

Applications de *Maple* pour calculer dans l'anneau de séries formelles dont les indéterminées sont les espèces atomiques.

Yves CHIRICOTA

Département de Mathématiques et d'Informatique,
Université du Québec à Montréal,
C. P. 8888, Succ. "A",
Montréal, Québec, Canada, H3C 3P8.

1. Introduction.

La décomposition moléculaire et le théorème de Yeh (voir [Yeh]) font que les espèces virtuelles constituent un anneau de séries formelles à une infinité de variables $Z[[\mathcal{A}]]$, où \mathcal{A} est l'ensemble des espèces atomiques. Nous verrons comment un logiciel de calcul symbolique tel *Maple* peut nous aider à résoudre quelques problèmes se situant dans le contexte de cet anneau $Z[[\mathcal{A}]]$ et dans le sous-anneau $Z[[\mathcal{E}]]$ où \mathcal{E} est formé des espèces moléculaires de type *Ensemble* : E_0, E_1, E_2, \dots etc.

La première partie de l'exposé décrit deux approches utilisées en *Maple* pour trouver les solutions à des équations différentielles combinatoires du type $Y'=F(X,Y)$ avec conditions initiales, où $Y \in Z[[\mathcal{A}]]$, $Y \in Z[[\mathcal{E}]]$ ou $Y \in N[[\mathcal{A}]]$. On trouve en outre que l'équation $Y''=1+Y^2; Y(0)=0$ dont la solution en espèces linéaires est bien connue [LV], n'a pas de solution en espèces ordinaires (c.-à-d. dans $N[[\mathcal{A}]]$). Elle en a cependant une infinité non nombrable dans $Z[[\mathcal{A}]]$ (voir [GL2], [CL]).

Un autre problème résolu grâce à l'utilisation du calcul symbolique est la transposition dans le cadre des espèces virtuelles à deux sortes de la conjecture Jacobienne. La question est la suivante: si un vecteur d'espèces virtuelles $F(X,Y)=(F_1(X,Y), F_2(X,Y))$ est tel que F_1 et F_2 sont polynomiales et que $(\partial F_1 / \partial X)(\partial F_2 / \partial Y) - (\partial F_2 / \partial X)(\partial F_1 / \partial Y) = 1$, est-ce que l'inverse $F^{<-1>}$ est polynômial? L'inverse est calculé à l'aide de l'opérateur de différence Δ_F introduit par André Joyal et Gilbert Labelle [GL1], [AJ3], [GL3]. *Maple* nous a évité de longs calculs pour trouver un contre-exemple à ce problème.

Finalement, un troisième champ dans lequel *Maple* s'avère d'une aide appréciable est la manipulation de structures et d'espèces moléculaires. Nous avons développé une méthode pour représenter les structures moléculaires dans l'environnement *Maple*. Cette méthode est basée sur le fait que toute espèce moléculaire M sur n points peut être vue comme l'ensemble des classes latérales de S_n/H où H est le stabilisateur d'une quelconque M -structure.

Une utilité de ces programmes est de comparer deux espèces moléculaires à partir des structures qui les engendrent. On peut par exemple vérifier si une espèce moléculaire dont les structures sont des graphes est isomorphe à une espèce définie au moyen de classes latérales dans S_n . Ces outils peuvent donc être utilisés pour étendre la table [JL2] des espèces moléculaires sur les petites cardinalités. On trouvera dans [YC] plus de détails concernant ces programmes.

Nous terminerons le tout en citant quelques problèmes soulevés dans le cadre de ce travail.

2. Equations de la forme $Y' = F(X, Y)$, $Y(0) = 0$.

Rappelons d'abord quelques définitions et notions élémentaires. Nous utilisons la terminologie ainsi que les résultats concernant les espèces de structures d'après [JL1] et [AJ1].

Définition 0. Une espèce est un foncteur F de la catégorie des ensembles finis avec bijections \mathbb{B} dans la catégorie des ensembles finis \mathbb{E} . On dira qu'une espèce M est moléculaire si $M \neq \emptyset$ et $M = B + C \Rightarrow B = \emptyset$ ou $C = \emptyset$. Une espèce A est dite atomique si A est moléculaire, $A \neq 1$ et $A = BC \Rightarrow B = 1$ ou $C = 1$. \square

Pour tout ensemble fini U et toute espèce F , on dénotera par $F[U]$ l'image de U par le foncteur F (c.-à-d. l'ensemble des F -structures sur U). En remplaçant \mathbb{B} par $\mathbb{B}^k = \mathbb{B} \times \dots \times \mathbb{B}$ (k facteurs) dans la définition, on obtient le concept d'espèce à k sortes. Pour signifier qu'une espèce est à deux sortes, nous utiliserons l'écriture $F = F(X, Y)$.

Nous noterons \mathcal{M} l'ensemble des espèces moléculaires à une sorte. On a la réunion disjointe $\mathcal{M} = \mathcal{M}_0 \cup \mathcal{M}_1 \cup \mathcal{M}_2 \cup \mathcal{M}_3 \cup \dots$, où \mathcal{M}_i désigne l'ensemble des espèces moléculaires sur la cardinalité i . L'ensemble des espèces atomiques sera dénoté par \mathcal{A} .

