conjectures of AGX form 1 for the index of the signless Laplacian. Among the 59 non-trivial conjectures generated, more than two thirds have now been proven.

This first exploratory study allowed us to get intuitions about the signless Laplacian, in particular on the families of extremal graphs with a given distance invariant. It also allowed us to formulate an interesting inequality involving q_1 and the chromatic number, and another involving q_1 and the clique number. Moreover, using AGX to get insights on the value of the signless Laplacian spectral gap, $q_1 - q_2$, we observed redundancies on the structures of the extremal graphs. This way, we identified families of graphs that are indeed those having a second largest signless Laplacian eigenvalue q_2 smaller or equal to 3 and are determined by this spectrum.

Let us insist on the fact that the interactive tool for graph invariants computation of AGX have been very helpful to verify intuitions, as well as for solving the many singular cases appearing along the proofs presented in this thesis.

Regarding graph theory results, we have determined families of graphs in which each graph is fully determined by its signless Laplacian spectrum. We also have found families of extremal graphs for q_1 when some distance invariants are given. Those families are determined by q_1 , the number of vertices of the graph and the value of the given invariant. In both cases, the families of graphs determined by this spectrum are the same as those determined by the spectrum of the adjacency matrix .

All results presented in this thesis have been published, in scientific reviews, for chapters 2 and 4, [14, 68, 69], and in a technical report, for chapter 3, [89]. Some have already been extended by researchers.

Finally, we would like to insist on the fact that the results of this thesis support the intuition of Dragos Cvetković, stating that the signless Laplacian spectrum does not determine less graphs than the adjacency matrix or the Laplacian matrix [35]. This observation together Cvetković's concerning small graphs [35] and the various results concerning signless Laplacian in the literature should arouse the interest of the reader in the study of the spectrum of this matrix.

Bibliographie

- [1] M. AOUCICHE, J. M. BONNEFOY, A. FIDAHOUSSEN, G. CAPOROSSI, P. HANSEN, L. HIESSE, J. LACHERÉ et A. MONHAIT : Variable neighborhood search for extremal graphs. 14. The AutoGraphiX 2 system. *In* Leo LIBERTI et Nelson MACULLAN, éditeurs : *Global optimization, from theory to implementation*, volume 84 de *Nonconvex Optim. Appl.*, pages 281–310. Springer, New York, 2006.
- [2] M. AOUCICHE et P. HANSEN : A survey of automated conjectures in spectral graph theory. *Linear Algebra and its Applications*, 432(9):2293 – 2322, 2010. Special Issue devoted to Selected Papers presented at the Workshop on Spectral Graph Theory with Applications on Computer Science, Combinatorial Optimization and Chemistry (Rio de Janeiro, 2008).
- [3] Mustapha AOUCICHE : *Comparaison Automatisée d'Invariants en Théorie des Graphes*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, february 2006.
- [4] Mustapha AOUCICHE, Gunnar BRINKMANN et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs. 21. conjectures and results about the independence number. *Discrete Applied Mathematics*, 156(13):2530–2542, 2008.
- [5] Mustapha AOUCICHE, Gilles CAPOROSSI et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs. 20. Automated comparison of graph invariants. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 58(2):365–384, 2007.

-
- [6] Mustapha AOUCICHE, Gilles CAPOROSI et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs. 20. Automated comparison of graph invariants. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 58(2):365–384, 2007.
 - [7] Mustapha AOUCICHE, Gilles CAPOROSI, Pierre HANSEN et Marie LAFFAY : Autographix : a survey. *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 22:515–520, 2005.
 - [8] Mustapha AOUCICHE, Gilles CAPOROSI, Pierre HANSEN et Claire LUCAS : Variable neighborhood search for extremal graphs 28 : Autographix after fifteen years. *Les Cahiers du GERAD, soumis pour publication*, G-2013-12, février 2013.
 - [9] Mustapha AOUCICHE, Odile FAVARON et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs. 22. extending bounds for independence to upper irredundance. *Discrete Applied Mathematics*, 157(17):3497–3510, 2009.
 - [10] Mustapha AOUCICHE et Pierre HANSEN : Recherche à voisinage variable de graphes extrémaux 13. à propos de la maille. *RAIRO-Operations Research*, 39(04): 275–293, 2005.
 - [11] Mustapha AOUCICHE et Pierre HANSEN : Automated results and conjectures on average distance in graphs. In Adrian BONDY, Jean FONLUPT, Jean-Luc FOUQUET, Jean-Claude FOURNIER et JorgeL. RAMÍREZ ALFONSÍN, éditeurs : *Graph Theory in Paris*, Trends in Mathematics, pages 21–36. Birkhäuser Basel, 2007.
 - [12] Mustapha AOUCICHE et Pierre HANSEN : Nordhaus–gaddum relations for proximity and remoteness in graphs. *Computers & Mathematics with Applications*, 59(8):2827–2835, 2010.
 - [13] Mustapha AOUCICHE et Pierre HANSEN : Proximity and remoteness in graphs : Results and conjectures. *Networks*, 58(2):95–102, 2011.
 - [14] Mustapha AOUCICHE, Pierre HANSEN et Claire LUCAS : On the extremal values of the second largest q -eigenvalue. *Linear Algebra and its Applications*, 435(10): 2591 – 2606, 2011. Special Issue in Honor of Dragos Cvetkovic.

-
- [15] Mustapha AOUCHICHE, Pierre HANSEN et Maolin ZHENG : Variable neighborhood search for extremal graphs. 19. further conjectures and results about the randic index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 58:83–102, 2007.
- [16] Mustapha AOUCHICHE, Pierre HANSEN et Maolin ZHENG : Variable neighborhood search for extremal graphs 19. further conjectures and results about the randic index. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, 58:83–102, 2007.
- [17] Francesco BELARDO, Enzo Maria LI MARZI et Slobodan K SIMIĆ : Some results on the index of unicyclic graphs. *Linear algebra and its applications*, 416(2):1048–1059, 2006.
- [18] Claude BERGE : *Graphs and hypergraphs*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1973. Translated from the French by Edward Minieka, North-Holland Mathematical Library, Vol. 6.
- [19] Changjiang BU et Jiang ZHOU : Starlike trees whose maximum degree exceed 4 are determined by their q-spectra. *Linear Algebra and its Applications*, 436(1):143 – 151, 2012.
- [20] Gilles CAPOROSSI, Dragoš CVETKOVIC, Ivan GUTMAN et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs. 2. finding graphs with extremal energy. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 39(6):984–996, 1999.
- [21] Gilles CAPOROSSI, Ivan GUTMAN et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs : Iv : chemical trees with extremal connectivity index. *Computers & chemistry*, 23(5):469–477, 1999.
- [22] Gilles CAPOROSSI et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs : 1 The AutoGraphiX system. *Discrete Math.*, 212(1-2):29–44, 2000.
- [23] Gilles CAPOROSSI et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs. 5. Three ways to automate finding conjectures. *Discrete Math.*, 276(1-3):81–94, 2004. 6th International Conference on Graph Theory.

