Etude du Laplacien de graphe

Projet S1V1 - MSRO 8 - GM3

Quentin GAROT & Rojan KAYA

Septembre/Octobre 2023

Le Laplacien de graphe s'interprète comme une version discrète de l'opérateur Laplacien que l'on retrouve dans l'équation de la chaleur. Ce projet consiste à étudier ses propriétés générales et spectrales.

Pour toute la suite, on fixe G = (X, U) un graphe simple non orienté avec n = Card(X) et m = Card(U) tels que les sommets sont numérotés de 1 à n.

Commençons par introduire quelques définitions et propriétés de base qui nous serviront pour la suite.

1 Définitions de bases

Définition 1.1: Matrice d'adjacence

La matrice d'adjacence de G, notée $A(G) = (a_{i,j})_{1 \le i,j \le n}$ est telle que :

$$\forall (i,j) \in [1,n], a_{ij} = \delta_{\{i,j\}}(U),$$

avec δ la mesure de Dirac.

Définition 1.2: Matrice des degrés

La matrice des degrés du graphe G, notée D(G), est $diag((d(i)_{i \in [\![1,n]\!]})$ avec $d: X \to \mathbb{N}$ la fonction qui a un sommet $i \in X$ associe son degré.

Définition 1.3: Laplacien discret

Le Laplacien du graphe G est $\Delta(G) = D(G) - A(G)$

Propriété 1.1: Somme des éléments de chaque ligne

Soit Δ le Laplacien de G. Alors la somme des éléments de chaque ligne est nulle, c'est-à-dire :

$$\forall i \in [1, n], \sum_{j=1}^{n} \Delta_{i,j} = 0$$

$\underline{\text{D\'emonstration}}$:

Montrons que la somme des éléments de chaque ligne est nulle.

Fixons alors $i \in [1, n]$ correspondant à un indice de ligne quelconque. On obtient :

$$\sum_{j=1}^{n} \Delta_{i,j} = d(i) + \sum_{j \neq i,j=1}^{n} \Delta_{i,j} = d(i) - \sum_{j=1,j \neq i}^{n} \delta_{\{i,j\}}(U) = d(i) - Card(\Gamma(i)) = 0$$

En effet, le terme $\sum_{j=1,j\neq i}^{n} \delta_{\{i,j\}}(U)$ compte le nombre de sommets j tel que $\{i,j\}$ existe. D'où la propriété.

2 Rappel de quelques notions de théorie spectrale

Fixons A une matrice carrée d'ordre n, à coefficients réels.

Définition 2.1: Valeur propre d'une matrice carrée

Soit A une matrice carrée d'ordre n, à coefficients réels. Un scalaire $\lambda \in \mathbb{R}$ est appelé valeur propre de la matrice A lorsqu'il existe une matrice colonne X de taille n non nulle telle que $AX = \lambda X$.

Propriété 2.1: Caractérisation des valeurs propres

Soit $\lambda \in \mathbb{R}$. λ est valeur propre de A ssi $A - \lambda I$ est non inversible.

Démonstration :

Raisonnons par équivalences.

 $\lambda \in Sp(A)$

- $\Leftrightarrow \exists X \in \mathcal{M}_{n,1}(\mathbb{R}) \setminus \{0\} / AX = \lambda X$
- $\Leftrightarrow \exists X \in \mathcal{M}_{n,1}(\mathbb{R}) \setminus \{0\} / AX \lambda X = 0$
- $\Leftrightarrow \exists X \in \mathcal{M}_{n,1}(\mathbb{R}) \setminus \{0\}/(A \lambda I)X = 0$
- $\Leftrightarrow \exists X \in \mathcal{M}_{n,1}(\mathbb{R}) \setminus \{0\} / X \in Ker(A \lambda I)$
- $\Leftrightarrow Ker(A \lambda I) \neq \{0\}$
- $\Leftrightarrow A \lambda I$ est non inversible.

Théorème 2.1: Racines du polynôme caractéristique

Les valeurs propres d'une matrice sont exactement les racines de son polynôme caractéristique.