Nous travaillerons ici dans l'anneau $\mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ et dans le sous-anneau $\mathbb{Z}[[\mathcal{E}]]$ défini ci-dessous. Un élément $F \in \mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ est appelé *espèce virtuelle*. Si $F \in \mathbb{Z}[\mathcal{A}]$ on dira que l'espèce virtuelle F est *polynomiale*. Notons que $\mathbb{Z} \subset \mathbb{Z}[\mathcal{A}] \subset \mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$. Le théorème de Yeh (voir [Yeh]) fait en sorte que ces anneaux sont à factorisation unique. Cette propriété nous donne l'unicité d'écriture des éléments de ces anneaux. Si F est une espèce, nous noterons par d l'opération dérivée définie par $dF[U] = F'[U] = F[U + \{*\}]$, où $* \notin U$. On définit l'intégrale indéfinie d'une espèce de la manière suivante, en laissant tomber les termes "constants"

$$\int F = \{G : dG = F, G(0) = 0\}.$$

Notons que cette définition dépend de l'ensemble des coefficients. Par exemple, une espèce F a toujours une intégrale dans $\mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ (voir [AJ2]). Par contre il se peut (voir [GL2])

que cette espèce F n'ait pas d'intégrale dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$. On verra que $2XC_3$ n'est pas intégrable dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$.

Ainsi l'intégrale d'une espèce ordinaire est un ensemble. Cette définition est motivée par le fait que l'intégration n'est pas bien définie dans le contexte des espèces ordinaires (contrairement au cas des espèces linéaires, [LV]). Par exemple, dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$, on a

$$\{P_4^{bic}, C_4\} = \int X^3.$$

Définie de la sorte, l'intégration dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$ ne préserve pas la somme. Par exemple,

$$XC_3 \in \int(C_3 + X^3) \text{ mais } XC_3 \notin \int C_3 + \int X^3.$$

Par contre si F et G vivent sur des cardinalités différentes alors il est clair que

$$\int(F + G) = \int F + \int G.$$

Cette observation nous servira à la section 2.2 pour intégrer des espèces.

2.1 Calcul dans $\mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbb{Z}[[\mathcal{E}]]$.

Définition 1. L'espèce des ensembles de cardinalité i est définie par:

$$E_i[U] = \begin{cases} \emptyset & \text{si } |U| \neq i \\ \{U\} & \text{si } |U| = i \end{cases}$$

L'anneau $\mathbb{Z}[[\mathcal{E}]]$ est l'anneau de séries formelles à coefficients dans \mathbb{Z} et dont les variables sont les éléments de $\mathcal{E} = \{E_i : i \geq 0\}$. Remarquons que $E_0 = 1$. Tout élément de $\mathbb{Z}[[\mathcal{E}]]$ est appelé *espèce virtuelle ensembliste* et s'écrit de manière unique de la façon suivante:

$$\sum_{n \geq 0} \sum_{\lambda \succ n} a_\lambda E^\lambda$$

où $\lambda \succ n$ signifie que λ est un partage de n , $a_\lambda \in \mathbb{Z}$ et $E^\lambda = E_1^{\lambda_1} E_2^{\lambda_2} E_3^{\lambda_3} \dots E_n^{\lambda_n}$. L'unicité de cette écriture est due à Yeh. On peut aussi écrire les éléments de $\mathbb{Z}[[\mathcal{E}]]$ de la façon suivante:

$$\sum_{\lambda \in \wp} a_\lambda E^\lambda$$

où \wp désigne l'ensemble de tous les partages d'entiers.

Dans ce qui suit, la notation $\ell(\lambda)$ désignera la longueur du partage λ . Nous utilisons aussi la notation exponentielle pour les partages: $\lambda = 1^{\lambda_1} 2^{\lambda_2} 3^{\lambda_3} \dots$ signifie que λ est le partage qui comporte λ_1 parts égales à 1, λ_2 parts égales à 2, etc.

Lemme 1. Soit $\underline{E}^\lambda = E_1^{\lambda_1} E_2^{\lambda_2} E_3^{\lambda_3} \dots E_n^{\lambda_n}$ un monôme avec $\ell(\lambda) = n$, alors

$$d\underline{E}^\lambda = \sum_{i=1}^n \lambda_i E_1^{\lambda_1} \dots E_{i-1}^{\lambda_{i-1}+1} E_i^{\lambda_i-1} \dots E_n^{\lambda_n}.$$

□

Ce lemme nous donne une formule pour calculer $d(\sum_{n \geq 0} \sum_{\lambda \succ n} a_\lambda \underline{E}^\lambda)$: par linéarité de d ,

on a

$$\begin{aligned} d(\sum_{\lambda \in \mathbb{P}} a_\lambda \underline{E}^\lambda) &= \sum_{\lambda \in \mathbb{P}} a_\lambda d\underline{E}^\lambda \\ &= \sum_{\lambda \in \mathbb{P}} a_\lambda \sum_{i=1}^{\ell(\lambda)} \lambda_i E_1^{\lambda_1} \dots E_{i-1}^{\lambda_{i-1}+1} E_i^{\lambda_i-1} \dots E_{\ell(\lambda)}^{\lambda_{\ell(\lambda)}}. \end{aligned}$$

Définition 2. Soit $T = T_0 + T_1 + T_2 + T_3 + \dots$ une espèce virtuelle où T_n est la restriction de T à la cardinalité n . La restriction aux cardinalités $\leq n$ de T que l'on note par $[T]_n$ est définie par $[T]_n = T_0 + T_1 + T_2 + \dots + T_n$. On désigne aussi la restriction de T à la cardinalité n par $[T]_{=n} = T_n$. □

