

Titre: Problèmes de réalisabilité et de connexité dans les graphes
Title: chimiques

Auteur: Cherif Sellal
Author:

Date: 2017

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Sellal, C. (2017). Problèmes de réalisabilité et de connexité dans les graphes chimiques [Master's thesis, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/2679/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/2679/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Alain Hertz, & Pierre Hansen
Advisors:

Programme: Maîtrise recherche en mathématiques appliquées
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

PROBLÈMES DE RÉALISABILITÉ ET DE CONNEXITÉ DANS LES GRAPHS
CHIMIQUES

CHERIF SELLAL
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES)
AOÛT 2017

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

PROBLÈMES DE RÉALISABILITÉ ET DE CONNEXITÉ DANS LES GRAPHS
CHIMIQUES

présenté par : SELLAL Cherif

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. LE DIGABEL Sébastien, Ph. D., président

M. HERTZ Alain, Doctorat ès Sc., membre et directeur de recherche

M. HANSEN Pierre, Diplôme d'agrégation, membre et codirecteur de recherche

M. MÉLOT Hadrien, Doctorat, membre

DÉDICACE

*À ma famille,
À tous mes amis...*

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier :

- mon directeur de recherche, le Professeur Alain Hertz, ainsi que mon co-directeur, le Professeur Pierre Hansen, pour le temps et l'énergie qu'ils m'ont consacré, leur aide précieuse, et leurs corrections qui ont permis l'amélioration de ce travail ;
- le Professeur Sébastien Le Digabel d'avoir accepté la présidence du jury de cette maîtrise ;
- le Professeur Hadrien Melot d'avoir accepté d'être l'examineur externe de cette maîtrise ;
- tout le personnel du GERAD (Groupe d'Études et de Recherche en Analyse des Décisions), ainsi que tous mes amis du GERAD ;
- finalement, je tiens à remercier du plus profond de mon coeur mes parents, mes soeurs, et mon frère qui m'ont toujours supporté. Sans vous, rien de cela n'aurait été possible.

RÉSUMÉ

Cette maîtrise s'inscrit dans le domaine de la chimie mathématique, et plus précisément le domaine de la théorie des graphes chimiques. Ce domaine est en pleine expansion depuis les travaux de William Cullen en 1758. Plusieurs invariants chimiques liés à la théorie des graphes ont été étudiés tels que l'indice de Randić, ainsi que le premier et le second indice de Zagreb. On les regroupe aujourd'hui sous le nom d'*indices Adriatiques*. Plusieurs modèles mathématiques ont été développés pour déterminer des bornes inférieures et supérieures pour ces invariants chimiques, ainsi que les graphes extrêmes correspondants. Ces modèles ne prennent pas en compte la connexité des graphes, en ce sens qu'aucune contrainte de connexité n'est imposée sur les graphes extrêmes générés.

Nos recherches ont porté sur le développement d'un algorithme capable de générer des graphes extrêmes simples (c'est-à-dire sans boucle ni arête multiple) et connexes atteignant la $k^{\text{ème}}$ plus petite ou la plus grande valeur des indices Adriatiques ($k \geq 1$). Pour ce faire, nous avons déterminé des conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence d'un graphe simple et connexe lorsque pour toute paire i, j d'entiers strictement positifs, on impose le nombre m_{ij} d'arêtes reliant les sommets de degré i à ceux de degré j . Nous avons ensuite montré qu'il est possible d'imposer ces conditions à l'aide d'un modèle linéaire en nombres entiers. Puis, nous avons utilisé ce modèle mathématique pour déterminer les valeurs extrêmes de plusieurs indices Adriatiques pour plusieurs familles de graphes, et nous avons finalement montré comment il est possible de générer les graphes qui atteignent ces valeurs.

Mots clés : graphes chimiques, invariants adriatiques, programmation linéaire en nombres entiers, problèmes de connexité.

ABSTRACT

This research lies in the field of mathematical chemistry, and more specifically in the area of the theory of chemical graphs. This domain is in full expansion since the early works of William Cullen in 1758. Several graphical chemical invariants have been studied such as the Randić index, and the first and second Zagreb index. These invariants are known today as the *Adriatic invariants*. Several mathematical models have been developed to determine lower and upper bounds for these chemical invariants, as well as their corresponding extreme graphs. However, these models do not take connectivity constraints into account, in that sense that it is not imposed that the generated extreme graphs should be connected.

The main objective of my research was to develop an algorithm able to generate extreme simple (i.e., without loops or multiple edges) and connected graphs that reach the k th smallest or largest value of Adriatic invariants ($k \geq 1$). For this purpose, we have first determined necessary and sufficient conditions for the existence of a simple connected graph when for every pair i, j of strictly positive integers, it is imposed that the generated graphs should have a fixed number m_{ij} of edges linking vertices of degree i with vertices of degree j . We have then shown that these conditions can be imposed by an integer programming model. The model was then used to determine extremal values of Adriatic indices for several families of graphs, and we have finally shown how to generate graphs that reach these values.

Key words: Chemical graphs, Adriatic indices, linear integer programming, connectivity problems.

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|--|------|
| DÉDICACE | iii |
| REMERCIEMENTS | iv |
| RÉSUMÉ | v |
| ABSTRACT | vi |
| TABLE DES MATIÈRES | vii |
| LISTE DES TABLEAUX | viii |
| LISTE DES FIGURES | ix |
| CHAPITRE 1 INTRODUCTION | 1 |
| CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE | 5 |
| CHAPITRE 3 LA RÉALISABILITÉ AUX ARÊTES DES GRAPHERS SIMPLES ET CONNEXES | 12 |
| 3.1 La réalisabilité aux arêtes des graphes simples | 12 |
| 3.2 La réalisabilité aux arêtes des graphes simples connexes | 16 |
| CHAPITRE 4 LE MODÈLE LINÉAIRE EN NOMBRES ENTIERS | 26 |
| 4.1 Un programme linéaire en nombres entiers | 26 |
| 4.2 La génération des matrices optimales | 29 |
| 4.3 La construction des graphes simples et connexes qui optimisent un invariant donné | 30 |
| 4.4 Les graphes extrêmes pour des invariants Adriatiques | 33 |
| 4.5 Outil de résolution du modèle linéaire | 38 |
| CHAPITRE 5 CONCLUSION | 39 |
| RÉFÉRENCES | 41 |

LISTE DES TABLEAUX

| | | |
|-------------|--|----|
| Tableau 2.1 | Définitions des invariants étudiés dans [10] | 9 |
| Tableau 4.1 | Construction d'un M -graphe simple. | 31 |
| Tableau 4.2 | Construction d'un M -graphe simple et connexe pour la matrice M qui satisfait les conditions (C1)-(C4) | 32 |
| Tableau 4.3 | Construction d'un ensemble de graphes simples et connexes qui optimisent un invariant. | 34 |

LISTE DES FIGURES

| | | |
|-------------|---|----|
| Figure 1.1 | La molécule d'éthane | 2 |
| Figure 1.2 | La chaîne carbonée d'éthane | 2 |
| Figure 1.3 | Le graphe correspondant à la chaîne carbonée d'éthane | 2 |
| Figure 3.1 | Illustration de la suppression des boucles no 1 | 14 |
| Figure 3.2 | Illustration de la suppression des boucles no 2 | 14 |
| Figure 3.3 | Illustration de la transformation (a) | 15 |
| Figure 3.4 | Illustration de la transformation (c) | 16 |
| Figure 3.5 | Illustration de la transformation du cas 1 | 17 |
| Figure 3.6 | Illustration de la transformation du cas 2.1 | 18 |
| Figure 3.7 | Illustration de la transformation du cas 2.2 | 19 |
| Figure 3.8 | Illustration de lemme 3.8 | 20 |
| Figure 3.9 | Illustration de la transformation no 1 | 23 |
| Figure 3.10 | Illustration de la transformation no 2 | 24 |
| Figure 3.11 | Illustration de la transformation no 3 | 25 |
| Figure 4.1 | Les arbres chimiques extrêmes pour l'indice de Randić. | 35 |
| Figure 4.2 | Arbre chimique avec 11 sommets qui est présenté comme le second minimum pour l'indice de Randić dans [26] et [21] | 36 |
| Figure 4.3 | Les graphes avec l'indice de Randić minimum et $n - 1$ arêtes. | 36 |
| Figure 4.4 | Le prix de la connectivité pour l'indice de Randić pour les arbres chimiques | 37 |
| Figure 4.5 | Les graphes extrêmes qui minimisent le second indice de Zagreb | 38 |

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Tel que l'a si bien dit Claude Berge [33], «Devant un grand nombre de situations, le mathématicien, comme d'ailleurs le sociologue, l'économiste, le planificateur ou le chimiste a été amené à tracer sur le papier des points (représentant des individus, des nombres, des localités, des opérations, des molécules chimiques, etc.) et des lignes continues reliant certains d'entre eux. Pour raisonner sur de tels schémas indépendamment de leur signification, le mathématicien a convenu d'appeler ces points des sommets et ces lignes des arêtes».

La théorie des graphes est apparue au dix-huitième siècle, lorsque Euler s'est penché sur le problème des ponts de Königsberg. Cette ville possédait sept ponts et la question était de savoir s'il était possible, en partant d'un quartier quelconque de la ville, de traverser les sept ponts sans emprunter deux fois le même pont et revenir par la suite au point du départ.

Un graphe est un ensemble de sommets, dont certaines paires sont reliées par des arêtes. La théorie des graphes permet de modéliser et de résoudre une variété de problèmes dans différents domaines. Son utilité est de transformer des problèmes très divers à l'étude de propriétés sur les sommets et les arêtes. Des exemples typiques sont les problèmes de transport dans les réseaux (la carte de la ville représente le graphe, les carrefours sont les sommets, et les routes sont les arêtes), ainsi que la chimie. La théorie des graphes chimiques est une branche des mathématiques appliquées qui combine la théorie des graphes et la chimie, et traite des problèmes moléculaires. La théorie des graphes est utilisée pour avoir des modèles mathématiques des molécules afin d'étudier les propriétés physiques de ces dernières. Il a été ainsi montré que certaines propriétés physiques, telles que le point d'ébullition, sont liées à la structure géométrique du composé. Ceci est particulièrement vrai dans le cas des composés chimiques tel que les alcanes qui sont des composés organiques contenant exclusivement des atomes de carbone et d'hydrogène. En plus chaque atome de carbone possède quatre liaisons chimiques, et chaque atome d'hydrogène a une seule liaison chimique. En exemple : l'éthane qui est un alcane, présenté dans la figure 1.1. Par conséquent, les atomes d'hydrogène peuvent être supprimés sans perdre d'informations sur la molécule. Une chaîne carbonée est un ensemble d'atomes de carbone qui sont reliés par des liaisons chimiques. La représentation résultante pour l'éthane est la chaîne carbonée qui est illustré dans la figure 1.2. Cette chaîne peut être représentée par un graphe en remplaçant les atomes de carbone par des sommets. Les liens chimiques sont représentés par des arêtes. La figure 1.3 représente le graphe correspondant à la chaîne carbonée d'éthane [6, 27]. Un graphe représente une molécule, les sommets sont associés aux atomes, et les arêtes aux liaisons moléculaires.

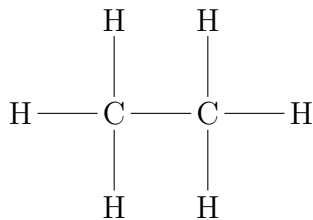


Figure 1.1 La molécule d'éthane



Figure 1.2 La chaîne carbonée d'éthane



Figure 1.3 Le graphe correspondant à la chaîne carbonée d'éthane

Un invariant dans un graphe est une mesure liée au graphe qui ne dépend pas de la numérotation des sommets ou des arêtes. L'un des objectifs principaux de la théorie des graphes chimiques est d'utiliser de tels invariants pour réduire la structure topologique d'une molécule à un seul nombre qui caractérise l'énergie de la molécule dans son ensemble, ses orbitales, ou d'autres concepts liés aux molécules [12]. Des centaines de tels invariants ont été étudiés, les plus connus étant l'indice de Randić, ainsi que le premier et le second indice de Zagreb, qui font tous les trois partie de la grande famille des indices Adriatiques [39]. Cette famille d'indices est caractérisée par le fait qu'ils peuvent être mesurés en fonction des nombres n_i et m_{ij} , où n_i est le nombre de sommets de degré i , et m_{ij} est le nombre d'arêtes reliant les sommets de degrés i aux sommets de degré j . Ainsi, par exemple, en attribuant un poids $\frac{1}{\sqrt{ij}}$ à chaque arête qui relie un sommet de degré i à un sommet de degré j , l'indice de Randić d'un graphe G , noté $Ran(G)$, est obtenu en faisant la somme totale de tous ces poids. Cet indice peut donc se calculer comme suit, où $\Delta(G)$ est le degré maximum dans G :

$$Ran(G) = \sum_{i=1}^{\Delta(G)} \sum_{j \geq i}^{\Delta(G)} \frac{m_{ij}}{\sqrt{ij}}$$

Le premier indice de Zagreb, noté $Z_1(G)$, est obtenu en faisant la somme des poids des sommets du graphe, chaque sommet de degré i ayant un poids i^2 . Cet indice peut donc se

calculer comme suit :

$$Z_1(G) = \sum_{i=1}^{\Delta(G)} n_i i^2$$

Le second indice de Zagreb, noté $Z_2(G)$, est la somme des poids des arêtes, chaque arête reliant un sommet de degré i à un sommet de degré j ayant un poids ij :

$$Z_2(G) = \sum_{i=1}^{\Delta(G)} \sum_{j \geq i}^{\Delta(G)} m_{ij} ij$$

Un graphe extrême par rapport à l'invariant I est un graphe pour lequel la valeur minimale ou la valeur maximal de I est atteinte. De nombreux algorithmes et logiciels ont été développés pour déterminer des graphes extrêmes pour divers invariants. Pour ce qui est des graphes chimiques, plusieurs modèles et algorithmes ont été développés et utilisés pour déterminer des bornes inférieures et supérieures pour divers invariants, ainsi que les graphes extrêmes correspondants. En général, ces modèles et algorithmes n'imposent pas la connexité du graphe. L'objectif de ma recherche est d'assurer la connexité.

