Éléments de la théorie spectrale des graphes

N. Lygeros, R. Philippe, I. Pitault, D. Schweich, M.-L. Zanota

La théorie spectrale des graphes permet de voir les structures à travers l'algèbre linéaire. Ainsi la recherche de celles-ci se ramène à celles d'invariants topologiques qui sont universels dans le sens où ils sont en relation avec le polynôme caractéristique. Cependant ce dernier dépend de la manière de coder matriciellement le graphe. Il est classique de considérer la matrice d'adjacence mais il est aussi possible d'étudier la matrice laplacienne qui correspond à $L = D - A$ où D est la matrice diagonale des degrés et A la matrice d'adjacence. Une autre variante consiste à prendre la matrice laplacienne, sans signe, à savoir $Q = D + A$. Une autre matrice encore plus discriminante que les autres, en termes de structures, c'est la matrice laplacienne normalisée. Celle-ci est définie de la façon suivante.

$$L = I - D^{-1/2} M D^{-1/2}$$

où M est une matrice symétrique non négative, avec des sommes des termes des lignes, qui soient positives et D est la matrice diagonale formée par ces sommes. En d'autres termes, si M est une matrice d'adjacence, alors D représente la matrice diagonale des degrés. À l'aide de ces différentes matrices, qui codent le graphe bi-univoquement, il est possible de discriminer structurellement les graphes, ce qui permet, en autres, de résoudre partiellement le problème d'isomorphie des graphes. Néanmoins, il existe deux graphes qui ne sont pas isomorphes et qui ont pourtant le même spectre. L'important c'est de réaliser le fait que le rapport entre ces graphes et les graphes dans leur ensemble doit être très petit. Sinon ce point de vue n'aurait pas d'intérêt ni mathématique, ni informatique au sens de l'énumération. Les études effectuées sur des graphes de petite taille montrent que c'est bien le cas. À ce niveau, il est important de constater que les différentes matrices considérées n'ont pas le même degré de discrimination sur les graphes.

En effet, l'étude de Haemers et Spence sur l'énumération des graphes cospectraux et celle de Wilson et Zhu sur le graphe du spectre pour les graphes de comparabilité, montrent qu'à partir d'un nombre de sommets, supérieur ou égal à 9, la matrice d'adjacence est la moins discriminante, ensuite vient la matrice laplacienne, puis la laplacienne sans signe et enfin la laplacienne normalisée. Dans ce sens, il est possible de combiner toutes ces approches pour obtenir un critère encore plus discriminant. Cela a permis aux deux derniers auteurs de montrer qu'il existe 10.096 graphes cospectraux de taille 10. Il est intéressant et remarquable de noter que ce résultat peut être obtenu directement avec la matrice de poids définie de la manière suivante :

$$W_{ij} = \begin{cases} d_i & i = j \\ -\, 1/d_i d_j & i \neq j \ \ (i, j) \in E \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où E est l'ensemble des arêtes du graphe.

Si nous restons strictement au sein de la théorie des graphes, le problème véritable de non résolution de l'isomorphie via ce type de méthode n'apparaît qu'avec les graphes fortement réguliers où cette fois ce sont des approches provenant du formalisme de la mécanique quantique qui donnent une solution satisfaisante. Cela montre indirectement l'efficacité d'une approche via le spectre pour l'analyse des éponges puisque celles-ci n'ont jamais le même degré pour l'ensemble de leurs sommets aussi elles n'appartiennent pas à la catégorie des graphes réguliers. Une autre manière de mettre en évidence cette disparité provient de notre étude directe des éponges. En effet, non seulement le polynôme caractéristique n'a pas de racines de multiplicité très élevée, mais dans les faits, nous obtenons des valeurs propres de multiplicité un. Ce fait démontre clairement la différence, aussi cette approche est une voie à poursuivre pour comprendre leur nature profonde structurellement parlant.