Nous utiliserons deux méthodes pour résoudre des équations différentielles. La première est par coefficients indéterminés. La deuxième par approximations successives. Les deux méthodes sont des conséquences de la proposition suivante dont la démonstration n'est pas difficile:

Proposition 1. Soit $F(X, Y)$ une espèce quelconque à deux sortes. Si $T \in \mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ est une solution combinatoire à l'équation différentielle

$$Y' = F(X, Y); \quad Y(0) = Y_0, \quad \text{où } Y_0 \in \mathbb{Z},$$

alors pour tout $n \geq 0$, on a $d([T]_{n+1}) = [F(X, [T]_n)]_n$ et $d([T]_{=n+1}) = [F(X, [T]_n)]_{=n}$. □

Comme nous le verrons dans un instant, la proposition précédente a deux corollaires utiles. Ils donnent une condition sous laquelle une équation différentielle n'a pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$ ou $\mathbb{N}[[\mathcal{E}]]$. Notons qu'il a été démontré [GL2] que toute équation différentielle possède une infinité (non dénombrable) de solutions dans $\mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$.

Soit m_n le nombre d'espèces moléculaires sur la cardinalité n et $M_n^{(i)}$ la i -ième espèce moléculaire sur n éléments (voir [JL2]). Il est bien connu que toute espèce $T \in \mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ (resp. $T \in \mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$) admet une unique décomposition en espèces moléculaires de la forme

$$T = \sum_{\substack{n \geq 0 \\ 1 \leq i \leq m_n}} a_n^{(i)}(T) M_n^{(i)} \quad \text{où } a_n^{(i)} = a_n^{(i)}(T) \in \mathbb{Z} \text{ (resp. } a_n^{(i)} = a_n^{(i)}(T) \in \mathbb{N}),$$

de plus $T \equiv W \Leftrightarrow (\forall n \in \mathbb{N})(\forall i = 1, \dots, m_n)(a_n^{(i)}(T) = a_n^{(i)}(W))$.

Considérons les coefficients $a_n^{(i)}$ comme des indéterminées et considérons, pour chaque $k \geq 0$, l'espèce polynomiale

$$P_k = \sum_{\substack{n=0 \\ 1 \leq i \leq m_n}}^k a_n^{(i)} M_n^{(i)} \in \mathbb{Z}[\mathcal{A}].$$

Corollaire 1. Soit l'équation différentielle:

$$Y' = F(X, Y); \quad Y(0) = Y_0, \quad \text{où } Y_0 \in \mathbb{N},$$

s'il existe un entier k tel que l'équation $dP_{k+1} = [F(X, P_k)]_k$ n'admet aucune solution pour $a_n^{(i)} \in \mathbb{N}$, alors l'équation différentielle ci-dessus n'a pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$. \square

Considérons maintenant les coefficients a_λ (avec $\lambda \in \wp$) comme des indéterminées et soit, pour chaque $k \geq 0$,

$$Q_k = \sum_{\substack{\lambda \in \wp \\ |\lambda| \leq k}} a_\lambda E^\lambda \in \mathbb{N}[\mathcal{E}].$$

le polynôme à coefficients indéterminés dont les variables sont les espèces moléculaires ensemblistes.

Corollaire 2. Soit $F(X, Y)$ une espèce polynomiale ensembliste. Considérons l'équation différentielle:

$$Y' = F(X, Y); \quad Y(0) = Y_0, \quad \text{où } Y_0 \in \mathbb{N}.$$

Si l'équation $dQ_{k+1} = [F(X, Q_k)]_k$ n'admet aucune solution pour $a_\lambda \in \mathbb{N}$ alors l'équation ci-dessus n'a pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{E}]]$. \square

Exemple 1. Considérons l'équation différentielle $Y' = XY$; $Y(0) = 1$. Il est facile de montrer que la solution analytique à cette équation est $y = \exp(x^2/2)$. Une solution en espèces ordinaires est donnée par l'espèce des involutions sans point fixe qui est isomorphe à $E(E_2)$. Cherchons une solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{E}]]$. Si une telle solution existe, $dQ_4 = [F(X, Q_3)]_3 = [XQ_3]_3$ doit avoir une solution. Par un calcul en *Maple* on trouve que cette équation impose les conditions suivantes sur les coefficients a_λ :

$$2a_{1^2} + a_2 - 1 = 0 \quad (1)$$

$$a_{31} + a_4 = 0 \quad (2)$$

$$2a_{2^2} + 2a_{21^2} + a_{31} - a_2 = 0 \quad (3)$$

On cherche une solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{E}]]$, donc $a_\lambda \in \mathbb{N}, \forall \lambda \in \wp$. Par conséquent, (1) \Rightarrow $a_{21^2} = 0$ et $a_2 = 1$. De (2) on déduit que $a_{31} = 0$. En combinant tout cela avec (3) on trouve

$2a_2 - 1 = 0$, c'est-à-dire $a_2 = 1/2 \notin \mathbb{N}$. L'équation $Y' = XY ; Y(0) = 1$ n'a donc pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{E}]]$.

Exemple 2. L'équation $Y' = (X + Y)^2 ; Y(0)=0$, dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$. Ici, il faut aller jusqu'à la cardinalité 5 avant d'obtenir une contradiction, le système d'équation obtenu des coefficients a été calculé avec *Maple*. Une analyse détaillée de ce système montre qu'il implique que $0=2$!

La méthode des approximations successives, que voici, découle aussi de la proposition 1 (voir aussi [GL2]).

