

Publications du **Laboratoire de
Combinatoire et d'
Informatique
Mathématique**

12

Yves Chiricota

**Structures combinatoires et
calcul symbolique**

Département de mathématiques et d'informatique



Université du Québec à Montréal

Ce numéro constitue la publication d'une thèse soutenue devant jury, le 3 septembre 1992, pour l'obtention du Ph.D.

Composition du Jury

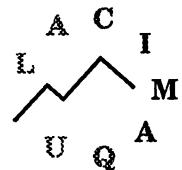
G. LABELLE	<i>UQAM</i> , directeur de recherche
P. BOUCHARD	<i>UQAM</i> , co-directeur de recherche
P. LEROUX	<i>UQAM</i> ,
J. LABELLE	<i>UQAM</i> ,
D. ZEILBERGER	<i>Temple University</i>

Dépôt légal, premier semestre 1993, Bibliothèque nationale du Québec.

ISBN 2-89276-113-1 LACIM Montréal

© LACIM, Montréal, Mars 1993.

Laboratoire de combinatoire et d'informatique mathématique
Département de mathématiques et d'informatique
Université du Québec à Montréal
C.P. 8888, Succ. A
Montréal, QC.
Canada H3C 3P8



UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL

THÈSE
PRÉSENTÉE
COMME EXIGENCE PARTIELLE
DU DOCTORAT EN MATHÉMATIQUES

par

Yves Chiricota

STRUCTURES COMBINATOIRES ET CALCUL SYMBOLIQUE

Août 1992

3.4	Équations différentielles autonomes dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.	59
3.5	Sous-modules différentiels de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.	67
3.6	Intégration dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$.	72
3.7	Algorithme pour intégrer dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$	74
4	Inversion dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.	77
4.1	Inversion d'espèces polynomiales et conjecture jacobienne.	77
4.1.1	Substitution dans E_2 et inversion dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$.	77
4.1.2	Inverse substitutionnel.	78
4.2	Racines carrées symétriques	81
4.2.1	Introduction	81
4.2.2	Substitution générale dans l'espèce E_2	82
4.2.3	Racine carrée symétrique	82
4.2.4	Arbres et arborescences	85
4.2.5	Remarques	87
4.3	Décomposition moléculaire de l'espèce A.	87
A	Tables concernant les espèces moléculaires.	95
A.1	Espèces moléculaires de degrés 6 et 7.	95
A.2	Dérivée des espèces moléculaires de degrés 1 à 5.	98
A.3	Dérivées des espèces atomiques de degrés 6 et 7.	99
A.4	Polynôme indicateur de cycles (degré 6 et 7).	101
A.5	Décomposition moléculaire de l'espèce des arborescences sur $n \leq 10$ points.	105
A.6	Décomposition moléculaire de l'espèce des arbres sur $n \leq 10$ points.	106
A.7	Exemple d'utilisation de la librairie Struct.	107
A.8	Exemple d'utilisation de la librairie EqDiff.	107
A.9	Procédures pour manipuler les structures combinatoires.	109

A.9.1 Fichier struct	109
A.9.2 Fichier Z	113
A.9.3 Fichier grconj	114
A.9.4 Fichier derivee	118
A.9.5 Fichier genSG	119
A.9.6 Fichier Yeh	121
A.9.7 Fichier divers	122
A.10 Appendice: Procédures pour traiter les équations différentielles.	124
A.10.1 Fichier eqDiff	124
A.10.2 Fichier indices	126
A.10.3 Fichier cardi	126
A.10.4 Fichier params	127
A.10.5 Fichier intc	128
A.10.6 Fichier decArbo	132

Table des illustrations

1.1	Un cycle sur 4 points.	7
1.2	Une tresse et sa projection.	11
1.3	Projection de x_i .	12
1.4	$A_{k,i}$.	12
1.5	Écriture d'une tresse peignée dans U_n .	15
1.6	Position des croisements.	16
1.7	Configurations possibles du croisement c .	17
1.8	Exemples de réécritures.	17
1.9	Passage de c en position droite.	18
1.10	Correspondance entre tresses pures et mots de Dyck.	21
1.11	Suite de mots de Dyck associés à une tresse pure.	21
2.1	Une (X^6/Kd) -structure.	31
2.2	Autre interprétation de X^6/Kd .	31
2.3	Six structures fixées par les copies de D_6 dans S_3^2b .	33
2.4	Effet de τ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure.	33
2.5	Effet de ρ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure.	33
2.6	L'effet de ρ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure ne dépend pas du choix du "trajet" à faire parcourir aux points.	34
2.7	Une (X^6/A_5b) -structure.	39
2.8	Une façon d'obtenir une classe de $X\mathcal{P}_5//H$.	39
2.9	Une (X^6/C_4b) -structure.	40
2.10	Une (X^6/Ke) -structure.	40
2.11	Autre interprétation pour (X^6/Ke) .	41

2.12 Action de Z_2 sur X^6/C_4b .	41
2.13 Quotient de C_3^2 par Z_4 .	42
2.14 Action induite sur les X^6/S_5b -structures.	42
2.15 X^6/S_3e .	42
2.16 X^6/D_6e .	43
2.17 X^7/A_4c .	43
2.18 X^7/A_4c .	43
2.19 X^7/Q_6a .	44
2.20 $X^7/(D_4S_3 \cap A_7)$.	44
2.21 X^7/H_7a .	44
2.22 Structures dérivées non-isomorphes.	47
2.23 Structures dérivées isomorphes.	47
2.24 Dérivée de C_3^2/Z_2 .	48
2.25 Dérivée de (X^6/Kd) .	48
2.26 Dérivée de C_3^2/Z_4 .	49
2.27 Dérivée de X^7/C_4b .	49
2.28 Dérivée de $(C_3C_4)/Z_2$.	50
2.29 Dérivée de X^7/D_6e (1).	50
2.30 Dérivée de X^7/D_6e (2).	50
 3.1 Amorces de solutions de $Y' = 1 + X + Y$, $Y(0) = 0$.	57
3.2 Amorces de solutions de $Y'(X) = E(X) + Y(X)$, $Y(0) = 0$.	57
3.3 Amorces de solutions de $Y'(X) = E(Y)L(Y)$, $Y(0) = 0$.	58
3.4 Amorces de solutions de $Y' = 1 + Y^2$, $Y(0) = 0$.	59
3.5 Amorces de solutions de $Y' = 1 + 2E_2(Y)$, $Y(0) = 0$.	59
3.6 Codage des monômes par des arborescences.	72
3.7 Produit de monômes.	72

3.8 Substitution de monômes.	72
-------------------------------------	-----------

Introduction.

La théorie des espèces de structures a été introduite par A. Joyal dans [Ja1]. Depuis, cette théorie a ouvert la voie à une foison de travaux dans plusieurs directions. Cette thèse se veut une continuation de certains de ces travaux dans deux axes tributaires l'un de l'autre. D'une part, nous avons entrepris une étude de structures combinatoires appartenant à des espèces moléculaires. Cette étude a menée à la classification complète des espèces moléculaires sur les cardinalités 6 et 7. D'autre part, nous apportons une contribution à la théorie du calcul intégral dans le contexte des espèces de structures et étudions des problèmes liés à l'inversion substitutionnelle dans l'anneau $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ des espèces rationnelles.

Le calcul symbolique a joué un rôle fondamental dans notre travail. Plusieurs algorithmes ont été mis au point pour résoudre des problèmes ou encore pour effectuer des calculs dans notre contexte. Certains résultats (entre-autre dans le chapitre 2) ont vu le jour grâce à l'informatique qui a agit comme une loupe nous permettant de voir de plus près certaines propriétés des objets que nous avons étudiés.

La première partie de cette thèse (chapitres 1 et 2) concerne l'étude de structures combinatoires. Ce travail fait suite aux travaux de Yeh et Labelle dans [Ye1, LJ2, LY]. Le lecteur pourra constater comment la théorie des groupes (de permutations) intervient dans la théorie des espèces de structures en lisant cette partie.

Le premier chapitre débute par la description d'une *représentation symbolique* (ou encore *informatique*) de structures combinatoires appartenant à des espèces moléculaires. On utilise ici le fait que les structures appartenant à une espèce moléculaire peuvent être vues, grâce aux travaux de Yeh (voir [Ye1]), comme les classes de S_n/K , où $K \leq S_n$. Cette approche a été implémentée en Maple et fut un outil appréciable pour effectuer des calculs dans le chapitre 2.

On retrouvera aussi dans ce chapitre une section sur la représentation symbolique des groupes de tresses. On y décrit un algorithme pour trouver la factorisation d'une tresse pure comme un produit d'éléments de $F_n F_{n-1} \cdots F_2$, où F_k est le groupe libre à k générateurs. Cet algorithme découle d'un théorème de Artin. Nous y faisons aussi l'énumération de tresses pures selon le nombre de croisements.

Le chapitre 2 est une suite du travail, accompli dans [LJ2], qui consiste à classifier les espèces moléculaires. Cette classification a été faite pour les espèces sur les cardinalités ≤ 5 ; nous avons poursuivi ce travail pour les espèces moléculaires sur 6 et 7 points. Il est évident que certaines de ces espèces sont obtenues des espèces sur $n < 6$ points par produit ou substitution. Une fois celles-ci classifiées, nous utilisons la représentation sous la forme X^n/K pour donner une interprétation géométrique aux espèces moléculaires qui restent. Le problème ici consiste à trouver, étant donné $K \leq S_n$ ($n = 6, 7$)¹, une structure s telle que le groupe des automorphismes de s soit égal à K . Dans certains cas, l'espèce pour laquelle on cherche

¹Notons que K est donné à conjugaison près, puisque K_1 et K_2 sont conjugués si et seulement si les espèces X^n/K_1 et X^n/K_2 sont isomorphes.

une interprétation géométrique est obtenue du quotient par un groupe G d'une espèce connue X^n/K (on a alors un homomorphisme de G dans $\text{Aut}(X^n/K)$).

Nous donnons dans ce chapitre un théorème de représentation du groupe $\text{Aut}(X^n/K)$ qui nous permet de trouver tous les quotients de X^n/K . De plus, on montre que X^n/K est "quotientable" si et seulement si K n'est pas simple. En outre, il y a des espèces qui sont atomiques, primitives et non-quotientables. C'est le cas de l'espèce X^6/A_5b , où A_5b est un groupe isomorphe au groupe alterné A_5 mais qui n'est pas dans la même classe de conjugaison (voir l'exemple 2.2.10). Pour celles-ci, nous avons introduit la notion de *regroupement* qui est en fait une généralisation du quotient (voir la 2.2.9). Nous utilisons cette notion pour donner une interprétation à X^6/A_5b .

Notons que nous avons utilisé une table (due à Wensley [We]) donnant un représentant pour les classes de conjugaison de sous-groupes de S_7 . On trouvera en appendice un tableau donnant des générateurs pour chacun des représentants.

La deuxième partie du présent travail contribue à la théorie des équations différentielles dans les espèces rationnelles $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ et concerne aussi des problèmes d'inversion dans les espèces.

Le chapitre 3 porte sur certaines équations différentielles dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. Entre-autre, nous y étudions les équations

$$Y' = 1 + Y^2; \quad Y(0) = 0 \quad (0.1)$$

et

$$Y' = 1 + 2E_2(Y); \quad Y(0) = 0. \quad (0.2)$$

Une éventuelle solution à ces équations aurait pour fonction génératrice associée $\tan x$. En fait, nous verrons que ces deux équations n'ont pas de solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$ en utilisant une version combinatoire de l'itération de Picard introduite dans [LG2].

Un des principaux résultats de ce chapitre est une méthode systématique pour trouver toutes les solutions de l'équation différentielle autonome

$$Y' = F(Y), \quad F(0) \neq 0; \quad Y(0) = Y_0. \quad (0.3)$$

Nous utilisons cette méthode pour trouver toutes les solutions aux équations (0.1) et (0.2) ainsi qu'à la généralisation de celles-ci donnée par

$$Y' = F(Y, t) \stackrel{\text{déf}}{=} 1 + 2tE_2(Y) + (1 - t)Y^2; \quad Y(0) = 0,$$

où $t \in \mathbf{Q}$ est un paramètre. Cette méthode est basée sur le fait que toutes les solutions à (0.3) sont données par l'ensemble

$$\{A(X + W(X)) : W \in \Omega_0\},$$

où $A(X)$ est une solution particulière de l'équation et

$$\Omega_0 = \{G \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]] : G' = 0, G(0) = 0\}.$$

Il est remarquable que dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ (de même que dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$), la solution à l'équation $Y' = 0, Y(0) = 0$ n'est pas triviale; c'est une particularité qui fait que cette théorie se détache de sa consœur, la théorie des équations différentielles dans les espèces linéaires (voir [LV]).

L'anneau $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ est naturellement muni d'une structure de module. Ce module contient plusieurs sous-modules différentiels (c.-à-d. stables sous la dérivation). Par exemple, le module $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$ où $\mathcal{E} = \{E_1, E_2, E_3, \dots\}$ des espèces dites *ensemblistes* est un sous-module différentiel de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ (car $(E_n)' = E_{n-1}$). La section 3.5 est consacrée à l'étude du noyau de la dérivée sur certains de ces sous-modules. L'anneau des fonctions symétriques nous vient en aide pour trouver la dimension de ce noyau ainsi que pour trouver une base canonique de celui-ci.

Nous terminons ce chapitre en donnant un algorithme pour intégrer dans le semi-anneau des espèces ordinaires. Cet algorithme est implémenté en Maple et on en trouvera le code en appendice. L'intégrale se fait par coefficients indéterminés. Étant donnée une espèce T vivant sur n points, cette méthode consiste à trouver toutes les solutions pour a_M dans \mathbf{N} au système d'équations obtenu en posant $T = (\sum_{M \in \mathcal{M}_{n+1}} a_M M)',$ où \mathcal{M}_{n+1} est l'ensemble des espèces moléculaires sur la cardinalité $n + 1.$ La connaissance des espèces moléculaires sur les petites cardinalités est nécessaire pour former ces équations.

Le dernier chapitre porte sur des problèmes reliés à l'inversion d'espèces. On y montre qu'il existe des espèces polynomiales F telles que $F' = 1$ et $F^{<-1>},$ l'inverse substitutionnel, n'est pas polynomial. En effet, on montrera que l'espèce $F = X + X^2 - 2E_2(X)$ a pour inverse une espèce de la forme $\sum_{n \geq 0} [(-1)^n X^{2^n} + \Xi_n],$ où Ξ_n est une espèce virtuelle ne contenant aucune puissance de $X.$ Ceci a pour conséquence qu'un analogue de la conjecture jacobienne ne peut pas tenir dans le contexte des espèces de structures.