Considérons la propriété P_1 qui indique les nombres m_{ij} d'arêtes ayant leur extrémité de degré i et j . La propriété P_2 est obtenue en imposant la connexité en plus de P_1 . Dans ce mémoire, nous déterminons des conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence de graphes vérifiant P_1 et P_2 . Puis, nous formulons des contraintes linéaires qui permettent de vérifier les conditions susmentionnées, et nous développons des algorithmes qui permettent de générer des graphes vérifiant ces propriétés. À partir de ces algorithmes, nous déterminons des graphes vérifiant ces propriétés et atteignant la $k^{\text{ème}}$ plus petite valeur ou la $k^{\text{ème}}$ plus grande valeur de quelques indices Adriatiques, plus particulièrement l'indice de Randić et le deuxième indice de Zagreb.

Ce travail est organisé de la manière suivante. Le deuxième chapitre sera consacré à une revue de la littérature dans laquelle nous indiquons les principaux modèles mathématiques utilisés pour trouver des bornes inférieures et supérieures pour une série d'invariants des graphes chimiques, ainsi que les graphes extrêmes correspondants. Par la suite, dans le troisième chapitre, nous présenterons des conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence de graphes vérifiant P_1 et P_2 . Le quatrième chapitre sera consacré à la formulation des contraintes linéaires qui permettent de vérifier les conditions vérifiant les propriétés P_1 et P_2 , et nous présenterons un algorithme pour déterminer des graphes vérifiant ces propriétés et atteignant le $k^{\text{ème}}$ plus petite valeur ou le $k^{\text{ème}}$ plus grande valeur d'un indice Adriatique. Nous illustrerons l'utilisation de ces algorithmes en générant quelques graphes chimiques extrêmes pour l'indice de Randić et le deuxième indice de Zagreb.

Nous terminons ce chapitre introductif en donnant quelques définitions et notions de base en théorie des graphes.

Les chapitres 3 et 4 correspondent à la traduction d'un article soumis pour publication [24], et au cahier du Gerad [25]

Définitions et notations

Un graphe simple non orienté $G = (V, E)$ est constitué d'un ensemble fini V de sommets et d'un ensemble E d'arêtes. L'ordre d'un graphe $G = (V, E)$ est son nombre de sommets $n = |V|$. La taille de $G = (V, E)$ est son nombre $m = |E|$ d'arêtes. Une arête e de G est une paire, non ordonnée, de sommets distincts u et v , qu'on note $e = uv$. Dans ce cas on dit que u et v sont voisins ou adjacents, que e est incidente à u et à v , et que u et v sont les extrémités de e . Une boucle est une arête d'un graphe ayant pour extrémités le même sommet. Deux arêtes sont dites incidentes si elles ont une extrémité en commun. Le nombre d'arêtes incidentes à un sommet v de G , est appelé le degré de v et est noté $d_G(v)$, ou $d(v)$ s'il n'y a pas de risque de confusion. Un graphe chimique est un graphe avec $\Delta(G) \leq 4$ (du fait de la valence du carbone) où $\Delta(G)$ est le degré maximum dans G .

Dans le cas d'un graphe avec arêtes parallèles entre deux sommets, on note e_{uv} le nombre d'arêtes multiples entre les sommets u et v . Le nombre total $\mu(G)$ d'arêtes multiples dans G est défini comme $\mu(G) = \sum_{u \neq v | u, v \in V} \max\{e_{uv} - 1, 0\}$.

Une chaîne est une suite e_1, \dots, e_r d'arêtes telle que chaque $e_i (1 \leq i \leq r)$ a une extrémité en commun avec $e_{i-1} (i > 1)$ et l'autre avec $e_{i+1} (i < r)$. Un cycle C de longueur l est une suite $(u_0, u_1, \dots, u_{l-1})$ de sommets telle que $u_i u_{i+1} \in E$ pour tout $i \in \{0, 1, \dots, l-1\}$ (l'addition $i+1$ étant faite modulo l). Deux sommets font partie d'une même composante connexe d'un graphe G si et seulement si il existe une chaîne qui les relie. Un graphe est connexe s'il n'a qu'une seule composante connexe. Un arbre est un graphe connexe sans cycle.

Le sous-graphe de G induit par $W \subseteq V$ est le graphe $G = (W, E_W)$ où E_W désigne l'ensemble des arêtes de G ayant leurs deux extrémités dans W .

Étant donnée une matrice symétrique $M = [m_{ij}]$, $i \in \{1, \dots, r\}$, $j \in \{1, \dots, r\}$ avec $\Delta(G) = r$, un M -graphe est un graphe G qui a m_{ij} arêtes dont les degrés des extrémités sont i et j pour $1 \leq i \leq j \leq r$. On note Γ_M l'ensemble des M -graphes simples (sans boucle ni arête multiple).

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

La théorie des graphes chimiques a débuté il y a environ deux siècles avec les travaux réalisés par le chimiste écossais William Cullen [5] en 1758 dans le but de représenter des forces et des réactions chimiques entre les molécules (ce qu'on appelle aujourd'hui les diagrammes d'affinités). De nombreux travaux dans ce domaine ont été réalisés depuis. Citons notamment ceux d'Alexandru Balaban [2, 3], Ante Graovac [16, 45], Ivan Gutman [17, 19, 20], Milan Randić [35], et Nenad Trinajstić [17, 18], qui sont des chercheurs si productifs qu'ils ont créé de véritables écoles. La programmation mathématique a notamment été utilisée pour étudier les graphes chimiques, ainsi que de nombreux invariants de graphes, pour lesquels on détermine les bornes inférieures et supérieures valables pour différentes classes de graphes chimiques telles que les arbres, les graphes unicycliques, les graphes sans sommets de degrés 1, 2, ou 3.

Il semble que Hakimi soit le premier à avoir étudié [22, 23] les conditions nécessaires et suffisantes d'existence d'un graphe chimique en fonction des degrés des sommets. Caporossi, Gutman, et Hansen ont déterminé la meilleure borne inférieure possible de l'indice de Randić pour les arbres chimiques, ainsi que les graphes extrêmes pour lesquels la borne de cet indice est atteinte [8, 21]. Leur résultat s'énonce comme suit

Théorème 2.0.1. *Soit T_n un arbre chimique ayant n sommets :*

- *si $n \equiv 2 \pmod{3}$ et $n \geq 5$, alors $Ran(T_n) \geq \frac{5n}{12} - \frac{1}{12}$ avec l'égalité si et seulement si tous les sommets de T_n sont de degré 1 ou 4, c'est-à-dire si T_n ne contient pas de sommets de degré 2 ou 3;*
- *si $n \equiv 1 \pmod{3}$ et $n \geq 13$, alors $Ran(T_n) \geq \frac{5n}{12} - \frac{6\sqrt{6}-11}{12}$ avec l'égalité si et seulement si tous les sommets de T_n sont de degrés 1 ou 4 sauf un sommet de degré 3 qui est adjacent à 3 sommets de degré 4, ce qui implique que T_n ne possède pas de sommets de degré 2;*
- *si $n \equiv 0 \pmod{3}$ et $n \geq 9$, alors $Ran(T_n) \geq \frac{5n}{12} + \frac{2\sqrt{2}-3}{4}$ avec l'égalité si et seulement si tous les sommets de T_n sont de degré 1 ou 4 sauf un sommet de degré 2 qui est adjacent à 2 sommets de degré 4, ce qui implique que T_n ne possède pas de sommets de degré 3.*

L'ensemble des égalités suivantes ont été utilisées pour prouver le théorème ci-dessus où n_i est le nombre de sommets de degré i , et m_{ij} est le nombre d'arêtes reliant un sommet de

degré i à un sommet de degré j :

$$\begin{aligned}
m_{12} + m_{13} + m_{14} &= n_1 \\
m_{12} + 2m_{22} + m_{23} + m_{24} &= 2n_2 \\
m_{13} + m_{23} + 2m_{33} + m_{34} &= 3n_3 \\
m_{14} + m_{24} + 2m_{34} + 2m_{44} &= 4n_4 \\
n_1 + 2n_2 + 3n_3 + 4n_4 &= 2(n-1) \\
n_1 + n_2 + n_3 + n_4 &= n.
\end{aligned}$$

Ces égalités ont ensuite été utilisées par plusieurs auteurs [9, 15, 32], et en 2003, Pavlović, [30] a ajouté les contraintes ci-dessous pour généraliser le programme linéaire défini ci-dessus.

$$\begin{aligned}
m_{ij} &\leq n_i n_j & 2 \leq i \leq n-1, \quad i < j \leq n-1 \\
m_{ii} &\leq \frac{n_i(n_i-1)}{2} & 2 \leq i \leq n-1.
\end{aligned}$$

Pavlović a ainsi obtenu la borne inférieure de l'indice de Randić pour les graphes simples et connexes ayant un degré minimum de 2.

Théorème 2.0.2. *Soit $G(2, n)$ un ensemble de graphes simples et connexes d'ordre n , tel que le minimum des degrés des sommets est 2. La valeur minimum de l'indice de Randić pour un graphe de $G(2, n)$ est :*

$$\frac{2(n-2)}{\sqrt{2(n-1)}} + \frac{1}{n-1}.$$

Cette valeur est atteinte pour les graphes de $G(2, n)$ avec $n_2 = n-2, n_{n-1} = 2, n_3 = n_4 = \dots = n_{n-2} = 0, m_{2, n-1} = 2(n-2), m_{n-1, n-1} = 1$ et les autres $m_{i,j}$ et $m_{j,i}$ valent 0.

En 2007, Pavlović [31] a aussi déterminé la borne inférieure ainsi que les graphes extrêmes de l'indice de Randić quand le nombre de sommets de degré k est $n-k+t$, avec $0 \leq t \leq k$, et $k \leq \frac{n}{2}$.

Théorème 2.0.3. *Soit $G(k, n)$ un ensemble de graphes simples d'ordre n , tel que le minimum des degrés des sommets est k . Si le nombre de sommets de degré k est $n-k+t$, pour $k \leq \frac{n}{2}$, et $0 \leq t \leq k$, où $n-k$ et t ne sont ni pair, ni impair, respectivement. La valeur minimum de l'indice de Randić pour un graphe de $G(2, n)$ est :*

$$\frac{(n-k+t)t}{2k} + \frac{(k-t)(n-k+t)}{\sqrt{k(n-1)}} + \frac{(k-t)(k-t-1)}{2(n-1)}.$$

Cette valeur est atteinte pour les graphes de $G(k, n)$ avec $n_{n-1} = k-1, n_{k+1} = n_{k+2} = \dots = n_{n-2} = 0, m_{k,k} = \frac{(n-k+1)t}{2}, m_{k,n-1} = (k-t)(n-k+t), m_{n-1,n-1} = \frac{(k-t)(k-t-1)}{2}$, et les autres $m_{i,j}$ et $m_{j,i}$ valent 0.

Des conditions similaires ont également été étudiées par Vukicevic et Graovac [40, 41, 42] et Vukicevic et Trinajstic [43, 44] pour analyser d'autres mesures de la description moléculaire, comme l'indice de Zagreb [18, 29]. Vukicevic et Veljan [37] ont déterminé les conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence d'un graphe acyclique ayant m_{ij} arêtes entre les sommets de degrés i et j . Nous donnons ici quelques définitions pour présenter les théorèmes 2.0.4, 2.0.5 et 2.0.6 qui résument leurs résultats.

Soit γ l'ensemble de tous les graphes acycliques et connexes avec un degré maximum d'au plus 4. Soit $\mu : \gamma \rightarrow \mathbb{N}_0^{10}$ la fonction telle que $\mu(G) = (m_{11}, m_{12}, m_{13}, m_{14}, m_{22}, m_{23}, m_{24}, m_{33}, m_{34})$ si et seulement si G a exactement m_{ij} arêtes entre les sommets de degrés i et j . Soit la fonction $\mu_{ij} : \gamma \rightarrow \mathbb{N}_0$ pour tout $1 \leq i \leq j \leq 4$, avec $\mu_{ij}(G) = m_{ij}$ si et seulement si, il y a m_{ij} arêtes entre les sommets de degrés i et j .

Théorème 2.0.4. Soit $m = (m_{11}, m_{12}, m_{13}, m_{14}, m_{22}, m_{23}, m_{24}, m_{33}, m_{34}) \in \mathbb{N}_0^{10}$. Il existe un graphe chimique acyclique G avec au moins deux sommets, tel que $\mu(G) = m$ si et seulement si l'une des conditions suivantes est vérifiée :

- (1) $m = (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$;
- (2) $m = (0, 2, 0, 0, m_{22}, 0, 0, 0, 0, 0)$;
- (3) $(m_{11} = 0)$ et $(n_2, n_3, n_4 \in \mathbb{N}_0)$ et $(q \geq 0)$ et $(m_{33} + m_{34} + m_{44} + q = n_3 + n_4 - 1)$ et $[(m_{12} + m_{23} + m_{24} \neq 0)$ ou $(m_{22} = 0)]$ et avec l'une des conditions suivantes :
 - (3.1) $(m_{44} \leq n_4 - 1)$ et $(m_{33} \leq n_3 - 1)$ et $(q + m_{33} - m_{24} \leq n_3 - 1)$ et $(q + m_{44} - m_{23} \leq n_4 - 1)$
 - (3.2) $(n_3 = 0)$
 - (3.3) $(n_4 = 0)$

où

$$\begin{aligned} n_2 &= \left(\frac{m_{12} + 2m_{22} + m_{23} + m_{24}}{2} \right), \\ n_3 &= \left(\frac{m_{13} + m_{23} + 2m_{33} + m_{34}}{3} \right), \\ n_4 &= \left(\frac{m_{14} + m_{24} + m_{34} + 2m_{44}}{4} \right), \\ q &= \left(\frac{m_{23} + m_{24} - m_{12}}{2} \right). \end{aligned}$$

Théorème 2.0.5. Soient $n_1, n_2, n_3, n_4, n \in \mathbb{N}_0$, Il existe un graphe chimique acyclique avec n sommets, tel que n_i est nombre de sommets de degré i , $i = 1, 2, 3, 4$; si et seulement si

$$\begin{aligned} n_1 + n_2 + n_3 + n_4 &= n, \\ n_3 + 2n_4 &= n_1 - 2. \end{aligned}$$