Proposition 2. On suppose que l'équation différentielle combinatoire

$$Y' = F(X, Y); Y(0) = Y_0 \text{ où } Y_0 \in \mathbb{N},$$

possède au moins une solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$ (resp. $\mathbb{N}[[\mathcal{E}]]$). De plus, supposons que nous ayons construit $[H]_n$ l'approximation d'une solution $H = H_0 + H_1 + H_2 + \dots$, jusqu'aux cardinalité $\leq n$ (en particulier $H_0 = Y_0$). Alors toutes les extensions de cette solution aux cardinalité $\leq n+1$ sont obtenues en choisissant

$$H_{n+1} \in [\int F(X, [H]_n)]_{=n+1}. \quad \square$$

Le lemme qui suit simplifie l'intégration dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$ d'espèces moléculaire à partir des tables (cf. [JL2]). Il sera utilisé pour montrer que $Y' = 1 + Y^2, Y(0)=0$ n'a pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$.

Lemme 3. Soit $n \geq 1$ et $M_n^{(r)}$ la r -ième espèce moléculaire sur la cardinalité n avec $1 \leq r \leq m_n$. Soit $\alpha \in \mathbb{N}$ fixé. Supposons que

$$\alpha M_n^{(r)} = d \sum_{i=1}^{m_{n+1}} a_i M_{n+1}^{(i)} \quad \text{avec } a_i \in \mathbb{N} \text{ des indéterminées,}$$

si dans $dM_{n+1}^{(i)}$, le coefficient d'une espèce $M_n^{(r)}$ ($r \neq i$) est non-nul, alors $a_i = 0$. \square

Remarque. Ce résultat est faux si $a_i \in \mathbb{Z}$, par exemple $X^2 = d(E_3 - XE_2)$ mais le coefficient de X^2 dans dE_3 est nul.

Corollaire. Si on veut trouver par coefficients indéterminés toutes les intégrales d'une espèce de la forme $\alpha M_n^{(r)}$ dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$, il suffit de considérer seulement les combinaisons linéaires des espèces $M_{n+1}^{(i)}$ telles que $dM_{n+1}^{(i)}$ est de la forme $\alpha_i M_n^{(r)}$ où $\alpha_i \in \mathbb{N}$. \square

.2 L'équation $Y'=1+Y^2$, $Y(0)=0$.

Nous allons montrer en utilisant la méthode des approximations successives que $Y'=1+Y^2$, $Y(0)=0$ n'a pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$.

Supposons qu'il existe une solution H . La condition initiale entraîne que $H_0 = 0$. Calculons les approximations $[H]_1, [H]_2, [H]_3, \dots$ etc, en utilisant la proposition 2.

$$\text{On a } H_1 \in [\int F(X, [H]_0)]_{=1} = [\int [1 + ([H]_0)^2]]_{=1} = [\int 1]_{=1} = \{X\}.$$

Donc le seul choix pour H_1 est X et $[H]_1 = H_0 + H_1 = 0 + X = X$. En continuant ainsi sur H_2, H_3 et H_4 , on trouve que le seul choix pour $[H]_4$ est

$$H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 = 0 + X + 0 + C_3 + 0 = X + C_3.$$

Quant à H_5 , on a

$$H_5 \in [\int [1 + ([H]_4)^2]]_{=5} = [\int 1 + (X + C_3)^2]_{=5} = [\int 1 + \int X^2 + \int 2XC_3 + \int C_3^2]_{=5} = \int 2XC_3.$$

Ici il faut calculer $\int 2XC_3$. D'après le lemme 3 il suffit de considérer les espèces moléculaires M sur la cardinalité 5 telles que dM est de la forme αXC_3 . D'après la table citée ci-dessus, aucune telle espèce n'existe. On conclut que cette équation n'a pas de solution dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$. On trouvera dans [CL] plus de détails concernant cette démonstration ainsi que la solution générale dans $\mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$ de l'équation $Y'=1+Y^2$, $Y(0)=0$.

3. Conjecture jacobienne.

Nous présentons ici une transposition dans le cadre des espèces à deux sorte de la conjecture jacobienne: si un vecteur d'espèce virtuelle $F(X, Y) = (F_1(X, Y), F_2(X, Y))$ est tel que F_1 et F_2 sont polynômes et tel que $|dF| = 1$, alors l'inverse $F^{<-1>}$ est polynomiale. Ici $|F|$ désigne le déterminant de la matrice jacobienne dF de F :

$$|dF| = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X} & \frac{\partial F_1}{\partial Y} \\ \frac{\partial F_2}{\partial X} & \frac{\partial F_2}{\partial Y} \end{vmatrix} = \frac{\partial F_1}{\partial X} \frac{\partial F_2}{\partial Y} - \frac{\partial F_1}{\partial Y} \frac{\partial F_2}{\partial X}.$$

Nous verrons que la conjecture est fausse dans ce cadre. L'inverse est calculée à l'aide de l'opérateur de différence Δ_F introduit par André Joyal et Gilbert Labelle [GL1], [J3], [GL3]. Nous nommerons n -espèce un vecteur de n espèces. Ainsi, F ci-dessus est une 2 -espèce.

$$F_1(X, Y) = X + a_1 E_2(x) + b_1 E_2(Y) + c_1 X^2 + d_1 Y^2 + e_1 XY$$

$$F_2(X, Y) = X + a_2 E_2(x) + b_2 E_2(Y) + c_2 X^2 + d_2 Y^2 + e_2 XY.$$

Nous avons aussi programmé une procédure qui inverse une espèce polynomiale, ce qui nous a guidé dans la recherche d'un contre-exemple.