Ce chapitre se termine par l'exposé de la notion de *racine carrée symétrique*. C'est en quelque sorte une généralisation de la notion de racine carré dans le contexte des espèces. La racine carrée d'une espèce G est une espèce F telle que $G^2 = F.$ Cette équation n'a pas toujours de solution dans l'anneau des espèces complexes $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$; c'est le cas de l'équation $G^2 = X.$ Quant à elle, la racine carrée symétrique de G est une solution à l'équation $E_2(G) = F.$ Dans ce cas, il y a toujours au moins une solution, c'est ce que nous verrons avec la proposition 4.2.3.

Nous verrons aussi comment l'espèce des arbres et celle des arborescences sont liées par la notion de racine carrée symétrique en utilisant la formule de dissymétrie $\alpha + \mathbf{A}^2 = \mathbf{A} + E_2(\mathbf{A})$ (voir [LM]), où α est l'espèce des arbres et \mathbf{A} celle des arborescences.

On retrouvera en appendice des tables donnant la liste complète des espèces moléculaires sur 6 et 7 points, leur dérivée et leur polynôme indicateur de cycles. En plus on y trouve des tables donnant la décomposition moléculaire de l'espèce des arbres et des arborescences jusqu'à la cardinalité 10. Divers programmes Maple implémentant nos algorithmes sont eux aussi donnés en appendice.

Chapitre 1

Représentation symbolique de structures combinatoires.

Nous développons dans ce chapitre des techniques pour représenter en machine des structures combinatoires. La première partie concerne les structures appartenant à des espèces moléculaires. Notre méthode, implémentée en Maple, donne un moyen efficace pour manipuler ces objets dans un contexte informatique. Cette implémentation a donné lieu à des programmes permettant d'effectuer diverses opérations sur les structures. Par exemple, il est possible de "fabriquer" de nouvelles structures à partir de celles existantes, d'en calculer le stabilisateur, de vérifier si deux structures appartiennent aux mêmes espèces moléculaires, etc. Ces programmes furent des outils profitables pour trouver des interprétations géométriques aux espèces moléculaires sur 6 et 7 points dont il sera question au chapitre 2.

La deuxième partie du chapitre expose des approches pour une représentation symbolique des groupes de tresses. On y retrouvera entre autre un algorithme combinatoire pour calculer la factorisation d'une tresse pure sur $n+1$ -brins dans le produit $F_n F_{n-1} \cdots F_2$ de groupes libres F_k .

1.1 Représentation des espèces moléculaires.

Nous débuterons en exposant une méthode pour représenter et manipuler les structures appartenant à des espèces moléculaires (voir [Ye1, LJ2]) dans l'environnement Maple. Notre 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 S_n est le groupe symétrique et H est le stabilisateur d'une M -structure quelconque.

Notre façon de procéder nous donne la possibilité de manipuler ces objets dans l'environnement fourni par le logiciel Maple. Nous avons implanté une librairie de programmes en Maple à partir de cette méthode. Une utilité de ces programmes est de comparer deux espèces moléculaires à partir de structures qui appartiennent à ces espèces. 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 programmes nous ont aidé pour étendre la table [LJ2] des espèces moléculaires sur les petites cardinalités (voir le chapitre 2).

Nous rappellerons d'abord quelques notions de base de la théorie des espèces moléculaires

(pour plus de détails voir [Ye1, LJ2, LY]), puis nous décrirons la méthode qui a été implémentée en Maple. On peut aussi calculer le stabilisateur d'une structure, trouver la matrice qui représente le graphe du type de l'espèce moléculaire à laquelle appartient une structure, déterminer si les espèces moléculaires auxquelles appartiennent deux structures sont isomorphes. On trouvera à l'appendice A.9.1 plus de détails concernant cette implémentation et au chapitre 3 une utilisation conduisant à la résolution d'équations différentielles combinatoires (dans $\mathbb{Q}[[\mathcal{A}]]$) par coefficients indéterminés. En fait, la connaissance des espèces moléculaires permet la construction de l'arborescence des solutions d'une équation différentielle comme nous le verrons à la section 3.3.

1.1.1 Notations.

Soit M une espèce moléculaire de degré n (c.-à-d. $M = M_n$) et U un ensemble de cardinalité n . Le groupe symétrique S_U agit sur l'ensemble $M[U]$ en posant $\sigma \cdot s = M[\sigma](s)$, 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 (c.-à-d. transitive). 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

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

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

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

Les résultats suivant joueront un rôle primordial dans notre façon de décrire les structures:

Proposition 1.1.1 *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 $\{1, 2, \dots, n\}$.*

■

On notera $M_H = L_n/H$ pour alléger la notation. En fait, l'espèce L_n est isomorphe au produit $X^n = X \cdots X$ (n facteurs) de l'espèce X des singlentons.

Proposition 1.1.2 *$M_H \cong M_K$ 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 structures), de sorte que

$$\text{Bij}(\{1, 2, \dots, n\}, U) \cong S_{|U|}.$$

Ainsi l'espèce moléculaire M est codée (à conjugaison près) par le sous-groupe H de S_n et les M -structures par les classes latérales de H dans S_n .

1.1.2 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). Par exemple le cycle de la figure 1.1 est codé par la classe $\{\text{Id}, (1234), (13)(24), (1432)\}$

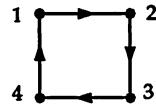


Figure 1.1: Un cycle sur 4 points.

Cette méthode, bien que correcte, n'est pas la plus pratique. En effet, 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 une structure de l'espèce cycle sera `c(liste d'objets)` (le `c` signifie cycle). Par exemple, l'appel `c(1, 2, 3, 4)` décrira un cycle sur l'ensemble $\{1, 2, 3, 4\}$. Une structure (différente des ensembles et des ordres linéaires) sera définie par une procédure Maple (voir l'appendice A.9.1) 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 $C_3(X^2)$ -structure sera définie par l'appel de la procédure `c` avec comme arguments trois ordres linéaire (listes) de deux points. Ainsi

$$\mathbf{c}([2, 4], [1, 3], [5, 6]).$$

représente une $C_3(X^2)$ -structure.

Comme on le voit, deux éléments 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 composée simultanément d'éléments des deux types.

La forme d'un appel est la 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 et $U_i \subset \{1, 2, \dots, n\}$ 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 permutés en accord avec un système de représentants des classes de $\{\varphi H : \varphi \in S_k\}$. Nous exploitons ici une caractéristique de la programmation symbolique 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

$$g: \{t_1, t_2, \dots, t_k\} \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$$

la fonction donnant le “rang” de chaque structure selon cet ordre. On peut voir $\{t_1, t_2, \dots, t_k\}$ comme une liste $t: \{1, 2, \dots, k\} \rightarrow \{t_1, t_2, \dots, t_k\}$. Alors $\sigma = g \circ t$ est une permutation de $\{1, 2, \dots, k\}$. Soit ρ le représentant de σ dans S_k/H . Il existe une unique permutation β telle que $\rho = \sigma \circ \beta$. Le résultat produit par l'appel $m(t_1, t_2, \dots, t_k) = m(t)$ sera

$$\begin{aligned} m(t \circ \beta) &= m(t_{\beta(1)}, t_{\beta(2)}, \dots, t_{\beta(k)}) \\ &= m(t_{\sigma^{-1}\rho(1)}, t_{\sigma^{-1}\rho(2)}, \dots, t_{\sigma^{-1}\rho(k)}). \end{aligned}$$

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

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

est

$$g(t\sigma^{-1}\rho) = (gt)\sigma^{-1}\rho = \sigma\sigma^{-1}\rho = \rho.$$

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

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

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 (ρ) de la classe de σ dans M et de retourner $m(t_{\sigma^{-1}\rho(1)}, t_{\sigma^{-1}\rho(2)}, \dots, t_{\sigma^{-1}\rho(k)})$. Comme système de représentants, 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 1.1.3 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 $C_4 \circ E_2$ -structure. Nous avons

$$t_1 = \{2, 3\}, t_2 = \{7, 8\}, t_3 = \{5, 6\}, t_4 = \{1, 4\},$$

$$U_1 = \{2, 3\}, U_2 = \{7, 8\}, U_3 = \{5, 6\}, U_4 = \{1, 4\},$$

$$a_1 = 2, a_2 = 7, a_3 = 5, a_4 = 1,$$

$$f(1) = 1, f(2) = 2, f(5) = 3, f(7) = 4.$$

On trouve $\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ et en prenant $C_n = \left\langle \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 4 & 3 & 1 \end{pmatrix} \right\rangle$, on calcule que $\rho = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 4 & 3 \end{pmatrix}$, de sorte que $\sigma^{-1}\rho = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$. 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-dessus 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. Pour plus de détails voir l'appendice A.7.

1.1.3 Conjugaison de sous-groupes dans S_n .

Comme on l'a vu, deux espèces moléculaires X^n/H_1 et X^n/H_2 sont isomorphes si et seulement si H_1 et H_2 sont des sous-groupes conjugués de S_n . Nous avons implémenté un algorithme pour déterminer si c'est le cas. Cet algorithme a été utilisé dans la recherche d'interprétations combinatoires aux espèces sur 6 et 7 points (voir le chapitre 2).

Outre une recherche systématique qui consiste chercher une permutation σ telle que $\sigma H_1 \sigma^{-1} = H_2$, nous avons utilisé l'algorithme décrit ici pour déterminer si deux sous-groupes de S_n sont dans la même classe de conjugaison. Cet algorithme procède par comparaison des types cycliques des permutations des deux sous-groupes.

Dans un premier temps, on définit une relation d'équivalence sur H_1 et sur H_2 comme suit: $\sigma \equiv \tau$ si et seulement si $t(\sigma) = t(\tau)$ où $t: S_n \rightarrow N^n$ est le type cyclique ($t(\sigma)(i) =$ nombre de cycles de longueur i dans σ). Les classes de H_1/\equiv contiennent les permutations de H_1 de même type cyclique (c.-à-d. conjuguées). Nous associons ensuite à chaque classe un couple (t, i) où $t \in N^n$ est le type cyclique des permutations dans la classe et i est la cardinalité de la classe. Notons que ces couples décrivent de façon non-équivoque les classes. On définit une application $\phi_i: H_1/\equiv \rightarrow N^n \times N$ par $\phi_i(C) = (t(C), |C|)$, pour $i = 1, 2$. Une condition nécessaire pour que H_1 et H_2 soient conjugués est que $\text{Im } \phi_1 = \text{Im } \phi_2$. Si ce n'est pas le cas, H_1 et H_2 ne sont pas conjugués, c'est fini. Sinon, il faut faire une analyse plus fine de la situation. Remarquons d'une part que si $\text{Im } \phi_1 = \text{Im } \phi_2$, alors il existe une unique bijection $\Psi = \phi_2^{-1} \circ \phi_1: H_1/\equiv \rightarrow H_2/\equiv$ telle que quelque soit $C \in H_1/\equiv$, on a $t(\Psi(C)) = t(C)$ et $|\Psi(C)| = |C|$. D'autre part, on a l'égalité suivante

$$\{\sigma \in S_n : \sigma H_1 \sigma^{-1} = H_2\} = \bigcap_{C \in H_1/\equiv} \{\gamma \in S_n : \gamma C \gamma^{-1} = \Psi(C)\}. \quad (1.1)$$

Ceci découle du fait que la conjugaison préserve la structure cyclique des permutations. La suite de l'algorithme se déroulera donc comme suit. Nommons C_1, C_2, \dots, C_k les classes de H_1/\equiv , avec $C_1 =$ classe de la permutation identité. Pour chaque $\sigma \in S_n$ on effectue les vérifications suivantes: si $\sigma C_2 \sigma^{-1} = \Psi(C_2)$ alors, pour $i = 3, 4, \dots, k$, on vérifie successivement si $\sigma C_i \sigma^{-1} = \Psi(C_i)$. Dès qu'un C_i est tel que $\sigma C_i \sigma^{-1} \neq \Psi(C_i)$ on passe au σ suivant (disons σ'), sinon $\forall i \in \{2, 3, \dots, k\}$ on a $\sigma C_i \sigma^{-1} = \Psi(C_i)$. Donc, en vertu de 1.1, $\sigma H_1 \sigma^{-1} = H_2$, et c'est fini. Si un des C_i est tel que $\sigma C_i \sigma^{-1} \neq \Psi(C_i)$, alors on répète l'opération avec σ' et ainsi de suite avec chaque élément de S_n . Si

$$(\forall \sigma \in S_n)(\exists i \in \{2, 3, \dots, k\})(\sigma C_i \sigma^{-1} \neq \Psi(C_i)),$$

alors H_1 et H_2 ne sont pas conjugués.

On trouvera le code Maple concernant cet algorithme à l'appendice A.9.3.

1.1.4 Structures mixtes.

Un genre particulier de structures est apparu au cours de l'élaboration de ces programmes. Les structures appartenant aux espèces de la forme $F(G)$ (où G est une espèce moléculaire) 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. Celles-ci généralisent la notion d'*assemblées injectives de G-structures* dénotés $E_{\text{inj}}(G)$ (voir [LM]). Ce sont des assemblées de G -structures deux à deux non-isomorphes. 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. Un problème intéressant est d'établir des liens entre espèces liées aux structures ordinaires et celles liées aux structures-mixtes.

1.2 Représentation symbolique et groupes de tresses.

1.2.1 Généralités.

Nous étudions ici quelques problèmes reliés à la représentation informatique du groupe des tresses. Comme nous l'avons vu (section 1.1.2), la représentation des structures appartenant à une espèce moléculaire se fait aisément en utilisant le stabilisateur d'une des structures. La représentation des tresses, objets de nature topologique, n'est pas aussi facile. Beaucoup de travail reste à faire pour obtenir des algorithmes efficaces permettant de manipuler les tresses.

Établissons quelques notations.