- [24] Domingos M. CARDOSO, Dragoš CVETKOVIĆ, Peter ROWLINSON et Slobodan K. SIMIĆ : A sharp lower bound for the least eigenvalue of the signless Laplacian of a non-bipartite graph. *Linear Algebra Appl.*, 429(11-12):2770–2780, 2008.
- [25] Domingos M. CARDOSO, Dragos CVETKOVIĆ, Peter ROWLINSON et Slobodan K. SIMIĆ : A sharp lower bound for the least eigenvalue of the signless Laplacian of a non-bipartite graph. *Linear Algebra and its Applications*, pages 2770 – 2780, 2008. Special Issue devoted to selected papers presented at the first IPM Conference on Algebraic Graph Theory.
- [26] Yan CHEN : Properties of spectra of graphs and line graphs. *Appl. Math. J. Ser. B*, 3:371–376, 2002.
- [27] Fan R. K. CHUNG : *Spectral graph theory*, volume 92 de *CBMS Regional Conference Series in Mathematics*. Published for the Conference Board of the Mathematical Sciences, Washington, DC, 1997.
- [28] D CVETKOVIĆ, S SIMIĆ, Gilles CAPOROSSI et Pierre HANSEN : Variable neighborhood search for extremal graphs 3 : On the largest eigenvalue of color-constrained trees. *Linear and Multilinear Algebra*, 49(2):143–160, 2001.
- [29] Dragoš CVETKOVIĆ : On graphs whose second largest eigenvalue does not exceed 1. *Publications de l'Institut mathématique (Beograd), Nouvelle série*, 31:15–20, 1982.
- [30] Dragoš CVETKOVIĆ : New theorems for the signless Laplacian eigenvalues. *Bulletin des sciences mathématiques et naturelles, Académie des Sciences de Bucarest*, 137(33):131–146, 2008.
- [31] Dragoš CVETKOVIĆ : private communication. at the Spectral Graph Theory Conference, Rio de Janeiro, 2008.
- [32] Dragoš CVETKOVIĆ et Irena PEVAC : Man-machine theorem proving in graph theory. *Artificial Intelligence*, 35(1):1–23, 1988.

- [33] Dragoš CVETKOVIĆ et Peter ROWLINSON : Spectra of unicyclic graphs. *Graphs and combinatorics*, 3(1):7–23, 1987.
- [34] Dragoš CVETKOVIĆ, Peter ROWLINSON et Slobodan K. SIMIĆ : Eigenvalue bounds for the signless Laplacian. *Publ. Inst. Math. (Beograd) (N.S.)*, 81(95):11–27, 2007.
- [35] Dragoš CVETKOVIĆ, Peter ROWLINSON et Slobodan K. SIMIĆ : Signless Laplacians of finite graphs. *Linear Algebra Appl.*, 423(1):155–171, 2007.
- [36] Dragoš CVETKOVIĆ et Slobodan K. SIMIĆ : On graphs whose second largest eigenvalue does not exceed $(\sqrt{5} - 1)/2$. *Discrete Mathematics*, 138:213 – 227, 1995. 14th British Combinatorial Conference.
- [37] Dragos CVETKOVIC et 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.
- [38] Dragos CVETKOVIC et Slobodan K. SIMIC : Towards a spectral theory of graphs based on the signless Laplacian, ii. *Linear Algebra and its Applications*, 432(9): 2257 – 2272, 2010. Special Issue devoted to Selected Papers presented at the Workshop on Spectral Graph Theory with Applications on Computer Science, Combinatorial Optimization and Chemistry (Rio de Janeiro, 2008).
- [39] Dragos CVETKOVIC et Slobodan K. SIMIC : Towards a spectral theory of graphs based on the signless laplacian, iii. Rapport technique, DOAJ-Articles [<http://www.doaj.org/oai.article>] (Sweden), 2010.
- [40] Dragoš M. CVETKOVIĆ, Michael DOOB et Horst SACHS : *Spectra of graphs, theory and applications*. Johann Ambrosius Barth, Heidelberg, third édition, 1995.
- [41] Kinkar Ch. DAS : On conjectures involving second largest signless Laplacian eigenvalue of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 432(11), June 2010.
- [42] Kinkar Ch. DAS : Proof of conjecture involving the second largest signless Laplacian eigenvalue and the index of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 435(10):2420 – 2424, 2011. Special Issue in Honor of Dragos Cvetkovic.

- [43] Leonardo Silva de LIMA et Vladimir NIKIFOROV : On the second largest eigenvalue of the signless Laplacian. *Linear Algebra and its Applications*, 438(3):1215 – 1222, 2013.
- [44] Ronald D DUTTON, Robert C BRIGHAM et Fernando GOMEZ : Ingrid : A graph invariant manipulator. *Journal of symbolic computation*, 7(2):163–177, 1989.
- [45] Ronald D. DUTTON, Robert C. BRIGHAM et Fernando GOMEZ : Ingrid : a graph invariant manipulator. *Journal of Symbolic Computation*, 7(2):163–177, 1989.
- [46] Susan L EPSTEIN : Learning and discovery : One system’s search for mathematical knowledge. *Computational Intelligence*, 4(1):42–53, 1988.
- [47] Siemion FAJTLOWICZ : On conjectures of graffiti v. *In Seventh International Quadrennial Conference on Graph Theory*, volume 1, pages 367–376, 1995.
- [48] Yi-Zheng FAN, Bit-Shun TAM et Jun ZHOU : Maximizing spectral radius of unoriented Laplacian matrix over bicyclic graphs of a given order. *Linear and Multilinear Algebra*, 56(4):381–397, 2008.
- [49] Yi-Zheng FAN, Yi WANG et Yu-Bin GAO : Minimizing the least eigenvalues of unicyclic graphs with application to spectral spread. *Linear Algebra and Its Applications*, 429(2):577–588, 2008.
- [50] Yi-Zheng FAN, Jing XU, Yi WANG et Dong LIANG : The Laplacian spread of a tree. *Discrete Mathematics & Theoretical Computer Science*, 10(1), 2008.
- [51] Yi-Zheng FAN et Dan YANG : The signless Laplacian spectral radius of graphs with given number of pendant vertices. *Graph. Comb.*, 25(3):291–298, août 2009.
- [52] Lihua FENG, Qiao LI et Xiao-Dong ZHANG : Minimizing the Laplacian spectral radius of trees with given matching number. *Linear and Multilinear Algebra*, 55(2):199–207, 2007.
- [53] Lihua FENG et Guihai YU : On three conjectures involving the signless Laplacian spectral radius of graph. *Publications de l’Institut mathématique (Beograd), Nouvelle série*, 85 (99):35 – 38, 2009.

- [54] Lihua FENG et Guihai YU : On three conjectures involving the signless Laplacian spectral radius of graphs. *Publ. Inst. Math. (Beograd) (N.S.)*, 85(99):35–38, 2009.
- [55] Lihua FENG et Guihai YU : The signless Laplacian spectral radius of unicyclic graphs with graph constraints. *Kyungpook Math. J.*, 49:123–131, 2009.
- [56] Miroslav FIEDLER : Algebraic connectivity of graphs. *Czechoslovak Math. J.*, 23(98):298–305, 1973.
- [57] Miranca FISCHERMANN, Ivan GUTMAN, Arne HOFFMANN, Dieter RAUTENBACH, Dusica VIDOVIC et Lutz VOLKMANN : Extremal chemical trees. *Zeitschrift für die Naturforschung A*, 57(1/2):49–52, 2002.
- [58] Michael E FISHER : On hearing the shape of a drum. *Journal of Combinatorial Theory*, 1(1):105–125, 1966.
- [59] F. R. GANTMACHER : *The theory of matrices. Vols. 1, 2.* Translated by K. A. Hirsch. Chelsea Publishing Co., New York, 1959.
- [60] Dieter GERNERT et Landon RABERN : A knowledge-based system for graph theory, demonstrated by partial proofs for graph-colouring problems. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.*, 58(2):445–460, 2007.
- [61] C.D. GODSIL et B.D. MCKAY : Constructing cospectral graphs. *Aequationes mathematicae*, 25(1):257–268, 1982.
- [62] Hs. H. GÜNTARD et H. PRIMAS : Zusammenhang von graphentheorie und molekültheorie von molekülen mit systemen konjugierter bindungen. *Helvetica Chimica Acta*, 39(6):1645–1653, 1956.
- [63] Ji-Ming GUO : On the Laplacian spectral radius of a tree. *Linear algebra and its applications*, 368:379–385, 2003.
- [64] Shu-Guang GUO : On bicyclic graphs whose second largest eigenvalue does not exceed 1. *Linear Algebra and its Applications*, 407(0):201 – 210, 2005.