Théorème 2.0.6. Soient $n_1, n_2, n_3, n_4 \in \mathbb{N}_0$, tels qu'il existe un graphe chimique acyclique G' avec n_i sommets de degré i , $i = 1..4$. Soient $m_{33}, m_{34}, m_{44} \in \mathbb{N}_0$. Alors il existe un graphe chimique acyclique G avec n_i sommets de degré i , $i = 1, 2, 3, 4$ tel que $\mu_{33}(G) = m_{33}$, $\mu_{34}(G) = m_{34}$ et $\mu_{44}(G) = m_{44}$ si et seulement si l'une des conditions suivante est vérifié :

- (1) $(n_3 = 0)$ et $(n_4 = 0)$ et $(m_{33} = 0)$ et $(m_{34} = 0)$ et $(m_{44} = 0)$;
- (2) $(n_3 \neq 0)$ et $(n_4 = 0)$ et $(n_3 - n_2 - 1 \leq m_{33} \leq n_3 - 1)$ et $(m_{34} = 0)$ et $(m_{44} = 0)$;
- (3) $(n_3 = 0)$ et $(n_4 \neq 0)$ et $(n_4 - n_2 - 1 \leq m_{44} \leq n_4 - 1)$ et $(m_{33} = 0)$ et $(m_{34} = 0)$;
- (4) $(n_3 \neq 0)$ et $(n_4 \neq 0)$ et $(m_{33} \leq n_3 - 1)$ et $(m_{44} \leq n_4 - 1)$ et

$$\max \left\{ \begin{array}{l} 0, n_3 + n_4 - 1 - \\ n_2 - m_{33} - m_{44} \end{array} \right\} \leq m_{34} \leq \min \left\{ \begin{array}{l} 3n_3 - 2m_{33}, 4n_4 - 2m_{44}, \\ n_3 + n_4 - 1 - m_{33} - m_{44} \end{array} \right\}.$$

Deng, Huang et Jiang [10] ont déterminé des bornes inférieures ou supérieures pour certains invariants chimiques tels que l'indice de Randić généralisé [4], le premier indice géométrique arithmétique [38], l'indice de la connectivité liée aux atomes [13], l'indice harmonique [14], l'indice de la somme des connectivités généralisé [46], ainsi que les graphes extrêmes correspondants, en se basant sur les égalités linéaires ci-dessous.

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n-1} m_{ij} + m_{ii} &= in_i, \quad 1 \leq i \leq n-1 \\ n_1 + n_2 + \dots + n_{n-1} &= n \end{aligned}$$

Voici quelques définitions qui permettent de bien comprendre les résultats qu'ils ont obtenus.

Un graphe complet est un graphe simple dont tous les sommets sont adjacents. Une étoile est un graphe connexe dont tous les sommets sauf un sont de degré 1. Un graphe est régulier si tous ses sommets ont le même degré.

Soit $I(G)$ un invariant graphique qui peut s'écrire comme une fonction linéaire des m_{ij} , c'est-à-dire

$$I(G) = \sum_{i=1}^{\Delta(G)} \sum_{j \geq i}^{\Delta(G)} m_{ij} c_{ij}$$

où c_{ij} est le poids de l'arête qui relie un sommet de degré i à un sommet de degré j .

Le tableau 2.1 ci-dessous contient la liste des invariants, leurs définitions, ainsi que le poids des arêtes c_{ij} correspondantes.

Tableau 2.1 Définitions des invariants étudiés dans [10]

| | | |
|-------------|---|---|
| <i>Rang</i> | L'indice de Randić généralisé | $c_{ij} = (ij)^\alpha$ avec $\alpha \in \mathbb{R}$, |
| <i>GA</i> | Le premier indice géométrique arithmétique | $c_{ij} = \frac{\sqrt{ij}}{\frac{1}{2}(i+j)}$ |
| <i>ABC</i> | L'indice de la connectivité liée aux atomes | $c_{ij} = \sqrt{\frac{i+j-2}{ij}}$ |
| <i>HA</i> | L'indice harmonique | $c_{ij} = \frac{2}{i+j}$ |
| <i>SCG</i> | L'indice de la somme des connectivités généralisé | $c_{ij} = (i+j)^\alpha, \alpha \in \mathbb{R}$ |

Finalement, nous présentons les résultats obtenus :

L'indice de Randić généralisé

$Rang(G)$ correspond à l'indice de Randić si $\alpha = -\frac{1}{2}$, au second indice de Zagreb si $\alpha = 1$, et le second indice de Zagreb modifié [29] si $\alpha = -1$.

Deng, Huang et Jiang [10] ont déterminé la borne inférieure quand $-\infty < \alpha \leq -1$ et $-\frac{1}{2} \leq \alpha < 0$, ainsi que la borne supérieure quand $-\frac{1}{2} \leq \alpha < +\infty$ pour l'indice de Randić généralisé. Pour tout graphe connexe G d'ordre n ,

$$Rang(G) \geq \begin{cases} \frac{1}{2}n(n-1)^{2\alpha+1} & \text{si } -\infty < \alpha \leq -1, \\ (n-1)^{\alpha+1} & \text{si } -\frac{1}{2} \leq \alpha < 0. \end{cases}$$

La borne est atteinte si et seulement si G est :

- (i) un graphe complet si $-\infty < \alpha \leq -1$;
- (ii) une étoile pour $n \geq 3$ si $\alpha = -\frac{1}{2}$;
- (iii) une étoile pour n suffisamment grand si $-\frac{1}{2} < \alpha < 0$.

Si $-\frac{1}{2} \leq \alpha < +\infty$:

$$Rang(G) \leq \frac{1}{2}n(n-1)^{2\alpha+1}.$$

La borne est atteinte si et seulement si toutes les composantes de G sont régulières sans sommets isolés ; ou G est un graphe complet si $-\frac{1}{2} < \alpha < +\infty$.

Le premier indice géométrique arithmétique

Deng, Huang et Jiang [10] ont déterminé la borne inférieure et supérieure pour le premier indice géométrique arithmétique. Pour tout graphe connexe G d'ordre n ,

$$\frac{2(n-1)^{\frac{3}{2}}}{n} \leq GA(G) \leq \frac{1}{2}n(n-1).$$

La borne inférieure est atteinte si et seulement si G est une étoile. La borne supérieure est atteinte si et seulement si G est un graphe complet.

L'indice de la connectivité liée aux atomes

Deng, Huang et Jiang [10] ont déterminé la borne supérieure pour l'indice de la connectivité liée aux atomes. Pour tout graphe connexe G d'ordre n ,

$$ABC(G) \leq \frac{1}{2}n\sqrt{2n-4}.$$

La borne est atteinte si et seulement si G est un graphe complet.

L'indice harmonique

Deng, Huang et Jiang [10] ont déterminé la borne inférieure et supérieure pour l'indice harmonique. Pour tout graphe connexe G d'ordre n ,

$$\frac{2(n-1)}{n} \leq HA(G) \leq \frac{n}{2}.$$

La borne inférieure est atteinte si et seulement si G est une étoile. La borne supérieure est atteinte si et seulement si toutes les composantes de G sont régulières sans sommets isolés.

L'indice de la somme des connectivités généralisé

Deng, Huang et Jiang [10] ont déterminé la borne inférieure quand $-1 \leq \alpha < 0$ ainsi que la borne supérieure quand $-1 \leq \alpha < +\infty$ pour l'indice de la somme des connectivités généralisé. Pour tout graphe connexe G d'ordre n ,

Si $-1 \leq \alpha < 0$:

$$SCG(G) \geq (n-1)n^{\alpha-1}.$$

La borne est atteinte si et seulement si G est une étoile pour $n \geq 6$ et $-1 \leq \alpha \leq -\frac{1}{2}$; et pour n est suffisamment grand et $-\frac{1}{2} < \alpha < 0$;

Si $-1 \leq \alpha < +\infty$:

$$SCG(G) \leq 2^{\alpha-1}n(n-1)^{\alpha+1}.$$

La borne est atteinte si et seulement si toutes les composantes de G sont régulières sans sommets isolés si $\alpha = -1$; ou G est le graphe complet sinon.

Les modèles utilisés ci-dessus ne vérifient pas la connexité des graphes et par ailleurs les graphes chimiques sont connexes. Notre travail consiste à compléter les conditions susmentionnées par une condition vérifiant la connexité, pour toutes les classes de graphes chimiques ($n = m - 1, \dots, n = 2m$), où n est le nombre de sommets, et m est le nombre d'arêtes.

CHAPITRE 3 LA RÉALISABILITÉ AUX ARÊTES DES GRAPHES SIMPLES ET CONNEXES

Nous présentons des conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence d'un graphe simple G et d'un graphe simple et connexe avec m_{ij} arêtes dont les degrés des extrémités sont i et j pour $i \leq j \in \{1, 2, \dots, \Delta(G)\}$, et n_i est le nombre de sommets de degré i pour $i = 1, \dots, \Delta(G)$.

3.1 La réalisabilité aux arêtes des graphes simples

Nous commençons par présenter les conditions nécessaires et suffisantes de la réalisabilité aux arêtes d'un graphe.

Théorème 3.1.1. *Soit $M = [m_{ij}]$ une matrice symétrique positive $r \times r$. $\Gamma_M \neq \emptyset$ si et seulement si les conditions suivantes sont satisfaites :*

$$(C1) \quad n_i = \frac{1}{i} \left(\sum_{j=i}^r m_{ij} + \sum_{j=1}^i m_{ji} \right) \text{ est entier pour tout } i = 1, \dots, r;$$

$$(C2) \quad m_{ii} \leq \frac{1}{2}(n_i(n_i - 1)) \text{ pour tout } i = 2, \dots, r \text{ tel que } 1 \leq n_i \leq i;$$

$$(C3) \quad m_{ij} \leq n_i n_j \text{ pour tout } 2 \leq i < j \leq r \text{ tel que } 1 \leq n_i < j \text{ et } 1 \leq n_j < i.$$

où Γ_M est l'ensemble des M -graphes simples (sans boucle ni arête multiple)

Démonstration. *Les conditions sont nécessaires.*

Soit G un M -graphe simple. Le nombre n_i de sommets de degré i dans G est nécessairement entier, et est égal à $\frac{1}{i}(\sum_{j=i}^r m_{ij} + \sum_{j=1}^i m_{ji})$. De plus, Comme G est un graphe simple, le nombre m_{ii} d'arêtes entre les sommets de degré i est au plus $\frac{1}{2}(n_i(n_i - 1))$.

Si $i = 1$ la condition (C1) impose :

- $m_{11} \leq \frac{1}{2}n_1 \leq \frac{1}{2}n_1(n_1 - 1)$ quand $n_1 \geq 2$;
- $m_{11} = 0$ quand $n_1 \leq 1$.

Si $i > 1$ la condition (C1) impose $m_{ii} \leq \frac{in_i}{2} \leq \frac{1}{2}(n_i(n_i - 1))$ quand $n_i \geq i + 1$ ou $n_i = 0$.

Donc, il est suffisant d'imposer $m_{ii} \leq \frac{1}{2}(n_i(n_i - 1))$ pour $i = 2, \dots, r$ et $n_i = 1, \dots, i$. Le nombre m_{ij} d'arêtes entre les sommets de degrés i et j est au plus $n_i n_j$, et il est suffisant d'imposer cette contrainte quand $n_i \leq j - 1$ et $n_j \leq i - 1$, de plus la condition (C1) impose :

- $m_{ij} \leq in_i \leq n_i n_j$ quand $n_j \geq i$ ou $n_i = 0$;
- $m_{ij} \leq jn_j \leq n_i n_j$ quand $n_i \geq j$ ou $n_j = 0$.

Les conditions sont suffisantes

Commençons par prouver que les trois conditions sont suffisantes pour l'existence d'un M -graphe qui n'est pas nécessairement simple (c'est-à-dire les boucles et les arêtes multiples sont autorisées). Soient V_1, \dots, V_r les ensembles de sommets (éventuellement $V_i = \emptyset$) distincts, avec $|V_i| = n_i$, et soit \mathcal{G}_M l'ensemble de graphes avec $V = \cup_{i=1}^r V_i$, tel que $d(u) \leq i, \forall u \in V_i$, $i = 1, \dots, r$, et avec au plus m_{ij} arêtes entre les sommets de degrés i et j , $1 \leq i \leq j \leq r$. Notons que \mathcal{G}_M ne peut pas être vide, puisqu'il contient au moins le graphe vide $G = (V, E)$ avec $E = \emptyset$. Considérons maintenant un graphe G dans \mathcal{G}_M avec un maximum d'arêtes. Soit m'_{ij} le nombre d'arêtes entre les sommets de degrés i et j dans G . Il est suffisant de prouver que $m'_{ij} = m_{ij}$ pour $1 \leq i \leq j \leq r$. Supposons donc, par contradiction, qu'il existe deux entiers i et j tel que $m'_{ij} < m_{ij}$.

— si $i = j$, alors

$$\sum_{v \in V_i} d(v) = 2m'_{ii} + \sum_{j \neq i} m'_{ij} \leq 2(m_{ii} - 1) + \sum_{j \neq i} m_{ij} = i|V_i| - 2;$$

s'il existe u, v dans V_i avec $d_G(u) < i$ et $d_G(v) < i$, alors nous pouvons ajouter une arête entre les sommets u et v . Sinon, un sommet $v \in V_i$ a un degré au plus égal à $i - 2$, et comme tous les sommets dans V_i ont un degré i , alors nous pouvons ajouter une boucle au sommet v . Dans les deux cas nous avons une contradiction sur le nombre maximal d'arêtes de G dans \mathcal{G}_M .

— si $i < j$, alors

$$\sum_{v \in V_i} d_G(v) = 2m'_{ii} + \sum_{k \neq i} m'_{ik} \leq 2m_{ii} + (\sum_{k \neq i} m_{ik} - 1) = i|V_i| - 1;$$

De manière similaire, nous avons $\sum_{v \in V_j} d_G(v) \leq j|V_j| - 1$, et nous avons donc au moins un sommet $u \in V_i$ et un autre $v \in V_j$ tel que $d_G(u) < i$ et $d_G(v) < j$. Nous pouvons donc ajouter une arête entre u et v , ce qui contredit le nombre maximal d'arêtes de G dans \mathcal{G}_M .

