Cours de l'institut Fourier

Yves Colin de Verdière

Introduction

Cours de l'institut Fourier, tome 22 (1993-1994), p. 5-10
<http://www.numdam.org/item?id=CIF_1993-1994__22__5_0>

INTRODUCTION

1. SPECTRE D'UN GRAPHE. —

Si $\Gamma = (V, E)$ est un graphe fini (la plupart du temps Γ sera supposé simple, connexe et sans boucles), un opérateur subordonné au graphe (ou opérateur de Schrödinger sur Γ) est un opérateur linéaire symétrique réel $A : \mathbf{R}^V \to \mathbf{R}^V$ de matrice $A = (a_{i,j})$ telle que:

$$a_{i,j} \begin{cases} < 0, & \text{si } (i,j) \in E; \\ = 0, & \text{si } (i,j) \notin E \text{ et } i \neq j. \end{cases}$$

On notera O_Γ l'ensemble de ces opérateurs.

Quelques mots de justification: on a envie de généraliser au cas d'un graphe la notion d'*opérateur différentiel elliptique autoadjoint positif.*

Un *opérateur différentiel* est un endomorphisme A de $\mathbf{C}^V$ qui est *local*:

$$Af(i) = W_i f(i) + \sum_{j \sim i} a_{i,j} f(j) \ .$$

L'*ellipticité* se traduit par la non nullité des $a_{i,j}$.

Pour ce qui est du caractère *autoadjoint*, on se donne une structure Hilbertienne sur $\mathbf{C}^V$, qui consiste à identifier $\mathbf{C}^V$ avec $l^2(V, \pi_o)$ où π_o est la mesure qui donne la masse 1 à chaque sommet. Si on part d'une autre mesure $\pi = \sum_{j \in V} \pi_j \delta(j)$ avec $\pi_j > 0$, un changement de jauge convenable

$$f \to g \text{ avec } g(j) = \alpha_j f(j)$$

est unitaire de $l^2(\pi_o)$ sur $l^2(\pi)$ et préserve la notion d'opérateur différentiel et l'ellipticité. On choisira de définir le caractère auto-adjoint par rapport à π_o. Bien sûr, d'autre choix peuvent être naturels par exemple pour les chaines de Markov réversibles.

La *positivité* se traduit par la fait que les $a_{i,j}$ sont < 0 pour toutes les arêtes.

Plusieurs variantes sont possibles, en particulier, on peut oublier le caractère réel de la matrice et s'intéresser à l'ensemble de tous les opérateurs elliptiques auto-adjoints. On notera cet ensemble M_Γ. Un tel opérateur sera vu comme un *opérateur de Schrödinger avec champ magnétique discret.*

On aura aussi besoin de considérer des opérateurs sur des *fibrés vectoriels*: un tel fibré est la donnée d'une collection d'espaces vectoriels indexée par les sommets et qui sont tous isomorphes. On peut étendre la notion d'opérateur elliptique auto-adjoint à ce cadre.

Enfin, il sera souvent intéressant de considérer des graphes infinis, localement finis.

Quelques cas particuliers:

a) si $a_{i,j} = -1$ lorsque $(i,j) \in E$ et 0 sinon, A est alors l'opposée de la *matrice d'adjacence du graphe* notée M_Γ.

b) Si $\Delta_\Gamma = D - M_\Gamma$ où D est la matrice diagonale dont le coefficient $a_{i,i}$ est égal au degré (valence) de i, on dira que Δ_Γ est le *laplacien canonique* ou *laplacien combinatoire* sur le graphe. La forme quadratique associée est $\sum_{(i,j)\in E}(x_i - x_j)^2$. Lorsque le degré est constant égal à d, on a évidemment:

$$\Delta_\Gamma = d\mathrm{Id} - M_\Gamma \ .$$

c) Si les sommes $\sum_j a_{i,j}$ sont toutes nulles, les vecteurs constants sont dans le noyau de A, on dira que A est un *laplacien.*

On s'intéresse maintenant au spectre de $A \in O_\Gamma$. On verra que, si Γ est connexe, les valeurs propres (répétées avec multiplicité) vérifient:

$$\lambda_1 < \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_{\#V} \ .$$

En particulier, on étudiera le *trou spectral* ou *gap* défini par $g(A) = \lambda_2 - \lambda_1$ et aussi la multiplicité de λ_2.

Remarque: (je dois cette remarque à Pierre de la Harpe).

C'est à Lagrange ([LA] p.72 à 79) que l'on doit le premier calcul général de spectre de graphe: celui du laplacien standard du graphe linéaire à m sommets, il est conduit à ce problème par discrétisation des équations de propagation du son.