Définition 2.2: Ordre de multiplicité

L'ordre d'une multiplicité d'une valeur propre est son ordre de multiplicité en tant que racine du polynôme caractéristique.

Théorème 2.2: Dimension du sous-espace propre et ordre de multiplicité

Soit λ une valeur propre de A d'ordre de multiplicité $m_{\lambda} \in \mathbb{N}^*$. Alors : $1 \leq \dim(Ker(A - \lambda I)) \leq m_{\lambda} \leq n$.

Dans la suite, si λ est valeur propre, on notera m_{λ} son ordre de multiplicité.

3 Propriétés spectrales de Laplacien de graphes

Propriété 3.1

Soit $\Delta(G)$ le Laplacien du graphe G. Alors 0 est valeur propre.

<u>Démonstration</u>:

D'après la propriété 1.1, la somme des éléments de chaque ligne de $\Delta(G)$ vaut 0. Ainsi, le vecteur

composé que de 1 est vecteur propre associé à la valeur propre 0.

Ce résultat permet également d'affirmer d'après la propriété 2.1 que la matrice $\Delta(G)$ est non inversible. Ceci fournit donc une première propriété concernant le Laplacien d'un graphe simple quelconque.

Propriété 3.2

La multiplicité de 0 en tant que valeur propre de $\Delta(G)$ est supérieure ou égale au nombre de composantes connexes du graphe G.

<u>Démonstration</u>:

Soient C_1, \ldots, C_k les composantes connexes de G.

Par la propriété 3.1, $\forall i \in [1, k], 0 \in Sp(C_i)$ donc $m_0 \geq k$.

Déterminons à présent quelques propriétés spectrales pour certaines classes de graphe en particulier.

3.1 Clique d'ordre n

Définition 3.1: Clique d'ordre n

Un graphe G de n sommets est une clique d'ordre n lorsque chaque sommet est relié à tous les autres. Dans ce cas, le graphe G est noté K_n .

Démarche :

On s'intéresse d'abord à la clique d'ordre 3. Ce graphe correspond donc à un simple triangle. Chaque sommet est de degré 2 et :

$$\Delta(K_3) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

On remarque que la matrice $\Delta(K_3)-3I_3$ (où I_3 désigne la matrice identité de taille 3) est de rang 1 puisque toutes les colonnes sont égales : elle est donc non inversible. Ainsi, d'après la propriété 2.1, on déduit que 3 est valeur propre. Or, le théorème du rang nous permet de connaître la dimension du sous-espace propre associé à la valeur propre d'ordre 3 qui elle-même peut nous fournir des informations sur son ordre de multiplicité par le théorème 2.2. En effet :

$$dim(Ker(\Delta(K_3) - 3I_3)) + rg(\Delta(K_3) - 3I_3) = 3$$

Donc:

$$dim(Ker(\Delta(K_3) - 3I_3)) = 2$$

Donc d'après le théorème 2.2, en notant m_3 l'ordre de multiplicité de la valeur propre 3:

$$m_3 \geq 2$$

Donc:

$$m_3 = 2$$
 ou $m_3 = 3$

Or, d'après l'introduction faite au début du paragraphe 3, 0 est également valeur propre, donc finalement :

$$Sp(\Delta(K_3)) = \{0, 3\} \text{ et } (m_3 = 2, m_0 = 1)$$

En remarquant facilement que $Sp(\Delta(K_2)) = \{0,2\}$ et $(m_2 = 1, m_0 = 1)$, essayons de généraliser ce résultat pour une clique d'ordre quelconque : ceci fait l'objet de la propriété suivante.

Propriété 3.3: Spectre du Laplacien d'une clique

$$\forall n \in \mathbb{N}, Sp(\Delta(K_n)) = \{0, n\} \text{ avec } m_0 = 1 \text{ et } m_n = n - 1.$$

<u>Démonstration</u>:

Soit $n \in \mathbb{N}$. Considérons la clique d'ordre n.

La matrice $\Delta(K_n) - nI_n$ n'est composée que de '-1',

donc $rg(\Delta(K_n) - nI_n) = 1$ et donc $n \in Sp(\Delta(K_n))$.