Comme G n'est pas nécessairement simple et connexe, nous passons à la suppression des boucles dans G .

1- Supposons qu'il existe une boucle incidente à un sommet $u \in V_i$. S'il existe une boucle incidente à un sommet $v \neq u$ dans V_i . Nous remplaçons la boucle de u et celle de v par deux arêtes entre u et v .

2- la condition (C2) implique $n_2 \geq 2$, et il existe donc un sommet $v \neq u$ dans V_i . Comme u et v ont le même degré i , alors il existe un sommet w avec $e_{vw} \geq e_{uw}$. Nous supprimons une boucle de u ainsi qu'une arête entre v et w , et nous ajoutons une arête entre u et v et une autre entre u et w .

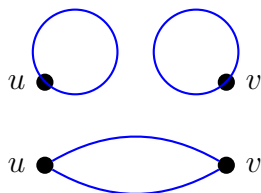


Figure 3.1 Illustration de la suppression des boucles no 1

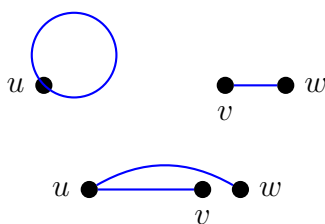


Figure 3.2 Illustration de la suppression des boucles no 2

En répétant cette transformation on obtient un M -graphe sans boucles. Montrons maintenant comment supprimer les arêtes multiples. Supposons que G contient deux sommets $u \in V_i$ et $v \in V_j$ avec $e_{uv} > 1$ (éventuellement $i = j$). Nous montrons comment construire un M -graphe G' avec $\mu(G') < \mu(G)$. Pour cela, nous considérons trois cas :

- (a) s'il existe un sommet $w \neq v$ dans V_j qui n'est pas adjacent à u , alors il existe un sommet q tel que $e_{vq} < e_{wq}$ (v et w ont le même degré j). Nous supprimons une arête entre u et v ainsi qu'une autre arête entre w et q , et nous ajoutons une arête entre u et w , et une autre entre v et q . Clairement, le graphe G' est encore un M -graphe et $\mu(G') < \mu(G)$;

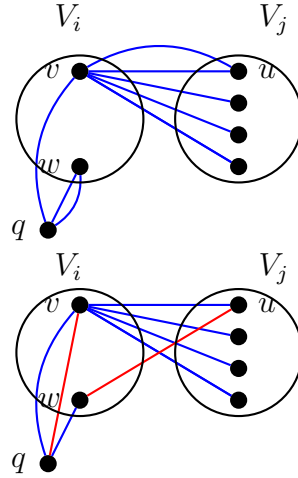


Figure 3.3 Illustration de la transformation (a)

- (b) si u est relié à tous les sommets de V_j , et il y a un sommet $w \neq u$ dans V_i , et qui n'est pas relié à v , nous utilisons la transformation du cas précédent (en permutant les rôles de u et v), et nous obtiendrons un graphe G' avec $\mu(G') < \mu(G)$;
- (c) Si u est relié à tous les sommets de V_j et v est relié à tous les sommets de V_i ,

nous avons $i \neq j$. En fait, avec $i = j$, nous aurions $m_{ii} > \frac{1}{2}n_i(n_i - 1)$, ce qui est interdit par la condition (C1) (si $n_i \geq i + 1$) ou (C2) (si $n_i \leq i$). Par ailleurs, il existe deux sommets non adjacents $u' \in V_i$ et $v' \in V_j$, sinon nous aurions $m_{ij} > n_i n_j$, ce qui est interdit par la condition (C1) (si $n_i \geq j$ ou $n_j \geq i$) ou la condition (C3) (si $n_i \leq j - 1$ et $n_j \leq i - 1$). Nous pouvons donc supposer que u est relié à v' et v à u' avec des arêtes simples, sinon nous serions dans le cas (a) ou (b). Comme u et u' ont le même degré, il existe un sommet $x \notin \{u, u', v, v'\}$ tel que $e_{ux} < e_{u'x}$. De même, il existe un sommet $y \notin \{u, u', v, v'\}$ (éventuellement $x = y$) tel que $e_{vy} < e_{v'y}$.

Nous supprimons une arête entre u et v , une autre entre u' et x , et une autre entre v' et y , nous ajoutons une arête entre u' et v' , une autre entre u et x , et une autre entre v et y . Nous obtiendrons encore un graphe G' qui est un M -graphe avec $\mu(G') < \mu(G)$.

Dans tous les cas, nous avons pu construire un M -graphe avec un nombre inférieur d'arêtes multiples. Nous répétons ainsi ces transformations, jusqu'à obtenir un M -graphe simple. \square

Nous avons prouvé le théorème de la réalisabilité aux arêtes des graphes simples qui ne sont pas nécessairement connexes. Nous allons maintenant prouver un théorème similaire en imposant une condition supplémentaire qui assure la connexité.

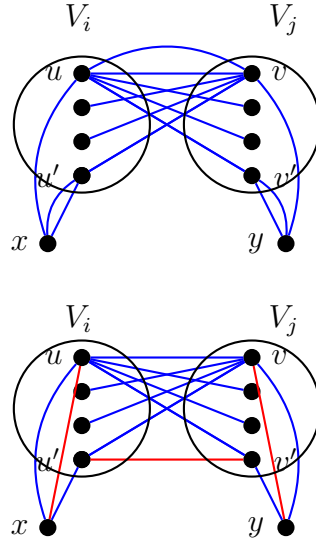


Figure 3.4 Illustration de la transformation (c)

3.2 La réalisabilité aux arêtes des graphes simples connexes

Soit $\Gamma'_M \subseteq \Gamma_M$ l'ensemble des M -graphes simples avec un nombre minimum de composantes connexes. Nous allons caractériser les matrices symétriques M pour lesquelles il existe un M -graphe G simple et connexe. En d'autres termes, nous allons déterminer des conditions nécessaires et suffisantes sur M pour que tous les graphes de Γ'_M soient connexes. En comparant avec le théorème 3.1.1, nous allons montrer que la quatrième condition doit être ajoutée. Il nous faut d'abord introduire quelques notations.

Pour un graphe G , soit $D(G)$ l'ensemble d'entiers i tel qu'il existe au moins un sommet v appartenant à un cycle dans G avec $d_G(v) = i$. De plus, soit $D'(G)$ l'ensemble d'entiers $i \notin D(G)$ tel qu'il existe au moins un sommet w avec $d_G(w) = i$, et qui appartient à un chemin P dans G , dont u et v sont les deux extrémités du chemin, avec $d_G(u) = d_G(v) \in D(G)$, et finalement, soit $H(G)$ le sous graphe de G induit par les sommets de degré $i \in D(G) \cup D'(G)$ dans G .

Par exemple, en considérant les graphes dans la figure 3.8, nous avons $D(G) = \{3, 4\}$ dans (a), (b), et (c), $D(G) = \emptyset$ dans (d), $D'(G) = \{2\}$ dans (a), $D'(G) = \{2, 6\}$ dans (b), et $D'(G) = \emptyset$ dans (c) et (d). Les sommets noirs sont ceux qui ont un degré $i \in D(G)$, tandis que les sommets gris sont ceux qui ont un degré $i \in D'(G)$. Les sommets de $H(G)$ sont ceux qui sont noirs et gris, et les arêtes de $H(G)$ sont celles qui sont représentées par des traits gras.

Maintenant nous prouvons un lemme utile, et nous allons l'illustrer avec les graphes sur

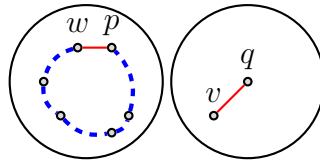
la figure 3.8

Lemme 3.2.1. Soit G un graphe dans Γ'_M avec une valeur maximum $|D(G) \cup D'(G)|$. Si deux sommets u et v dans G ont le même degré $i \in D(G) \cup D'(G)$, alors ils appartiennent à la même composante connexe de $H(G)$.

Démonstration. Considérons deux sommets u et v de même degré $i \in D(G) \cup D'(G)$, et supposons donc, par contradiction, que u et v appartiennent à deux composantes connexes différentes de $H(G)$.

Cas 1 : $i \in D(G)$. Les sommets u et v appartiennent à deux composantes connexes différentes de G , sinon $H(G)$ contiendrait tous les sommets appartenant à tous les chemins qui relient u et v , et donc u et v appartiendraient à la même composante connexe de $H(G)$.

Soit C un cycle qui contient un sommet w (éventuellement égal à u ou v) avec $d_G(w) = i$. Au moins l'un des sommets u ou v , disons u , n'appartient pas à la même composante connexe que w dans G . Soit p un voisin de w sur C , et soit q un voisin quelconque de u dans G . En remplaçant les arêtes uq et wp , par wq et up , et nous obtiendrons un nouveau M -graphe simple avec un nombre inférieur de composantes connexes.



La composante connexe i La composante connexe j

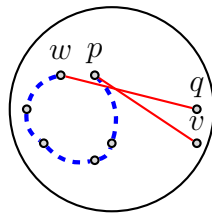


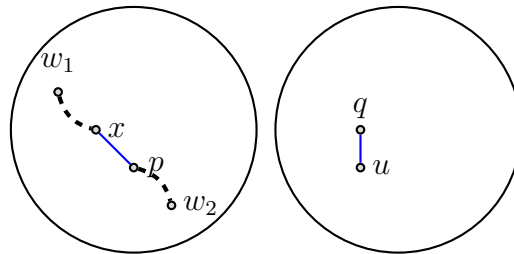
Figure 3.5 Illustration de la transformation du cas 1

Donc nous avons $G \notin \Gamma'_M$, ce qui est contradictoire.

Cas 2 : $i \in D'(G)$. Il existe un sommet x (éventuellement égal à u ou v) dans G avec $d_G(x) = i$, qui appartient à un chemin P dont w_1 et w_2 sont ses extrémités, et $d_G(w_1) = d_G(w_2) \in D(G)$. Au moins l'un des deux sommets u et v , disons u , n'appartient pas à la

même composante connexe à laquelle le chemin P appartient dans $H(G)$. Nous distinguons deux cas :

Cas 2.1 : u et x appartiennent à deux composantes connexes différentes de G . Soit p un voisin de x sur P , et soit q un voisin de u . En remplaçant les arêtes uq et xp par xq et up , nous obtiendrons ainsi un nouveau M -graphe simple G' qui contient au plus le même nombre de composantes connexes que G , ce qui implique $G' \in \Gamma'_M$. Comme x n'appartient pas à un cycle dans G (sinon $i \in D(G)$), nous savons que w_1 et w_2 appartiennent à deux composantes connexes différentes de G' , et d'après le Cas 1, $G' \notin \Gamma'_M$, ce qui est contradictoire.



La composante connexe i La composante connexe j

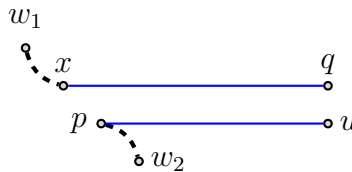


Figure 3.6 Illustration de la transformation du cas 2.1

Cas 2.2 : u et x appartiennent à la même composante connexe de G . Soit P' un plus court chemin entre u et x dans G , soit p un sommet dans $P \setminus P'$ adjacent à x , et soit q un voisin de u qui n'appartient pas à P' .

Soit $G' \in \Gamma'_M$ le graphe obtenu à partir de G en remplaçant les arêtes xp et uq par xq et up . En utilisant $P' \cup \{up\}$ et $P' \cup \{xq\}$ dans G' au lieu de xp et uq dans G pour connecter les sommets

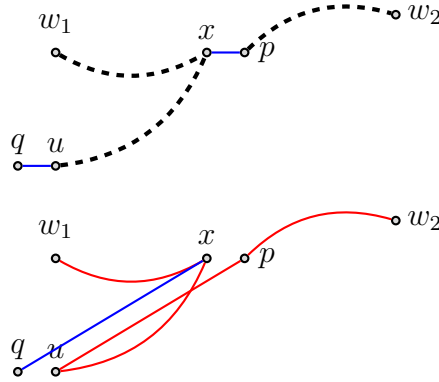


Figure 3.7 Illustration de la transformation du cas 2.2

Nous avons :

- $D(G) \subseteq D(G')$. En effet, Si un sommet appartient à un cycle dans G , alors il appartient à un cycle dans G'
- $D'(G) \subseteq D'(G')$. En effet, Si un sommet w est sur un chemin dans G qui relie deux sommets y_1 et y_2 avec le même degré dans $D(G)$, alors w est sur un chemin dans G' reliant y_1 et y_2 (ce qui prouve $D'(G) \subseteq D'(G')$). De plus, tous les sommets sur P' appartiennent à $H(G')$ puisque $(P \cup P') \setminus \{xp\}$ est un chemin qui relie w_1 et w_2 dans G' . Comme, il existe au moins un sommet sur P' qui n'appartient pas à $H(G)$ (sinon u et x appartiendraient à la même composante connexe de $H(G)$), nous avons $D'(G) \subset D'(G')$

Donc, G' est un graphe dans Γ'_M avec $|D(G') \cup D'(G')| > |D(G) \cup D'(G)|$, une contradiction

□

Considérons le graphe de la Figure 3.8 (a). Les transformations Cas 1 et 2.1 ne peuvent pas s'appliquer car tous les sommets de $H(G)$ appartiennent à la même composante connexe de G . En appliquant les échanges d'arêtes de Cas 2.2, et nous obtiendrons le graphe de la Figure 3.8(b) dont $|D'(G)|$ dépasse exactement d'une unité de $|D'(G)|$ de la Figure 3.8(a).