Maple nous a donné trois ensembles-solution de l'équation $|dF|=1$. Nous en avons éduits deux contre-exemples. Le premier est équivalent en fait à une 1-espèce. Nous montrerons que son inverse n'est pas polynomiale. Il découlera de ce calcul que l'inverse du deuxième exemple n'est pas polynomial tout en étant une 2-espèce.

Le premier contre-exemple est $F = (X-2E_2(X)+X^2, Y)$. Tout d'abord, il est évident que F est polynomiale et un calcul rapide montre $|dF| = 1$. De plus F est de la forme voulue, à-d. $F = (F_1, F_2) = (X+H_1, Y+H_2)$ avec $H_1 = X^2-2E_2(X)$ et $H_2=0$.

Notons que dans le cas qui nous occupe, F_1 est une espèce à une sorte, on peut donc traiter F comme une 1-espèce à une sorte car de plus $\Delta_F(\text{Id}(X, Y)) = F_1(X, Y) - X, F_2(X, Y) - Y = (X^2-2E_2(X), 0)$. L'inverse de F sera de la forme $(F_1^{<-1>}, Y)$, où $F_1^{<-1>}$ est calculée avec

$$F_1^{<-1>} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k \Delta_{F_1}^k(X), \quad \text{où } \Delta_{F_1} G(X) = G(F_1) - G.$$

Pour conclure il faut montrer que $F_1^{<-1>}$ n'est pas polynomiale.

Lemme 1. Avec F_1 comme ci-dessus, on a

$$F_1^{<k>} = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} X^{2^i} + \sum_{i=1}^{n_k} b_i^{(k)} \prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)}),$$

$b_i^{(k)} \in \mathbb{Z}$ et $P_{i,j}^{(k)}$ est moléculaire dans $(\mathbb{Z}[[X, E_2]], \cdot, \circ)$, donc avec coefficient 1. \square

Démonstration. Se fait par récurrence sur k en notant qu'on a ici linéarité $F_1(X+Y) = (X+F_1(Y))$ et $F_1(aZ) = aZ - 2aE_2(Z) + aZ^2 = aF_1(Z)$. \square

Lemme 2. Soit H une 1-espèce à une sorte, alors

$$\Delta_H^k(X) = \sum_{i=0}^k (-1)^{k-i} \binom{k}{i} H^{<i>}(X). \quad \square$$

Démonstration. Se fait par récurrence sur k . \square

Nous avons en main tout ce qu'il faut pour conclure que F_1 fournit bien un contre-exemple.

Proposition 3. On a $\Delta_{F_1}^n(X) = X^{2^n} + \Xi_n$, où Ξ_n ne contient aucune puissance de X . \square

Démonstration. Développons $\Delta_{F_1}^n(X)$:

$$\begin{aligned}\Delta_{F_1}^n &= \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \binom{n}{k} F_1^{<k>} (X) \quad (\text{lemme 2}) \\ &= \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \left[\sum_{i=0}^k \binom{k}{i} X^{2^i} + \sum_{i=1}^{n_k} b_i^{(k)} \prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)}) \right] \quad (\text{lemme 1}) \\ &= \sum_{k=0}^n \sum_{i=0}^k (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \binom{k}{i} X^{2^i} + \left[\sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \sum_{i=1}^{n_k} b_i^{(k)} \prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)}) \right]\end{aligned}$$

Remarquons que le deuxième terme de cette somme ne contient aucune puissance de X , donc l'expression est égale à

$$\sum_{k=0}^n \sum_{i=0}^k (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \binom{k}{i} X^{2^i} + \Xi_n$$

où Ξ_n ne contient aucune puissance de X . Une inversion binômiale montre que la seule puissance de X dans la dernière expression est X^{2^n} . \square

Corollaire 1. $F_1^{<-1>}$ n'est pas une espèce polynomiale. \square

Corollaire 2. Si $F=(X-2E_2(X)+X^2, Y-2E_2(X)+X^2)$, alors $F^{<-1>}$ n'est pas polynomiale. \square

Dans ce cas, on vérifie facilement que $F^{<-1>}$ n'est pas polynomiale car sa première composante est $F_1^{<-1>}$, or $|dF| = 1$. Notons que le corollaire 1 montre que la conjecture jacobienne est même fausse pour les espèces virtuelles à une seule sorte puisqu'alors $|dF_1| = F_1'(X) = 1$.

4. Représentation des structures en *Maple*.

Nous poursuivons l'exposé en décrivant une méthode pour représenter des structures combinatoires dans l'environnement *Maple*. Cette façon de procéder nous donne la possibilité de manipuler ces objets en profitant de toute la versatilité du logiciel *Maple*. Nous rappelerons d'abord quelques notions de base de la théorie des espèces moléculaires (pour plus de détails voir [Yeh]), ensuite nous décrirons la méthode en question. Nous avons écrit en *Maple* un ensemble de procédures pour faire certains calculs sur les structures, par exemple, calculer le stabilisateur d'une structure ou encore trouver la matrice qui représente le graphe du type de l'espèce moléculaire à laquelle appartient une structure. Etant données deux structures, on peut aussi déterminer si les espèces moléculaires auxquelles appartiennent ces structures sont isomorphes. Ces procédures sont dé-

crites dans les grandes lignes dans [YC]. Une des principale utilité de celles-ci sera d'étendre la table des espèces moléculaires sur les petites cardinalités et de calculer les dérivées de celles-ci (ce travail reste à faire). Bien sur, ceci nous donnera la possibilité de résoudre des équations différentielles par coefficient indéterminés pour des cardinalités plus grandes.