Or, d'après le théorème du rang, $n = dim(Ker(\Delta(K_n) - nI_n)) + rg(\Delta(K_n) - nI_n)$,

donc on peut déduire que $dim(Ker(\Delta(K_n) - nI_n)) = n - 1$,

donc l'ordre de multiplicité m_n vérifie $m_n \ge n-1$.

Mais d'après l'introduction de ce paragraphe, $0 \in Sp(\Delta(K_n))$ et $m_0 \ge 1$.

Or, le polynôme caractéristique de $\Delta(K_n)$ est de degré n donc nécessairement $m_n = n - 1$ et $m_0 = 1$.

Conclusion: $Sp(\Delta(K_n)) = \{0, n\}$ avec $m_0 = 1$ et $m_n = n - 1$.

3.2 Etoile d'ordre *n*

Définition 3.2: Etoile d'ordre n

Un graphe G de n sommets est une étoile d'ordre n lorsqu'un unique sommet est relié à tous les autres et qu'il n'y a pas d'autres arêtes. Dans ce cas, le graphe G est noté E_n .

Démarche pour déterminer le Laplacien de l'étoile :

Soit E_n l'étoile d'ordre n. On considère, sans perte de généralité, que le centre (unique sommet relié aux autres) de l'étoile est d'indice 1.

Ainsi, on a les matrices de degrés et d'adjacence suivantes :

$$D = \begin{pmatrix} n-1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} \text{ et } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & & & \\ \vdots & & 0 & \\ 1 & & & \end{pmatrix}$$

On déduit donc le Laplacien suivant :

$$\Delta = D - A = \begin{pmatrix} n - 1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -1 & 0 & & 1 \end{pmatrix}$$

Propriété 3.4: Spectre du Laplacien d'une étoile

 $\forall n \in \mathbb{N}, Sp(\Delta(E_n)) = \{0, 1, n\} \text{ avec } m_0 = 1, m_1 = n - 2 \text{ et } m_n = 1.$

Démonstration :

Soit $n \in \mathbb{N}$. Considérons l'étoile d'ordre n notée E_n . D'après l'introduction de ce paragraphe, $0 \in Sp(\Delta(E_n))$ et $m_0 \ge 1$. On remarque d'une part que la matrice suivante est non inversible.

$$\Delta(E_n) - nI_n = \begin{pmatrix} -1 & -1 & \dots & -1 \\ -1 & 1 - n & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -1 & 0 & & 1 - n \end{pmatrix}$$

En effet, on peut exprimer la première colonne comme combinaison linéaires de toutes les autres :

$$\begin{pmatrix} -1 \\ \vdots \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=2}^{n} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \underbrace{1-n}_{\text{(i-ème ligne)}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Donc $m_n \geq 1$.

On remarque d'autre part que la matrice $\Delta(E_n) - I_n$ n'est pas inversible car il y a (n-1) colonnes identiques, donc $rg(\Delta(E_n) - I_n) = 2$, donc $dim(Ker(\Delta(E_n) - I_n)) = n - 2$ d'après le théorème du rang. Ainsi, 1 est valeur propre et $m_1 \geq n - 2$. Or, le polynôme caractéristique de $\Delta(K_n)$ est de degré n donc nécessairement $m_0 = 1$, $m_1 = n - 2$ et $m_n = 1$.

Conclusion:
$$Sp(\Delta(E_n)) = \{0, 1, n\}$$
 avec $m_0 = 1, m_1 = n - 2$ et $m_n = 1$.

3.3 Matrice circulante d'ordre n

L'intérêt de ce paragraphe est de présenter les matrices circulantes qui nous seront utiles pour étudier les cycles. Commençons par énoncer la définition d'une matrice circulante d'ordre n pour ensuite établir quelques propriétés spectrales.

Définition 3.3: Matrice circulante d'ordre n

Une matrice C de taille n est dite **circulante** lorsque C s'écrit sous la forme :

$$C = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ a_n & a_1 & \dots & a_{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_2 & a_3 & \dots & a_1 \end{pmatrix}$$

où $a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{C}$. On note cette matrice $C(a_1, \ldots, a_n)$.