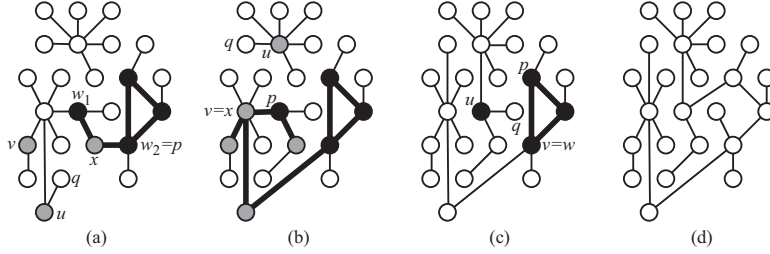


Figure 3.8 Illustration de lemme 3.8

Le graphe dans la Figure 3.8(b) a deux sommets u et v de même degré $6 \in D'(G)$, mais dans les composantes connexes différentes de G . En appliquant les échanges d'arêtes de Cas 2.1, nous obtiendrons ainsi le graphe de la Figure 3.8(c) avec le même nombre de composantes connexes, et dans lequel nous appliquons les échanges d'arêtes de Cas 1 pour obtenir le graphe de la figure 3.8(d), qui est connexe.

Maintenant nous introduisons quelques notations supplémentaires. Soit \mathcal{P}_r l'ensemble contenant toutes les partitions de tous les sous ensemble de $\{2, \dots, r\}$. Par exemple pour $r = 4$, \mathcal{P}_4 contient les 15 partitions suivantes :

- les 5 partitions non-vides de $\{2, 3, 4\}$: $\{\{2\}, \{3\}, \{4\}\}$, $\{\{2\}, \{3, 4\}\}$, $\{\{3\}, \{2, 4\}\}$, $\{\{4\}, \{2, 3\}\}$, et $\{\{2, 3, 4\}\}$;
- les 2 partitions non-vides de $\{2, 3\}$: $\{\{2\}, \{3\}\}$, $\{\{2, 3\}\}$;
- les 2 partitions non-vides de $\{3, 4\}$: $\{\{3\}, \{4\}\}$, $\{\{3, 4\}\}$;
- les 2 partitions non-vides de $\{2, 4\}$: $\{\{2\}, \{4\}\}$, $\{\{2, 4\}\}$;
- les 3 partitions non-vides de $\{2\}, \{3\}$, et $\{4\}$: $\{\{2\}\}$, $\{\{3\}\}$, $\{\{4\}\}$;
- l'ensemble vide.

De plus, pour une partition $p \in \mathcal{P}_r$, soit $E_r(p)$ l'ensemble de tous les entiers qui apparaissent dans un sous-ensemble de p (c'est-à-dire $E_r(p) = \cup_{s \in p} s$), et soit $\overline{E_r(p)} = \{2, \dots, r\} \setminus E_r(p)$. Par exemple pour $p = \{\{2, 3\}, \{5\}\}$, nous avons $E_6(p) = \{2, 3, 5\}$ et $\overline{E_6(p)} = \{4, 6\}$.

Maintenant, soit $I(M)$ l'ensemble d'entiers i dans $\{2, \dots, r\}$ tel que $m_{ii} + \sum_{j=1}^r m_{ij} \geq 1$. pour une partition $p \in \mathcal{P}_r$. Notons par $|p|_M$ le nombre de sous-ensembles $s \in p$ tel que $s \cap I(M) \neq \emptyset$. Par exemple : pour $I(M) = \{2, 3, 5, 6, 8\}$, et $p = \{\{2, 4\}, \{3\}, \{5, 8\}, \{7\}\}$, nous avons $|p|_M = 3$

Il y a une bijection entre \mathcal{P}_r et l'ensemble de partitions $\{1, \dots, r\}$. En effet, pour chaque partition $p \in \mathcal{P}_r$, nous pouvons associer une partition de l'ensemble $\{1, \dots, r\}$ en ajoutant le bloc $\overline{E_r(p)} \cup \{1\}$. Donc, le nombre total de partitions dans \mathcal{P}_r est le $r^{\text{ème}}$ nombre de Bell (séquence A000110 dans OEIS [36]) qui est défini comme suit :

$$B_{r+1} = \sum_{k=0}^n \binom{r}{k} B_k.$$

Maintenant nous sommes prêts à prouver le théorème principal qui caractérise les matrices M pour lesquelles, il existe un M -graphe simple et connexe G .

Théorème 3.2.1. *Soit $M = [m_{ij}]$ une matrice symétrique positive $r \times r$. Il existe un M -graphe simple et connexe G si et seulement si les conditions suivantes sont satisfaites :*

$$(C1) \quad n_i = \frac{1}{i} \left(\sum_{j=i}^r m_{ij} + \sum_{j=1}^i m_{ji} \right) \text{ est entier pour tout } i = 1, \dots, r;$$

$$(C2) \quad m_{ii} \leq \frac{1}{2}(n_i(n_i - 1)) \text{ pour tout } i = 2, \dots, r \text{ tel que } 1 \leq n_i \leq i.$$

$$(C3) \quad m_{ij} \leq n_i n_j \text{ pour tout } 2 \leq i < j \leq r \text{ tel que } 1 \leq n_i < j \text{ et } 1 \leq n_j < i.$$

$$(C4) \quad \sum_{\substack{s \neq s' \\ s, s' \in p}} \sum_{\substack{i \in s \\ j \in s'}} m_{ij} + \sum_{\substack{i \in E_r(p) \\ j \in \overline{E_r(p)}}} m_{ij} + \sum_{\substack{i \leq j \\ \{i, j\} \subseteq \overline{E_r(p)}}} m_{ij} - m_{11} \geq \sum_{i \in E_r(p)} n_i + |p|_M - 1 \quad \forall p \in \mathcal{P}_r.$$

Démonstration, que la condition est nécessaire

Soit G un M -graphe simple et connexe. D'après le théorème 3.1 les conditions (C1)-(C3) sont vérifiées. De plus la condition (C1) implique que $I(M)$ est l'ensemble de tous les entiers $i \in \{2, \dots, r\}$ tel que $n_i \geq 1$. Soit p une partition quelconque dans \mathcal{P}_r , et prouvons que la condition (C4) est aussi vérifiée. Dans ce but, nous construisons un nouveau graphe G' (qui n'est pas nécessairement simple) à partir du graphe G comme suit : tout d'abord nous supprimons tous les sommets de degré 1; ensuite, pour chaque $s \in p$ avec $s \cap I(M) \neq \emptyset$, nous contractons tous les sommets qui ont un degré $i \in s$ à un seul sommet v_s dans G ; et finalement, nous supprimons toutes les boucles. Il est clair que, G' est aussi connexe, et contient $|p|_M$ sommets (d'après la contraction des sommets), ainsi que tous les sommets du graphe G avec un degré $i \notin E_r(p)$. Soient n' et m' désignent respectivement le nombre de sommets et d'arêtes dans G' , alors nous avons :

$$n' = \sum_{i \in \overline{E_r(p)}} n_i + |p|_M; \tag{a}$$

$$m' = \sum_{\substack{s \neq s' \\ s, s' \in p}} \sum_{\substack{i \in s \\ j \in s'}} m_{ij} + \sum_{\substack{i \in E_r(p) \\ j \in \overline{E_r(p)}}} m_{ij} + \sum_{\substack{i \leq j \\ \{i, j\} \subseteq \overline{E_r(p)}}} m_{ij}. \tag{b}$$

□

Il reste à prouver que $m' - m_{11} \geq n' - 1$.

- si $m_{11} > 0$, alors G contient seulement deux sommets (comme il était connexe), et $m_{11} = 1$. Donc $n' = m' = 0$, ce qui implique $m' - m_{11} = n' - 1$;
- si $m_{11} = 0$, alors $m' \geq n' - 1$ (comme G' était connexe), ce qui équivaut à $m' - m_{11} \geq n' - 1$.

Démonstration, que la condition est suffisante

Supposons donc que, M satisfait les conditions (C1)-(C4). Nous savons d'après le théorème 3.1.1 que $\Gamma_M \neq \emptyset$. Alors, soit G un M -graphe simple dans Γ'_M avec une valeur maximum de $|D(G) \cup D'(G)|$, donc il reste à prouver que G est connexe. Soient H_1, \dots, H_k les composantes connexes de $H(G)$, et soit s_j l'ensemble d'entiers $i \in D(G) \cup D'(G)$ tel que H_j contient au moins un sommet de degré i . D'après le lemme 3.2.1, $p = \{s_1, \dots, s_k\}$ est une partition de $D(G) \cup D'(G)$

Soit G' le graphe (qui n'est pas forcément simple) obtenu à partir du graphe G en contractant tous les sommets de H_j ($j = 1, \dots, k$) à un seul sommet v_j , et en supprimant toutes les boucles. Il est suffisant de prouver que G' est connexe, ce qui implique que le graphe original G est aussi connexe.

Soient n' et m' désignent respectivement le nombre de sommets et d'arêtes de G' , nous avons :

$$n' = n_1 + \sum_{i \in E_r(p)} n_i + |p|_M; \quad (\text{a}')$$

$$m' = \sum_{i=1}^r m_{1i} + \sum_{\substack{s \neq s' \\ s, s' \in p}} \sum_{\substack{i \in s \\ j \in s'}} m_{ij} + \sum_{\substack{i \in E_r(p) \\ j \in E_r(p)}} m_{ij} + \sum_{\substack{i \leq j \\ \{i, j\} \subseteq E_r(p)}} m_{ij}. \quad (\text{b}')$$

La condition (C4) implique $m' - \sum_{i=1}^r m_{1i} - m_{11} \geq n' - n_1 - 1$, ce qui est équivalent à $m' \geq n' - 1$, comme $n_1 = m_{11} + \sum_{i=1}^r m_{1i}$ (par la condition (C1))

Supposons donc, par contradiction, que G' n'est pas connexe. Comme $m' \geq n' - 1$, donc G' contient un cycle ou des arêtes multiples.

1- Si un sommet $u \notin H(G)$ est connecté à un sommet v_j ($1 \leq j \leq k$) par des arêtes multiples dans G' , alors deux sommets de H_j sont adjacents à u dans G . Mais comme H_j est connexe, donc u appartient à un cycle dans G , d'où $u \in H(G)$ ce qui est contradictoire.

2- De plus, si deux sommets v_i et v_j ($1 \leq i < j \leq k$) sont connectés par des arêtes

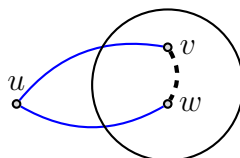
Le graphe G' Le graphe G

Figure 3.9 Illustration de la transformation no 1

multiples dans G' , alors il y a (pas nécessairement distincts) des sommets $u_{i,1}$ et $u_{i,2}$ dans H_i , et (pas nécessairement distincts, sauf si $u_{i,1} = u_{i,2}$) des sommets $u_{j,1}$ et $u_{j,2}$ dans H_j tel que $u_{i,1}$ est adjacent à $u_{j,1}$, et $u_{i,2}$ est adjacent à $u_{j,2}$ dans G , comme H_i et H_j sont connexes cela signifie que G contient un cycle avec des sommets de H_i et H_j , ce qui est contradictoire puisque H_i et H_j sont deux composantes connexes différentes de $H(G)$.

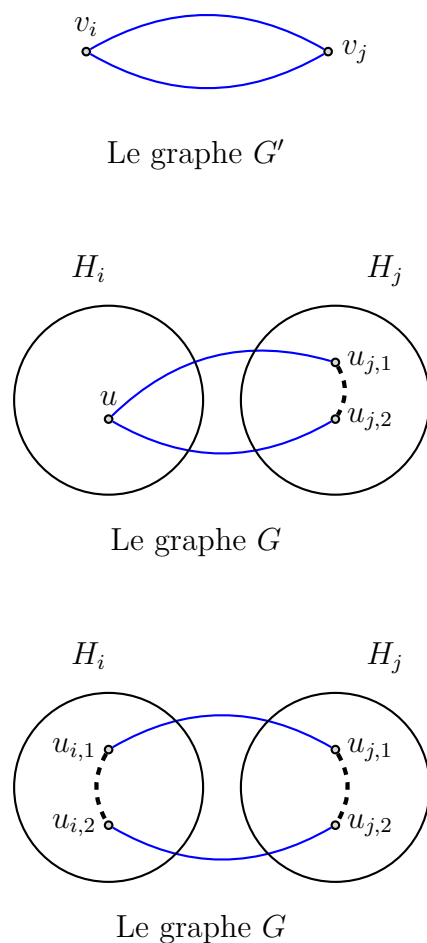


Figure 3.10 Illustration de la transformation no 2

3- Comme nous avons prouvé que G' ne contient aucune arête multiple, cela signifie qu'il existe un cycle $C = w_0 w_2 \dots w_t w_0$ dans G' (comme $m' \geq n' - 1$). Chaque arête de C qui relie w_i et w_{i+1} (les indices sont pris en modulo $t + 1$) correspond à une arête dans G qui relie un sommet x_i et un sommet y_{i+1} . Si $w_i \notin \{v_1, \dots, v_k\}$, alors $w_i = x_i = y_i$. Si $w_i \in \{v_1, \dots, v_k\}$, alors x_i et y_i appartiennent à la même composante connexe de $H(G)$, cela signifie qu'il existe un chemin (éventuellement un seul sommet) qui connecte x_i à y_i dans G . Donc G contient un cycle avec un sommet $w_i \notin H(G)$, ou avec deux sommets x_i et y_{i+1} dans des composantes connexes différentes de $H(G)$, ce qui est contradictoire.

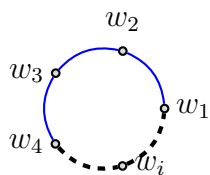


Figure 3.11 Illustration de la transformation no 3

□

La condition (C4) du théorème 3.2 se traduit par un très grand nombre de contraintes, surtout pour les valeurs élevées de r . Cela ne pose cependant pas de problèmes pour le cas des graphes chimiques, où $r = \Delta(G) \leq 4$. En effet, comme nous avons déjà vu \mathcal{P}_4 contient seulement 15 partitions.

Nous avons prouvé des conditions nécessaires et suffisantes pour l'existence d'un graphe simple et connexe. Nous allons voir dans le chapitre suivant comment nous formulons ces conditions en termes d'un modèle linéaire en nombres entiers, et nous présentons ensuite un algorithme de construction de graphes simples et connexes.

CHAPITRE 4 LE MODÈLE LINÉAIRE EN NOMBRES ENTIERS

Dans ce chapitre, nous définissons le modèle linéaire en nombres entiers PLNE des conditions prouvées dans le chapitre précédent, ensuite nous montrons comment trouver la $k^{\text{ème}}$ plus petite valeur ou la $k^{\text{ème}}$ plus grande valeur de quelques indices Adriatiques en ajoutant des contraintes au PLNE, et finalement nous définissons une méthode pour trouver tous les graphes qui optimisent un invariant donné.