2. EXEMPLES DE SPECTRES DE GRAPHES. —

Ces opérateurs et leurs spectres interviennent dans de nombreux problèmes:

Exemple 1: petites oscillations de pendules couplés.

On considère une famille de pendules de masses m_i à un degré de liberté (les sommets de Γ) dont certains sont reliés par des ressorts (les arêtes de Γ). On se place près de la position d'équilibre et on prend des coordonnées x_i mesurant l'éloignement du i-ème pendule par rapport à sa position d'équilibre.

L'énergie cinétique est alors:

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i\in V} m_i (\frac{dx_i}{dt})^2 \ ,$$

alors que l'énergie potentielle due aux ressorts est

$$V = \frac{1}{2}c_{i,j}(x_i - x_j)^2 \ ,$$

où les $c_{i,j}$ sont > 0. Si M est la matrice diagonale des m_i et $C(x) = (\frac{\partial V}{\partial x_i})$, les équations des oscillations s'écrivent:

$$M\frac{d^2x}{dt^2} = -C(x) \ ,$$

et donc les oscillations quasi-périodiques du système de pendules sont superpositions d'oscillations périodiques de fréquences ω_i telles que les $\lambda_i = \omega_i^2$ soient les valeurs propres de la matrice $A = M^{-1/2}CM^{-1/2}$ qui est subordonnée au graphe Γ.

Exemple 2: discrétisation d'un problème de Dirichlet par la méthode des éléments finis.

Pour ceci, voir [CI].

Considérons le problème de Dirichlet dans un domaine borné D à frontière lisse de $\mathbf{R}^2$. Soit T une triangulation de D par des triangles géodésiques, Γ le 1-squelette de T, V_o l'ensemble des sommets de Γ qui sont sur le bord.

Soit F_T l'espace vectoriel des fonctions sur D qui sont continues et affines sur chaque triangle de T. Cet espace est isomorphe à $\mathbf{R}^V$ car une telle fonction est donnée par sa valeur aux sommets de T. Considérons la forme quadratique q sur F_T définie par

$$q(\varphi) = \int_T \|d\varphi\|^2 \ ,$$

appellée intégrale de Dirichlet. Alors, on a, si $\varphi(i) = x_i$:

$$q(\varphi) = \frac{1}{2} \sum_{(i,j)\in E} c_{i,j}(x_i - x_j)^2 \ ,$$

avec $c_{i,j} = \frac{1}{\tan\alpha} + \frac{1}{\tan\beta}$ où α et β sont les 2 angles sous lesquels on voit le côté (i,j) depuis les sommets $\neq i,j$ des 2 triangles adjacents à (i,j). Si donc $\alpha + \beta < \pi$, la matrice de q est subordonnée à Γ. C'est le cas si on choisit T ayant tous ses triangles à angles aigus.

Pour approximer la solution du problème de Dirichlet dans D avec donnée au bord f, on commence par discrétiser f en ne conservant que sa valeur sur les sommets de V_o, puis on minimise $q_T(\varphi)$ avec $\varphi = f$ sur V_o. On obtient ainsi φ qui est harmonique pour l'opérateur A associé à q.

Exemple 3: effet tunnel semi-classique.

Pour plus de détails, voir [CV3].

Soit $H = -h^2\Delta + V$ l'opérateur de Schrödinger dans $\mathbf{R}^2$ et on suppose $V \geq 0$ et $\liminf_{x\to\infty} V(x) = E_o > 0$. Supposons que $V^{-1}(0) = \{A_1, \cdots, A_N\}$ (les A_i s'appellent les puits de potentiel) et que $V''(A_i) > 0$. Supposons en outre que, près de A_i, on ait:

$$V(x,y) = (x-a_i)^2 + (y-b_i)^2 + O(\|x - A_i\|^3) \ .$$

Alors, H admet, pour h assez petit des valeurs propres $0 < \lambda_1 < \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_N < \lambda_{N+1} \leq \cdots < E_o$ et on veut évaluer le comportement asymptotique précis des λ_i lorsque h tend vers 0. Soit F_N l'espace engendrés par les N premières fonctions propres. F_N admet une base orthonormée (φ_i) de fonctions localisées près de A_i:

$$\varphi_i(x) \sim \frac{1}{\pi h} e^{-\frac{\|x-A_i\|^2}{2h}} \ ,$$

et on peut exprimer la matrice de H dans cette base. Les coefficients non diagonaux $h_{i,j}$ sont de la forme

$$h_{i,j} \sim a_{i,j} e^{-\frac{S_{i,j}}{h}}$$

où $a_{i,j} < 0$ et $S_{i,j}$ est la distance de A_i à A_j pour la métrique *d'Agmon*

$$d\sigma^2 = V(x,y)(dx^2 + dy^2) ;$$

notons que cette métrique est une métrique riemannienne qui n'a de singularités qu'aux points A_i. Ses géodésiques sont donc lisses en dehors des A_i.