Définition 1.2.1 *Le groupe des tresses B_n est le groupe engendré par $n - 1$ générateurs $\{x_1, x_2, \dots, x_{n-1}\}$ satisfaisant les relations $x_i x_{i+1} x_i = x_{i+1} x_i x_{i+1}$ si $1 \leq i \leq n - 1$ et $x_i x_j = x_j x_i$ si $|i - j| \geq 2$.*

Théorème 1.2.2 (Artin) Soit F_n le groupe libre sur n générateurs

$$\{a_1, a_2, \dots, a_n\},$$

alors B_n est isomorphe au sous-groupe de $\text{Aut}(F_n)$ engendré par les images de x_i , l'image de x_i étant définie par

$$a_i \mapsto a_i a_{i+1} a_i^{-1}, \quad a_{i+1} \mapsto a_i \quad \text{et} \quad a_j \mapsto a_j \quad \text{si} \quad j \neq i, i+1.$$

■

Les éléments du groupe B_n ont également une interprétation géométrique que nous donnons ici. Soient $a, b \in \mathbb{R}$ avec $a < b$ et considérons les deux plans π_0 et π_1 dans \mathbb{R}^3 , d'équations $z = a$ et $z = b$ respectivement. Sur chacun des plans alignons deux droites $\delta_0 \subset \pi_0$ et $\delta_1 \subset \pi_1$, parallèles à l'axe des y . Sur chacune des droites plaçons n points que nous nommerons P_1, P_2, \dots, P_n sur δ_0 et Q_1, Q_2, \dots, Q_n sur δ_1 de telle sorte si $i > j$ alors la coordonnée y de P_i (resp. de Q_i) soit < que celle de P_j (resp. de Q_j). Une *tresse à n brins* est la donnée, à isotopie ambiante près, pour chaque $i = 1, 2, \dots, n$ d'un chemin C^∞ reliant le point P_i à un point $Q_{\sigma(i)}$ où $\sigma \in S_n$. Ces n chemins doivent être tels que la coordonnée z est strictement décroissante. En plus, les chemins ne peuvent s'intersecter. Le chemin reliant le point P_i au point $Q_{\sigma(i)}$ est appelé le *i^e brin*.

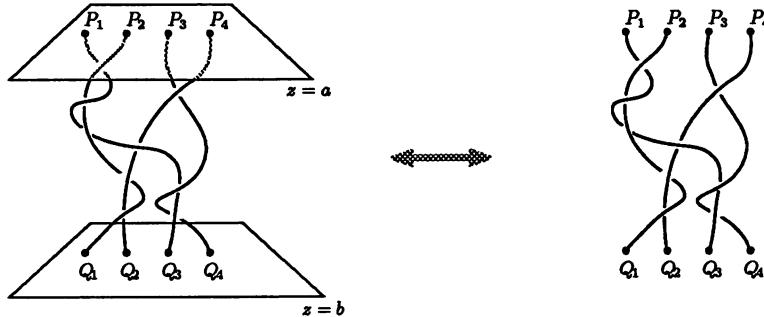


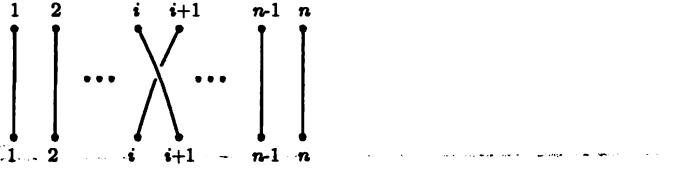
Figure 1.2: Une tresse et sa projection.

Notons que la construction qui précède est de E. Artin et peut se généraliser (voir [Bi, Mo]). Il y a une façon de représenter graphiquement une tresse en deux dimensions en la projetant dans le plan yz (voir [Mo] pour plus de détails). Nous utiliserons cette représentation dans nos illustrations. La figure 1.2 représente une tresse sur 4 brins et sa projection.

Soit \mathcal{B}_n l'ensemble de toutes les tresses à n brins (les points P_i et Q_i étant fixés). Lorsque nous parlerons d'une tresse $p \in \mathcal{B}_n$, nous sous-entendrons toujours sa projection. L'isotopie ambiante définit une relation d'équivalence sur \mathcal{B}_n . On munit l'ensemble quotient d'une structure de groupe en prenant comme opération la "concaténation" de tresses. L'élément neutre est la tresse triviale (le brin i relie les points P_i et Q_i et les brins ne sont pas entrelacés). Dans ce qui suit, nous étiquetterons les points P_i par l'entier i et $Q_{\sigma(i)}$ par $\sigma(i)$.

Artin a montré que le groupe obtenu est isomorphe au groupe B_n . Le générateur x_i correspond à la tresse décrite dans la figure 1.3.

Nous noterons par Π l'homomorphisme défini par $x_i \mapsto (i, i+1) \in S_n$. Ainsi, toute tresse $t \in \mathcal{B}_n$ détermine une permutation $\Pi(t)$ de $\{1, 2, \dots, n\}$. L'ensemble des tresses t telles que $\Pi(t)$ est l'identité forme un sous-groupe normal de \mathcal{B}_n noté \mathcal{P}_n . On l'appelle *le groupe*

Figure 1.3: Projection de x_i .

des tresses pures. Si on fixe pour chaque $\sigma \in S_n$ un élément t_σ dans \mathcal{B}_n qui a σ comme permutation sous-jacente, alors chaque $t \in \mathcal{B}_n$ s'écrit de manière unique comme un produit pt_σ où $p \in \mathcal{P}_n$ et σ est la permutation sous-jacente de t . Nous dénoterons par \mathbf{P}_n le sous-groupe de \mathbf{B}_n correspondant aux tresses pures.

Soit $1 \leq i < k \leq n$ et définissons (voir figure 1.4)

$$A_{k,i} = \begin{cases} (x_{k-1}x_{k-2}\cdots x_{i+1})x_i^2(x_{k-1}x_{k-2}\cdots x_{i+1})^{-1} & \text{si } k > i+1 \\ x_i^2 & \text{si } k = i+1 \end{cases}.$$

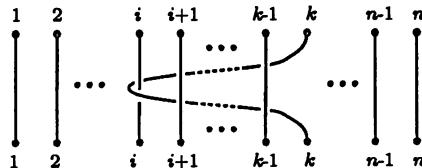
On montre que si k est fixé, alors le groupe U_k engendré par

$$\{A_{k,k-1}, A_{k,k-2}, \dots, A_{k,1}\}$$

est libre. De plus, on montre que $\mathcal{P}_n = U_n \rtimes \mathcal{P}_{n-1}$. L'action de \mathcal{P}_{n-1} sur U_n se fait par conjugaison. Pour une démonstration de ces résultats, voir [Mo, Ha]. Notons que nous donnerons une définition équivalente du produit semi-direct à la section 2.1. Il s'en suit que $\mathcal{P}_n = U_n U_{n-1} \cdots U_2$, d'où le résultat

Proposition 1.2.3 *Toute tresse pure s'écrit de manière unique sous la forme $A_n A_{n-1} \cdots A_2$, (où $A_k \in U_k$ s'écrit de manière unique comme produit de tresses de la forme $A_{k,i}$, $1 \leq i \leq k-1$).*

■

Figure 1.4: $A_{k,i}$.

La définition suivante donne une représentation d'une tresse comme tableau de nombres. Elle nous donne une façon combinatoire de voir une tresse.

Définition 1.2.4 *Le tableau associé à un mot $W = x_{i_1}^{\epsilon_1} x_{i_2}^{\epsilon_2} \cdots x_{i_s}^{\epsilon_s} \in \mathbf{B}_n$ est un couple (M, f) où $M = M_W$ est une matrice $(s+1) \times n$ d'entiers dont la première ligne est $(1, 2, 3, \dots, n)$ et dont la r -ième ligne ($2 \leq r \leq s+1$) est obtenue de la précédente en permutant les entrées (r, i_{r-1}) et $(r, i_{r-1} + 1)$ et f est une fonction qui, à chaque ligne d'indice $1 \leq r \leq s$ de M , associe le signe de l'entier ϵ_r .*

■

Remarque 1.2.5 Notons que deux tableaux distincts peuvent représenter la même tresse. Ceux-ci sont toutefois utiles pour déterminer où se produisent les croisements entre les brins. En effet, le tableau associé à un mot $x_{i_1}^{\epsilon_1}x_{i_2}^{\epsilon_2}\cdots x_{i_s}^{\epsilon_s}$ donne la trace des brins de la tresse associée à ce mot. En outre, le tableau contient toute l'information dont on a besoin pour reconstituer une tresse. En particulier, les positions successives occupées par l'entier i dans le tableau nous donnent le "trajet" du brin i dans la projection de la tresse. ■

Exemple 1.2.6 Le tableau associé à $x_3^{-1}x_1x_1x_2^{-1}x_3^{-1} \in B_4$ est

$$\left(\begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & - \\ 1 & 2 & 4 & 3 & + \\ 2 & 1 & 4 & 3 & + \\ 1 & 2 & 4 & 3 & - \\ 1 & 4 & 2 & 3 & - \\ 1 & 4 & 3 & 2 & \end{array} \right).$$

Définition 1.2.7 Soit $W = x_{i_1}^{\epsilon_1}x_{i_2}^{\epsilon_2}\cdots x_{i_s}^{\epsilon_s}$. Soit $1 \leq r \leq s$, l'entier

$$(\Pi(x_{i_1}^{\epsilon_1}x_{i_2}^{\epsilon_2}\cdots x_{i_r}^{\epsilon_r}))^{-1}(i)$$

sera appelé l'emplacement ou encore la place du brin i en position r . Par position nous entendons la ligne du tableau associé. ■

Remarque 1.2.8 Si dans W , le brin i se retrouve à l'emplacement k et en position r , cela signifie qu'à la colonne k et à la ligne $r+1$, on retrouve l'entier i dans le tableau associé à W . ■

Définition 1.2.9 Nous dirons que $W = x_{i_1}^{\epsilon_1}x_{i_2}^{\epsilon_2}\cdots x_{i_s}^{\epsilon_s}$ présente un croisement entre les brins i_1 et i_2 en position r ($1 \leq r \leq s$) et l'emplacement k , si dans le tableau associé, on a que $i_1 = M_W(r, k)$, $i_2 = M_W(r, k+1)$ et que $M_W(r, k) = M_W(r+1, k+1)$ et $M_W(r+1, k) = M_W(r, k+1)$. ■

Remarque 1.2.10 Notons que l'on peut voir les croisements de W comme une liste. Chaque croisement correspond à une lettre de W .

1.2.2 Représentation de tresses.

Nous abordons ici le problème de représenter une tresse en machine. Ce problème soulève plus de difficultés que celui de la représentation des structures appartenant aux espèces moléculaires. La plupart des algorithmes développés ici sont de complexité exponentielle. Nous énoncerons les résultats de la théorie des tresses nécessaire à la compréhension du texte et décrirons ensuite nos algorithmes. On trouvera dans [Mo],[Ca] la démonstration des résultats cités sans démonstration.

Nous terminerons la section par l'énumération des tresses pures selon le nombre de croisements en utilisant la technique des langages algébriques (voir [BM]).

Une représentation possible est de coder une tresse par une des ses écritures dans B_n (c.-à-d. par un mot $x_{i_1}^{\epsilon_1}x_{i_2}^{\epsilon_2}\cdots x_{i_r}^{\epsilon_r}$, où $\epsilon_i \in \{-1, 1\}$). Le problème qui se pose alors est de déterminer si deux tresses sont isotopes. Le problème du mot dans B_n étant résolu, entre autres par Garside (voir [Ga]), on peut savoir si deux mots correspondent à des tresses isotopes ou non. Les résultats de Garside suggèrent un algorithme que nous décrirons plus loin (section 1.2.2).

Notons que le groupe des tresses a une représentation dans un groupe de matrices appelée la *représentation de Burau* (voir [Mo]). Si cette représentation était fidèle, le problème de savoir si deux tresses sont isotopes serait résolu en vérifiant que les matrice associées à celles-ci sont égales. Malheureusement, on ne sait pas si cette représentation est fidèle.

Nous décrirons ici deux méthodes pour déterminer si deux tresses (données sous la forme de mots) sont isotopes. La première utilise le théorème de représentation d'Artin (théorème 1.2.2). La seconde méthode consiste à trouver la factorisation de la tresse dans $U_n U_{n-1} \cdots U_2$. L'avantage de la première méthode est de déterminer de façon simple (codage facile) si deux mots représentent la même tresse. Par contre, elle ne donne pas une représentation unique en machine contrairement à la deuxième méthode, qui est plus compliquée à coder.

Représentation d'Artin.

Le théorème 1.2.2 nous donne une méthode simple pour déterminer si deux tresses sont isotopes. Soit $W \in B_n$ un mot représentant une tresse t . Dénotons par \bar{W} l'image dans $\text{Aut}(F_n)$ de W . Pour vérifier si deux mots W_1 et W_2 correspondent à des tresses isotopes, il suffit de vérifier que l'image des générateurs a_1, a_2, \dots, a_n de F_n est la même par \bar{W}_1 et \bar{W}_2 . Pour ce faire il suffit de connaître l'image de ces éléments par \bar{x}_i pour $i = 1, 2, \dots, n - 1$. Le théorème de Artin nous donne cette information.

Exemple 1.2.11 Soit $W_1 = x_1x_2x_3x_1x_2$ et $W_2 = x_2x_1x_3x_2x_3$. On calcule que

$$\begin{aligned}\bar{W}_1(a_1) &= \bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3\bar{x}_1\bar{x}_2(a_1) = \bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3\bar{x}_1(\bar{x}_2(a_1)) \\ &= \bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3(\bar{x}_1(a_1)) = \bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3(a_1a_2a_1^{-1}) \\ &= \bar{x}_1\bar{x}_2(\bar{x}_3(a_1)\bar{x}_3(a_2)\bar{x}_3(a_1^{-1})) = \bar{x}_1\bar{x}_2(a_1a_2a_1^{-1}) \\ &= \bar{x}_1(\bar{x}_2(a_1)\bar{x}_2(a_2)\bar{x}_2(a_1^{-1})) = \bar{x}_1(a_1a_2a_3a_2^{-1}a_1^{-1}) \\ &= \bar{x}_1(a_1)\bar{x}_1(a_2)\bar{x}_1(a_3)\bar{x}_1(a_2^{-1})\bar{x}_1(a_1^{-1}) \\ &= a_1a_2a_1^{-1}a_1a_3a_1^{-1}a_1a_2^{-1}a_1^{-1} \\ &= a_1a_2a_3a_2^{-1}a_1^{-1}.\end{aligned}$$

Par un calcul similaire, on trouvera que $\bar{W}_2(a_1) = a_1a_2a_3a_2^{-1}a_1^{-1}$, et en poursuivant ainsi, on calculera $\bar{W}_2(a_i) = \bar{W}_2(a_i)$, pour $i = 2, 3, 4$. Donc, W_1 et W_2 représentent des tresses isotopes. On a en effet que

$$x_1x_2x_3x_1x_2 = x_1x_2x_1x_3x_2 = x_2x_1x_2x_3x_2 = x_2x_1x_3x_2x_3$$

en utilisant la définition 1.2.1. ■

Cet algorithme se prête bien au parallélisme puisqu'il y a n calculs indépendants à faire. La complexité de chaque calcul est au pire 3^s où s est la longueur du plus grand des deux mots (et donc le nombre de croisements de la tresse correspondante). Bien qu'il nous permette de comparer deux tresses, cet algorithme ne nous donne pas une expression canonique pour représenter une tresse, contrairement à la méthode exposée dans la prochaine section.

Factorisation dans $U_n U_{n-1} \cdots U_2$.