Visuellement, c'est donc une matrice carrée pour laquelle le passage d'une ligne à la suivante se fait par décalage à droite des coefficients.

Propriété 3.5

Soit $J_n = C(0, 1, 0, \dots, 0)$.

Alors J_n est inversible d'inverse J_n^{n-1} et X^n-1 est un polynôme annulateur de J_n .

Démonstration :

Calculons J_n^2 .

$$J_n^2 = C(0, 1, 0, \dots, 0)^2 = C(0, 0, 1, 0, \dots, 0)$$

Par récurrence, on trouve que chaque multiplication par J_n « décale les diagonales » vers la droite, donc :

$$J_n^n = C(1, 0, \cdots, 0) = I_n$$

<u>Conclusion</u>: d'après la relation précédente, on a d'une part $J_n \times J_n^{n-1} = I_n$ (ce qui prouve que J_n est bien inversible), et d'autre part $J_n^n - I_n = 0$, ce qui montre que le polynôme $X^n - 1$ est annulateur de J.

Propriété 3.6

 J_n est diagonalisable et ses valeurs propres sont les racines n-ièmes de l'unité définies

$$\forall k \in [0, n-1], \omega_k = e^{2ik\pi/n}$$

Démonstration:

Le polynôme annulateur X^n-1 est scindé et à racines simples dans \mathbb{C} , puisqu'en effet, ses racines sont les racines n-ième de l'unité :

$$X^{n} - 1 = \prod_{k=0}^{n-1} (X - \omega_{k})$$

Donc J_n est \mathbb{C} -diagonalisable.

Montrons maintenant que $X^n - 1$ est le polynôme minimal de J_n .

Soit alors μ le polynôme minimal de J_n .

Montrons que $\mu |X^n - 1|$ et $X^n - 1|\mu$.

(i) D'une part, le polynôme minimal divise tout polynôme annulateur, d'où $\mu | X^n - 1$.

(ii) D'autre part, effectuons la division euclidienne de μ par $X^n - 1$.

Il existe alors $Q, R \in \mathbb{C}[X]$ tels que $\mu = Q(X^n - 1) + R$ et $\deg(R) < n$.

Or, $\mu(J_n) = 0$

Donc:
$$[Q(X^n - 1) + R](J_n) = Q(J_n) \times \underbrace{(J_n^n - I_n)}_{0} + R(J_n) = 0$$

Donc : $R(J_n) = 0$.

Or, R est de degré strictement plus petit que n. Posons alors $R = \sum_{k=0}^{n-1} r_k X^k$. Donc : $\sum_{k=0}^{n-1} r_k J_n^k = r_0 I_n + r_1 C(0, 1, 0, \dots, 0) + \dots + r_{n-1} C(0, \dots, 0, 1) = C(r_0, \dots, r_{n-1}) = 0$

Donc: $\forall k \in [0, n-1], r_k = 0$

Donc : R = 0

Donc : $X^n - 1|\mu$.

Ainsi, comme $\mu | X^n - 1$ et $X^n - 1 | \mu$, alors $X^n - 1$ et μ sont associés, ie : $\exists \lambda \in \mathbb{C}^* \mid \mu = \lambda (X^n - 1)$.

Mais le polynôme minimal est unitaire, donc nécessairement $\lambda = 1$. On a alors : $\mu = X^n - 1$.

Or, les racines de μ sont les valeurs propres de J_n , c'est à dire :

$$Sp(J_n) = \left\{ \omega_k = e^{2ik\pi/n} \mid k \in [0, n-1] \right\}$$

Propriété 3.7

Soit $a_1, ..., a_n \in \mathbb{C}$. Alors le polynôme

$$P = \sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} X^k$$

évalué en la matrice $J_n = C(0, 1, 0, ..., 0)$ vaut $C(a_1, a_2, ..., a_n)$.