- [65] Ivan GUTMAN, Pierre HANSEN et Hadrien MÉLOT : Variable neighborhood search for extremal graphs. 10. comparison of irregularity indices for chemical trees. *Journal of chemical information and modeling*, 45(2):222–230, 2005.
- [66] Willem H. HAEMERS, Xiaogang LIU et Yuanping ZHANG : Spectral characterizations of lollipop graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 428(11–12):2415 – 2423, 2008.
- [67] Pierre HANSEN et Claire LUCAS : Bounds and conjectures for the signless Laplacian index of graphs. *Les Cahiers du GERAD*, G-2009-27, 2009.
- [68] Pierre HANSEN et Claire LUCAS : An inequality for the signless Laplacian index of a graph using the chromatic number. *Graph Theory Notes of New-York*, 57:39–42, 2009.
- [69] Pierre HANSEN et Claire LUCAS : Bounds and conjectures for the signless Laplacian index of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 432(12):3319 – 3336, 2010.
- [70] Pierre HANSEN et Hadrien MÉLOT : Variable neighborhood search for extremal graphs. 6. analyzing bounds for the connectivity index. *Journal of chemical information and computer sciences*, 43(1):1–14, 2003.
- [71] Pierre HANSEN et Nenad MLADENović : Variable neighborhood search : Principles and applications. *European Journal of Operational Research*, 130(3):449 – 467, 2001.
- [72] Pierre HANSEN, Nenad MLADENović et José. MORENO PÉREZ : Variable neighbourhood search : methods and applications. *Annals of Operations Research*, 175(1):367–407, 2010.
- [73] Pierre HANSEN et Dragan STEVANOVIĆ : On bags and bugs. *Discrete Applied Mathematics*, 156(7):986 – 997, 2008. GRACO 2005, 2nd Brazilian Symposium on Graphs, Algorithms and Combinatorics.

- [74] Bian HE, Ya-Lei JIN et Xiao-Dong ZHANG : Sharp bounds for the signless Laplacian spectral radius in terms of clique number. *Linear Algebra and its Applications*, 2011. in press.
- [75] Chang-Xiang HE, Jia-Yu SHAO et Jin-Ling HE : On the Laplacian spectral radii of bicyclic graphs. *Discrete Mathematics*, 308(24):5981–5995, 2008.
- [76] Yuan HONG et 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.
- [77] Yaoping HOU : Unicyclic graphs with minimal energy. *Journal of Mathematical Chemistry*, 29(3):163–168, 2001.
- [78] Yaoping HOU, Ivan GUTMAN et Ching-Wah WOO : Unicyclic graphs with maximal energy. *Linear Algebra and its applications*, 356(1):27–36, 2002.
- [79] Bofeng HUO, Shengjin JI, Xueliang LI et Yongtang SHI : Solution to a conjecture on the maximal energy of bipartite bicyclic graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 435(4):804–810, 2011.
- [80] Mark KAC : Can one hear the shape of a drum? *The american mathematical monthly*, 73(4):1–23, 1966.
- [81] L.Yu. KOLOTILINA : Inequalities for the extreme eigenvalues of block-partitioned hermitian matrices with applications to spectral graph theory. *Journal of Mathematical Sciences*, 176:44–56, 2011.
- [82] Mirko LEPOVIĆ et Ivan GUTMAN : No starlike trees are cospectral. *Discrete mathematics*, 242(1):291–295, 2002.
- [83] Jianxi LI, Ji-Ming GUO et Wai Chee SHIU : On the second largest Laplacian eigenvalues of graphs. *Linear Algebra and its Applications*, 438(5):2438 – 2446, 2013.
- [84] Xueliang LI et Jianbin ZHANG : On bicyclic graphs with maximal energy. *Linear Algebra and its Applications*, 427(1):87–98, 2007.

-
- [85] Muhuo LIU et Bolian LIU : The signless Laplacian spread. *Linear Algebra and Its Applications*, 432(2):505–514, 2010.
- [86] Muhuo LIU, Xuezhong TAN et Bolian LIU : The (signless) Laplacian spectral radius of unicyclic and bicyclic graphs with n vertices and k pendant vertices. *Czechoslovak mathematical journal*, 60(3):849–867, 2010.
- [87] Xiaogang LIU, Yuanping ZHANG et Xiangquan GUI : The multi-fan graphs are determined by their Laplacian spectra. *Discrete Mathematics*, 308(18):4267 – 4271, 2008.
- [88] László LOVÁSZ et J PELIKAN : On the eigenvalues of trees. *Periodica Mathematica Hungarica*, 3(1):175–182, 1973.
- [89] Claire LUCAS : Valeurs extrêmes du rayon spectral du Laplacien sans signe avec un invariant de distance fixé. *Cahiers du GERAD*, 2013.
- [90] Brendan D MCKAY : On the spectral characterisation of trees. *Ars Combin*, 3:219–232, 1977.
- [91] Russell MERRIS : A note on Laplacian graph eigenvalues. *Linear Algebra and its Applications*, 285:33 – 35, 1998.
- [92] N. MLADENović et P. HANSEN : Variable neighborhood search. *Computers & Operations Research*, 24(11):1097 – 1100, 1997.
- [93] Theodore Samuel MOTZKIN et Ernst Gabor STRAUS : Maxima for graphs and a new proof of a theorem of turán. *Canadian Journal of Mathematics*, 17:533 – 540, 1965.
- [94] CS OLIVEIRA, L.S. LIMA, N.M.M. ABREU et P. HANSEN : Bounds on the index of the signless Laplacian of a graph. to appear in *Discrete Applied Math.*, 2009.
- [95] G.R. OMIDI et K. TAJBAKHSH : Starlike trees are determined by their Laplacian spectrum. *Linear Algebra and its Applications*, 422(2–3):654 – 658, 2007.

- [96] Miroslav PETROVIĆ, Bojana BOROVIĆANIN et Tatjana ALEKSIĆ : Bicyclic graphs for which the least eigenvalue is minimum. *Linear Algebra and its Applications*, 430(4):1328–1335, 2009.
- [97] Miroslav PETROVIĆ et Bojana MILEKIĆ : On the second largest eigenvalue of line graphs. *J. Graph Theory*, 27(2):61–66, 1998.
- [98] James R. SCHOTT : *Matrix analysis for statistics*. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], Hoboken, NJ, second édition, 2005.
- [99] A. J. SCHWENK : Almost all trees are cospectral. In F. HARARY, éditeur : *New Directions in the Theory of Graphs*, page 275–307. Academic Press, New York, 1973.
- [100] Slobodan K SIMIĆ : On the largest eigenvalue of unicyclic graphs. *Publications de l'Institut Mathématique. Nouvelle Série*, 42:13–19, 1987.
- [101] Slobodan K SIMIĆ : On the largest eigenvalue of bicyclic graphs. *Publications de l'Institut Mathématique. Nouvelle Série*, 46:1–6, 1989.
- [102] D. STEVANOVIĆ, V. BRANKOV, Dragoš CVETKOVIĆ et Slobodan K. SIMIĆ : New-Graph, 2003-2004. Available from <<http://www.mi.sanu.ac.yu/newgraph/>>.
- [103] G. SZEKERES et Herbert S. WILF : An inequality for the chromatic number of a graph. *J. Combinatorial Theory*, 4:1–3, 1968.
- [104] Edwin R. van DAM et Willem H. HAEMERS : Which graphs are determined by their spectrum? *Linear Algebra Appl.*, 373:241–272, 2003. Special issue on the Combinatorial Matrix Theory Conference (Pohang, 2002).
- [105] JianFeng WANG, Francesco BELARDO, QiongXiang HUANG et Borović BOJANA : On the two largest q -eigenvalues of graphs. *Discrete Mathematics*, 310(21):2858–2866, november 2010.
- [106] Pawel WOCJAN et Clive ELPHICK : New spectral bounds on the chromatic number encompassing all eigenvalues of the adjacency matrix. *CoRR*, abs/1209.3190, 2012.