4.1. Définitions et rappels.

Soit M une espèce moléculaire. Le groupe symétrique S_U agit sur l'ensemble $M[U]$ en posant $\sigma.s = M[\sigma](s)$, où $\sigma \in S_U$ et $s \in M[U]$. On montre que M est moléculaire si et seulement si cette action de S_U sur $M[U]$ est connexe.

Soit $\text{Bij}(\{1,2,\dots,n\}, U)$ l'ensemble des bijections de $\{1,2,\dots,n\}$ dans U . Désignons par L_n l'espèce définie par $L_n[U] = \text{Bij}(\{1,2,\dots,n\}, U)$. Si H est un sous-groupe de S_n , on définit une autre espèce que l'on note L_n/H par

$$(L_n/H)[U] = \{\varphi H : \varphi \in \text{Bij}(\{1,2,\dots,n\}, U)\},$$

le transport des structures le long d'une bijection $\sigma: U \longrightarrow V$, étant donné par

$$(L_n/H)[\sigma](\varphi H) = \sigma\varphi H.$$

Le résultat suivant jouera un rôle primordial dans notre façon de décrire les structures: toute espèce moléculaire M est isomorphe à une espèce de type L_n/H , où H est le sous-groupe stabilisateur d'une M -structure s quelconque sur l'ensemble $\{1,2,\dots,n\}$. Nous écrirons au besoin $M_H = L_n/H$ pour alléger la notation. Notons que $M_H \cong M_K$ si et seulement si H et K sont conjugués.

En ce qui nous concerne, l'ensemble sous-jacent U sera toujours un sous-ensemble de $\{1,2,\dots,n\}$ (c'est possible par transport de structure), de sorte que $\text{Bij}(\{1,2,\dots,n\}, U) \cong S_{|U|}$. Ainsi une espèce moléculaire peut être codée par un ensemble de classes latérales d'un sous-groupe dans S_n .

Notons enfin, à la lumière de ce qui précède, que toute espèce moléculaire M est concentrée sur une et une seule cardinalité en ce sens que si $|U| \neq n$, alors $M[U] = \emptyset$ car il n'y a pas de bijections entre $\{1,2,\dots,n\}$ et U .

4.2. Représentation en *Maple*.

Avant de poursuivre, soulignons que les structures d'*ordre linéaire* et d'*ensemble* sont déjà présentes dans *Maple*. Les premières correspondent aux *listes* et s'écrivent avec les

"[]", quant aux ensembles, on les désigne avec les "{}". Les expressions écrites avec les caractères *courier* désignent des instructions directement exécutables en *Maple*.

La définition que nous donnons d'espèce moléculaire plus haut suggère une approche pour décrire les structures d'un type donné dans un ordinateur. Il s'agit de coder les classes latérales de S_n/K sous la forme de d'ensemble de permutations (où K est le stabilisateur d'une des structures). Cette méthode, bien que correcte, n'est pas la plus pratique si on l'utilise directement sous cette forme. Si dans un environnement de programmation interactif comme *Maple*, on désire comparer des structures ou en créer de nouvelles à partir de celles existantes, il est peu commode d'avoir à écrire les ensembles de permutations qui forment certaines classes latérales. De plus, il n'est pas toujours évident de reconnaître une structure à partir d'une classe latérale.

Nous avons donc mis au point une variante compacte de cette méthode pour décrire une structure. L'expression *Maple* pour décrire le cycle ci-dessus sera $c(1, 2, 3, 4)$ (le *c* signifie *cycle*).

Une structure (différente des ensembles et des ordres linéaires) sera définie par une procédure *Maple* (voir [Ma]) dont les arguments sont les éléments de l'ensemble sous-jacent. Ces éléments (ou points) peuvent eux-mêmes être d'autres structures. Par exemple, une $C_3(L_2)$ -structure sera définie par l'appel de la procédure *c* avec comme arguments deux ordres linéaires (listes) de trois points: $c([2, 4], [1, 3], [5, 6])$. Comme on le voit, deux ingrédients de base seront utilisés pour représenter des structures: d'une part les ensembles et les ordres linéaires, d'autre part des procédures. Une structure pourra être une combinaison d'ingrédients des deux types. Nous décrirons plus loin comment écrire la procédure comme telle.

De façon générale, un appel sera de la forme suivante:

$$m(t_1, t_2, \dots, t_k)$$

où m est une M_H -structure vivant sur k points; $t_i := t_i[U_i]$ (pour $i=1, \dots, k$) est une T_i -structure sur $|U_i|$ points; $U_i \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ avec $i \neq j \Rightarrow U_i \cap U_j = \emptyset$. L'ensemble U_i est l'ensemble sous-jacent à la structure t_i . Notons que les structures t_i peuvent être des points, il suffit de considérer $T_i[U_i]$ avec $T_i=X$, l'espèce singleton et $|U_i|=1$.

Le résultat retourné par la procédure qui représente la M_H -structure m sera cette même procédure mais dont les arguments seront permuts d'après un système de représentants des classes de $\{\phi H : \phi \in S_k\}$. Nous exploitons ici une caractéristique de *Maple* permettant à une procédure de retourner comme valeur un appel à elle-même non-évalué.