Démonstration:

On a:

$$P(J_n) = \left(\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} X^k\right) (J_n) = \sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} J_n^k$$

Or:

$$\forall k \in [0, n-1], J_n^k = C(0, 1, \dots, 0)^k = C(0, \dots, 1, 0, \dots, 0) =: C_k$$

où le chiffre 1 se situe à la (k+1)-ième position. Ainsi, en reprenant l'égalité précédente, on a :

$$\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} J_n^k = \sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} C_k = a_1 C(1, 0, \dots, 0) + \dots + a_n C(0, \dots, 1) = C(a_1, \dots, a_n)$$

 $\underline{\text{Conclusion}}: P(J_n) = C(a_1, \cdots, a_n).$

Remarque : cette propriété est intéressante puisqu'elle permet de faire le lien entre une matrice circulante quelconque et la matrice J_n dont on connait ses valeurs propres.

Notation: pour toute la suite, pour une matrice circulante quelconque $C(a_1, \dots, a_n)$, on note $\Phi_{C(a_1, \dots, a_n)}$ le polynome $\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} X^k$.

Propriété 3.8: Valeurs propres d'une matrice circulante

Soit C une matrice circulante.

Alors C est diagonalisable et $Sp(C) = \{\Phi_C(\omega_k), k \in [0, n-1]\}.$

Démonstration:

D'après la propriété précédente : $C = \Phi_C(J_n)$

Or : d'après la propriété 3.7, J_n est diagonalisable et $Sp(J_n) = \{\omega_k = e^{2ik\pi/n} \mid k \in [0, n-1]\}$ Donc : il existe une matrice de passage P telle que $J_n = P \times \underbrace{diag((\omega_k)_{k \in [0,n-1]})}_{D} \times P^{-1}$. Ainsi :

$$\Phi_C(J_n) = \Phi_C(PDP^{-1}) = \left(\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} X^k\right) (PDP^{-1}) = \left(\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} \underbrace{(PDP^{-1})^k}_{PD^k P^{-1}}\right)$$

Faisons maintenant apparaître le polynôme Φ_C évalué en D. On reprend :

$$\left(\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} \underbrace{(PDP^{-1})^k}_{PD^k P^{-1}}\right) = P\underbrace{\left(\sum_{k=0}^{n-1} a_{k+1} D^k\right)}_{\Phi_C(D)} P^{-1}$$

D'où : $C = P\Phi_C(D)P^{-1} = P \times diag((\Phi_C(\omega_k))_{k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket}) \times P^{-1}$

Conclusion: C est diagonalisable et $Sp(C) = \{\Phi_C(\omega_k), k \in [0, n-1]\}.$

3.4 Cycle d'ordre n

Définition 3.4: Cycle d'ordre n

Un graphe G de n sommets est un cycle d'ordre n (noté C_n) lorsque G est constitué d'un unique cycle de longueur n.

Pour rappel, un cycle est une chaîne dont les deux extrémités sont identiques.

<u>Démarche</u> : Remarquons pour commencer que lorsqu'on parle de cycle, le nombre de sommets doit être supérieur ou égal à 3.

- Cas n=3: on remarque que $C_3=K_3$, donc en reprenant les résultats précédents, on a :

$$Sp(\Delta(C_3)) = Sp(\Delta(K_3)) = \{0, 3\}$$

- Cas n=4 : après avoir déterminé la matrice d'adjacence et la matrice des degrés, on détermine le Laplacien comme suit :

$$\Delta(C_4) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Essayons de déterminer des valeurs propres à l'aide de la propriété 2.1. En calculant la matrice $\Delta(C_4) - 2I_4$, on voit que la première et la troisième colonne sont égales :

$$\Delta(C_4) - 2I_4 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Donc $\Delta(C_4) - 2I_4$ est non inversible, c'est à dire $2 \in Sp(\Delta(C_4))$. De plus :

$$\Delta(C_4) - 4I_4 = \begin{pmatrix} -2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & -2 \end{pmatrix}$$

et on remarque que $Colonne_1 = Colonne_2 - Colonne_3 + Colonne_4$ donc il existe une colonne qui est combinaison linéaire d'autres. Ainsi, $\Delta(C_4) - 4I_4$ est non inversible, c'est à dire $4 \in Sp(\Delta(C_4))$. On sait également que $0 \in Sp(\Delta(C_4))$.