- [107] Guang-Hui XU : On unicyclic graphs whose second largest eigenvalue does not exceed 1. *Discrete Applied Mathematics*, 136(1):117 – 124, 2004. Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science (DMTCS).
- [108] Chen YAN : Properties of spectra of graphs and line graphs. *Applied Mathematics-A Journal of Chinese Universities*, 17:371–376, 2002.
- [109] Guihai YU : On the maximal signless Laplacian spectral radius of graphs with given matching number. *Proc. Japan Acad.*, 84:163–166, 2008.
- [110] Jianbin ZHANG et Bo ZHOU : On bicyclic graphs with minimal energies. *Journal of mathematical chemistry*, 37(4):423–431, 2005.
- [111] Xiao-Dong ZHANG : The signless Laplacian spectral radius of graphs with given degree sequences. *Discrete Appl. Math.*, 157(13):2928–2937, juillet 2009.
- [112] Yuanping ZHANG, Xiaogang LIU, Bingyan ZHANG et Xuerong YONG : The lollipop graph is determined by its q -spectrum. *Discrete Mathematics*, 309(10):3364–3369, 2009.

Signless Laplacian spectra of some particular graphs

A.1 Computation of the spectrum of $SK_{n,\alpha}$

Recall that the complete split graph $SK_{n,\alpha}$ is a graph obtained from an empty graph on α vertices and a clique on $n - \alpha$ vertices by adding all edges between them. Its signless Laplacian matrix Q is the matrix on n rows and n columns defined by :

$$Q = \begin{pmatrix} n - \alpha & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & n - \alpha & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & n - \alpha & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & n - 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & n - 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & n - 1 \end{pmatrix}.$$

Let λ be an eigenvalue of Q and $x = x_1, x_2, \dots, x_n$ be a corresponding eigenvector. The eigenvalues equations give

$$\lambda x_i = (n - \alpha)x_i + \sum_{j=\alpha+1}^n x_j, \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, \alpha \quad (\text{A.1})$$

$$\lambda x_i = (n - 2)x_i + \sum_{j=1}^n x_j, \quad \text{for } i = \alpha + 1, \dots, n \quad (\text{A.2})$$

If $\lambda \neq n - \alpha$ and $\lambda \neq n - 2$, then $x_i = x_j$ for all $i, j = 1, \dots, \alpha$ and for all $i, j = \alpha + 1, \dots, n$. Hence λ satisfy the eigenvalues equation if and only if λ is an eigenvalue of

$$\begin{pmatrix} n - \alpha & n - \alpha \\ \alpha & 2n - 2 - \alpha \end{pmatrix}.$$

Computation gives the following roots : $3n/2 - \alpha - 1 - \sqrt{n^2 + 4n\alpha - 4\alpha^2 - 4n + 4}$, and $3n/2 - \alpha - 1 + \sqrt{n^2 + 4n\alpha - 4\alpha^2 - 4n + 4}$.

Assume that $\alpha \neq 2$ and $\alpha \neq 1$.

If $\lambda = n - \alpha$, then $\sum_{j=\alpha+1}^n x_j = 0$ and $x_i = x_j$ for all $i, j = \alpha + 1, \dots, n$. Hence $x_i = 0$ for all $i = \alpha + 1, \dots, n$. Moreover $\sum_{j=1}^{\alpha} x_j = 0$. Then $n - \alpha$ is an eigenvalue with multiplicity $\alpha - 1$.

If $\lambda = n - 2$, then $\sum_{j=1}^n x_j = 0$ and $x_i = x_j$ for all $i, j = 1, 2, \dots, n - \alpha$. Hence $\sum_{j=\alpha+1}^n x_j = -\alpha x_i$ for all $i = 1, \dots, \alpha$. Which lead to $x_i = 0$, for all $i = 1, \dots, \alpha$. Then $n - 2$ is an eigenvalue with multiplicity $n - \alpha - 1$.

Now assume that $\alpha = 2$. If $\lambda = n - 2$ then the eigenvalue equations are $\sum_{j=1}^n x_j = 0$ and $\sum_{j=\alpha+1}^n x_j = 0$. Hence $n - 2$ is an eigenvalue with multiplicity $n - 2$.

If $\alpha = 1$, then we consider the complete graph whose signless Laplacian spectrum is well-known.

A.2 Computation of the spectrum of a complete tripartite graph

Let G be a complete tripartite graph with independent sets of order p , q and r . Let λ be an eigenvalue of its signless Laplacian Q and $x = x_1, x_2, \dots, x_n$ be a corresponding eigenvector. The eigenvalues equations give

$$\lambda x_i = (n-p)x_i + \sum_{j=p+1}^n x_j, \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, p \quad (\text{A.3})$$

$$\lambda x_i = (n-q)x_i + \sum_{j=1}^p x_j + \sum_{j=p+q+1}^n x_j, \quad \text{for } i = p+1, \dots, p+q \quad (\text{A.4})$$

$$\lambda x_i = (n-r)x_i + \sum_{j=1}^{p+q} x_j, \quad \text{for } i = p+q+1, \dots, n \quad (\text{A.5})$$

If $\lambda \neq n-p$, $\lambda \neq n-q$ and $\lambda \neq n-r$, then $x_i = x_j$ for all $i, j = 1, \dots, p$, for all $i, j = p+1, \dots, p+q$ and for all $i, j = p+q+1, \dots, n$. Hence λ satisfy the eigenvalues equation if and only if λ is an eigenvalue of

$$M = \begin{pmatrix} n-p & q & r \\ p & n-q & r \\ p & q & n-r \end{pmatrix}.$$

The characteristic polynomial of M is $p(\lambda) = -\lambda^3 + 2n\lambda^2 - n^2\lambda + 4pqr$, with $p+q+r = n$. Under the constraint $p+q+r = n$, pqr is maximum for $p = q = r = n/3$. As $p_1(\lambda) = -\lambda^3 + 2n\lambda^2 - n^2\lambda + 4(n/3)^3 = (n/3 - \lambda)^2(4n/3 - \lambda)$ and $p_2(\lambda) = -\lambda^3 + 2n\lambda^2 - n^2\lambda = -\lambda(n-\lambda)^2$, we know that the roots $x_1 \geq x_2 \geq x_3$ of p are such as $x_1 \in [n, 4n/3]$, $x_2 \in [n/3, n]$ and $x_3 \in [0, n/3]$.

The other possible eigenvalues are $n-p$, $n-q$, and $n-r$. Hence, obviously the index q_1 of Q satisfies $q_1 \in [n, 4n/3]$.

A.3 Computation of the spectrum of S_n^+

Recall that S_n^+ is the graph on n vertices obtained from the star S_n by adding an edge.

Its signless Laplacian matrix Q is the matrix on n rows and n columns defined by :

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1 & 1 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Then

$$Q - \lambda I = \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1-\lambda & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1-\lambda & 1 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix}$$

Let r_i denotes the i -th row of $Q - \lambda I$. By adding $\frac{1}{1-\lambda} \sum_{i=1}^{n-3} r_i$ to the $n-2$ -th row, we obtain the following matrix which has the same determinant as $Q - \lambda I$.

$$\begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1-\lambda & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & n-1-\lambda - \frac{n-3}{1-\lambda} & 1 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix}$$

Hence, the eigenvalues of Q are $(1)^{n-3}$ and the roots of the determinant of

$$\begin{pmatrix} n-1-\lambda-\frac{n-3}{1-\lambda} & 1 & 1 \\ 1 & 2-\lambda & 1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix}$$

i.e. the roots of the polynomial,

$$p(\lambda) = -\lambda^3 + (n+3)\lambda^2 - 3n\lambda + 4.$$

Computing does not lead to usable values, so we only find an upper bound for q_1 , where q_1 denotes the index of Q .