En particulier, si $S_o = \inf S_{i,j}$, seuls les (i,j) tels que $S_{i,j} = S_o$ contribuent réellement à la partie non diagonale. Le *graphe d'Agmon* Γ est le graphe dont les sommets sont les A_i et les arêtes les couples (i,j) tels que $S_{i,j} = S_o$. Alors la matrice de H restreinte à F_N dans la base des (φ_i) est essentiellement subordonnée au graphe d'Agmon. La remarque essentielle est alors que le graphe d'Agmon est plongé dans $\mathbf{R}^2$ en prenant pour arêtes (i,j) une géodésique minimisante de A_i à A_j.

La preuve est très simple: si les géodésiques de longueur S_o de A_1 à A_3 et de A_2 à A_4 se coupent en B, il existe un trajet de A_i à A_{i+1} (pour un $i \in \{1,2,3,4\}$) passant par B et suivant des arcs des géodésiques précédentes de longueur $\leq S_o$. Ce chemin a un point anguleux en B et on peut donc le déformer en un chemin de longueur $< S_o$. Cela contredit la minimalité de S_o.

Exemple 4: petites valeurs propres des surfaces de Riemann compactes à courbure constante -1.

Pour ceci, voir l'article [C-C].

On considère une surface de Riemann compacte de genre g fixé muni d'une métrique à courbure -1.

Supposons que l'on fasse dégénérer la métrique de façon que la longueur de certaines géodésiques fermées simples γ_i tende vers 0.

On associe à cette situation le graphe suivant: les sommets sont les composantes connexes du complémentaire de la réunion des γ_i et les arêtes sont en bijection avec les γ_i et joignent les 2 régions qui leur sont contigües.

Les valeurs propres du laplacien sur la surface qui dégénère sont alors contrôlées avec une grande précision par les valeurs propres d'un laplacien sur le graphe précédent.

Exemple 5: chaines de Markov réversibles.

Voir par exemple [F-Y].

Soit $X_n(\omega)$ une chaine de Markov sur Γ; c'est à dire que $n \to X_n(\omega)$ est une promenade aléatoire sur V telle que la probabilité de transition $p(X_{n+1} = j | X_n = i) = p_{i,j}$ est donnée avec:

$$\sum_j p_{i,j} = 1,\ p_{i,j} > 0 \Leftrightarrow (i,j) \in E .$$

Soit μ_n la mesure de répartition de X_n:

$$\mu_n(\{i\}) = p(X_n(\omega) = i) .$$

Alors, si $P = (p_{i,j})$, on a $\mu_{n+1} = {}^t P\mu_n$. On dit que la chaine est *irréductible* s'il existe une puissance de P à coefficients tous > 0. Dans ce cas, comme P admet la valeur propre

1 de multiplicité 1, il en est de même de ${}^tP$. ${}^tP$ admet un unique vecteur propre μ_∞ qui soit une probabilité partout > 0 sur V: c'est la *mesure stationnaire* de la chaine. Il est important pratiquement de déterminer la vitesse de convergence de μ_n vers μ_∞.

Maintenant, on dit que $X_n(\omega)$ est *réversible* s'il existe $p_i > 0, \sum p_i = 1$ tel que $\forall (i,j) \in E,\ p_i p_{i,j} = p_j p_{j,i}$. Alors $\mu_\infty = (p_i)$ et l'opérateur $P : \mathbf{R}^V \to \mathbf{R}^V$ est symétrique par rapport au produit scalaire de matrice $diag(p_i)$. Toute chaine réversible est irréductible (Γ est connexe), mais la réciproque est fausse. En particulier, les valeurs propres

$$\lambda_1 = 0 < \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_N$$

de $Id - P$ sont celles d'une matrice de O_Γ. Le *trou spectral* ou *gap* $\lambda_2 - \lambda_1 = \lambda_2$ mesure alors la vitesse de convergence de la chaine vers sa distribution stationnaire.

Exemple 6: méthode de Hückel en chimie organique.

Voir [C-O-M], [C-S]. Hückel a introduit le spectre de la matrice d'adjacence de certains graphes dans l'étude de la stabilité du benzène et d'autres molécules aromatiques.