Considérons maintenant le polynôme caractéristique de $\Delta(C_4)$, noté $\chi_{\Delta(C_4)}$. Comme tout polynôme est scindé dans \mathbb{C} , c'est en particulier le cas pour $\chi_{\Delta(C_4)}$, donc $\Delta(C_4)$ admet exactement n valeurs propres comptées avec multiplicité et leur somme vaut la trace de $\Delta(C_4)$ (*). Or, à ce stade, on sait que $\{0, 2, 4\} \in Sp(\Delta(C_4))$. Notons λ la valeur propre manquante. (*) nous donne :

$$0+2+4+\lambda=tr(\Delta(C_4))=8$$
 d'où $\lambda=2$

Conclusion : $Sp(\Delta(C_4)) = \{0, 2, 4\}$ avec 2 d'ordre de multiplicité 2.

Pour pouvoir déterminer le spectre du Laplacien d'un cycle d'ordre quelconque, utilisons le fait que les matrices circulantes sont diagonalisables. Ceci permettra de faciliter grandement la généralisation.

Propriété 3.9: Spectre du Laplacien d'un cycle

$$\forall n \in \mathbb{N}^* \setminus \{1, 2\}, \, Sp(\Delta(C_n)) = \left\{2 - 2\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right), k \in [0, n - 1]\right\}.$$

Démonstration :

Commençons par déterminer la matrice des degrés et la matrice d'adjacence :

$$D = \begin{pmatrix} 2 & & \\ & \ddots & \\ & & 2 \end{pmatrix} \text{ et } A = C(0, 1, 0, \dots, 1)$$

On déduit donc le Laplacien : $\Delta(C_n) = C(2, -1, 0, \dots, -1)$. Il s'agit d'une matrice circulante et d'après les propriétés précédentes, $\Delta(C_n)$ est diagonalisable et :

$$Sp(\Delta(C_n)) = \{\Phi_C(\omega_k), k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket \}$$

Déterminons une expression de chaque valeur propre. Soit $k \in [0, n-1]$. On a :

$$\Phi_{C}(\omega_{k}) = 2 \times \omega_{k}^{0} - w_{k}^{1} - w_{k}^{n-1}$$

$$= 2 - e^{\frac{i2k\pi}{n}} - e^{\frac{i2k(n-1)\pi}{n}}$$

$$= 2 - \left(e^{\frac{i2k\pi}{n}} + \frac{e^{i2k\pi}}{e^{\frac{i2k\pi}{n}}}\right)$$

$$= 2 - \left(e^{\frac{i2k\pi}{n}} + \frac{1}{e^{\frac{i2k\pi}{n}}}\right)$$

$$= 2 - \left(e^{\frac{i2k\pi}{n}} + e^{-\frac{i2k\pi}{n}}\right)$$

$$= 2 - 2\cos\left(\frac{2k\pi}{n}\right)$$

$$\underline{\text{Conclusion}}: Sp(\Delta(C_n)) = \left\{2 - 2\cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right), k \in [0, n-1]\right\}.$$

3.5 Chaîne d'ordre n

Définition 3.5: Chaîne d'ordre n

Un graphe G de n sommets est une chaîne d'ordre n si les sommets forment une chaîne. Dans ce cas, le graphe G est noté Ch_n .

Démarche:

- Cas n=2: on a

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
 et $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ donc $\Delta_2 = D - A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$

Ainsi, le polynôme caractéristique de Δ_2 est :

$$\chi_{\Delta_2} = \begin{vmatrix} X - 1 & 1 \\ 1 & X - 1 \end{vmatrix}$$

$$= (X - 1)^2 - 1 \text{ (par la règle de Sarrus)}$$

$$= X^2 - 2X$$

$$= X(X - 2)$$

Donc : $Sp(Ch_2) = \{0, 2\}.$

- Cas n=3: on a

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ et } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ donc } \Delta_3 = D - A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Ainsi, le polynôme caractéristique de Δ_3 est :