It is well known the second largest eigenvalue of a graph on n vertices is no more than $n-2$. Hence, if $\lambda > n-2$ and $p(\lambda) < 0$ then $\lambda > q_1$.

Let $\lambda = n + 1/2n$,

$$p(n + \frac{1}{2n}) = -\frac{n-11}{2} - \frac{1}{2n} + \frac{3}{4n^2} - \frac{1}{8n^3}.$$

For $n \geq 11$, $p(n + 1/(2n)) < 0$. Hence, for all $n \geq 11$, $q_1 < n + 1/(2n)$.

A.4 Computation of the spectrum of $Ki_{n,n-1}$

Recall that $Ki_{n,n-1}$ is the graph on n vertices obtained from the complete graph on $n-1$ vertices by adding a pending vertex. Its signless Laplacian matrix Q is the matrix on n rows and n columns :

$$Q = \begin{pmatrix} n-2 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & n-2 & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & n-2 & 1 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Then

$$Q - \lambda I = \begin{pmatrix} n-2-\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & n-2-\lambda & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & n-2-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & 1 & n-1-\lambda & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1-\lambda \end{pmatrix}$$

Let r_i denotes the i -th row of $Q - \lambda I$. By adding $\frac{1}{2n-5-\lambda} \sum_{i=1}^{n-2} r_i$ to the $n-1$ -th row, we obtain the following matrix which has the same determinant as $Q - \lambda I$.

$$\begin{pmatrix} n-2-\lambda & 1 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & n-2-\lambda & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & 1 & 0 \\ 1 & \cdots & 1 & n-2-\lambda & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & n-1-\lambda - \frac{n-2}{2n-5-\lambda} & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1-\lambda \end{pmatrix}.$$

Hence, the eigenvalues of Q are $(n-3)^{n-3}$ and the roots of

$$p(\lambda) = (2n-5-\lambda) \begin{vmatrix} n-2-\lambda - \frac{n-2}{2n-5-\lambda} & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{vmatrix}.$$

Computation gives the following roots for p : $(n-3/2 - \sqrt{4n^2 - 20n + 33}/2)^1$, $(n-2)^1$ and $(n-3/2 + \sqrt{4n^2 - 20n + 33}/2)^1$.

Conjectures for the second largest eigenvalue of the signless Laplacian

B.1 Bounds using degree invariants

Conjecture B.1.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with signless second largest Laplacian eigenvalue q_2 and maximum degree Δ . Then*

$$4 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} \leq q_2 + \Delta \tag{B.1}$$

$$q_2 / \Delta \leq 1 + \cos \frac{2\pi}{n}, \quad \text{if } n \geq 13 \tag{B.2}$$

$$4 + 4 \cos \frac{2\pi}{n} \leq q_2 \cdot \Delta \tag{B.3}$$

The upper bound for (B.2) is attained by the cycle C_n and the path P_n , for $n \geq 13$.

If n is even, $q_2 - \Delta$ is maximum for and only for the graph G_1 obtained from two disjoint cliques on $n/2$ vertices by switching two edges rs and uv to the position of the non edges ru and sv and the graph obtained from G_1 by deleting an edge joining the two maximum cliques.

If n is odd, $q_2 - \Delta$ is maximum for and only for the graph G_1 obtained from two disjoint cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices by adding a vertex labelled v , deleting an edge in each clique and joining its end vertices to the vertex v .

The lower bounds for (B.1) and (B.3) are attained by the cycle C_n and the path P_n .

Conjecture B.1.2. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with signless second largest Laplacian eigenvalue q_2 and minimum degree δ . Then*

$$-1 \leq q_2 - \delta, \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{n-2}{n-1} \leq q_2/\delta. \quad (\text{B.5})$$

The lower bound for (B.4) and (B.5) is attained by and only by the complete graph K_n .

Conjecture B.1.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with signless second largest Laplacian eigenvalue q_2 and average degree $\bar{d}$. Then*

$$-1 \leq q_2 - \bar{d} \leq n - 6 + \frac{8}{n} \quad (\text{B.6})$$

$$\frac{n}{2(n-2)} \leq q_2/d \quad (\text{B.7})$$

The upper bound for (B.6) is attained by and only by the complete bipartite graph $K_{n-2,2}$. Moreover, $q_2 - \bar{d}$ is maximum for the double star obtained from two stars on $\lceil \frac{n}{2} \rceil$ vertices by coalescing two vertices when n is odd, and for a graph obtained from two stars on $\frac{n}{2} + 1$ vertices by coalescing two pending vertices of a star with two pending vertices of the other when n is even.

The lower bounds for (B.6) is attained by and only by the complete graph K_n . The lower bounds for (B.7) is attained by and only by the star S_n .

B.2 Bounds using metric invariants

Conjecture B.2.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with signless second largest Laplacian eigenvalue q_2 and average distance $\bar{l}$. Then*

$$\left. \begin{array}{ll} -1 + \frac{2}{n} & \text{if } n \leq 12 \\ 2 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} - \frac{n+1}{3} & \text{if } n \geq 13 \end{array} \right\} \leq q_2 - \bar{l} \quad (\text{B.8})$$

$$3 - \frac{2}{n} \leq q_2 + \bar{l} \leq n - \frac{4}{n} + \frac{4}{n(n-1)} \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{n}{2n-2} \leq q_2 / \bar{l} \quad (\text{B.10})$$

$$2 - \frac{2}{n} \leq q_2 \cdot \bar{l} \quad (\text{B.11})$$

The upper bound for (B.9) is attained by and only by the complete bipartite graph $K_{n-2,2}$.

The lower bound for (B.8) is attained by and only by the star S_n when $n \leq 12$, and the path P_n when $n \geq 13$. The lower bounds for (B.9), (B.10) and (B.11) are attained by and only by the star S_n .

Conjecture B.2.2. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with second largest signless Laplacian eigenvalue q_2 and average distance $\bar{l}$. Then*

$$2 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} - (n-1) \leq q_2 - D \quad (\text{B.12})$$

$$3 \leq q_2 + D \leq n + 1 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} \quad (\text{B.13})$$

$$\left. \begin{array}{ll} \frac{1}{2} & \text{if } 4 \leq n \leq 7 \\ \frac{2+2 \cos(2\pi/n)}{n-1} & \text{if } n \geq 8 \end{array} \right\} \leq q_2 / D \quad (\text{B.14})$$

$$2 \leq q_2 \cdot D \quad (\text{B.15})$$

The upper bound for (B.13) is attained by and only by the path P_n .

The lower bound for (B.12) is attained by and only by the path P_n . The lower bound for (B.14) is attained by and only by the star S_n when $4 \leq n \leq 7$, and the path P_n when $n \geq 8$. The lower bounds for (B.13) and (B.15) are attained by and only by the star S_n .

Conjecture B.2.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with signless*

second largest Laplacian eigenvalue q_2 and radius r . Then

$$q_2 + r \leq n \quad (\text{B.16})$$

$$(\text{B.17})$$

The bound is attained by the complement of a perfect matching if n is even and by the complement of a perfect matching on $n - 1$ vertices and one additional pendant vertex if n is odd.

Moreover for all $n \geq 8$, $q_2 - r$ and q_2/r are minimum for the path P_n if n is odd and by the graph obtained by the path P_{n-1} by adding a pendant vertex at one of the central vertices, if n is even.