4.1 Un programme linéaire en nombres entiers

Soient n et m deux entiers positifs avec $m \geq n - 1$. Dans cette section, nous montrons comment déterminer une matrice symétrique positive M qui satisfait les conditions du Théorème 3.2.1, ainsi que les deux contraintes suivantes :

$$(C5) \quad n = \sum_{i=1}^r n_i$$

$$(C6) \quad m = \sum_{1 \leq i \leq j \leq r} m_{ij}$$

Un M -graphe avec une telle matrice M possède n sommets et m arêtes. Pour trouver une telle matrice nous utilisons un modèle de programmation linéaire en nombres entiers (PLNE). Comme M est une matrice symétrique, nous considérons seulement les variables m_{ij} pour $1 \leq i \leq j \leq r$. Afin de satisfaire les conditions (C1), le PLNE utilise aussi les variables entières non négatives n_i ($i = 1, \dots, r$) qui sont soumises aux contraintes suivantes :

$$\sum_{j=i}^r m_{ij} + \sum_{j=1}^i m_{ji} = in_i \quad i = 1, \dots, r. \quad (4.1)$$

Afin d'imposer la condition (C2), nous considérons la nouvelle variable booléenne x_{ik} qui est définie pour tout $i = 1, \dots, r$ et $k = 1, \dots, i$, et nous imposons

$$n_i \geq (k+1)(1 - x_{ik}) \quad i = 2, \dots, r, \quad k = 1, \dots, i \quad (4.2)$$

$$m_{ii} + x_{ik}m \leq \frac{k(k-1)}{2} + m \quad i = 2, \dots, r, \quad k = 1, \dots, i \quad (4.3)$$

Les contraintes (4.2) impliquent que $x_{ik} = 1$ quand $n_i \leq k$, tandis que x_{ik} peut prendre la valeur 0 ou 1 quand $n_i > k$.

Considérons $i \in \{2, \dots, r\}$; nous avons :

- si $n_i > i$, les contraintes (4.3) n'imposent aucune restriction comme x_{ik} peut prendre la valeur 0 ou 1 pour tout $k = 1, \dots, i$;
- si $n_i = 0$, les contraintes (4.3) imposent une série de bornes supérieures sur m_{ii} , et la plus forte borne est obtenue avec $k = 1$. nous avons ainsi $m_{ii} \leq 0$, qui est déjà imposée par les contraintes (4.1);
- si $1 \leq n_i \leq i$, les contraintes (4.3) imposent une série de bornes supérieures sur m_{ii} , et la plus forte borne est obtenue avec $k = n_i$ (c'est-à-dire, $m_{ii} \leq \frac{1}{2}n_i(n_i - 1)$) qui correspond aux conditions (C2).

La condition (C3) est imposée de la même manière :

$$m_{ij} + mx_{jk} \leq kn_i + m \quad 2 \leq i < j \leq r, k = 1, \dots, i - 1 \quad (4.4)$$

$$m_{ij} + mx_{ik} \leq kn_j + m \quad 2 \leq i < j \leq r, k = 1, \dots, j - 1 \quad (4.5)$$

Pour tout i, j tel que $2 \leq i < j \leq r$

- si $n_i \geq j$ et $n_j \geq i$, aucune contrainte est imposée, donc x_{ik} dans (4.4) et x_{jk} dans (4.5) peuvent valoir 0 pour tout k ;
- si $n_i = 0$ ou $n_j = 0$, les contraintes (4.4) et (4.5) ne sont pas plus restrictives que les contraintes (4.1) qui imposent $m_{ij} = 0$;
- si $n_i \geq j$ et $1 \leq n_j \leq i - 1$, les contraintes (4.4) imposent $m_{ij} \leq n_i n_j$, qui ne sont pas plus restrictives que $m_{ij} \leq j n_j$ qui sont imposées par (4.1) (les contraintes (4.5) n'imposent aucune restriction);
- si $n_j \geq i$ et $1 \leq n_i \leq j - 1$, les contraintes (4.5) imposent $m_{ij} \leq n_i n_j$, qui ne sont pas plus restrictives que $m_{ij} \leq i n_i$ qui sont imposées par les contraintes (4.1);
- si $1 \leq n_j \leq i - 1$ et $1 \leq n_i \leq j - 1$, les deux contraintes (4.4) et (4.5) imposent la condition (C3).

Pour imposer la condition (C4), comme M n'est pas connu, la seule difficulté est le terme $|p|_M$. Par définition, $I(M)$ est l'ensemble d'entiers i dans $\{2, \dots, r\}$ tel que $m_{ii} + \sum_{j=1}^r m_{ij} \geq 1$, et d'après les contraintes (4.1), ceci est équivalent à dire que $I(M)$ est l'ensemble d'entiers i dans $\{2, \dots, r\}$ tel que $n_i \geq 1$. En effet, étant donnée une partition $p \in \mathcal{P}_r$, et un ensemble $s \in p$, nous avons $s \cap I(M) \neq \emptyset$ si et seulement si, il existe $i \in s$ avec $n_i \geq 1$, donc nous définissons la variable booléenne q_s pour tout sous-ensemble non vide s de $\{2, \dots, r\}$.

$$q_s = \begin{cases} 1 & \text{si } \exists i \in s, n_i \geq 1, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Cela est fait par l'imposition des contraintes suivantes :

$$\sum_{i \in s} n_i \leq n q_s \quad s \in \{2, \dots, r\}, s \neq \emptyset \quad (4.6)$$

$$\sum_{i \in s} n_i \geq q_s \quad s \in \{2, \dots, r\}, s \neq \emptyset \quad (4.7)$$

Comme $|p|_M = \sum_{s \in p} q_s$, nous pouvons imposer la condition (C4) comme suit. Pour une partition quelconque $p \in P_r$, soit $A(p)$ l'ensemble de paires (i, j) telles que $i < j$ et il y a deux ensembles distincts s, s' dans p avec $i \in s$ et $j \in s'$. De plus, soit $B(p)$ l'ensemble de paires (i, j) telles que $i < j$, $i \in E_r(p)$ et $j \in \overline{E_r(p)}$, ou $j \in E_r(p)$ et $i \in \overline{E_r(p)}$.

La condition (C4) est imposée par les contraintes suivantes :

$$\sum_{(i,j) \in A(p) \cup B(p)} m_{ij} + \sum_{\substack{i \leq j \\ \{i,j\} \subseteq \overline{E_r(p)}}} m_{ij} - m_{11} \geq \sum_{i \in \overline{E_r(p)}} n_i + \sum_{s \in p} q_s - 1 \quad \forall p \in \mathcal{P}_r \quad (4.8)$$

Il est clair que les conditions (C5) et (C6) sont imposées par les contraintes suivantes, où n et m sont des entiers fixés :

$$n = \sum_{i=1}^r n_i \quad (4.9)$$

$$m = \sum_{1 \leq i \leq j \leq r} m_{ij} \quad (4.10)$$

Finalement, les contraintes suivantes définissent les valeurs admissibles de toutes les variables :

$$m_{ij} \in N \quad i = 1, \dots, r, j = i, \dots, r \quad (4.11)$$

$$n_i \in N \quad i = 1, \dots, r \quad (4.12)$$

$$x_{ik} \in \{0, 1\} \quad i = 2, \dots, r, k = 1, \dots, i \quad (4.13)$$

$$q_s \in \{0, 1\} \quad s \subseteq \{2, \dots, r\}, s \neq \emptyset \quad (4.14)$$

Un calcul simple montre qu'il y a $2^{r-1} + r(r+2) - 2$ variables et $2^r + \frac{r}{2}(r^2 - r + 6) - 4 + B_r$ contraintes (où B_r représente le $r^{\text{ème}}$ nombre de Bell)

Le programme linéaire en nombre entier (PLNE) est défini comme suit :

Minimisation ou maximisation de l'invariant $I(G)$
sous les contraintes 4.1-4.14

4.2 La génération des matrices optimales

Étant donnée une matrice quelconque M qui est obtenue par le PLNE dans la section précédente. Nous allons montrer comment générer une autre matrice différente de M (s'il en existe d'autres), qui satisfait aussi les conditions (C1)–(C6), par la procédure suivante. Soit $\{M_{ij}\}$ une matrice optimale pour la $k^{\text{ème}}$ plus petite valeur ou la $k^{\text{ème}}$ plus grande valeur d'un indices Adriatiques, et est obtenue à partir du PLNE dans la section précédente. Pour tout $1 \leq i \leq j \leq r$ avec $M_{ij} > 0$, nous définissons une variable booléenne y_{ij} , telle que $y_{ij} = 1$ si et seulement si $M_{ij} < m_{ij}$. Cela s'obtient par l'imposition des contraintes suivantes :

$$M_{ij} + my_{ij} \geq m_{ij} \quad \forall 1 \leq i \leq j \leq r \text{ avec } M_{ij} > 0 \quad (4.15)$$

$$y_{ij}(M_{ij} + 1) \leq m_{ij} \quad \forall 1 \leq i \leq j \leq r \text{ avec } M_{ij} > 0 \quad (4.16)$$

$$y_{ij} \in \{0, 1\} \quad \forall 1 \leq i \leq j \leq r \text{ avec } M_{ij} > 0 \quad (4.17)$$

De la même manière, nous définissons la variable booléenne $z_{ij} = 1$ si et seulement si $M_{ij} > m_{ij}$

$$M_{ij} + m(1 - z_{ij}) \geq m_{ij} + 1 \quad \forall 1 \leq i \leq j \leq r \text{ avec } M_{ij} > 0 \quad (4.18)$$

$$(1 - z_{ij})M_{ij} \leq m_{ij} \quad \forall 1 \leq i \leq j \leq r \text{ avec } M_{ij} > 0 \quad (4.19)$$

$$z_{ij} \in \{0, 1\} \quad \forall 1 \leq i \leq j \leq r \text{ avec } M_{ij} > 0 \quad (4.20)$$

Afin de générer une nouvelle matrice différente de M , il est suffisant d'ajouter la contrainte

suivante, qui impose qu'au moins l'une variable y_{ij} et z_{ij} soit égale à 1 :

$$\sum_{i=1}^r \sum_{j=i}^r (y_{ij} + z_{ij}) \geq 1 \quad (4.21)$$

4.3 La construction des graphes simples et connexes qui optimisent un invariant donné

La construction d'un M-graphe simple ou M-graphe simple et connexe peut être faite selon la preuve de la section 3.1 et 3.2 dans le chapitre précédent. Plus précisément, étant donnée une matrice M qui satisfait les conditions (C1)-(C3), l'Algorithme 1 dans la table 4.1 construit un M-graphe simple suivant la preuve du Théorème 3.1.1. Les instructions 2-13 construisent un M-graphe, les instructions 15-18 suppriment les boucles, et les instructions 19-25 suppriment les arêtes multiples. Notons qu'on ne considère pas le cas où deux sommets de même degré i ont chacun une boucle, cette situation ne se produit jamais avec les phases constructives 2-13. De plus, les cas (a) et (b) du Théorème 3.1 correspondent aux instructions 20-21, tandis que le cas (c) est traité dans 22-23.

De manière similaire, étant donnée une matrice M qui satisfait les conditions (C1)-(C4), l'Algorithme 2 dans la table 4.2 construit un M-graphe simple et connexe suivant la preuve du Théorème 3.2. A est l'ensemble de sommets qui appartiennent à un cycle, tandis que B contient tous les sommets de degré $i \in D(G)$. De plus, A' est l'ensemble de sommets appartenant à un chemin qui relie deux sommets de l'ensemble B de même degré, tandis que B' contient tous les sommets avec un degré $D'(G)$. Le sommet b_v qui apparait dans les instructions 16, 21 et 26, est un voisin de $v \in A'$ sur un chemin qui relie deux sommets de même degré B . Les échanges d'arêtes dans les instructions 8-10 correspondent au cas 1 du Théorème 3.2, tandis que les instructions 20-22 sont pour le Cas 2.1, et les instructions 25-27 pour le Cas 2.2

Tableau 4.1 Construction d'un M -graphe simple.