On s'intéresse à une molécule formée de N atomes (par exemple de carbone) organisés suivant la combinatoire d'un graphe Γ à N sommets. Ces atomes partagent les électrons de la couche superficielle supposés en nombre égal à N: en première approximation, on considère ces électrons comme indépendants. Comme les électrons sont des fermions si on connait le spectre $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \cdots$ de l'opérateur de Schrödinger pour un électron, le fondamental de la molécule est donné par la somme $\lambda'_1 + \cdots + \lambda'_N$ où le spectre des λ'_i est obtenu en répétant le spectre des λ_j 2 fois (on tient ainsi compte du fait qu'il y a 2 possibilités pour le spin de chaque électron): en fait, on a un opérateur sur $(\mathcal{H} \oplus \mathcal{H})^{\wedge N}$ où $\mathcal{H}$ est l'espace de Hilbert pour un électron sans spin.

Maintenant, Hückel assimile l'opérateur de Schrödinger pour un électron à $NId - M_\Gamma$ et son critère de stabilité est que le fondamental soit < 0.

Conclusion:

Récemment, le spectre de ces opérateurs a été beaucoup étudié et en particulier le parallèle avec le cas du laplacien riemannien s'est avéré très fructueux dans les 2 sens.

En fait, on s'intéresse soit à des familles de graphes dont le nombre de sommets tend vers l'infini, soit à la famille de tous les opérateurs possibles sur un graphe donné.

3. TROU SPECTRAL D'UN GRAPHE ET EXPANSION. —

Un graphe Γ sera dit un (k,c)-expanseur ($k \geq 2$, $c > 0$) si $\forall A \subset V$ tel que $|A| \leq |V|/2$, on a

$$\forall i \in V,\ \text{degré}\ (i) \leq k \text{ et } |\partial A| \geq c|A| ,$$

où ∂A est l'ensemble des sommets de Γ non dans A, mais joints par une arête à un sommet de A.

Dans les problèmes de réseau, il est intéressant d'avoir des valeurs de c assez grandes tout en bornant k. En effet sur un tel réseau l'information se propage vite (exercice:

montrer que le diamètre d'un (k, c)-expanseur est majoré par $1 + \frac{1}{\operatorname{Log} c} \operatorname{Log}(|V|/2)$ alors que le diamètre d'un graphe de degré $\leq k$ est minoré par $\operatorname{Log}|V|/\operatorname{Log} k$).

Il se trouve que la constante c peut être relié au *trou spectral* du laplacien ($=\lambda_2 - \lambda_1$).

Donc obtenir c grand ou le trou spectral grand sont des problèmes voisins.

Une façon de le faire est de considérer des graphes de Cayley de groupes de type fini et d'en prendre des quotients finis. Les bons groupes sont ceux qui ont la propriété (T) de Kazhdan.

D'autre part, si le graphe est homogène de degré $q+1$, il y a une limite naturelle infranchissable lorsque le nombre de sommets tend vers l'infini: la limsup du trou spectral est alors $\leq a_q = q + 1 - 2\sqrt{q}$. Un graphe homogène de degré $q+1$ dont le gap est $\geq a_q$ sera dit de *Ramanujan*. En effet de tels graphes peuvent être obtenus par des constructions arithmétiques et le fait qu'ils ont le trou spectral voulu est alors conséquence de conjectures de Ramanujan.

4. MULTIPLICITES DES VALEURS PROPRES ET PLONGEMENTS DE GRAPHES. —

Maintenant, le graphe est fixé et on s'intéresse aux spectres possibles pour une matrice de O_Γ. La théorie des perturbations des valeurs propres multiples permet d'introduire dans ce problème une condition de transversalité naturelle ([vN-W], [AR]).

On relie le problème de construire un spectre prescrit au problème classique du plongement d'un graphe dans une surface.

En particulier, on construit un invariant à valeurs entières des graphes finis $\mu(\Gamma)$ qui a la propriété d'être monotone pour la relation des mineurs et par suite de détecter la planarité.

Le cas des champs magnétiques donne lieu à un autre invariant associé à la multiplicité du fondamental, $\nu(\Gamma)$ qui s'avère être relié à la largeur d'arbre du graphe.

5. AUTRES PROBLEMES. —

D'autres problèmes intéressants seront peut-être abordés ultérieurement:

–par exemple, le cas *aléatoire*. On se demande alors quel est le spectre typique pour une matrice subordonnée à un réseau infini. Ce problème est important pour la physique du solide. Voir à ce sujet [F-S], [AI-M], [PO], [SI].