Conjecture B.2.4. Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and average eccentricity ecc . Then

$$\left. \begin{array}{ll} 2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} - \frac{3n-2}{4} & \text{if } n \text{ is even} \\ 2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} - \frac{(3n+1)(n-1)}{4n} & \text{if } n \text{ is odd} \end{array} \right\} \leq q_2 - ecc \leq n - 3, \quad (\text{B.18})$$

$$3 - 1/n \leq q_1 + ecc \quad (\text{B.19})$$

$$\left. \begin{array}{ll} \frac{8+8 \cos(\pi/n)}{3n-2} & \text{if } n \text{ is even} \\ \frac{8n+8n \cos(\pi/n)}{(3n+1)(n-1)} & \text{if } n \text{ is odd} \end{array} \right\} \leq q_2/ecc \leq n - 2. \quad (\text{B.20})$$

$$2 - 1/n \leq q_2 \cdot ecc \quad (\text{B.21})$$

The lower bounds for (B.18) and (B.20) are attained by and only by the path P_n .

The upper bounds for (B.18), (B.19) and (B.20) are attained by and only by the complete graph K_n .

Moreover $q_2 + ecc$ is maximum for the graph obtained from two cliques of order $\lceil n/2 \rceil$ by deleting respectively one edge, linking a vertex of lower degree of one clique to a vertex of lower degree of the other by an edge and contracting this edge if n is odd.

Conjecture B.2.5. Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Lapla-

cian index q_1 and proximity Π . Then

$$\left. \begin{array}{ll} 0 & \text{if } n \leq 14 \\ 2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} - \frac{(3n+1)(n-1)}{4n} & \text{if } n \geq 15 \text{ is odd} \\ 2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} - \frac{3n-2}{4} & \text{if } n \geq 16 \text{ is even} \end{array} \right\} \leq q_2 - \Pi \leq n - 3, \quad (\text{B.22})$$

$$q_1 + \Pi \leq 2n - 1, \quad (\text{B.23})$$

$$\left. \begin{array}{ll} 1 & \text{if } n \leq 14 \\ \frac{8n+8n \cos(\pi/n)}{(3n+1)(n-1)} & \text{if } n \text{ is odd} \\ \frac{8+8 \cos(\pi/n)}{3n-2} & \text{if } n \text{ is even} \end{array} \right\} \leq q_2/\Pi \leq n - 2. \quad (\text{B.24})$$

The lower bounds for (B.22) and (B.24) are attained by and only by the star S_n if $n \leq 14$ and the path P_n otherwise .

The upper bounds for (B.22) and (B.24) are attained by any graph with at least two dominant vertices.

Moreover, if n is even, $q_2 + P_i$ is maximum for the graph obtained from two cliques of order $\lceil n/2 \rceil$ by deleting respectively one edge and linking a vertex of lower degree of one clique to a vertex of lower degree of the other by an edge. If n is odd, $q_2 + P_i$ is maximum for the complementary of a perfect matching and an edge.

$q_2 \cdot P_i$ is maximum for the graph obtained from two cliques of order $\lfloor n/2 - 1 \rfloor$ by linking by a path on the remaining vertices.

B.3 Bounds using connectivity invariants

We next consider bounds involving q_1 and three well-known connectivity invariants : vertex connectivity ν , edge connectivity κ , and algebraic connectivity a .

Proposition B.3.1. *Let G be a connected graph on $n \geq 4$ vertices with signless Laplacian index q_1 and edge connectivity κ . Then*

$$2 \leq q_1 - \kappa \leq n - \frac{5}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}, \quad (\text{B.25})$$

$$3 + 2 \cos \frac{\pi}{n} \leq q_1 + \kappa \leq 2n - 1, \quad (\text{B.26})$$

$$2 \leq q_1 / \kappa \leq n - \frac{3}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}, \quad (\text{B.27})$$

$$2 + 2 \cos \frac{\pi}{n} \leq q_1 \cdot \kappa \leq 2(n - 1)^2. \quad (\text{B.28})$$

The lower bound for (B.25) is attained by and only by the cycle C_n . The lower bounds for (B.26) and (B.28) are attained by and only by the path P_n . The lower bounds for (B.27) is attained by C_n, K_n for all n , the complete bipartite graph $K_{n/2, n/2}$, when n is even, and possibly others.

The upper bounds for (B.26) and (B.28) are attained by and only by the complete graph K_n . The upper bounds for (B.25) and (B.27) are attained by and only by the kite $Ki_{n, n-1}$.

Proof :

- (a) The lower and upper bounds for (B.26) and (B.28) and the characterizations of the corresponding extremal graphs are immediate.
- (b) Upper bound for (B.25) and (B.27). Let G be a connected graph on n vertices.

If $\kappa = 1$, then q_1 is maximum for a graph consisting in two cliques linked by an edge. Indeed, for any graph with $\kappa = 1$ it is possible to obtain such a graph and increase q_1 by adding edges, then it is not possible to add an edge without changing κ .

Let ω be the cardinality of the maximum clique of this graph, from lemma 2.1.6 we have $q_1 < \max(d_i + d_j) = n + \omega - 2$. Then, for $\omega \leq n - 2$, $q_1 < 2n - 4$. Moreover, by the interlacing theorem, $q_1(Ki_{n, n-1}) > q_1(K_{n-1}) = 2n - 4$. Hence, for $\nu = 1$, q_1 is maximum for $Ki_{n, n-1}$.

If $\kappa \geq 2$, then $q_1 / \kappa \leq n - 1$. This completes the proof for (B.27).

If $\kappa = 2$, then q_1 is maximum for a graph obtained from two cliques on n_1 and n_2 vertices ($n = n_1 + n_2$), by adding two edges. We have $q_1 \leq \max(d_i + m_i) =$

$n_1 + ((n_1 - 1)^2 + 2(n - n_1)/(n_1 + 1))$, or $q_1 \leq \max(d_i + m_i) = n_1 + ((n_1 - 1)^2 + n - n_1 + 1/n_1)$, which are both maximum for $n_1 = n - 1$. Then, for $\kappa = 2$, $q_1 - \kappa \leq 2n - 5 + 3/(n - 1) \leq n - 5/2 + \sqrt{4n^2 - 20n + 33}/2$.

If $\kappa \geq 3$, then $q_1/\kappa \leq 2n - 5$. This completes the proof for (B.25).

- (c) Lower bound for (B.25). Let G be connected graph on n vertices. Recall that for all graphs, $\delta \geq \kappa$.

If $\kappa = 1$, then $q_1 - \kappa \geq 1 + 2 \cos(\pi/n)$ with equality for and only for the path P_n . Hence $q_1 - \kappa = 2$ for P_3 and $q_1 - \kappa > 2$ for $n \geq 4$.

If $\kappa = 2$, then $q_1 - \kappa \geq 2$ with equality for and only for the cycle C_n .

If $\kappa \geq 3$, then $q_1 - \kappa \geq 2\delta - \kappa \geq \delta \geq 3$.

- (d) Lower bound for (B.27). For all graphs we have, $q_1/\kappa \geq 2\delta/\kappa \geq 2$. For the cycle C_n and for the complete graph K_n , $q_1/\kappa = 2$. When n is even, for the complete bipartite graph $K_{n/2, n/2}$ we also have $q_1/\kappa = 2$. $\square$

Conjecture B.3.2. *Let G be a connected graph on $n \geq 5$ vertices with signless Laplacian index q_1 and algebraic connectivity a . Then*

$$2 + 2 \cos \frac{2\pi}{n} \leq q_1 - a \leq n - \frac{5}{2} + \frac{\sqrt{4n^2 - 20n + 33}}{2}. \quad (\text{B.29})$$

The lower bound is attained by and only by the cycle C_n and the upper bound is attained by and only by the kite $Ki_{n, n-1}$.

Moreover, q_1/a is maximum for and only for the kite $Ki_{n, \lceil n/3 \rceil + 1}$, for all $n \geq 6$.

Conjectures and simple bounds for the Signless Laplacian eigenvalues of graphs

Let us recall that for a bipartite graph the smallest eigenvalue of the signless Laplacian is always equal to zero. It is then natural to consider the problem : minimize $q_n \otimes i$ among all the non-bipartite connected graphs, where i is a graph invariant and $\otimes$ is one of the usual operations $+, -, \times, /$.