Si l'ensemble $\{t_1, t_2, \dots, t_k\}$ des structures t_i est totalement ordonné à priori, soit $g: \{t_1, t_2, \dots, t_k\} \longrightarrow \{1, 2, \dots, k\}$ la fonction donnant le "rang" de chaque structure selon cet

ordre. On peut voir t_1, t_2, \dots, t_k comme une liste $t : \{1, 2, \dots, k\} \longrightarrow \{t_1, t_2, \dots, t_k\}$. Alors $\sigma = g \circ t$ est une permutation $\{1, 2, \dots, k\}$. Soit τ le représentant de σ dans S_k / H . Il existe une unique permutation ρ telle que $\tau = \sigma \circ \rho$. Le résultat produit par l'appel $m(t_1, t_2, \dots, t_k) = m(t)$ sera

$$m(t \circ \rho) = m(t_{\rho(1)}, t_{\rho(2)}, \dots, t_{\rho(k)}) = m(t_{\sigma^{-1}\tau(1)}, t_{\sigma^{-1}\tau(2)}, \dots, t_{\sigma^{-1}\tau(k)}).$$

Remarquons que la permutation de l'ensemble $\{t_1, t_2, \dots, t_k\}$ obtenue de

$$m(t_{\sigma^{-1}\tau(1)}, t_{\sigma^{-1}\tau(2)}, \dots, t_{\sigma^{-1}\tau(k)})$$

est $g \circ (t \circ \sigma^{-1} \circ \tau) = (g \circ t) \circ \sigma^{-1} \circ \tau = \sigma \circ \sigma^{-1} \circ \tau = \tau$.

Comme le montre ce qui suit, pour toute liste de structures t_1, t_2, \dots, t_k telles que les ensembles sous-jacents satisfont $i \neq j \Rightarrow U_i \cap U_j = \emptyset$, on peut définir un ordre total de façon "canonique".

Posons $a_i := \min\{j : j \in U_i\}$ (pour $i = 1, 2, \dots, k$). Soit f l'unique bijection croissante

$$f : \{a_1, \dots, a_k\} \longrightarrow \{1, 2, \dots, k\},$$

alors f induit un ordre total sur les structures t_1, t_2, \dots, t_k . Le rang g d'une structure t_i est donné par $f(a_i)$. De plus, posons $\sigma(i) := f(a_i)$ (pour $i = 1, \dots, k$). Il est facile de vérifier que la permutation obtenue de cette façon est bien définie (ce qui découle du fait que $i \neq j \Rightarrow U_i \cap U_j = \emptyset$). Il suffit ensuite de choisir le représentant (τ) de la classe de σ dans M et de retourner

$$m(t_{\sigma^{-1}\tau(1)}, t_{\sigma^{-1}\tau(2)}, \dots, t_{\sigma^{-1}\tau(k)})$$

Comme système de représentant on peut choisir les permutations (vues comme mots sur $\{1, 2, \dots, k\}$) minimales dans l'ordre lexicographique.

L'exemple suivant illustre notre méthode.

Exemple. La procédure C définit une structure c de type *cycle* ($C[n] \cong S_n / C_n$ où $C_n < S_n$ désigne le groupe cyclique d'ordre n). En *Maple* l'expression

$$C(\{2, 3\}, \{7, 8\}, \{5, 6\}, \{1, 4\});$$

désigne une $C_4 \times E_2$ -structure. Nous avons

$$\begin{aligned} t_1 &= \{2, 3\}, t_2 = \{7, 8\}, t_3 = \{5, 6\}, t_4 = \{1, 4\}, \\ U_1 &= \{2, 3\}, U_2 = \{7, 8\}, U_3 = \{5, 6\}, U_4 = \{1, 4\} \\ a_1 &= 2, a_2 = 7, a_3 = 5, a_4 = 1, \\ f(1) &= 1, f(2) = 2, f(5) = 3, f(7) = 4. \end{aligned}$$

On trouve $\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ et en prenant $C_n = \langle \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \rangle$, on calcule que $\tau = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 4 & 3 \end{pmatrix}$, sorte que $\sigma^{-1}\tau = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$. Donc, $c(t_1, t_2, t_3, t_4)$ est égal à $c(t_4, t_1, t_2, t_3)$ et l'appel ci-dessous produira:

$$C(\{1, 4\}, \{2, 3\}, \{7, 8\}, \{5, 6\}).$$

L'effet produit sur les arguments est une rotation telle que l'ensemble qui contient le plus petit élément se retrouve en première position.

Il est possible d'effectuer d'autres opérations sur les structures. Par exemple, nous avons écrit une procédure qui permet de faire agir des permutations sur ces dernières. Nous y reviendrons.

5. Conclusion.

Nous terminons par quelques remarques soulevées par ce travail.

Les résultats que nous avons pour résoudre des équations différentielles nous donnent des conditions suffisantes sous lesquelles une équation n'a pas de solution. Il est possible qu'une équation $Y' = F(X, Y)$, $Y(0) = 0$ n'ait pas de solution mais que l'on puisse appliquer une des méthodes (approximations successives ou coefficients indéterminés) jusqu'à des cardinalités arbitrairement grandes. Malheureusement, pour l'instant on ne peut intégrer en toute généralité sur les cardinalités > 4 , car on ne dispose pas de table de dérivées pour les espèces moléculaires sur cardinalités > 5 . Nous prévoyons étendre la table des dérivées aux cardinalités ≤ 7 dans un avenir rapproché.