Cette approche consiste à considérer l'écriture vu plus haut d'une tresse t comme produit d'une tresse pure p et d'une tresse t_σ associée à une permutation σ . En fait, à $t \in \mathcal{B}_n$, on associe $(\Pi(t), tN_{\Pi(t)}^{-1})$, où $N_{\Pi(t)}$ est fixé une fois pour toutes dans $\Pi(t)^{-1}(t)$. Notons que $tN_{\Pi(t)}^{-1}$ est une tresse pure. Le problème se ramène alors à trouver un représentant pour une tresse pure. Nous prendrons son écriture dans $U_n U_{n-1} \cdots U_2$. En d'autres mots, il faut passer de l'écriture $x_{i_1}^{e_1} x_{i_2}^{e_2} \cdots x_{i_s}^{e_s}$ à $A_n A_{n-1} \cdots A_2$.

Nous utiliserons la terminologie suivante

Définition 1.2.12 Nous dirons que $W = x_{i_1}^{e_1} x_{i_2}^{e_2} \cdots x_{i_s}^{e_s}$ est peigné entre les positions $1 \leq d_1 < d_2 \leq s$ lorsque les seuls croisements qui surviennent entre ces positions sont entre les brins n et i (avec $i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$). ■

Remarquons qu'il est facile de trouver l'écriture dans U_n de $W \in \mathbf{P}_n$ peigné de la position du début à la fin. La figure 1.5 illustre l'opération.

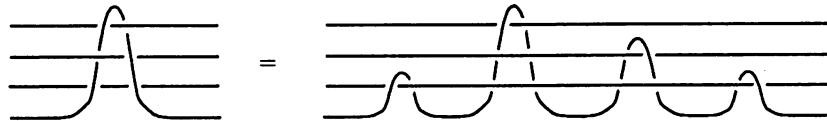


Figure 1.5: Écriture d'une tresse peignée dans U_n .

L'algorithme que nous allons décrire utilise le fait que $\mathbf{P}_n = U_n \times \mathbf{P}_{n-1}$ pour trouver l'écriture d'une tresse pure $p = x_{i_1}^{e_1} x_{i_2}^{e_2} \cdots x_{i_s}^{e_s}$ dans $U_n U_{n-1} \cdots U_2$. En fait, il suffit de calculer le facteur $A_n \in U_n$ tel que $p = A_n p'$ avec $p' \in \mathbf{P}_{n-1}$ et de réappliquer l'algorithme à p' . Pour calculer A_n , il s'agit de repérer les croisements entre les brins $1, 2, \dots, n-1$ (par exemple à l'aide du tableau associé à la tresse) et de les faire passer à la fin de la tresse. Pour ce faire nous utiliserons des réécritures décrites dans le lemme 1.2.17 énoncé plus loin.

Définition 1.2.13 Nous noterons $\Gamma(X, W)$ la liste des croisements entre les brins $\in X \subset \{1, 2, \dots, n\}$ de la tresse t correspondant au mot W . Nous utiliserons la fonction $\rho(W)$ pour désigner la position du croisement qui correspond au dernier retour du brin n en place n dans t . Un croisement dans

$$\Gamma(\{1, 2, \dots, n-1\}, W)$$

est dit en position gauche s'il est situé entre le début de t et le croisement en position $\Gamma(W)$ (voir la figure 1.6 dans laquelle la tresse a subi une rotation de 90 degrés pour faciliter l'illustration). Sinon, il est dit en position droite. Nous noterons $\Gamma_g(X, t)$ l'ensemble des croisements en position gauche ordonnés par ordre d'apparition dans la tresse. ■

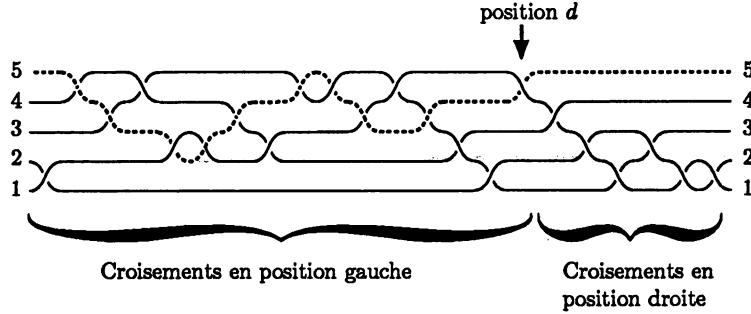


Figure 1.6: Position des croisements.

Nous utiliserons l'opération que voici sur les mots.

Définition 1.2.14 Soit $W = x_{i_1}^{e_1} x_{i_2}^{e_2} \cdots x_{i_s}^{e_s} \in P_n$, on notera $\gamma(W, r)$ le mot obtenu de W en faisant commuter la lettre x_{i_r} le plus loin possible à droite en n'utilisant que les relations $x_i x_j = x_j x_i$ si $|i - j| \geq 2$. ■

Exemple 1.2.15 Si $W = x_3 x_1 x_4 x_4 x_3 x_2^{-1} x_3$, alors $\gamma(W, 2) = x_3 x_4 x_4 x_3 x_1 x_2^{-1} x_3$. ■

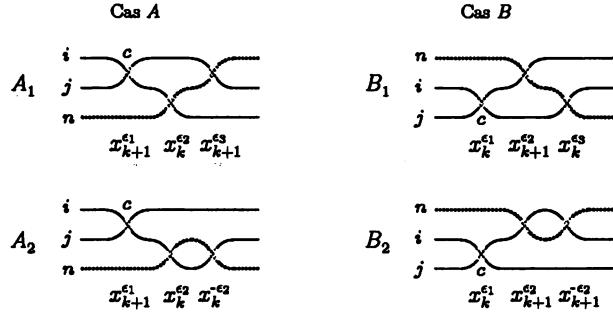
Dans ce qui suit, nous supposons que les mots ne contiennent aucune occurrence des lettres $x_i x_i^{-1}$ et $x_i^{-1} x_i$.

Soit $p \in P_n$. Soit c_s, c_{s-1}, \dots, c_1 la suite des croisements en position gauche de p ordonnés (c_1 étant le plus à droite). Chaque croisement correspond à une lettre dans $W = W_p$ le mot en x_i correspondant à p . L'algorithme consiste à faire passer successivement les croisements c_1, c_2, \dots, c_s en position droite. Nous utiliserons les résultats suivants.

Remarque 1.2.16 Un mot $W \in P_n$ est toujours peigné entre le croisement en position gauche le plus à droite et le croisement en position $\rho(W)$.

Lemme 1.2.17 Soit $W \in P_n$ et p la tresse correspondante. Si W est peigné entre un croisement c en position gauche et la position $d = \rho(W)$ alors il est possible de déplacer c en position droite de telle sorte que W' , la tresse obtenue, soit peignée entre c et le croisement dans $\Gamma_g(W', \{1, 2, \dots, n-1\})$ qui précédait c dans W (il se peut que $\Gamma_g(W', \{1, 2, \dots, n-1\}) = \emptyset$, dans ce cas $W' = AV$ où $A \in U_n$ et V est une tresse pure sur $n-1$ brins).

Démonstration: On supposera que c intervient entre les brins i et j et que le brin i occupe la place par dessus le brin j . Si i et j sont placés sous le brin n alors il est évident qu'on peut pousser le croisement c en position droite. Sinon, c se produit au dessus du brin n . Alors, pour faire passer c en position droite dans W , nous utiliserons des réécritures déduites de l'opération à effectuer sur la tresse p . Les brins i et j étant adjacents et la tresse étant peignée, il y a deux cas possibles pour le croisement suivant c , chacun se divisant en deux sous-cas pour le troisième croisement comme l'illustre la figure 1.7. Chaque sous-cas se divise selon le signe des croisements dans la configuration. Les sous-cas A_1 et B_1 donnent lieu à 8

Figure 1.7: Configurations possibles du croisement c .

possibilités chacun et les sous-cas A_2 et B_2 donnent lieu à 4 possibilités chacun (on exclut les $x_i x_i^{-1}$ et $x_i^{-1} x_i$). Il y a donc au total 24 configurations possibles. À chacune d'elles correspond une réécriture qui permet de faire passer le croisement c à droite du brin n (donc en position gauche dans la tresse). Nous illustrons deux réécritures à la figure 1.8, les autres réécritures seront facilement trouvées en examinant ces exemples.

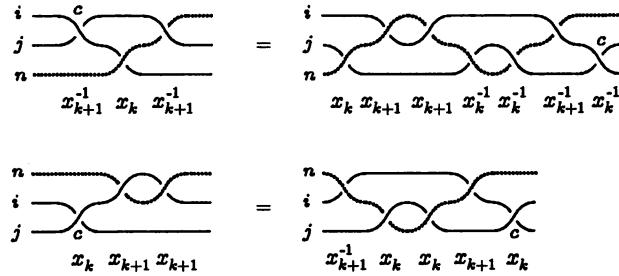


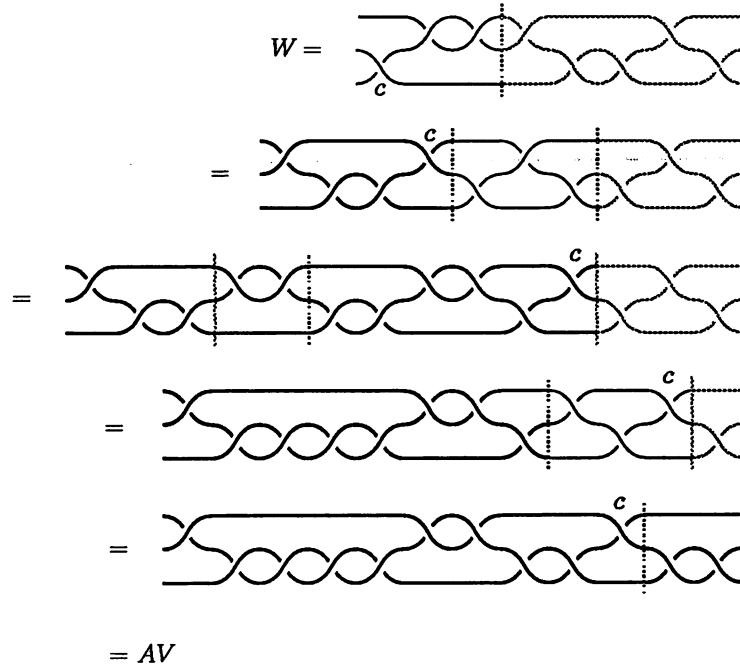
Figure 1.8: Exemples de réécritures.

Pour que le croisement se retrouve en position droite, il faudra la plupart du temps utiliser plusieurs fois les réécritures décrites ci-dessus. Chacune d'elles permet de faire passer *localement* le croisement de l'autre côté du brin n . Après chaque réécriture, il se peut que des facteurs $x_i x_i^{-1}$ ou $x_i^{-1} x_i$ apparaissent, il faut alors les éliminer. ■

Exemple 1.2.18 La figure 1.9 illustre la suite de réécritures nécessaire pour faire passer le croisement c en position droite dans la tresse $W \in \mathbf{P}_3$. On obtient à la fin $W = AV$, où $A = A_{3,1}^2 A_{3,2}^{-1} A_{3,1} \in U_3$ et $V \in \mathbf{P}_2$. ■

Nous avons maintenant tous les instruments en main pour décrire l'algorithme de factorisation de $W \in \mathbf{P}_n$ dans $U_n U_{n-1} \cdots U_2$. Le calcul de $\rho(W)$ s'effectue facilement en utilisant T_W , le tableau associé à W . Il s'agit de lire la dernière colonne du tableau à partir de la fin vers le début et de repérer la première fois où l'entrée est différente de n . Par suite, il faut calculer $\Gamma g(W, \{1, 2, \dots, n-1\})$. Pour ce faire, on peut encore utiliser T_W . Il s'agit alors de lire T_W entre la première ligne et la ligne d . On note alors quels entiers i, j ont été transposés entre une ligne et la suivante. Si $i, j \neq n$, alors nous avons affaire à un élément de $\Gamma(W, \{1, 2, \dots, n-1\})$.

Voici donc l'algorithme annoncé.

Figure 1.9: Passage de c en position droite.

Algorithme 1.2.19 Factorisation d'une tresse pure W (donnée sous la forme d'un mot) en deux mots $W = A\tilde{W}$ où $A \in U_n$ et $\tilde{W} \in P_{n-1}$.

Soit $W \in P_n$;
 Calculer $\{c_1 < c_2 < \dots < c_s\} := \Gamma g(W, \{n-1\})$;
 Pour $i := 1$ à s faire
 Calculer $\rho(W)$;
 $W' :=$ réécriture de W entre c_i et $\rho(W)$; (cf. lemme 1.2.17)
 $W := W'$;
 $W = A\tilde{W}$ est factorisé.

Il est facile de voir que le mot \tilde{W} est obtenu de W en considérant la tresse associée à W et en ôtant le brin n . Nous noterons $A(V)$ le préfixe et V^* le suffixe d'un mot V quelconque dans cette factorisation.

Remarque 1.2.20 Cet algorithme est exponentiel. En effet, les réécritures du lemme 1.2.17 font apparaître 0, 1, 2, 3 ou 4 nouveaux croisements qui devront à leur tour passer en position droite. ■

Remarque 1.2.21 L'algorithme 1.2.19 se prête au parallélisme en effectuant un prétraitement sur le mot à factoriser. En effet, soit $W \in P_n$. Écrivons $W = U(W)V(W)$ où U donne le mot correspondant aux croisements en position gauche et V celui correspondant aux croisements en position droite. En particulier, $V(W) \in B_{n-1}$. Soit $A(W)\tilde{W}$ le mot obtenu après l'application

de l'algorithme à W . Le mot \tilde{W} s'écrit $\tilde{W} = Z(W)V(W)$ où $Z(W) \in \mathbf{B}_{n-1}$. En fait, on retrouvera Z en considérant le mot obtenu du tableau $T_{U(W)}$ dans lequel on enlève tous les n , pour ensuite combler les espaces vides en déplaçant les nombres dans la même ligne vers la gauche, ensuite on enlève les lignes qui se répètent. Cette opération sur les tableaux est équivalente à ôter le brin n de la tresse qui correspond à $U(W)$. En fait, chaque croisement entre les brins i et j en position gauche qui passe en position droite par une réécriture (décrise dans le lemme 1.2.17) crée en quelque sorte une lettre du mot Z . Pour trouver Z , il suffit donc de considérer les croisements dans $\Gamma_g(U(W), \{1, 2, \dots, n-1\})$. Notons que le préfixe $U(W)$ contient toute l'information dont on a besoin pour calculer $A(W)$.