In the following, $TPS_{n,p}$ denotes the graph on n vertices obtained from a triangle and a star by linking them by a path of length p . $TPC_{n,g}$ denotes the graph on n vertices obtained from a triangle and a cycle on g vertices by linking them by a path.

C.1 Bounds using degree invariants

Conjecture C.1.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and maximum, minimum and average degrees distance Δ , δ and $\bar{d}$. Then*

- q_n/Δ is minimum for $TPS_{n, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 3}$,
- $q_n - \delta$ is maximum for $Ki_{n,n-1}$,
- q_n/δ is minimum for $TPC_{n,4}$,
- q_n/δ is maximum for $Ki_{n,n-1}$,

- $q_n - \bar{d}$ is minimum for $Ki_{n,n-1}$.

C.2 Bounds using metric invariants

Conjecture C.2.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and average distance $\bar{l}$. Then*

$$q_n + \bar{l} \leq n - 2, \quad (\text{C.1})$$

and upper bound is attained if and only if G is the complete graph K_n .

Moreover $q_n - \bar{l}$ and $q_n/\bar{l}$ are minimum for $Ki_{n,3}$

The upper bound for (C.1) is attained by and only by the complete graph K_n .

Conjecture C.2.2. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and diameter D . Then*

$$q_n + D \leq n - 1, \quad (\text{C.2})$$

and the upper bound is attained if and only if G is the complete graph K_n or the path P_n .

Moreover,

- $q_n - D$ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n + D$ is minimum for S_n^+ ,
- q_n/D is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times D$ is maximum for $K_n - e$.

Conjecture C.2.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and radius r . Then*

$$q_n + r \leq n - 1, \quad (\text{C.3})$$

$$q_n \times r \leq 2n - 8, \text{ if } n \text{ is even.} \quad (\text{C.4})$$

The bound for C.3 is attained if and only if G is the complete graph K_n or the path P_n .

The bound for C.4 is attained if and only if G is the complement of a minimal covering.

Moreover,

- $q_n - r$ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n + r$ is minimum for S_n^+ ,
- q_n/r is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times r$ is minimum for the complement of a minimal covering for all values of n .

Conjecture C.2.4. Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and eccentricity ecc . Then

$$q_n + ecc \leq n - 1, \quad (\text{C.5})$$

$$q_n \times ecc \leq \begin{cases} n - 4, & \text{if } n \text{ is even} \\ (n - 4)^{\frac{2(n-1)+1}{n}}, & \text{if } n \text{ is odd} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

The bound for C.5 is attained if and only if G is the complete graph K_n . The bound for

C.6 is attained if and only if G is the complement of a perfect matching.

Moreover,

- $q_n - ecc$ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n + ecc$ is minimum for S_n^+ ,
- q_n/ecc is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times D$ is minimum for $TPS_{n, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 3}$.

Conjecture C.2.5. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and girth g . Then*

$$q_n + g \leq n + 1, \quad (\text{C.7})$$

$$q_n \times g \leq 3(n - 3). \quad (\text{C.8})$$

The bounds for C.7 and C.8 are attained if and only if G is the complete graph K_n

Moreover,

- $q_n - g$ is minimum for $Ki_{n,n-1}$ if n is even and C_n if n is odd,
- q_n/g is minimum for $Ki_{n,3}$ if n is even and C_n if n is odd,

Conjecture C.2.6. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and proximity Π . Then*

- $q_n - \Pi$ is minimum for $Ki_{n,3}$, if $n \geq 6$,
- $q_n + \Pi$ is minimum for S_n^+ ,
- q_n/Π is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times \Pi$ is minimum for $TPS_{n, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 3}$.

Conjecture C.2.7. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and remoteness ρ . Then*

- $q_n - \rho$ is minimum for $Ki_{n,3}$, if $n \geq 6$,
- q_n/ρ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times \rho$ is minimum for $TPS_{n, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 3}$.

C.3 Bounds using connectivity invariants

Conjecture C.3.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and vertex connectivity ν . Then*

$$q_n - \nu \leq \lceil n/2 \rceil - 3, \quad (\text{C.9})$$

and the upper bound is attained if and only if G is the graph consisting of two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and $\lceil n/2 \rceil$ vertices linked by a vertex.

Moreover

- $q_n - \nu$ is minimum for the complement of two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and one isolated vertex if n is odd, and the complement of the union of one clique on $n/2$ vertices and one clique on $n/2$ vertices less one edge, if n is even,
- q_n/ν is minimum for $Ki_{n,3}$

Conjecture C.3.2. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and edge connectivity κ . Then*

$$q_n - \nu \leq \lceil n/2 \rceil - 3, \quad (\text{C.10})$$

and the upper bound is attained if and only if G is the graph consisting of two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and $\lceil n/2 \rceil$ vertices linked by an edge.

Moreover,

- $q_n - \kappa$ is minimum for the complement of two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and one isolated vertex if n is odd and the complement of the union of one clique on $n/2$ vertices and one clique on $n/2$ vertices less one edge, if n is even,
- q_n/κ is minimum for $Ki_{n,3}$

Conjecture C.3.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and algebraic connectivity a . Then*

- $q_n - a$ is minimum for the complement of two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and one isolated vertex if n is odd and the complement of the union of one clique on $n/2$ vertices and one clique on $n/2$ vertices less one edge, if n is even,

- $q_n - a$ is maximum for two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and $\lceil n/2 \rceil$ vertices linked by a vertex.,when n is odd, and two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and $\lceil n/2 \rceil$ vertices linked by an edge,when n is even,
- $q_n + a$ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- q_n/a is maximum for two cliques on $\lfloor n/2 \rfloor$ vertices and $\lceil n/2 \rceil$ vertices linked by an edge.

C.4 Bounds using subsets cardinality invariants

Conjecture C.4.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and independence number α . Then*

- $q_n - \alpha$ is minimum for S_n^+ ,
- $q_n + \alpha$ is minimum for $Ki_{n,n-2}$,
- $q_n \times \alpha$ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times \alpha$ is maximum for $SK_{n,\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1}$.

Conjecture C.4.2. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and clique number ω . Then*

$$q_n - \omega \leq n - 4 - \lfloor \frac{n}{2} \rfloor, \quad (\text{C.11})$$

$$q_n/\omega \leq \frac{n-4}{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}. \quad (\text{C.12})$$

Bounds for C.11 and C.12 are attained if and only if G is the complement of a perfect matching. Moreover q_n/ω is minimum for $Ki_{n,3}$.

Conjecture C.4.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and domination number β . Then*

$$q_n \times \beta \leq 2n - 8. \quad (\text{C.13})$$

The bound is attained if and only if G is the complement of a minimal covering. Moreover, $q_n + \beta$ is minimum for S_n^+ .

C.5 Bounds using miscellaneous invariants

Conjecture C.5.1. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and chromatic number χ . Then*

$$q_n - \chi \leq n - 4 - \lfloor n/2 \rfloor, \quad (\text{C.14})$$

$$q_n/\chi \leq \frac{n-4}{\lfloor n/2 \rfloor}. \quad (\text{C.15})$$

The upper bounds are attained if and only if G is the complement of a perfect matching.

Moreover,

- $q_n - \chi$ is minimum for the kite $Ki_{n,n-1}$,
- $q_n + \chi$ is maximum for $Ki_{n,3}$,
- q_n/χ is minimum for the kite $Ki_{n,n-1}$,
- $q_n \times \chi$ is minimum for $Ki_{n,3}$.

Conjecture C.5.2. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and matching number μ . Then*

$$q_n - \mu \leq n - 2 - \lfloor n/2 \rfloor, \quad (\text{C.16})$$

$$q_n/\mu \leq \frac{n-2}{\lfloor n/2 \rfloor}. \quad (\text{C.17})$$

The upper bounds are attained if and only if G is the complete graph K_n .