$$\chi_{\Delta_3} = \begin{vmatrix} X - 1 & 1 & 0 \\ 1 & X - 2 & 1 \\ 0 & 1 & X - 1 \end{vmatrix}$$

$$= (X - 1)^2 (X - 2) - 2(X - 1) \text{ (par la règle de Sarrus)}$$

$$= (X - 1)((X - 1)(X - 2) - 2)$$

$$= (X - 1)(X^2 - 2X - X + 2 - 2)$$

$$= (X - 1)(X^2 - 3X)$$

$$= (X - 1)X(X - 3)$$

Donc: $Sp(Ch_3) = \{0, 1, 3\}.$

- Cas n = 4:

Après calcul, on trouve : $\chi_{\Delta_4} = X(X-2)(X-2+\sqrt{2})(X-2-\sqrt{2})$ Donc : $Sp(\text{Ch}_4) = \left\{0, 2-\sqrt{2}, 2, 2+\sqrt{2}\right\}$.

Pour la généralisation, on remarque que le Laplacien d'une chaîne est assez similaire au Laplacien d'un cycle. En effet, un cycle n'est autre qu'une chaîne dont on a relié les deux extrémités. C'est pourquoi on a:

$$\Delta(Ch_n) = \Delta(C_n) - \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & & & & 0 \\ \vdots & & . & & \vdots \\ 0 & & & & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Pour la suite, admettons le résultat suivant :

Propriété 3.10: Spectre du Laplacien d'une chaîne

$$\forall n \in \mathbb{N}^* \setminus \{1, 2\}, \, Sp(\Delta(Ch_n)) = \left\{ 2 - 2\cos\left(\frac{\pi k}{n}\right) \,\middle|\, k \in \llbracket 0, n - 1 \rrbracket \right\}.$$

4 Algorithme pour calculer les valeurs propres

4.1 Méthode de la puissance

La méthode de la puissance est un algorithme permettant d'estimer la valeur propre de plus grand module et un vecteur propre associé d'une matrice A. L'idée est que, si on définit une suite $(x_n)_n$ de vecteurs de \mathbb{R}^n par la relation $x_{n+1}=Ax_n$, plus n est grand, plus le vecteur x_n va se "diriger" dans la direction des vecteurs propres associés à la plus grande des valeurs propres.

Théorème 4.1

Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ une matrice diagonalisable, $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ ses valeurs propres, et on suppose que $|\lambda_1| > \max(|\lambda_2|, \dots, |\lambda_n|)$. Soit aussi v_1 un vecteur propre associé à λ_1 . Alors, si x_0 est un vecteur non orthogonal à v_1 , et si (x_n) est définie par la relation de récurrence $x_{n+1} = Ax_n$, alors $\frac{x_n}{\|x_n\|}$ converge vers un multiple de v_1 , et de plus $\frac{\langle x_{n+1}, x_n \rangle}{\|x_n\|_2^2}$ converge vers

Si on choisit le vecteur x_0 au hasard, il a une probabilité nulle d'être orthogonal à v_1 .

4.2 Méthode de déflation

Pour déterminer les autres valeurs propres on va utiliser cette méthode.

Cette méthode permet, connaissant la valeur propre de plus grand module d'une matrice et un vecteur propre associé, de trouver la seconde valeur propre dont le module est le plus grand.

Théorème 4.2

Soit une matrice A d'ordre n dont les valeurs propres vérifient $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$. On suppose aussi que la matrice A est symétrique. La méthode de la puissance nous donne la plus grande valeur propre en module, λ_1 et un vecteur propre associé, v_1 . On pose alors

$$B = A - \frac{\lambda_1}{\|v_1\|^2} v_1 v_1^T.$$

Alors B possède pour valeurs propres $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$... et 0.

Il suffit d'appliquer à nouveau la méthode de la puissance, mais à B, pour obtenir une valeur approchée de λ_2 , et un vecteur propre associé, et ainsi de suite... On peut ainsi trouver toutes les valeurs propres de A.

4.3 Algorithme de la puissance itérée

On appelle ainsi l'algorithme qui combine ces 2 méthodes l'algorithme de la puissance itérée. La méthode de déflation va donc appeler la méthode de puissance n fois. Nous allons l'implémenter dans la prochaine sous-partie.