Algorithme 1 : Construction du M -graphe simple pour la matrice M qui satisfait les conditions (C1)-(C3)

- 1 Construction de M -graphe
- 2 Créer r ensembles de sommets V_i ($i = 1, \dots, r$) distingués, avec $|V_i| = n_i$;
- 3 Soit $m'_{ij} = 0 \forall 1 \leq i \leq j \leq r$ et $I = \{(i, j) \mid i \leq j \text{ et } m'_{ij} < m_{ij}\}$;
- 4 **tant que** $I \neq \emptyset$ **faire**
 - 5 choisir une paire $(i, j) \in I$;
 - 6 **si** $i=j$ **alors**
 - 7 **si** *il existe deux sommets u, v de degré $< i$ dans V_i* **alors**
 - 8 | Ajouter une arête entre u et v ;
 - 9 **sinon**
 - 10 | Choisir $u \in V_i$ de degré $< i$, et ajouter une boucle incidente au sommet u ;
 - 11 **sinon**
 - 12 | Choisir $u \in V_i$ de degré $< i$ et $v \in V_j$ de degré $< j$, et ajouter une arête entre u et v ;
- 13 **fin**
- 14 Suppression des boucles et des arêtes multiples
- 15 **tant que** *le graphe contient des boucles* **faire**
 - 16 Choisir u, v dans le même V_i tel que u possède une boucle;
 - 17 Choisir $w \neq u$ adjacent à v ;
 - 18 Remplacer une boucle de u et une arête entre v et w par une arête entre u et v , et une autre entre u et w ;
- 19 **fin**
- 20 **tant que** *le graphe contient des arêtes multiples* **faire**
 - 21 **si** *il existe u, v, w tels que $e_{uv} > 1$, $e_{v,w} = 0$, et v et w appartiennent au même V_i* **alors**
 - 22 Choisir q avec $e_{vq} < e_{wq}$, supprimer une arête entre u et v et une autre entre w et q , et ajouter une arête entre u et w et une autre entre v et q ;
 - 23 **sinon**
 - 24 Déterminer u, v, u', v' tels que u, u' appartiennent au même V_i , et v, v' appartiennent au même V_j , $e_{uv} > 1$, et $e_{u'v'} = 0$;
 - 25 Choisir x et y tel que $e_{ux} < e_{u'x}$ et $e_{vy} < e_{v'y}$;
 - 26 Supprimer une arête entre u et v , une entre u' et x , et une autre entre v' et y ;
 - 27 Ajouter une arête entre u' et v' , une autre entre u et x , et une autre entre v et y ;
- 28 **fin**

Tableau 4.2 Construction d'un M -graphe simple et connexe pour la matrice M qui satisfait les conditions (C1)-(C4)

Algorithme 2 : Construction d'un M -graphe simple et connexe pour la matrice M qui satisfait les conditions (C1)-(C4)

```

1 Utiliser l'Algorithme 1 pour construire un  $M$ -graphe simple ;
2 tant que  $G$  n'est pas connexe faire
3   Déterminer une base de cycle de  $G$  et soit  $A$  l'ensemble de sommets qui
   appartiennent au moins à une base de cycle ;
4   pour chaque sommet  $v \in A$  faire
5     Poser  $C_v$  égale à une base de cycle qui contient  $v$  ;
6   fin
7   Déterminer l'ensemble  $B \supseteq A$  de sommets qui ont au moins un sommet de même
   degré dans  $A$  ;
8   si il existe  $u \in B$  et  $v \in A$  de même degré, qui appartiennent dans deux
   composantes connexes différentes de  $G$  alors
9     Choisir  $q$  adjacent à  $u$  et  $p$  sur  $C_v$  et adjacent à  $v$  ;
10    Remplacer les arêtes  $uq$  et  $vp$  par  $up$  et  $vq$  ;
11  sinon
12    Poser  $A' = \emptyset$  ;
13    pour chaque sommet  $v \notin B$  faire
14      Soient  $u_1, \dots, u_r$  les voisins de  $v$  dans  $G$  et soit  $G_j$  ( $1 \leq j \leq r$ ) les
      composantes connexes de  $G - v$  qui contient  $u_j$  ;
15      si il existe  $x \in G_i \cap B$  et  $y \in G_j \cap B$  de même degré, et avec  $i \neq j$  alors
16        Choisir une paire de sommets  $x, y$ , poser  $b_v = x$ , et ajouter  $v$  à  $A'$  ;
17    fin
18    Déterminer l'ensemble  $B' \supseteq A'$  de sommets qui ont au moins un sommet de
      même degré dans  $A'$  ;
19    si il existe  $u \in B'$  et  $v \in A'$  de même degré, et qui appartiennent dans deux
      composantes connexes différentes de  $G$  alors
20      Choisir un sommet  $q$  adjacent à  $u$  ; remplacer les arêtes  $uq$  et  $vb_v$  par  $ub_v$ 
      et  $vq$  ;
21    sinon
22      Soit  $H$  le sous graphe induit par les sommets dans  $B \cup B'$  ;
23      Déterminer  $u \in B'$  et  $v \in A'$  de même degré, qui appartiennent à deux
      composantes connexes différentes de  $H$  ;
24      Choisir un sommet  $q$  adjacent à  $u$  ;
25      Remplacer les arêtes  $uq$  et  $vb_v$  par  $ub_v$  et  $vq$  ;
26 fin

```

Remarque :

Soient $C_i, i = 1, \dots, K$ les composantes connexes déterminées à l'étape 3 dans l'Algorithme 2. À l'étape 4, nous utilisons l'algorithme de *Prim* [34] pour trouver un arbre couvrant T_i pour chaque composante connexe C_i (avec des coûts unitaires sur chaque arête). Afin de déterminer les sommets appartenant à A à l'étape 4, nous ajoutons une arête e à la fois telle que $e \in C_1$ et $e \notin T_1$.

4.4 Les graphes extrêmes pour des invariants Adriatiques

Nous allons montrer comment trouver les graphes extrêmes simples et connexes qui optimisent (maximisent ou minimisent) des indices Adriatiques.

Étant donnés deux entiers n et m , pour trouver un graphes simples et connexes G avec la valeur optimale $I(G)$, nous devons tout d'abord résoudre le modèle linéaire en nombres entiers PLNE, et puis, nous allons passer à la construction de M -graphe simple et connexe (avec l'Algorithme 2), en utilisant la matrice M générée par le PLNE.

L'Algorithme 3 de la table 4.3 génère un ensemble de graphes simples et connexes avec n sommets et m arêtes qui optimisent l'invariant $I(G)$. L'algorithme commence à générer un ensemble de matrices optimales M , et des M -graphes simples et connexes pour chaque matrice M . Finalement, nous pouvons trouver d'autres graphes extrêmes avec les mêmes matrices M , en utilisant la transformation décrite dans les instructions 9-18 de l'Algorithme

3. Suivant la conjecture 4.4.1, l'Algorithme 3 génère tous les graphes simples et connexes qui optimisent la valeur de $I(G)$.

Conjecture 4.4.1. *Étant donnés deux entiers n et m et un invariant graphique Adriatique I , l'Algorithme 3 génère tous les graphes simples et connexes G avec une valeur optimale $I(G)$*

Tableau 4.3 Construction d'un ensemble de graphes simples et connexes qui optimisent un invariant.

Algorithme 3 : Construction d'un ensemble de graphes simples et connexes G avec n sommets, m arêtes, et la valeur optimale $I(G)$

- 1 Minimiser ou maximiser l'invariant I sous les contraintes (4.1)-(4.14) ;
- 2 Soit I^* la valeur optimale résultante, et M la matrice optimale ;
- 3 Poser $S = \emptyset$;
- 4 **répéter**
- 5 | Construire un M -graphe simple et connexe avec l'Algorithme 2 ;
- 6 | Ajouter G à S ;
- 7 | Ajouter les contraintes (4.15)-(4.21) au programme linéaire en nombres entiers pour ne pas générer la même matrice M ;
- 8 | Résoudre le nouveau programme linéaire en nombres entiers, poser M une nouvelle matrice optimale, et soit I' la valeur optimale résultante ;
- 9 **jusqu'à** $I' \neq I^*$;
- 10 Considérons tous les graphes de S non marqués ;
- 11 **tant que** S contient des graphes non marqués **faire**
- 12 | Choisir un graphe G non marqué dans S ;
- 13 | **pour chaque** quadruple (u, v, x, y) de sommets **faire**
- 14 | | **si** u et v ont le même degré, u est relié à x mais pas à y , et v est relié à y mais pas à x **alors**
- 15 | | | Construire un graphe G' à partir de G en remplaçant les arêtes ux et vy par les arêtes uy et vx ;
- 16 | | | **si** G' est connexe et $G' \notin S$ **alors**
- 17 | | | | Ajouter G' dans S , et considérerons G' comme non marqué ;
- 18 | **fin**
- 19 | marquer G ;
- 20 **fin**

Afin de générer un ensemble de graphes simples et connexes pour la seconde valeur minimum ou pour toute $k^{\text{ème}}$ valeur minimum, avec $k > 1$, il est suffisant de changer le critère d'arrêt à l'étape 9 de l'Algorithme 3. Notons qu'afin de déterminer si le graphe G' est dans S à l'étape 16, nous utilisons l'algorithme de McKay [28] pour déterminer s'il existe un autre graphe isomorphe à G' dans S .

Nous allons illustrer l'efficacité des modèles et des algorithmes de ce chapitre en prenant le cas *des arbres chimiques*, (i.e. les arbres avec un degré maximum $r \leq 4$). Donc nous résoudrons le PLNE en fixant $r = 4$ et $m = n - 1$. Comme nous avons déjà mentionné dans la section 4.1 le modèle contient $2^{r-1} + r(r+2) - 2$ variables et $2^r + \frac{r}{2}(r^2 - r + 6) - 4 + B_r$ contraintes, ce qui donne au total 30 variables et 63 contraintes (pour $r = 4$), indépendamment du nombre de sommets considérés dans l'arbre chimique. Nous commençons par générer tous les arbres chimiques simples avec $6 \leq n \leq 15$ sommets ayant la $k^{\text{ème}}$ plus petite valeur pour l'indice de Randić, pour tout $k = 1, \dots, 5$. L'ensemble de graphes extrêmes sont représentés dans la figure 4.1.

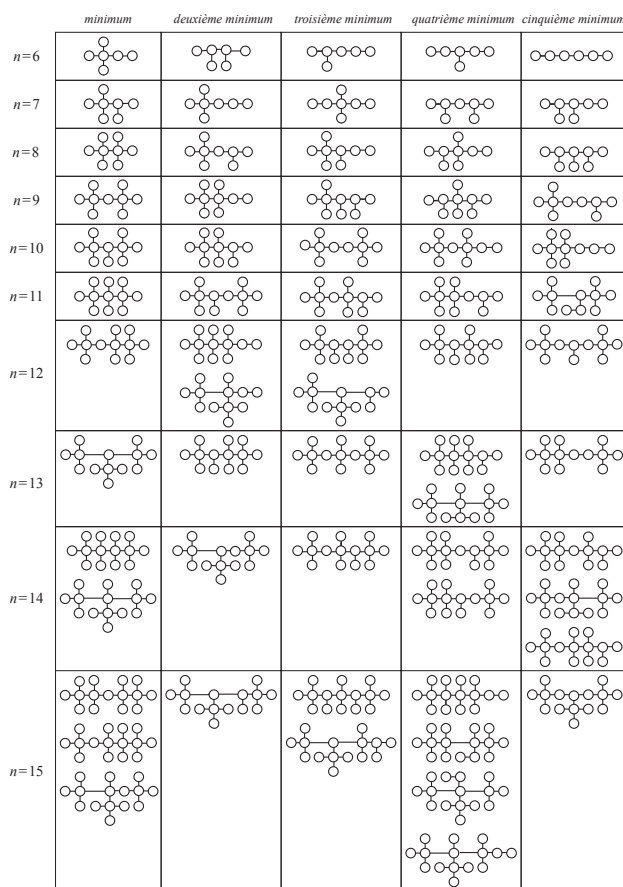


Figure 4.1 Les arbres chimiques extrêmes pour l'indice de Randić.

Pour la comparaison, une étude similaire a été réalisée dans [26] et [21], où les auteurs font une analyse des arbres chimiques pour le minimum (la plus petite valeur), le second minimum, et le troisième minimum de l'indice de Randić. Les auteurs donnent des graphes extrêmes pour chaque $n = 6, 7, \dots, 24$. Une comparaison attentive de ces résultats, montre que les trois graphes présentés dans [21] et [26] (à la page 87) ne sont pas corrects : leur second minimum et leur troisième minimum pour $n = 11$, ainsi que leur troisième minimum pour $n = 14$ ont tous une valeur de Randić plus grande que notre cinquième minimum. Par exemple les graphes qui sont dans la figure 4.1 pour $n = 11$ ont des valeurs respectives de 4.5, 4.62, 4.65, 4.66, et 4.69 de l'indice de Randić.

Nous présentons dans la Figure 4.2, le graphe considéré comme le second minimum pour l'indice de Randić dans [26] et [21], et qui a la valeur 4.71.

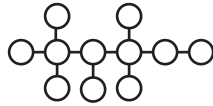


Figure 4.2 Arbre chimique avec 11 sommets qui est présenté comme le second minimum pour l'indice de Randić dans [26] et [21]

La condition (C4) est importante pour assurer la connexité. Pour la comparaison, Nous illustrons dans la Figure 4.3 les graphes simples ayant un degré maximum $r \leq 4$, $m = n - 1$ arêtes, $4 \leq n \leq 13$ sommets, et l'indice de Randić minimum. Ces graphes sont obtenus en remplaçant la contrainte (4.9) par l'inégalité $\sum_{i=1}^r n_i \leq n$ pour permettre d'avoir des sommets isolés, et en ôtant les contraintes (4.6), (4.7), et (4.8), en utilisant l'Algorithme 1 au lieu de l'Algorithme 2 à l'étape 5 de l'Algorithme 3, et la suppression de la condition de connexité à l'étape 16 de l'Algorithme 3.

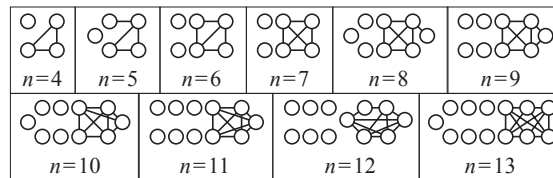


Figure 4.3 Les graphes avec l'indice de Randić minimum et $n - 1$ arêtes.

Soit R_n la plus petite valeur de l'indice de Randić pour l'arbre chimique avec n sommets, et soit R_n^* la plus petite valeur de l'indice de Randić pour le graphe simple avec n sommets et

$m = n - 1$ arêtes, et le degré maximum $r \leq 4$. Clairement, $R_n \geq R_n^*$. La différence $R_n - R_n^*$ est le *prix de la connectivité* [7] que nous représentons dans la figure 4.4 pour $n \leq 99$. La courbe indique la forme régulière pour $n \geq 11$. Après avoir analysé les graphes pour R_n^* , nous remarquons que si n est impair alors le graphe possède $\frac{n-1}{2}$ sommets de degré 4, et $\frac{n+1}{2}$ sommets isolés, sinon le graphe a $\frac{n-2}{2}$ sommets de degré 4, et un sommet de degré 2, et $\frac{n}{2}$ sommets isolés. La formule de la fonction régulière $R_n - R_n^*$ est représenté dans la figure 4.4 pour $n \geq 11$, nous avons :

$$R_n - R_n^* \leq \begin{cases} \frac{n}{6} & \text{si } n \bmod(6)=0 \\ \frac{n-1}{6} + \frac{\sqrt{3}-1}{2} & \text{si } n \bmod(6)=1 \\ \frac{n+4}{6} - \frac{\sqrt{2}}{2} & \text{si } n \bmod(6)=2 \\ \frac{n-3}{6} - \frac{\sqrt{2}}{2} & \text{si } n \bmod(6)=3 \\ \frac{n-4}{6} - \frac{\sqrt{3+1}-\sqrt{2}}{2} & \text{si } n \bmod(6)=4 \\ \frac{n+1}{6} & \text{si } n \bmod(6)=5 \end{cases}$$

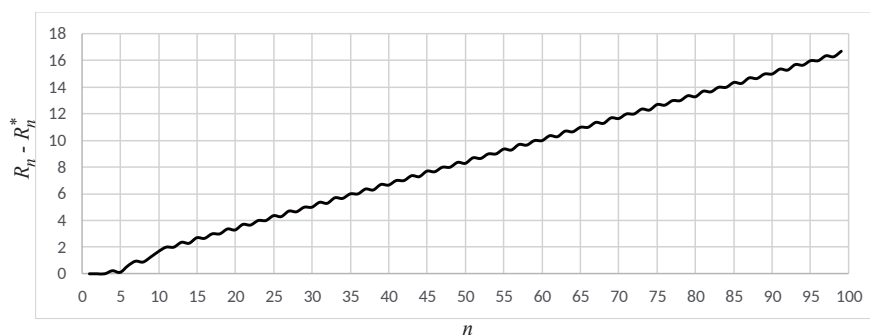


Figure 4.4 Le prix de la connectivité pour l'indice de Randić pour les arbres chimiques

Finalement, Nous présentons dans la figure 4.5 tous les arbres chimiques avec de $6 \leq n \leq 12$ ayant la valeur du minimum, le deuxième minimum, le troisième minimum, le quatrième minimum et cinquième minimum de second indice de Zagreb.