On pourrait étudier des équations aux dérivées partielles (plusieurs sortes de points) à l'aide de nos deux méthodes.

Notons que la décidabilité de savoir si une équation différentielle possède une solution par une de nos méthodes semble du même ordre que la décidabilité de savoir si le développement décimal de π contient une suite de nombres donnée.

Il serait intéressant de trouver une condition nécessaire et suffisante (non-triviale) pour qu'une équation différentielle possède une solution.

Finalement nous poursuivrons le travail concernant la conjecture jacobienne dans le contexte de $Z[[\{C_n, L_n\}_{n \geq 0}]]$. Notons que cet anneau est stable sous la dérivation $dC_n = L_{n-1}$.

Un genre particulier de structures est apparu au cours de l'élaboration de ces programmes. Les espèces de la forme $F(G)$ sont décrites par des appels

$$F(G(U_1), G(U_2), \dots, G(U_k)),$$

mais on peut tout aussi bien considérer une structure de la forme $f(g_1(U_1), g_2(U_2), \dots, g_k(U_k))$ où au moins deux structures G_i sont non-isomorphes. Nous nommerons provisoirement ces dernières *structures-mixtes*, les structures-mixtes généralisent les E_{inj} , voir [LM]. Comme pour les structures ordinaires, l'action de S_n sur une structure-mixte nous donne le multi-graphe du type de l'espèce à laquelle appartient celle-ci.

Une autre avenue est d'établir des liens entre espèces provenant de structures ordinaires et celles provenant de structures-mixtes: à quelle espèce appartient une structure mixte?

6. Bibliographie.

- [AJ1] Joyal A., Une théorie Combinatoire des Séries Formelles, *Adv. in Math.* 42 (1981), 1-82.
- [AJ2] Joyal A., Calcul intégral combinatoire et homologie du groupe symétrique, *C. R. Math. Acad. Sci. Canada*, 7, No. 1 (1983), 58-94.
- [AJ3] Joyal A., Foncteurs analytiques et espèces de structures, (G. Labelle et P. Leroux, Ed.), *Lectures Notes in Math.*, Vol. 1234, pp.126-159, Springer-Verlag, New-York/Berlin, 1986.
- [CL] Chiricota Y., Labelle G., Families of combinatorial solutions of $Y'=1+Y^2$, $Y(0)=0$, (*under preparation*).
- [GL1] Labelle G., Sur l'inversion et l'itération continue des séries formelles, *Europ. J. Comb.*, 1 (1980), 113-138.
- [GL2] Labelle G., On combinatorial differential equations, *J. Math. Anal. Appl.*, 113, No. 2 (1986), 344-381.
- [GL3] Labelle G., On the generalized iterates of Yeh's combinatorial K -species, *J. of Comb. Th.*, Series A, 50, No. 2 (1989), 235-258.
- [JL1] Labelle J., Applications diverses de la théorie combinatoire des espèces de structures, *Ann. sc. math. Québec*, 7, No.1 (1983), 59-94.
- [JL2] Labelle J., Quelques Espèces sur les Ensembles de Petite Cardinalité, *Ann. Sci. Math. Québec*, 9, No1, (1985), 31-58.
- [LM] Leroux P., Miloudi B., Généralisation de la formule d'Otter, *en préparation*.
- [LV] Leroux P., Viennot X. G., Combinatorial resolution of systems of differential equations: ordinary differential equations, (G. Labelle et P. Leroux, Ed.), *Lectures Notes in Math.*, Vol. 1234, pp.210-245, Springer-Verlag, New-York/Berlin, 1986.
- [Ma] Char B. W., "MAPLE Reference Manual", 5th Ed., Watcom Publications Limited, Waterloo, 1988.
- [Rot] Rotman J. H., "An introduction to the theory of groups", Allyn and Bacon, Inc., Boston, 1984.
- [YC] Chiricota Y., Représentation des structures en *Maple*, Raport de recherche, Département de math. et inform., UQAM, n° 138, 1990.
- [Yeh] Yeh Y.-N., "On the Combinatorial Species of Joyal", Ph. D. thesis, State Univ. of New York at Buffalo, 1985.

Appendice: exemples de structures.

Les variables *sigma* et *tau* contiennent respectivement les permutations σ et τ décrites dans la section 4.2. La procédure *clLat* calcule une classe latérale. La procédure *pmin* trouve le représentant dans une classe latérale (c'est la permutation qui est la plus petite dans l'ordre lexicographique).

```
# Structure polygone.  
P := proc()  
    local sigma,tau,i,D;  
    sigma:=permInd(args);  
    # D est le sous-groupe diédral.  
    D:=diedral(nargs);  
    tau:=pmin(clLat(sigma,D));  
    sigma:=prod(inv(sigma),tau);  
    RETURN(evaln(P(`$('args[sigma[i]]','i'=1..nargs))))  
end;  
  
# Structure de type  $(L_2C_3)/Z_2 = S_5/L$  (cf. [Yeh])  
L:=(* [1,2,3,4,5],[2,3,1,4,5],[3,1,2,4,5],[2,1,3,5,4],[3,2,1,5,4],[1,3,2,5,4] *);  
S5L := proc()  
    local sigma,tau,i;  
    if nargs<>5 then RETURN({}) fi;  
    sigma:=permInd(args);  
    tau:=pmin(clLat(sigma,L));  
    sigma:=prod(inv(sigma),tau);  
    RETURN(evaln(S5L(`$('args[sigma[i]]','i'=1..nargs))))  
end;
```