Ainsi on peut facilement connaître $W_1 := \tilde{W}$ avant même d'avoir effectué quelque réécriture que ce soit. Deux opérations sont nécessaires, premièrement calculer $\rho(W)$ (ce qui se fait en temps linéaire). On obtient ainsi les facteurs $U(W)$ et $V(W)$. Deuxièmement il faut calculer $Z(W)$ (ceci se fait en temps polynomial). On a alors $W_1 = Z(W)V(W) \in \mathbf{P}_{n-1}$. On poursuit le calcul avec $W_2 = Z(W_1)V(W_1)$, et ainsi de suite avec $W_3 = Z(W_2)V(W_2)$, etc. À chaque étape, on calcule un facteur $U(W_k)$ à réécrire. Si $k_1 \neq k_2$, la réécriture de $U(W_{k_1})$ est indépendante de celle de $U(W_{k_2})$, ce travail peut donc se faire simultanément.

La méthode de Garside.

Nous débuterons par l'énoncé des résultats dont nous aurons besoin. La démonstration de ceux-ci se trouve dans [Ga].

Nous noterons Δ le mot $(x_1 x_2 \cdots x_n)(x_1 x_2 \cdots x_{n-1}) \cdots (x_1 x_2 x_3)(x_1 x_2)(x_1)$ dans \mathbf{B}_n . Soit R défini par $R(x_i) = x_{n-i}$. On dira qu'un mot est *positif* s'il ne comporte aucune puissance négative de x_i , $i = 1, 2, \dots, n-1$.

Lemme 1.2.22 *On a, pour tout $i = 1, 2, \dots, n-1$,*

- (i) $x_i \Delta = \Delta R(x_i)$;
- (ii) $x_i^{-1} \Delta = \Delta (R(x_i))^{-1}$;
- (iii) $x_i \Delta^{-1} = \Delta^{-1} R(x_i)$;
- (iv) $\Delta^{-1} x_i^{-1} \Delta^{-1} (R(x_i))^{-1}$.

■

Nous noterons $W_1 \doteq W_2$ si W_1 et W_2 peuvent être obtenus l'un de l'autre par une suite de transformations (éventuellement vides) ne faisant apparaître que des puissances positives des x_i .

Lemme 1.2.23 *Pour tout $i = 1, 2, \dots, n-1$, il existe des mots positifs X_i tels que $x_i^{-1} = X_r \Delta^{-1}$.*

■

Nous noterons $D(W)$ l'ensemble $\{V \in \mathbf{B}_n : V \doteq W\}$. Nous dirons qu'un mot positif W est Δ -libre si aucun des mots de $D(W)$ n'admet Δ comme facteur. Si A est positif et premier par rapport à Δ , nous noterons par \hat{A} le plus petit mot (dans l'ordre lexicographique) de $D(A)$.

Théorème 1.2.24 *Tout mot de $W \in \mathbf{B}_n$ s'écrit de manière unique sous la forme $\Delta^m \hat{A}$, où A est positif et premier par rapport à Δ et $m \in \mathbf{Z}$.*

La démonstration de ce théorème (due à Garside) donne un algorithme pour déterminer si deux tresses sont les mêmes et donne une représentation unique en machine pour une tresse. Soit $W \in \mathbf{B}_n$. Si W est positif, alors on peut calculer \hat{W} en utilisant l'algorithme ci-dessous. Sinon, W s'écrit

$$W_1 x_{i_1}^{-1} W_2 x_{i_2}^{-1} \cdots W_{s-1} x_{i_s}^{-1} W_s$$

où W_i est un mot positif (pour $i = 1, 2, \dots, s$). D'après le lemme 1.2.23, on peut écrire

$$W = W_1 (X_{i_1} \Delta^{-1}) W_2 (X_{i_2} \Delta^{-1}) \cdots W_{s-1} (X_{i_s} \Delta^{-1}) W_s,$$

où X_{i_r} est un mot positif (pour $r = 1, 2, \dots, s$). Maintenant, en appliquant le lemme 1.2.22, on peut regrouper les lettres positives à droite de sorte que $W = \Delta^m A$ où $m \in \mathbf{Z}$ et $A = W_1 X_{i_1} W_2 X_{i_2} \cdots W_{s-1} X_{i_s} W_s$. Il est facile de voir que l'ensemble $D(A)$ est fini, l'algorithme 1.2.25 donné ci-dessous permet de le calculer. On trouve ensuite facilement \hat{A} . Dans les deux cas, nous avons une représentation unique pour W .

Soit $U(W)$ l'ensemble des mots que l'on peut obtenir de V en utilisant une et une seule relation du type $x_i x_j = x_j x_i$ ou $x_i x_{i+1} x_i = x_{i+1} x_i x_{i+1}$. On appelle $U(V) \setminus \{V\}$ l'ensemble des successeurs de V .

Algorithme 1.2.25 Algorithme (dans le style Todd-Coxeter) pour calculer $D(A)$, où $A \in \mathbf{B}_n$ est un mot positif. Cet algorithme utilise une pile P pour emmagasiner les mots dont il faut calculer les successeurs et un ensemble C des mots calculés. Les fonctions Emp et Dép gèrent la pile.

```

 $D := U(A);$ 
 $C := \{A\};$ 
 $\text{Emp}(A, P);$ 
Tant que  $P \neq \emptyset$  faire
   $V := \text{D}(P);$ 
   $D := D \cup U(V);$ 
   $C := C \cup \{V\};$ 

```

La variable D contient maintenant $D(W)$.

1.2.3 Énumération de tresses pures.

Nous entreprenons dans cette section l'énumération des tresses pures selon le nombre de croisements. Les techniques d'énumération utilisées ici proviennent de l'école bordelaise. Les tresses

$t \in \mathcal{P}_n$ sont en bijection avec les suites de $n-1$ mots de Dyck bicolorés de hauteurs $n, n-1, \dots, 2$ respectivement, modulo certaines relations sur ceux-ci. L'énumération des tresses pures se fera en termes de mots de Dyck. Établissons d'abord quelques notations.

Si A est un ensemble, nous dénoterons par A^* l'ensemble des mots sur A .

Définition 1.2.26 Un mot de Dyck bicoloré est un mot $w \in \{x, \bar{x}, y, \bar{y}\}^*$ tel que (i) $|w|_x + |w|_y = |w|_{\bar{x}} + |w|_{\bar{y}}$, où $|w|_a$ dénote le nombre d'occurrence de la lettre a dans w et (ii) si $u = vw$, alors $|v|_x + |v|_y \geq |w|_{\bar{x}} + |w|_{\bar{y}}$. ■

Tout mot de Dyck peut être vu comme un chemin dans le plan $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$, voir [BM] pour plus de détails. La hauteur d'un chemin de Dyck w , dénotée $h(w)$, est définie par la hauteur du chemin associé. L'ensemble des mot de Dyck muni du mot vide forme un monoïde que l'on quotientera par la relation $x\bar{x} = \bar{x}x = y\bar{y} = \bar{y}y = 1$. Nous écrirons \mathcal{D} pour désigner ce quotient moins la classe du mot vide et nous utiliserons la notation $\mathcal{D}^{(k)}$ pour l'ensemble $\{w \in \mathcal{D}^{(k)} : h(w) \leq k-1\}$, pour $k = 2, 3, \dots$.

Il est alors facile de voir, en utilisant la proposition 1.2.3, que chaque tresse pure se décompose de façon unique comme une suite de mots $(w_{n-1}, w_{n-2}, \dots, w_1)$ où $w_k \in \mathcal{D}^{(k+1)} \cup \{1\}$ pour $k = 1, \dots, n-1$. Réciproquement, à chaque suite correspond une et une seule tresse pure. La figure 1.10 indique comment on établit la bijection.

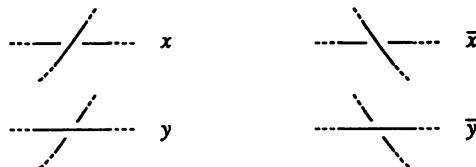


Figure 1.10: Correspondance entre tresses pures et mots de Dyck.

Exemple 1.2.27 Dans la figure 1.11, la tresse est associée à la suite de mot de Dyck (w_3, w_2, w_1) où $w_3 = xyx\bar{y}\bar{x}\bar{x}yxy\bar{y}\bar{x}$, $w_2 = xy\bar{x}\bar{y}$ et $w_1 = x\bar{y}x\bar{y}$. ■

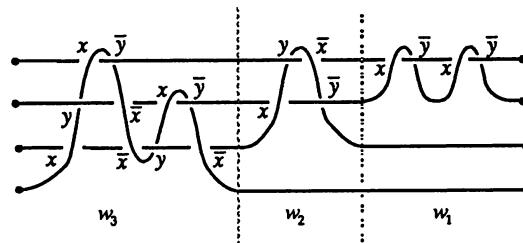


Figure 1.11: Suite de mots de Dyck associés à une tresse pure.

Il suffit donc d'énumérer ces suites pour connaître le nombre de tresses pures sur n brins avec un nombre de croisements donné. Pour ce faire, nous associons à ces mots un langage algébrique nous permettant d'énumérer récursivement $\mathcal{D}^{(2)}, \mathcal{D}^{(3)}, \dots$. Par abus de notation, nous allons identifier \mathcal{D} et $\mathcal{D}^{(k)}$ aux langages associés à ces ensembles.

Dans un premier temps, on a

$$\mathcal{D}^{(k)} = \mathcal{D}_x^{(k)} + \mathcal{D}_y^{(k)},$$

où

$$\mathcal{D}_x^{(k)} = \{w \in \mathcal{D}^{(k)} : \exists v \in \{x, \bar{x}, y, \bar{y}\}^* \text{ tel que } w = xv\}$$

et

$$\mathcal{D}_y^{(k)} = \{w \in \mathcal{D}^{(k)} : \exists v \in \{x, \bar{x}, y, \bar{y}\}^* \text{ tel que } w = yv\}.$$

Si $k > 3$, on peut ensuite décomposer $\mathcal{D}_x^{(k)}$ et $\mathcal{D}_y^{(k)}$ de la façon suivante (chaque terme correspondant à des cas mutuellement exclusifs):

$$\mathcal{D}_x^{(k)} = x\bar{y} + x\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{x} + x\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{y} + x\bar{y}\mathcal{D}_x^{(k)} + x\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{x}\mathcal{D}_y^{(k)} + x\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{x}\mathcal{D}_x^{(k)}, \quad (1.2)$$

$$\mathcal{D}_y^{(k)} = y\bar{x} + y\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{x} + y\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{y} + y\bar{x}\mathcal{D}_y^{(k)} + y\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{y}\mathcal{D}_x^{(k)} + y\mathcal{D}^{(k-1)}\bar{y}\mathcal{D}_y^{(k)}. \quad (1.3)$$

Si $k = 2$, on a

$$\mathcal{D}_x^{(2)} = x\bar{y} + x\bar{y}\mathcal{D}_x^{(2)}$$

et

$$\mathcal{D}_y^{(2)} = y\bar{x} + y\bar{x}\mathcal{D}_y^{(2)}.$$

On arrivera à nos fins en résolvant pour $\mathcal{D}^{(k)}$ les équations précédentes après avoir posé $x = \bar{x} = y = \bar{y} = t$. Si on nomme $\mathcal{D}^{(k)}(t)$ la solution obtenue, alors le coefficient de t^{2m} dans

$$\prod_{i=2}^k (1 + \mathcal{D}^{(i)}(t))$$

sera le nombre de tresses pures sur k brins avec m croisements. Les équations obtenues de 1.2 et 1.3 en posant $x = \bar{x} = y = \bar{y} = t$ sont

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_x^{(2)} &= t^2 + t^2\mathcal{D}_x^{(2)}, \\ \mathcal{D}_y^{(2)} &= t^2 + t^2\mathcal{D}_y^{(2)}, \\ \mathcal{D}_x^{(k)} &= t^2 + 2t^2\mathcal{D}^{(k-1)} + t^2\mathcal{D}_x^{(k)} + t^2\mathcal{D}^{(k-1)}(\mathcal{D}_y^{(k)} + \mathcal{D}_x^{(k)}), \\ \mathcal{D}_y^{(k)} &= t^2 + 2t^2\mathcal{D}^{(k-1)} + t^2\mathcal{D}_y^{(k)} + t^2\mathcal{D}^{(k-1)}(\mathcal{D}_x^{(k)} + \mathcal{D}_y^{(k)}). \end{aligned}$$

Il est évident que $\mathcal{D}_x^{(k)} = \mathcal{D}_y^{(k)}$, ainsi on a $\mathcal{D}^{(k)} = 2\mathcal{D}_x^{(k)}$ et on tire des équations précédentes que

$$\mathcal{D}^{(k)} = 2 \frac{t^2 + 2t^2\mathcal{D}^{(k-1)}}{1 - (t^2 + 2t^2\mathcal{D}^{(k-1)})}. \quad (1.4)$$

Nous avons utilisé Maple pour calculer le tableau suivant dont l'entrée (n, k) donne le nombre de tresses pures à n brins ayant k croisements.

	0	2	4	6	8	10	12	14	16
2	1	2	2	2	2	2	2	2	2
3	1	4	16	52	160	484	1456	4372	13120
4	1	6	34	182	898	4326	20386	94742	436738
5	1	8	56	368	2320	14136	84360	496224	2887328
6	1	10	82	618	4450	31178	213810	1444394	9648578
7	1	12	112	940	7456	57228	429840	3177900	23219008
8	1	14	146	1342	11522	94990	762834	6016766	46835074
9	1	16	184	1832	16848	147616	1252936	10404984	85065504

Chapitre 2

Classification des espèces moléculaires.

Nous développons dans ce chapitre les concepts que nous allons utiliser pour étendre la table des espèces moléculaires, travail entrepris par Yeh dans [Ye1] et poursuivi par J. Labelle dans [LJ2]). Si $M = X^n/H$ est une espèce moléculaire, nous donnons une condition nécessaire et suffisante sur H pour que M soit isomorphe à un quotient d'espèce non trivial. Nous introduisons aussi la notion de regroupement d'espèce, notion qui permet de donner une interprétation combinatoire à une espèce moléculaire lorsque celle-ci n'est pas quotientable.

On trouvera à l'appendice A.1 des tables décrivant toutes les espèces moléculaires sur 6 et 7 points. Certaines sont décrites sous la forme de quotient ou de regroupement.

2.1 Quotients et automorphismes d'espèces

Quotienter une espèce est une méthode pour *construire* de nouvelles espèces à partir d'une espèce ayant déjà une interprétation combinatoire. Ce procédé, décrit dans [LJ2], consiste à prendre comme structures d'une espèce M les orbites de l'action naturelle d'un groupe sur une autre espèce N .

Soit T une espèce moléculaire, nous noterons $\text{Aut}(T)$ le groupe des transformations naturelles inversibles du foncteur T dans lui-même. Si $G \times X \xrightarrow{\rho} X$ est une action d'un groupe G sur un ensemble X , nous utiliserons la notation $g.x$ pour désigner $\rho(g, x)$. L'ensemble $\{1, 2, \dots, n\}$ sera dénoté \mathbf{n} . La notation $H \approx K$ sera utilisée pour dire que les groupes H et K sont conjugués dans S_n .