4.4 Implémentation en Fortran 90

4.4.1 Sous-programme : méthode de puissance

```
subroutine meth_puiss(A,n,niter,v1,vpmax)
         implicit none
        double precision, dimension(n,n) :: A
        integer :: n, niter, i
        double precision, dimension(n,1) :: v1
6
        double precision, intent(out) :: vpmax
        double precision, dimension(:,:), allocatable :: x, xbis
9
        double precision :: lambda, rand_val
10
11
        allocate(x(n,1))
12
        allocate(xbis(n,1))
13
        call random_seed()
15
16
        ! vecteur initial aleatoire
17
        do i=1,n
18
          call random_number(rand_val)
19
          x(i, 1) = rand_val
20
21
22
         ! methode de puissance
23
        do i=1,niter
           xbis = matmul(A,x)
25
           lambda=norm2(xbis)
26
27
           ! eviter le vecteur propre NaN en prenant le dernier plus proche donc x_
28
      \{i-1\}
           if (lambda == 0.d0) then
29
             exit
30
31
           endif
32
33
          x=xbis/lambda
         enddo
```

4.4.2 Programme principal : méthode de déflation

```
program meth_defl
         implicit none
3
4
         integer, parameter:: niter=250
5
6
        integer :: n, i
7
         double precision :: vpmax
         double precision, dimension(:,:), allocatable :: A, v1
8
        read(*,*) n
10
11
        allocate(A(n,n))
12
        allocate(v1(n,1))
13
14
        ! lecture de la matrice
15
        do i=1, n
16
          read(*,*) A(i,:)
17
        enddo
18
19
        ! methode de deflation
20
21
        do i=1, n
          call meth_puiss(A,n,niter,v1,vpmax)
22
23
           write(*,*) "val propre:", vpmax, "; vec propre:", v1
24
25
           A = A - (vpmax/(norm2(v1)**2))*matmul(v1,transpose(v1))
26
         enddo
27
28
         end
29
```

4.4.3 Makefile

```
1 FC=gfortran
2 OPT=-g
3
4 #-----executables------
5 main : meth_puiss.o meth_defl.o
6 $(FC) $(OPT) meth_puiss.o meth_defl.o -o main
7
8 #-----objets------
9 meth_puiss.o : meth_puiss.f
10 $(FC) $(OPT) meth_puiss.f -c
11
12 meth_defl.o : meth_defl.f
13 $(FC) $(OPT) meth_defl.f -c
14
15 clean:
16 rm -f *.o main
```

Pour exécuter le code il suffit de taper dans la console : make clean && make main && ./main < matrix.txt

4.5 Résultats numériques

Nous avons testé cet algorithme pour des laplaciens de chaînes de tailles différentes :

Chaîne d'ordre 2

Entrée:

```
1 2
2 1 -1
3 -1 1
```

Sortie:

Chaîne d'ordre 3

Entrée:

```
1 3
2 1 -1 0
3 -1 2 -1
4 0 -1 1
```

Sortie:

Chaîne d'ordre 4

Entrée:

```
1 4
2 1 -1 0 0
3 -1 2 -1 0
4 0 -1 2 -1
5 0 0 -1 1
```

Sortie:

<u>Conclusion</u>: Bien que cet algorithme soit simple, ses défauts sont que sa convergence est très lente (augmenter le nombre d'itérations ne va pas complètement changer les valeurs de sortie) et que les vecteurs propres restent relativement approximatifs.

5 Conclusion

En conclusion, ce projet nous a permis d'étudier quelques propriétés des Laplaciens de graphe et d'approfondir nos connaissances au sujet de la théorie spectrale. Comme le Laplacien d'un graphe correspond à une discrétisation de l'opérateur Laplacien, on peut lui trouver une multitude d'applications dans le domaine de la physique. Ainsi, dans le cas d'un Laplacien de graphe diagonalisable, il suffit de trouver une base dans laquelle il est diagonal afin de faciliter la résolution d'équations.