Bien qu'il ne soit pas le cas pour l'indice de Randić, il arrive parfois qu'une valeur extrême de second indice de Zagreb soit atteinte par plusieurs M -matrices. Des exemples de graphes extrêmes ayant la même valeur, avec différentes M -matrices sont visibles sur la figure 4.5, ils sont dans une même case séparés par des lignes pointillées. Par exemple, pour $n = 10$, il y a 4 graphes avec le même quatrième minimum de second indice de Zagreb. Le premier graphe est obtenu à partir de la première M -matrice, tandis que les trois autres sont obtenus à partir de la deuxième M -matrice.

| | <i>minimum</i> | <i>deuxième minimum</i> | <i>troisième minimum</i> | <i>quatrième minimum</i> | <i>cinquième minimum</i> |
|--------|----------------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $n=6$ | ○○○○○○ | ○○○○○ ○ | ○○○○○ ○ | ○○○○○ ○ | ○○○○○ ○ |
| $n=7$ | ○○○○○○○ | ○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○ ○ |
| $n=8$ | ○○○○○○○○ | ○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○ ○ |
| $n=9$ | ○○○○○○○○○ | ○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○ ○ |
| $n=10$ | ○○○○○○○○○○ | ○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○ ○ |
| $n=11$ | ○○○○○○○○○○○ | ○○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○○ ○ |
| $n=12$ | ○○○○○○○○○○○○ | ○○○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○○○ ○ | ○○○○○○○○○○○○ ○ |

Figure 4.5 Les graphes extrêmes qui minimisent le second indice de Zagreb

4.5 Outil de résolution du modèle linéaire

Tout au long de cette maîtrise, nous avons utilisé le langage de programmation Java pour implémenter l'algorithme 3, et nous avons aussi utilisé le solveur Cplex Studio version 12.6.1.0 pour résoudre le programme linéaire en nombres entiers. Cet outil permet de résoudre des programmes linéaires mixtes, en combinant l'algorithme du simplexe, la méthode de séparation et évaluation, et la génération de coupes. [11]

CHAPITRE 5 CONCLUSION

Dans ce mémoire nous avons posé le problème de la réalisabilité aux arêtes d'un graphe simple et connexe ayant m_{ij} arêtes entre les sommets de degré i et j . Nous avons obtenu des conditions nécessaires et suffisantes pour la réalisabilité de tels graphes (voir le Théorème 3.1.1). En second lieu, nous avons formulé ces conditions sous forme de programme linéaire en nombres entiers, qui est utilisé pour déterminer les valeurs extrêmes de plusieurs indices Adriatiques. Finalement, nous avons développé un algorithme pour générer des graphes extrêmes simples et connexes atteignant la $k^{\text{ème}}$ plus petite valeur ou la $k^{\text{ème}}$ plus grande valeur des indices Adriatiques ($k \geq 1$).

Afin de montrer l'efficacité de notre algorithme, nous avons comparé les graphes générés par notre algorithme avec des graphes obtenus par des modèles qui n'assurent pas la connexité des graphes. Nous avons également obtenu les minima successifs pour l'indice de Randić des arbres chimiques. Dans certains cas nous avons amélioré les résultats présentés dans [21, 26].

Dans de futurs travaux nous nous intéressons aux problèmes suivants :

Problème 1

Étant donnée une valeur positive Val pour un invariant graphique donné, parmi les graphes chimiques ayant n sommets et m arêtes, nous nous intéressons à la génération de graphes qui ont la valeur supérieure et la valeur inférieure la plus proche possible de Val .

Problème 2

Étant donnés n, m qui correspondent aux nombres de sommets et d'arêtes, nous nous intéressons à générer des conjectures sous la Forme 1 d'AutoGraphiX [1] qui est la suivante :

$$\underline{b_{n,m}} \leq I_1(G) \otimes I_2(G) \leq \overline{b_{n,m}}$$

où le symbole \otimes représente une opération liant deux invariants Adriatiques (I_1 et I_2) qui peut être : $+$, $-$, \times , ou $/$.

Le but est donc de trouver la bornes $\underline{b_n}$ et $\overline{b_n}$ en fonction de l'ordre n et de la taille m du graphe, sur $I_1(G) \otimes I_2(G)$ pour une paire d'invariants Adriatiques I_1 et I_2 donnée. Pour chacune des bornes, on donne des graphes extrêmes pour lesquels les deux bornes sont

atteintes.

Pour finir, rappelons que nous avons posé une conjecture

Conjecture 4.4.1 Étant donnés deux entiers n et m et un invariant graphique Adriatique I , l'algorithme 3 génère tous les graphes simples et connexes G avec une valeur optimale $I(G)$

RÉFÉRENCES

- [1] M. Aouchiche, “Comparaison automatisée d’invariants en théorie des graphes”, Thèse de doctorat, École polytechnique, 2006.
- [2] A. T. Balaban, *Chemical applications of graph theory*. Academic Press, 1976.
- [3] —, “Chemical graphs”, *Theoretical Chemistry Accounts : Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta)*, vol. 53, no. 4, pp. 355–375, 1979.
- [4] B. Bollobás et P. Erdős, “Graphs of extremal weights”, *Ars Combinatoria*, vol. 50, pp. 225–233, 1998.
- [5] D. Bonchev, *Chemical graph theory : introduction and fundamentals*. CRC Press, 1991, vol. 1.
- [6] K. J. Burch, “Chemical graph theory”, *Loci (February 2010), DOI*, vol. 10, 2008.
- [7] E. Camby, J. Cardinal, S. Fiorini, et O. Schaudt, “The price of connectivity for vertex cover”, *Discrete Mathematics & Theoretical Computer Science*, vol. 16, no. 1, pp. 207–224.
- [8] G. Caporossi, I. Gutman, et P. Hansen, “Variable neighborhood search for extremal graphs : Iv : chemical trees with extremal connectivity index”, *Computers & chemistry*, vol. 23, no. 5, pp. 469–477, 1999.
- [9] G. Caporossi, I. Gutman, P. Hansen, et L. Pavlović, “Graphs with maximum connectivity index”, *Computational Biology and Chemistry*, vol. 27, no. 1, pp. 85–90, 2003.
- [10] H. Deng, G. Huang, et X. Jiang, “A unified linear-programming modeling of some topological indices”, *Journal of Combinatorial Optimization*, vol. 30, no. 3, pp. 826–837, 2015.
- [11] C. Duhamel et A. Duhamel, *Introduction à CPLEX*, 2009. En ligne : http://www.isima.fr/~duhamel/ESDI/intro_CPLEX_v2.pdf
- [12] D. B. Ernesto, E., *Chemical Graph Theory*, 2013.
- [13] E. Estrada, L. Torres, L. Rodríguez, et I. Gutman, “An atom-bond connectivity index : modelling the enthalpy of formation of alkanes”, *Indian journal of chemistry. Sect. A :*

- Inorganic, physical, theoretical & analytical*, vol. 37, no. 10, pp. 849–855, 1998.
- [14] O. Favaron, M. Mahéo, et J.-F. Saclé, “Some eigenvalue properties in graphs (conjectures of graffiti—ii)”, *Discrete Mathematics*, vol. 111, no. 1-3, pp. 197–220, 1993.
- [15] M. Fischermann, A. Hoffmann, D. Rautenbach, et L. Volkmann, “A linear-programming approach to the generalized randić index”, *Discrete applied mathematics*, vol. 128, no. 2, pp. 375–385, 2003.
- [16] B. Furtula, A. Graovac, et D. Vukičević, “Augmented zagreb index”, *Journal of mathematical chemistry*, vol. 48, no. 2, pp. 370–380, 2010.
- [17] A. Graovac, I. Gutman, N. Trinajstić, et T. Živković, “Graph theory and molecular orbitals”, *Theoretical Chemistry Accounts : Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta)*, vol. 26, no. 1, pp. 67–78, 1972.
- [18] I. Gutman et N. Trinajstić, “Graph theory and molecular orbitals. total φ -electron energy of alternant hydrocarbons”, *Chemical Physics Letters*, vol. 17, no. 4, pp. 535–538, 1972.
- [19] —, “Graph theory and molecular orbitals”, *New Concepts II*, pp. 49–93, 1973.
- [20] I. Gutman, B. Rusčić, N. Trinajstić, et C. F. Wilcox Jr, “Graph theory and molecular orbitals. xii. acyclic polyenes”, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 62, no. 9, pp. 3399–3405, 1975.
- [21] I. Gutman, O. Miljković, G. Caporossi, et P. Hansen, “Alkanes with small and large randić connectivity indices”, *Chemical Physics Letters*, vol. 306, no. 5, pp. 366–372, 1999.
- [22] S. L. Hakimi, “On realizability of a set of integers as degrees of the vertices of a linear graph I”, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 10, no. 3, pp. 496–506, 1962.
- [23] —, “On realizability of a set of integers as degrees of the vertices of a linear graph II”, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 11, no. 1, pp. 135–147, 1963.
- [24] P. Hansen, A. Hertz, C. Sellal, D. Vukičević, M. Aouchiche, et G. Caporossi, “Edge realizability of connected simple graphs”, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, (in press).

- [25] P. Hansen, A. Hertz, C. Sellal, D. Vukicevic, M. Aouchiche, et G. Caporossi, “Edge realizability of connected simple graphs”.
- [26] X. Li, I. Gutman, et M. Randić, *Mathematical aspects of Randić-type molecular structure descriptors*. University, Faculty of Science, 2006.
- [27] Loic. (2008) An introduction to chemical graph theory. En ligne : https://www.maa.org/external_archive/joma/Volume8/Burch/Research.html
- [28] B. D. McKay, “Applications of a technique for labelled enumeration”, *Congressus Numerantium*, vol. 40, pp. 207–221, 1983.
- [29] S. Nikolić, G. Kovačević, A. Miličević, et N. Trinajstić, “The zagreb indices 30 years after”, *Croatica chemica acta*, vol. 76, no. 2, pp. 113–124, 2003.
- [30] L. Pavlovic, “Graphs with extremal randic index when the minimum degree of vertices is two”, *Kragujevac Journal of Mathematics*, vol. 25, pp. 55–63, 2003.
- [31] L. Pavlović, “The linear programming approach to the randić index”, *International Transactions in Operational Research*, vol. 14, no. 6, pp. 535–545, 2007.
- [32] —, “Maximal value of the zeroth-order randić index”, *Discrete Applied Mathematics*, vol. 127, no. 3, pp. 615–626, 2003.
- [33] J.-P. Pier, *Development of mathematics : 1950-2000*. Birkhauser Verlag, Basel, 2000.
- [34] R. C. Prim, “Shortest connection networks and some generalizations”, *Bell Labs Technical Journal*, vol. 36, no. 6, pp. 1389–1401, 1957.
- [35] M. Randic, “Characterization of molecular branching”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 97, no. 23, pp. 6609–6615, 1975.
- [36] N. Sloane, *The on-line encyclopedia of integer sequences*. En ligne : <http://www.research.att.com/minjas/sequences/>.
- [37] D. Veljan et D. Vukičević, “On acyclic molecular graphs with prescribed numbers of edges that connect vertices with given degrees”, *Journal of mathematical chemistry*, vol. 40, no. 2, pp. 155–178, 2006.
- [38] D. Vukičević et B. Furtula, “Topological index based on the ratios of geometrical and arithmetical means of end-vertex degrees of edges”, *Journal of mathematical chemistry*, vol. 46, no. 4, pp. 1369–1376, 2009.

- [39] D. Vukičević et M. Gašperov, “Bond additive modeling 1. adriatic indices”, *Croatica chemica acta*, vol. 83, no. 3, pp. 243–260, 2010.
- [40] D. Vukičević et A. Graovac, “On molecular graphs with valencies 1, 2 and 4 with prescribed numbers of bonds”, *Croatica chemica acta*, vol. 77, no. 1-2, pp. 313–319, 2004.
- [41] —, “high valence connectivities are realizing monocyclic molecules : generating algorithm and its application to test discriminative properties of zagreb and modified zagreb index”, dans *Third Mathematical Congress 2004*, 2004.
- [42] —, “Valence connectivity versus randić, zagreb and modified zagreb index : A linear algorithm to check discriminative properties of indices in acyclic molecular graphs”, *Croatica chemica acta*, vol. 77, no. 3, pp. 501–508, 2004.
- [43] D. Vukičević et N. Trinajstić, “Modified zagreb m 2 index–comparison with the randić connectivity index for benzenoid systems”, *Croatica chemica acta*, vol. 76, no. 2, pp. 183–187, 2003.
- [44] —, “On the discriminatory power of the zagreb indices for molecular graphs”, *MATCH : communications in mathematical and in computer chemistry*, vol. 53, pp. 111–138, 2005.
- [45] D. Vukičević et A. Graovac, “Comparing zagreb 1 m and 2 m indices for acyclic molecules”, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem*, vol. 57, pp. 587–590, 2007.
- [46] B. Zhou et N. Trinajstić, “On general sum-connectivity index”, *Journal of mathematical chemistry*, vol. 47, no. 1, pp. 210–218, 2010.