Nous utiliserons la définition suivante de produit semi-direct de groupes.

Définition 2.1.1 *Un groupe G est le produit semi-direct de K par H si K et H sont deux sous-groupes de G tels que $K \triangleleft G$, $KH = G$ et $K \cap H = \langle 1 \rangle$. On notera $G = K \rtimes H$.*

Si $G = K \rtimes H$ et si \overline{K} et \overline{H} sont deux groupes (pas nécessairement des sous-groupes de G) tels que $\overline{K} \cong K$ et $\overline{H} \cong H$, alors nous dirons par abus de langage que $G = \overline{K} \rtimes \overline{H}$.

Remarquons que si $G = K \rtimes H$ alors $G/K \cong H$.

Proposition 2.1.2 Soit T une espèce et G un groupe quelconque. S'il existe un homomorphisme

$$\Theta: G \rightarrow \text{Aut}(T),$$

on définit une nouvelle espèce, dénotée T/G en posant

$$T/G[U] \stackrel{\text{déf}}{=} T[U]/G = \{G.s : s \in T[U]\},$$

où $G.s = \{\Theta_U(g)(s) : g \in G\}$ (par commodité, on note $\Theta_U(g)(s)$ au lieu de $(\Theta(g))_U(s)$). Si $\beta: U \rightarrow V$ est une bijection, le transport est défini par

$$T/G[\beta](G.s) = G.(T[\beta](s)).$$

Remarque 2.1.3 Un homomorphisme $\Theta: G \rightarrow \text{Aut}(T)$ induit une action

$$G \times T[U] \xrightarrow{\rho_U} T[U]$$

en posant $\rho_U(g, s) \mapsto \Theta_U(g)(s)$. De plus, cette action est telle que si U et V sont des ensembles finis, alors, pour toute bijection $\beta: U \rightarrow V$, le diagramme suivant est commutatif:

$$\begin{array}{ccc} G \times T[U] & \xrightarrow{\rho_U} & T[U] \\ \downarrow_{1_G \times T[\beta]} & & \downarrow T[\beta] \\ G \times T[V] & \xrightarrow{\rho_V} & T[V] \end{array}$$

Réiproquement, si l'action d'un groupe G est telle que le diagramme ci-dessus commute, alors on en déduit un homomorphisme $\Theta: G \rightarrow \text{Aut}(T)$.

Définition 2.1.4 L'espèce définie dans la proposition (2.1.2) est appelée quotient de T par G .

La proposition suivante nous permet de trouver tous les quotients d'une espèce moléculaire quelconque $T = X^n/K$. En effet, elle donne une description de $\text{Aut}(T)$ en fonction du normalisateur de K dans le groupe symétrique S_n .

Théorème 2.1.5 Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire. On a un isomorphisme de groupes

$$\text{Aut}(T) \cong (N_{S_n}(K)/K)^{\text{opp}}.$$

Démonstration: Soit $\sigma \in S_n$, $a \in \text{Bij}(n, U)$ et $aK \in (X^n/K)[U]$. On définit une application $\Theta_{\sigma, U}: (X^n/K)[U] \rightarrow (X^n/K)[U]$ par $\Theta_{\sigma, U}(aK) \stackrel{\text{déf}}{=} a\sigma K$. On a que $\Theta_{\sigma, U}$ est bien définie si et seulement si $\sigma \in N_{S_n}(K)$. En effet, pour que $\Theta_{\sigma, U}$ soit bien définie, il faut et il suffit que

$$(\forall a \in \text{Bij}(n, n))(aK = K \Rightarrow a\sigma K = \sigma K).$$

En particulier, quel que soit $k \in K$ on a $kK = K$, donc

$$(\forall k \in K)(k\sigma K = \sigma K),$$

d'où, quel que soit $k \in K$, $\sigma^{-1}k\sigma K = K$. Donc $(\forall k \in K)(\sigma^{-1}k\sigma \in K)$, ce qui entraîne que $\sigma^{-1}K\sigma \subset K$, ainsi $\sigma \in N_{S_n}(K)$. La réciproque est évidente.

Nous noterons $\Theta_{\sigma,U}$ par Θ_σ lorsqu'aucune confusion ne sera possible.

On a que $\sigma \in N_{S_n}(K) \Rightarrow \Theta_\sigma$ est une bijection de $T[U]$ sur $T[U]$. En effet, sous cette condition, $a\sigma K = b\sigma K \Leftrightarrow aK\sigma = bK\sigma \Leftrightarrow aK = bK$. Donc c'est une injection. Puisque $T[U]$ est un ensemble fini, il en découle que Θ_σ est aussi une surjection.

Par suite, on a que Θ_σ est une transformation naturelle. En effet, soit $\beta : U \longrightarrow V$.

$$\begin{aligned} (\Theta_\sigma \circ T[\beta])(aK) &= \Theta_\sigma(\beta aK) \\ &= \beta a\sigma K \\ &= T[\beta](a\sigma K) \\ &= (T[\beta] \circ \Theta_\sigma)(aK). \end{aligned}$$

Voyons maintenant que tout élément de $\text{Aut}(T)$ est de la forme Θ_σ pour un certain $\sigma \in S_n$. Soient $\Phi \in \text{Aut}(T)$ et $\sigma \in S_n$ tel que $\Phi_n(K) = \sigma K$. Alors si $aK \in T[U]$ (en particulier, $a \in \text{Bij}(n,U)$), la naturalité de Φ entraîne que

$$\begin{aligned} \Phi_U(aK) &= \Phi_U(T[a](K)) \quad (\text{où } T[a] : T[n] \rightarrow T[U]) \\ &= T[a](\Phi_n(K)) \\ &= T[a](\sigma K) \\ &= a\sigma K. \end{aligned}$$

Donc quel que soit $\Phi \in \text{Aut}(T)$, Φ est de la forme Θ_σ .

Nous allons montrer que l'application $\Lambda : N_{S_n}(K)/K \rightarrow \text{Aut}(T)$ définie par $\Lambda(\sigma K) = \Theta_\sigma$ est un anti-isomorphisme de groupes. Tout d'abord, on montre facilement que

$$\Theta_\sigma = \Theta_{\sigma'} \Leftrightarrow \sigma \equiv \sigma' \pmod{K},$$

donc Λ est injective et bien définie. On a montré que tout élément de $\text{Aut}(T)$ est de la forme Θ_σ , donc Λ est aussi surjective. Enfin,

$$(\Theta_\sigma \circ \Theta_{\sigma'})(aK) = \Theta_\sigma(a\sigma' K) = a\sigma' \sigma K = \Theta_{\sigma' \sigma}(aK),$$

d'où $\Theta_\sigma \circ \Theta_{\sigma'} = \Theta_{\sigma' \sigma}$, c'est-à-dire

$$\Lambda(\sigma K)\Lambda(\sigma' K) = \Lambda(\sigma' \sigma K) = \Lambda(\sigma' K\sigma K)$$

et Λ est un anti-isomorphisme. ■

Cette proposition a des corollaires utiles.

Corollaire 2.1.6 Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire. Si $N_{S_n}(K)/K \cong \langle 1 \rangle$ alors on ne peut faire de quotient non trivial de T . ■

En fait, la connaissance de tous les sous-groupes dans $N_{S_n}(K)/K$ nous donne tous les quotients possibles de l'espèce X^n/K .

Corollaire 2.1.7 On a $\text{Aut}(X^n) \cong S_n^{\text{opp}}$; tout automorphisme naturel de $X^n = \text{Bij}(n, -)$ est de la forme $a \mapsto a\sigma$ pour $\sigma \in S_n$. ■

Si une espèce X^n/Q est un quotient de X^n/K , alors Q contient un sous-groupe normal (dans Q) conjugué (dans S_n) à K . C'est ce que l'on montre avec la proposition qui suit.

Proposition 2.1.8 Si

$$X^n/Q \cong (X^n/K)/G,$$

alors Q contient un sous-groupe normal \bar{K} conjugué (dans S_n) à K .

Démonstration: Soit $s = K \in (X^n/K)[n]$. Montrons tout d'abord que $K \triangleleft \text{stab}(G.s)$. On a une action naturelle de G sur (X^n/K) , donc

$$(\forall g \in G)(\forall \sigma \in S_n)(g.((X^n/K)[\sigma](s)) = (X^n/K)[\sigma](g.s)).$$

Si $k \in K$ et $G.K = G.s \in (X^n/Q)[n]$, on a

$$\begin{aligned} (X^n/Q)[k](G.s) &= ((X^n/K)/G)[k](G.s) \\ &= G.((X^n/K)[k](s)) \\ &= G.s, \end{aligned}$$

ainsi $K \leq \bar{Q} \stackrel{\text{déf}}{=} \text{stab}(G.s)$. Par suite, supposons $k \in K$ et $h \in \bar{Q}$. Puisque $h \in \bar{Q}$, il existe $g \in G$ tel que $(X^n/\bar{Q})[h](s) = g.s$. Par naturalité de l'action de G , on a aussi $(X^n/\bar{Q})[h^{-1}] = g^{-1}.s$. Ainsi, en posant $T = X^n/\bar{Q}$,

$$\begin{aligned} T[hkh^{-1}](s) &= T[hk](T[h^{-1}](s)) \\ &= T[hk](g^{-1}.s) \\ &= T[h](T[k](g^{-1}.s)) \\ &= T[h](g^{-1}.(T[k](s))) \\ &= T[h](g^{-1}.s) \\ &= (gg^{-1}).s = s, \end{aligned}$$

par conséquent, $hkh^{-1} \in \text{stab}(s) = K$. Il s'en suit que $hKh^{-1} \subset K$ car le choix de k est arbitraire, donc $K \triangleleft \bar{Q}$, le choix de h étant lui aussi arbitraire. Or, $\bar{Q} \approx Q$, donc il existe $\sigma \in S_n$ tel que $\bar{Q} = \sigma^{-1}Q\sigma$. Ainsi $\bar{K} = \sigma K \sigma^{-1} \triangleleft Q$. ■

Le corollaire suivant nous donne une condition sous laquelle une espèce n'est pas un quotient.

Corollaire 2.1.9 Si $Q \leq S_n$ est simple, alors l'espèce X^n/Q n'est pas un quotient non trivial.

Exemple 2.1.10 Le sous-groupe $Q = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (1, 4, 2)(3, 5, 6) \rangle \leq S_6$ est isomorphe à A_5 (mais dans une classe de conjugaison différente), c'est donc un groupe simple. Ainsi l'espèce X^n/Q ne peut être obtenue par quotient d'une autre espèce. Nous verrons dans la section 2.2 une autre construction qui nous permet de trouver une interprétation combinatoire pour cette espèce moléculaire. ■

Réciproquement, si Q, K sont des sous-groupes de S_n tels que $K \triangleleft Q$, alors l'espèce X^n/Q est un quotient de l'espèce X^n/K comme le montre la proposition suivante. Ce résultat trouve une application dans la recherche d'une interprétation combinatoire pour une espèce atomique X^n/Q lorsque l'on connaît Q . Il suffit de trouver un sous-groupe $K \triangleleft Q$ et alors on sait que l'espèce est un quotient. De plus, en effectuant le quotient Q/K , on a une description de l'action du groupe par lequel on effectue le quotient.

Proposition 2.1.11 Soient $K, Q \leq S_n$ tels que $K \triangleleft Q$, alors il existe un groupe G par lequel on peut effectuer un quotient de X^n/K de telle sorte que

$$(X^n/K)/G \cong X^n/Q.$$

Démonstration: Posons $N = N_{S_n}(K)$ et $G = Q/K$. D'une part, $K \triangleleft Q \Rightarrow Q \leq N_{S_n}(K)$ et alors

$$Q/K \leq N_{S_n}(K)/K.$$

D'autre part, la proposition 2.1.5 nous donne un (anti-)isomorphisme

$$N/K \xrightarrow{\Lambda} \text{Aut}(X^n/K).$$

On a donc

$$Q/K \xrightarrow{\iota} N/K \xrightarrow{\Lambda} \text{Aut}(X^n/K).$$

L'action de Q/K sur X^n/K est obtenue en composant le long de $\Lambda \circ \iota$ de sorte que l'image de $qK \in Q/K$ est Θ_q définie par $\Theta_q(aK) = aqK$ ($aK \in (X^n/K)[U]$) (voir la démonstration de la proposition 2.1.5). On termine la preuve en montrant que Θ_q est bien défini et qu'avec cette action, on a effectivement

$$(X^n/K)/G \cong X^n/Q.$$

En fait, si U est un ensemble fini, on définit un isomorphisme naturel

$$\Omega: (X^n/K)/G \rightarrow X^n/Q$$

en posant

$$\Omega_U(G.aK) = aQ \in (X^n/Q)[U],$$

où $aK \in (X^n/K)[U]$. ■

Le groupe Z_2 agit sur l'espèce C_n en changeant l'orientation des cycles. On constate alors que $X^n/D_n \cong (X^n/C_n)/Z_2$ (où D_n est le groupe diédral). Or il se trouve que $D_n \cong C_n \rtimes Z_2$ (où D_n est le groupe diédral). Il est donc naturel de se demander si l'assertion suivante est vraie: $X^n/Q \cong (X^n/K)/G \Rightarrow Q \cong K \rtimes G$. Il s'avère que cet énoncé est faux. En effet, soit $H_5 = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 3, 5, 4) \rangle$ et $\mathcal{P}_5 = X^5/D_5$ l'espèce des polygones à cinq côtés. On a que $X^5/H_5 \cong \mathcal{P}_5/Z_2$ où l'action de Z_2 se fait par complétion des arêtes d'un polygone à 5 côtés $p \in \mathcal{P}_5[U]$. En particulier, on a que $N_{S_5}(D_5) = H_5$ et que $H_5/D_5 \cong Z_2$. Par contre, H n'est pas le produit semi-direct de D_5 par Z_2 . En effet, par inspection, on trouve que $H_5 - D_5$ ne contient que des permutations de la forme (a_1, a_2, a_3, a_4) . Ces permutations sont d'ordre 4. Il est donc impossible de trouver un sous-groupe G de H_5 qui soit d'ordre 2 et tel que $G \cap D_5 = \langle 1 \rangle$.

Par ailleurs, si Q , K et G sont des sous-groupes de S_n tels que $Q = K \rtimes G$, alors en particulier on a que $K \triangleleft Q$ et que $G \cong Q/K$, d'où le corollaire suivant.