Moreover,

- $q_n - \mu$ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n + \mu$ is maximum for $Ki_{n,3}$,

- q_n/μ is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times \mu$ is minimum for TPS_n .

Conjecture C.5.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with smallest signless Laplacian eigenvalue q_n and Randić index Ra . Then*

$$q_n - Ra \leq \frac{n}{2} - 2, \quad (C.18)$$

$$q_n/Ra \leq \frac{2(n-2)}{n} - 2. \quad (C.19)$$

The upper bounds are attained if and only if G is the complete graph K_n .

Moreover,

- $q_n - Ra$ is minimum for C_n , if $n \geq 13$ odd,
- $q_n + Ra$ is maximum for S_n^+ ,
- q_n/Ra is minimum for $Ki_{n,3}$,
- $q_n \times Ra$ is minimum for $TPS_{n, \lceil \frac{n}{2} \rceil - 3}$.

C.6 Proofs of some simple properties

In this part of the appendix, proof of some easy, but non-trivial properties are presented. A preliminary definition and a preliminary lemma are recalled, propositions and proofs follow.

Definition C.6.1. *For a subset S of the vertex set $V(G)$ of a graph G , let $\psi = \psi(G)$ be the minimum over all non-empty proper subsets S of $V(G)$ of the quotient*

$$\frac{|cut(S)| + e_{min}(S)}{|S|},$$

where e_{min} is the minimum number of edges whose removal from the subgraph induced by S results in a bipartite graph.

Lemma C.6.2. [34] *Let G be a connected graph, with least Q -eigenvalue q_n . Then*

$$\frac{\psi^2}{4\Delta} \leq q_n \leq 4\psi.$$

Proposition C.6.3. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with least Q -eigenvalue q_n . Then $q_n - \Delta$ is minimum for $G = S_n^+$.*

Proof : Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices so that $q_n - \Delta$ is minimum. We may delete edges from G to obtain an odd-unicyclic graph G' without changing Δ . By the interlacing theorem, $q_n(G') \leq q_n(G)$ and so, among the connected graphs, the minimal value of q_n is attained by an odd-unicyclic graph. For an odd-unicyclic graph, $\psi = \frac{1}{n}$ [34] and

$$\frac{1}{4\Delta n^2} \leq q_n \leq \frac{4}{n}.$$

For S_n^+ ,

$$q_n - \Delta \leq \frac{4}{n} - n + 1.$$

For an odd-unicyclic graph different from S_n^+ ,

$$\begin{aligned} q_n - \Delta &\geq \frac{1}{4(n-2)n^2} - n + 2 = \frac{1}{4(n-2)n^2} + 1 - \frac{4}{n} + \left(\frac{4}{n} - n + 1\right) \\ &> \frac{4}{n} - n + 1, \text{ if } n \geq 4 \\ &> q_n(S_n^+) - \Delta(S_n^+). \end{aligned}$$

Hence $q_n - \Delta$ is minimum for S_n^+ and G is S_n^+ or can be obtained from S_n^+ by adding edges. $\square$

Lemma C.6.4. *Let G be graph on n vertices. Its least eigenvalue λ_n is equal to zero only for totally disconnected graphs. Otherwise, for graphs with at least one edge, it is less than or equal to -1 ; it is equal to -1 if each component is a complete graph. For all other graphs it is less than or equal to $-\sqrt{2}$, the least eigenvalue of $K_{1,2}$.*

Lemma C.6.5. *Let G be a graph on n with least eigenvalue λ_n , then*

$$q_n \leq \Delta + \lambda_n.$$

Proof : Let x be the normalized eigenvector corresponding to λ_n , then

$$\begin{aligned} q_n &\leq \langle x, Qx \rangle \\ &\leq \langle x, Dx \rangle + \langle x, Ax \rangle \\ &\leq \Delta + \lambda_n. \end{aligned}$$

□

The following proposition is a direct consequence of lemma C.6.4 and C.6.5.

Proposition C.6.6. *Let G be a connected graph on n vertices. Then*

$$q_n - \Delta \leq -1$$

with equality if and only if G is a complete graph.

Proposition C.6.7. *Let G be a connected graph on n vertices. Then*

$$q_n/\Delta \leq \frac{n-2}{n-1},$$

with equality if and only if G is a complete graph.

Proof : Let G be a connected graph on n vertices, we have

$$\begin{aligned} q_n/\Delta &\leq 1 + \frac{\lambda_n}{\Delta} \\ &\leq 1 - \frac{1}{\Delta} \\ &\leq 1 - \frac{1}{n-1}. \end{aligned}$$

And, obviously, the equality holds if and only if G is the complete graph.

□

The following lemma was proved in [24].

Lemma C.6.8. *If G is a connected non-bipartite graph on n vertices whose least eigenvalue is minimum, then $G = Ki_{n,3}$*

Proposition C.6.9. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices with least eigenvalue q_n . Then $q_n - \Delta$ is minimum if and only if $G = C_n$ when n is odd and if and only if $G = Ki_{n,3}$ when n is even.*

Proof : When n is even, C_n is bipartite so we have $\Delta \geq 3$ for all connected non-bipartite graphs. Lemma C.6.8 leads to the conclusion.

For an odd-unicyclic graph, $\psi = \frac{1}{n}$ and

$$\frac{1}{4\Delta n^2} \leq q_n \leq \frac{4}{n}.$$

For C_n ,

$$q_n + \Delta \leq \frac{4}{n} + 2.$$

For $Ki_{n,3}$

$$\begin{aligned} q_n + \Delta &\geq \frac{1}{12n^2} + 3 = \frac{1}{12n^2} + 1 - \frac{4}{n} + \left(\frac{4}{n} + 2\right) \\ &> \frac{4}{n} + 2, \quad \text{if } n \geq 4 \\ &> q_n(C_n) + \Delta(C_n). \end{aligned}$$

Hence, when n is odd, $q_n + \Delta$ is minimum if and only if $G = C_n$. □

Proposition C.6.10. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices. Then*

- $q_n + \delta$,
- $q_n \times \delta$,
- $q_n + \bar{d}$,
- $q_n \times \bar{d}$,

are minimum for $Ki_{n,3}$.

Proof : From lemma C.6.8, q_n is minimum if and only if $G = Ki_{n,3}$, δ is obviously minimum for $Ki_{n,3}$. Since G is non-bipartite G is not a tree, then $\bar{d} \geq 2$ and the bound is attained by and only by the unicyclic graphs. The results follow. $\square$

Proposition C.6.11. *Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices. Then $q_n - \alpha$ is minimal if and only if $G = S_n^+$.*

Proof : Let G be a connected non-bipartite graph on n vertices so that $q_n - \alpha$ is minimum. We may delete edges from G to obtain an odd-unicyclic graph G' without decreasing α . By the interlacing theorem, $q_n(G') \leq q_n(G)$ and so, the minimal value of q_n is attained by an odd-unicyclic graph among others.

For S_n^+ ,

$$q_n - \alpha \leq \frac{4}{n} - n + 2.$$

For an odd-unicyclic graph different from S_n^+ ,

$$\begin{aligned} q_n - \alpha &\geq \frac{1}{4(n-2)n^2} - n + 3 = \frac{1}{4(n-2)n^2} + 1 - \frac{4}{n} + \left(\frac{4}{n} - n + 2\right) \\ &> \frac{4}{n} - n + 2, \text{ if } n \geq 4 \\ &> q_n(S_n^+) - \alpha(S_n^+). \end{aligned}$$

Hence $q_n - \Delta$ is minimum for S_n^+ . Moreover if G is a graph on n vertices so that $q_n - \Delta$ is minimal then G is S_n^+ or can be obtained from S_n^+ by adding edges. $\square$