Corollaire 2.1.12 *Soient $G, H, Q \leq S_n$ tels que $Q = K \rtimes G$, alors on peut effectuer un quotient $(X^n/K)/G$ de telle sorte que*

$$(X^n/K)/G \cong X^n/Q.$$

Exemple 2.1.13 On a $S_n \cong A_n \rtimes Z_2$, donc $X^n/S_n \cong (X^n/A_n)/Z_2$, l'action de Z_2 consiste évidemment à changer l'orientation de la (X^n/A_n) -structure.

Le lemme suivant est utile pour déterminer si un groupe engendré par des permutations est produit semi-direct de deux de ses sous-groupes engendrés par des sous ensembles de permutations données.

Lemme 2.1.14 *Soient $X = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_r\}$ et $Y = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_s\}$ deux sous-ensembles de S_n tels que $i \neq j \Rightarrow \tau_i \neq \tau_j$, ($i, j = 1, 2, \dots, r$), $i \neq j \Rightarrow \gamma_i \neq \gamma_j$, ($i, j = 1, 2, \dots, s$) et $X \cap Y = \emptyset$. Posons $Q = \langle X, Y \rangle$, $K = \langle X \rangle$ et $G = \langle Y \rangle$. Supposons que $K \cap G = \langle 1 \rangle$ et que*

$$(\forall \tau \in X)(\forall \gamma \in Y)(\gamma \tau \gamma^{-1} \in K)$$

alors

$$Q = K \rtimes G.$$

Démonstration: Montrons que G , K et Q satisfont la définition 2.1.1. Primo, on a par hypothèse $K \cap G = \langle 1 \rangle$. Secundo, montrons que $K \triangleleft Q$. Tout d'abord, par récurrence sur la longueur de $q \in Q$, on a que $q \tau_i q^{-1} \in K$ (pour $i = 1, 2, \dots, r$). Par suite, si $k = \tau_{i_1}^{\epsilon_1} \tau_{i_2}^{\epsilon_2} \cdots \tau_{i_n}^{\epsilon_n} \in K$ (où $\epsilon_i = \pm 1$) et $q \in Q$, on a

$$\begin{aligned} qkq^{-1} &= q\tau_{i_1}^{\epsilon_1} \tau_{i_2}^{\epsilon_2} \cdots \tau_{i_n}^{\epsilon_n} q^{-1} \\ &= (q\tau_{i_1}^{\epsilon_1} q^{-1})(q\tau_{i_2}^{\epsilon_2} q^{-1}) \cdots (q\tau_{i_n}^{\epsilon_n} q^{-1}) \\ &\in K. \end{aligned}$$

Tierco, puisque les générateurs respectifs de K et G forment une partition de ceux de Q et que $K \triangleleft Q$, on a $Q = KG$. ■

Exemple 2.1.15 Soit $\tau_1 = (1, 2, 3)(4, 5, 6)$, $\tau_2 = (1, 6)(2, 5)(3, 4)$ et $\gamma = (2, 3)(4, 5)$. On calcule que $\langle \tau_1, \tau_2 \rangle \cap \langle \gamma \rangle = \langle 1 \rangle$. De plus, on a $\gamma\tau_1\gamma^{-1}, \gamma\tau_2\gamma^{-1} \in K$. Donc le lemme 2.1.14 entraîne que $\langle \tau_1, \tau_2, \gamma \rangle = \langle \tau_1, \tau_2 \rangle \rtimes \langle \gamma \rangle$.

Or il se trouve que $X^6 / \langle \tau_1, \tau_2 \rangle \cong \mathcal{P}_6^{\text{bic}}$ et que $\langle \tau_1, \tau_2, \gamma \rangle \cong D_6$. On a donc une action de $\langle \gamma \rangle \cong Z_2$ sur l'espèce $\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$. Le quotient par cette action est équivalente à oublier la coloration des $\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$ -structures.

Par la suite, nous utiliserons la notation de [We] pour le nom des groupes représentant les classes de conjugaisons de sous-groupes de S_6 et S_7 . Par exemple, le groupe Kd ci-dessous est un groupe isomorphe au groupe de Klein, mais dans une autre classe de conjugaison (voir les tables de l'appendice A.1 au besoin).

Exemple 2.1.16 L'espèce X^6 est de toute évidence isomorphe à $X^3 \circ X^2$. Une X^6 -structure peut être considérée comme une liste de trois ordres linéaires sur deux points. Soit $Kd = \langle (1, 4)(2, 5), (1, 4)(3, 6) \rangle$, il est clair que

$$X^6 / Kd \cong (X^3 \circ X^2) / Kd.$$

Une (X^6 / Kd) -structure peut être représentée comme l'ensemble obtenu en inversant simultanément de toutes les façons possibles deux des X^2 -structures formant une $(X^3 \circ X^2)$ -structure donnée (voir la figure 2.1). Remarquons qu'on a $\langle 1 \rangle \triangleleft Kd$, donc la proposition 2.1.11 s'applique à $X^6 \cong X^6 / \langle 1 \rangle$.

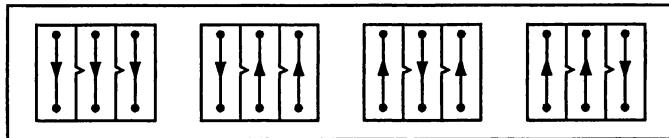


Figure 2.1: Une (X^6 / Kd) -structure.

Le modèle ci-dessus nous servira à la section 2.6 pour calculer la dérivée de l'espèce X^6 / Kd . Cette dernière possède toutefois une interprétation comme quotient de l'espèce $X^2 E_2(X^2)$ par Z_2 tel que décrit à la figure 2.2. Dans cette figure, nous avons indiqué par des flèches a, b, c la correspondance entre les deux interprétations (la flèche c est la même dans les deux cas). Il est facile de voir que le stabilisateur de la structure de la figure 2.2 est

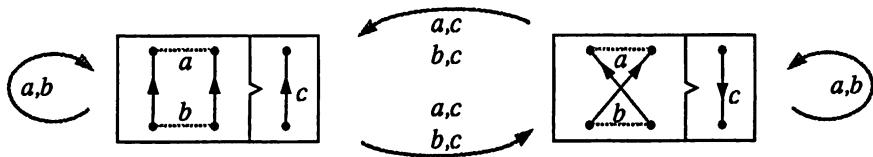


Figure 2.2: Autre interprétation de X^6 / Kd .

conjugué à Kd . Pour s'en convaincre, le lecteur constatera que les automorphismes de cette structure consistent à inverser exactement deux des flèches a, b, c à la fois. Enfin, notons que $Z_2 \cong \langle (1, 4)(2, 5) \rangle \triangleleft Kd$ en accord avec la proposition 2.1.11. ■

Exemple 2.1.17 Le groupe

$$A_4b = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 4)(2, 5) \rangle$$

est isomorphe à

$$A_4 = \langle (1, 2, 3), (1, 2)(3, 4) \rangle$$

mais dans une classe de conjugaison différente. Avec le lemme 2.1.14, on montre que $A_4b = Kd \rtimes C_3b$, où $C_3b = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6) \rangle$ est isomorphe à Z_3 . On a donc une action naturelle de Z_3 sur l'espèce X^6/Kd . Cette action consiste à permute cycliquement les 3 ordres linéaires sur 2 points dans les $(X^3 \circ X^2)$ -structures formant les (X^6/Kd) -structures. On a donc $X^6/A_4b \cong (X^6/Kd)/Z_3$ sous cette action.

Considérons maintenant le groupe

$$S_4c = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 4)(2, 5), (1, 4)(2, 3)(5, 6) \rangle$$

isomorphe à S_4 . On a $S_4c \cong A_4b \rtimes G_1$ où $G_1 = \langle (1, 4), (2, 3), (5, 6) \rangle \cong Z_2$. Il y a donc une action naturelle du groupe Z_2 sur l'espèce X^6/A_4b . À la lumière du théorème 2.1.5 et de la proposition 2.1.11, une façon de déterminer comment Z_2 agit est de calculer le transport par $(X^6/A_4b)[(1, 4)(2, 3)(5, 6)]$ de $\ell = ((1, 4), (2, 5), (3, 6)) \in (X^3 \circ X^2)[n]$; on trouve $((4, 1), (3, 6), (2, 5))$. L'action se fait donc en inversant l'ordre du couple ayant $\{1, 4\}$ comme ensemble sous-jacent et en échangeant le couple sur $\{2, 5\}$ avec celui sur $\{3, 6\}$ dans toutes les $(X^3 \circ X^2)$ -structures formant la classe contenant ℓ dans $(X^6/A_4b)[\{1, 2, \dots, 6\}]$. Il suffit d'utiliser le transport de structures pour un ensemble quelconque U .

Il y a un autre groupe isomorphe à S_4 dans S_6 . C'est le groupe

$$S_4d = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 4)(2, 5), (2, 3)(5, 6) \rangle.$$

On montre avec le lemme 2.1.14 que $S_4d = A_4b \rtimes G_2$, où $G_2 = \langle (2, 3)(5, 6) \rangle \cong Z_2$. Ici aussi Z_2 agit sur l'espèce X^6/A_4b . L'action dans ce cas se fait en échangeant le couple sur $\{2, 5\}$ avec celui sur $\{3, 6\}$ dans toutes les (X^6/Kd) -structures formant la classe contenant ℓ (on ne modifie pas le couple sur $\{1, 4\}$). ■

Exemple 2.1.18 Considérons le groupe

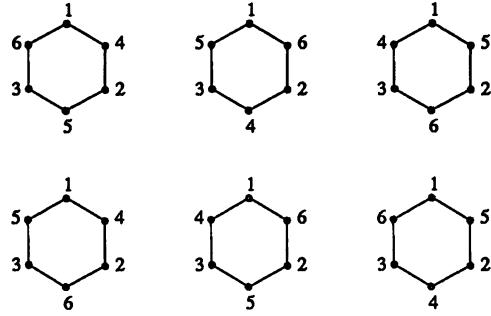
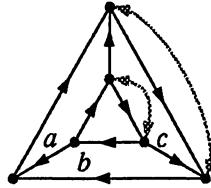
$$S_3^2b = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 6, 3, 4, 2, 5), (2, 3)(5, 6) \rangle,$$

qui est isomorphe au produit cartésien $S_3 \times S_3$.

Ce groupe contient 6 copies isomorphes à D_6 qui sont les stabilisateurs des hexagones de la figure 2.3. Seules les copies correspondant aux trois hexagones du bas sont telles que le produit semi-direct de C_3b avec le stabilisateur de celles-ci donne S_3^2b (C_3b fixe les trois premiers hexagones). Nommons respectivement G_1, G_2 et G_3 ces copies de D_6 .

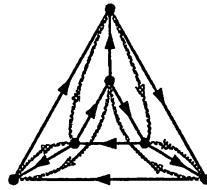
Il y a donc un quotient de $X^6/C_3b \cong C_3 \circ X^2$ par D_6 . Utilisons la présentation suivante de D_6 : $\langle \rho, \tau ; \rho^6 = 1, \tau^2 = 1, \rho\tau\rho\tau = 1 \rangle$.

L'action de τ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure est décrite par la figure 2.4. Elle consiste à choisir une des faces étiquetées a, b, c dans la figure et à échanger les points opposés comme

Figure 2.3: Six structures fixées par les copies de D_6 dans S_3^2b .Figure 2.4: Effet de τ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure.

indiqué par les flèches pâles. On constatera facilement que cette action ne dépend pas du choix de la face. En fait, on a inversé les orientations des deux triangles orientés dans le graphe (figure 2.4). Les trois façons de faire agir τ correspondent à G_1, G_2 et G_3 .

L'effet de ρ est décrit par la figure 2.5. Comme dans le cas de τ , il y a trois façons de faire agir ρ correspondant aux trois sous-groupes G_1, G_2 et G_3 . On se convaincra, en observant la figure 2.6, que cette action ne dépend pas du choix de la façon de faire agir ρ . Dans les trois cas, on échange les triangles intérieurs et extérieurs de la $C_3 \circ X^2$ -structure et on effectue une rotation d'un tiers de tour dans le sens anti-horaire du triangle intérieur.

Figure 2.5: Effet de ρ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure.

Analysons cette action de D_6 sur l'espèce $C_3 \circ X^2$. Pour ce faire, posons

$$\xi_1 = (1, 2, 3)(4, 5, 6), \xi_2 = (2, 3)(4, 5), \xi_3 = (1, 3, 2)(4, 5, 6), \xi_4 = (1, 6)(2, 5)(3, 4).$$

Un calcul montre que $G_1 = \langle \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle (\cong D_6)$. Par ailleurs, $\langle (1, 5, 3, 6, 2, 4) \rangle = \langle \xi_3 \rangle \rtimes \langle \xi_4 \rangle$ (il est bien connu que $Z_6 = Z_3 \rtimes Z_2$). On a donc $G_1 = (\langle \xi_3 \rangle \rtimes \langle \xi_4 \rangle) \rtimes \langle \xi_2 \rangle$. On en déduit les quotients successifs suivants. Dans un premier temps, on peut faire le quotient de $C_3 \circ X^2$ par Z_3 qui consiste à effectuer un tiers de tour dans le sens anti-horaire du triangle intérieur. Il est facile de voir que l'espèce quotient est C_3^2 . Ensuite, on quotientise l'espèce obtenue par Z_2 en échangeant les deux triangles (cycles) entre eux. On obtient l'espèce $E_2(C_3)$. Finalement, le troisième quotient consiste à changer l'orientation des deux cycles en même temps. On obtient

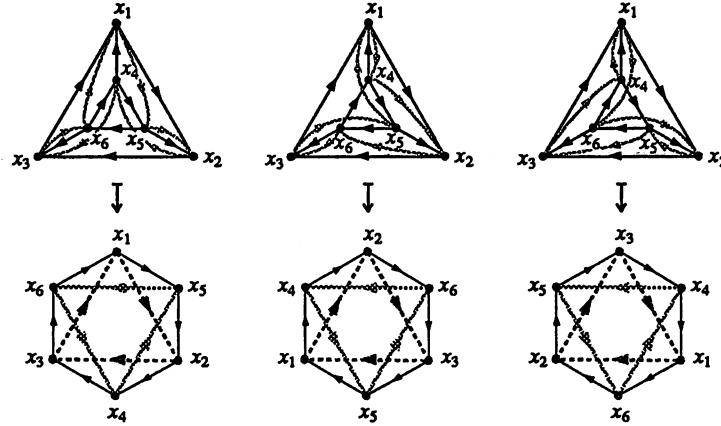


Figure 2.6: L'effet de ρ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure ne dépend pas du choix du “trajet” à faire parcourir aux points.

un quotient de $E_2(C_3)$. De façon schématique, on pourrait résumer ainsi

$$C_3 \circ X^2 \xrightarrow{Z_3} C_3^2 \xrightarrow{Z_2} E_2(C_3) \xrightarrow{Z_2} E_2(C_3)/Z_2.$$

L'existence de ces quotients découle de la proposition 2.1.11 et du fait que l'on a

$$\langle \xi_1 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_3 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_3, \xi_4 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle.$$

Notons que l'on peut faire agir les groupes $\langle \xi_2 \rangle$, $\langle \xi_3 \rangle$ et $\langle \xi_4 \rangle$ indépendamment sur l'espèce $C_3 \circ X^2$. L'action induite par ξ_2 consiste à changer en même temps les deux orientations des triangles. Quant à ξ_3 , l'action induite est de faire tourner le triangle intérieur d'un tiers de tour dans le sens anti-horaire (c'est l'action de ρ^2 ci-dessus). Enfin ξ_4 induit l'action qui se fait en échangeant les deux triangles entre eux et en changeant leur orientation simultanément (c'est le même effet que ρ^3 ci-dessus). D'autres quotients sont possibles. Par exemple, on a

$$\langle \xi_1 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_4 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_3, \xi_4 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle.$$

Par contre, ces actions ne commutent pas. Si on effectue d'abord les quotients par Z_2 , nous ne pourrons quotienter par Z_3 ensuite. En effet, il est facile de voir que si on effectue le quotient de $C_3 \circ X^2$ induit par ξ_2 , on obtient l'espèce $E_3 \circ X^2$. Par suite, si on utilise l'action induite par ξ_4 , on obtient l'espèce P_6 (entre autre parce que $\langle \xi_1, \xi_2, \xi_4 \rangle \approx D_6b$). Or on a $N_{S_6}(D_6) = D_6$ et donc $N_{S_6}(D_6)/D_6 \cong \langle 1 \rangle$. Il s'en suit, d'après le théorème 2.1.5, que le seul automorphisme de l'espèce des polygones à 6 côtés est l'identité. Il est donc impossible d'effectuer un quotient par Z_3 . Ceci se traduit aussi par le fait que $\langle \xi_1, \xi_2, \xi_4 \rangle \not\approx \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle$. Dans le cas contraire, la proposition 2.1.11 nous donnerait un quotient.

■

2.2 Regroupements

Le corollaire 2.1.9 entraîne que certaines espèces atomiques (telle X^6/A_5b) ne sont pas un quotient d'une autre espèce par un groupe non-trivial. Nous verrons ici une opération plus

générale que le quotient qui nous permet de décrire certaines de ces espèces.

Étant donnée une espèce moléculaire T , le groupe symétrique S_n agit sur les structures de $T[n]$ par transport. L'action de $\sigma \in S_n$ sur $s \in T[n]$ est définie par $\sigma.s = T[\sigma](s)$. Si $H \leq S_n$, on peut faire agir toutes les permutations de H sur une structure s donnée. Nous verrons ci-dessous qu'on peut définir une nouvelle espèce à partir de T et H . Cette nouvelle espèce est appelée *regroupement* et généralise le quotient.

Cette construction est apparue dans un contexte informatique où l'on fait agir des sous-groupes de S_n sur des structures appartenant à des espèces moléculaires (voir la procédure regroupe dans l'appendice A.9.1). De cette façon nous obtenons de nouvelles structures donnant une interprétation combinatoire à certaines espèces moléculaires. Le corollaire 2.1.9 et l'existence de sous-groupes simples de S_n (par exemple X^6/A_5b) n'ayant pas d'interprétation directe (faisant appel à des espèces plus simples) dans le cadre de la théorie des espèces sont une autre justification la notion de regroupement.

Dans ce qui suit, si T est une espèce moléculaire, nous identifierons T à l'espèce X^n/K où K est le stabilisateur d'une $T[n]$ -structure.

Définition 2.2.1 Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire et $H \leq S_n$ tel que $HK = KH$. On appelle regroupement de T relatif à H l'espèce notée $T//H$ et définie par

$$(T//H)[U] = \{\{fhK : h \in H\} : f \in \text{Bij}(n, U)\}.$$

Si $\beta \in \text{Bij}(U, V)$, le transport par β est défini par

$$(T//H)[\beta](\{fhK : h \in H\}) = \{\beta fhK : h \in H\}.$$

Remarque 2.2.2 La condition $HK = KH$ n'est pas nécessaire pour que le regroupement de X^n/K relativement à H soit bien défini. Mais nous allons voir dans ce qui suit que si cette condition est vérifiée, alors le regroupement jouit de propriétés intéressantes. ■

Remarque 2.2.3 On montre facilement que le transport ci-dessus est lui aussi bien défini. ■

Lorsque le contexte sera clair, nous dénoterons l'ensemble $\{fhK : h \in H\}$ par $[f]_H$. Si aucune confusion n'est possible, nous écrirons aussi $[f]$ au lieu de $[f]_H$.

Proposition 2.2.4 Si T est une espèce moléculaire alors $T//H$ est aussi une espèce moléculaire. ■

Notons que l'on pourrait aussi définir le regroupement à partir d'un ensemble quelconque de permutations au lieu d'un sous-groupe H . Dans ce cas, il se peut que les "classes" $[f]_H$ ne soient pas disjointes.

Proposition 2.2.5 *Avec les notations utilisées plus haut, soit $H \leq S_n$. Si $HK = KH$ alors pour tout ensemble U , $(T//H)[U]$ est une partition de $T[U]$. De plus, si cette condition est vérifiée, alors*

$$|[f]_H| = |H| / |H \cap K|.$$

Démonstration: Soit U un ensemble fini. Montrons d'abord que les classes sont disjointes. Soient $f, g \in \text{Bij}(n, U)$, supposons que $[f] \cap [g] \neq \emptyset$. Il existe alors fh_1K et gh_2K tels que $h_1, h_2 \in H$ et $fh_1K = gh_2K$. En particulier il existe $k \in K$ tel que $fh_1 = gh_2k$. Ainsi $f = gh_2kh_1^{-1}$, mais $HK = KH$ donc il existe $h_3 \in H$ et $k_1 \in K$ tels que $kh_1^{-1} = h_3k_1$. D'où $f = gh_2h_3k_1$. Par suite, si $fhK \in [f]$, on peut écrire

$$\begin{aligned} fhK &= (gh_2h_3k_1)hK \\ &= g(h_2h_3h_4)k_2K (\text{car } HK = KH) \\ &= gh_5K (\text{car } H \text{ est un groupe}) \end{aligned}$$

Donc $fhK \in [g]$, ainsi $[f] \subset [g]$. L'inclusion inverse se montre de façon similaire.

Par ailleurs, il est clair que

$$\bigcup_{f \in \text{Bij}(n, U)} [f]_H = T[U].$$

La première assertion est démontrée. Montrons maintenant la seconde. Il est facile de montrer que l'application

$$\begin{array}{rcl} \rho : & H & \longrightarrow [f]_H \\ & h & \mapsto fhK \end{array}$$

est bien définie et surjective. Par ailleurs, soient $h_1 \in H, h_2 \in H$ et $f \in \text{Bij}(n, U)$. On a $h_1h_2^{-1} \in H \cap K \Leftrightarrow fh_1K = fh_2K$. En effet, d'une part, la condition entraîne qu'il existe $k \in H \cap K$ tel que $h_1 = h_2k$. Ainsi $fh_1K = fh_2kK = fh_2K$. D'autre part, si $fh_1K = fh_2K$ alors il existe $k \in K$ tel que $fh_1 = fh_2k$. Donc $h_1 = h_2k$, c.-à-d. $k = h_1h_2^{-1} \in K$. Finalement $k = h_1h_2^{-1} \in H$ (car H est un groupe), donc $k = h_1h_2^{-1} \in H \cap K$. Il s'en suit que $|\rho^{-1}(fhK)| = |H \cap K|$ et la seconde assertion est démontrée. ■

Remarque 2.2.6 On vient de voir que la condition $HK = KH$ entraîne que le regroupement de $T = X^n/K$ relatif à H donne une partition de $T[U]$. Les éléments de $T[U]$ sont alors regroupés suivant leur image par l'application r_U suivante:

$$\begin{array}{rcl} r_U : & T[U] & \longrightarrow (T//H)[U] \\ & fK & \mapsto \{fhK : h \in H\}. \end{array}$$

La partition est en fait $\{r_U^{-1}(x) : x \in (T//H)[U]\}$. ■

Remarquons que $HK = KH$ si et seulement si HK est un groupe. Il s'avère que le stabilisateur d'une $T//H$ -structure sur $\{1, 2, \dots, n\}$ est (conjugué à) HK comme le montre la proposition suivante.

Proposition 2.2.7 Soient H tel que $HK = KH$ et $[f]_H \in (T//H)[n]$, alors $\text{stab}([f]_H)$ est conjugué à HK .

Démonstration: Soit $[1]_H \in (T//H)[n]$. Tout d'abord, montrons que $KH \leq \text{stab}([1]_H)$. Soit $k^*h^* \in KH$. Par définition $[1]_H = \{hK : h \in H\}$, on a donc $k^*h^*hK = h_1k_1K = h_1K$ car $HK = KH$ et $h_1K \in \{hK : h \in H\}$. Ainsi $[1]_H \cap [h^*k^*1]_H \neq \emptyset$ d'où $[h^*k^*1]_H = [1]_H$ (voir la proposition 2.2.5). Ainsi $(h^*k^*).[1]_H = [h^*k^*1]_H = [1]_H$. Donc $KH \leq \text{stab}([1]_H)$.

D'autre part, on a $\text{stab}([1]_H) \leq KH$. Soit $\sigma \in \text{stab}([1]_H)$, alors quel que soit $h_1 \in H$, il existe $h_2 \in H$ tels que $\sigma h_1 K = h_2 K$. Il existe donc $k \in K$ tel que $\sigma h_1 = h_2 k$, d'où $\sigma = h_2 k h_1^{-1} = k_1 h_3 h_1^{-1} \in KH$. Il s'en suit que $\text{stab}([1]_H) \leq KH$ et on conclut. ■

Corollaire 2.2.8 Soit $T = X^n/K$ et $H \leq S_n$ tel que $HK = KH$, alors

$$T//H \cong X^n/HK.$$

De plus, sous ces conditions, on a $|(X^n/HK)[n]| = \frac{n!|H \cap K|}{|H||K|}$. ■

La proposition suivante montre que tout quotient est un regroupement.

Proposition 2.2.9 Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire. Tout quotient de T par un groupe G est isomorphe à un regroupement par un groupe $H \leq S_n$.

Démonstration: Soit $\varphi: G \rightarrow \text{Aut}(T)$ un homomorphisme. Nous supposerons sans perte de généralité que φ est injectif. L'espèce T est moléculaire, donc pour tout $g \in G$ on peut définir $X_g = \{\sigma \in S_n : \sigma K = g.K\}$, où $g.K$ désigne $\varphi(g)_n(K)$. Posons

$$H = \bigcup_{g \in G} X_g.$$

On a que H est un sous-groupe de S_n . En effet, en utilisant le fait que $\varphi(g)$ est une transformation naturelle, on calcule que $\sigma \tau K = \sigma(g_2.K) = g_2.(\sigma K) = g_2.(g_1 K) = g_2 g_1 K$. De plus on a $\sigma(g^{-1}.K) = g^{-1}.(\sigma K) = g^{-1}.(g.K) = K$, d'où $\sigma^{-1}K = g^{-1}.K$.

On montre aussi que $X_1 = K \triangleleft H$ et que

$$G \cong (H/K)^{\text{opp}}.$$

Montrons maintenant que les espèces T/G et $T//H$ sont isomorphes. Pour ce faire, il faut exhiber une bijection naturelle entre T/G et $T//H$. Soit U un ensemble fini et $\Phi: T/G \rightarrow T//H$ définie par $\Phi_U(G.aK) = [a]_H$, pour tout $G.aK \in (T/G)[U]$. Cette application est bien définie. En effet, si $G.aK = G.bK$ alors $1.aK = aK = g.bK$ pour un $g \in G$. Or $g.bK = b(g.K)$ par naturalité. De plus, il existe $h \in H$ tel que $g.K = hK$, d'où $aK = bhK$. Il s'en suit que $[a]_H \cap [b]_H \neq \emptyset$, d'où $[a]_H = [b]_H$, grâce à la proposition 2.2.5.

Par suite, si $[a]_H \in (T//H)[U]$ alors $[a]_H$ est l'image de $G.aK$, donc Φ est surjective.

Montrons maintenant que Φ est injective. Si $[a]_H = [b]_H$ alors il existe $k \in K$ et $h \in H$ tels que $a = bkh$. Soit $g (= g_h)$ tel que $hK = g.K$, donné par définition de H . On a

$$\begin{aligned} G.aK &= G.(b(g.K)) \\ &= G.(g.bK) \text{ (l'action de } G \text{ étant naturelle)} \\ &= G.bK. \end{aligned}$$

Finalement, il faut montrer que, quels que soient les ensembles finis U et V et la bijection $\beta: U \rightarrow V$, le diagramme suivant commute:

$$\begin{array}{ccc} T/G[U] & \xrightarrow{\Phi_U} & T//H[U] \\ T/G[\beta] \downarrow & & \downarrow T//H[\beta] \\ T/G[V] & \xrightarrow{\Phi_V} & T//H[V] \end{array}$$

Or, si $G.aK \in (T/G)[U]$ alors

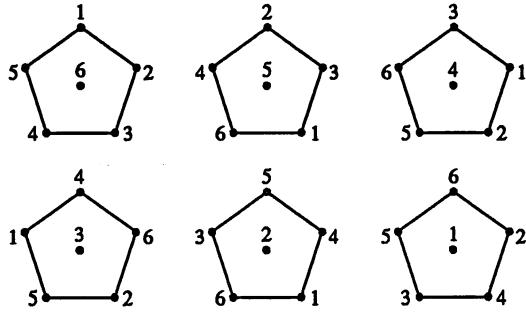
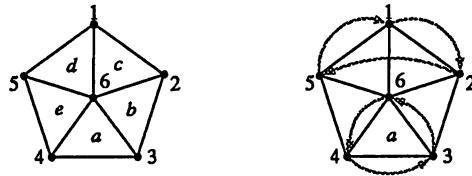
$$\begin{aligned} (\Phi_V \circ T/G[\beta])(G.aK) &= \Phi_V(G.(T[\beta](aK))) \\ &= \Phi_V(G.\beta aK) \\ &= [\beta a]_H \\ &= T//H[\beta]([a]_H) \\ &= (T//H[\beta] \circ \Phi_U)(G.aK). \end{aligned}$$

Ceci termine la démonstration. ■

Exemple 2.2.10 Soit A_5b le groupe $\langle (1, 2, 3, 4, 5), (1, 2, 5)(3, 6, 4) \rangle$. On a vu dans l'exemple 2.1.10 que l'espèce X^6/A_5b n'est pas un quotient car A_5b est simple. Par contre, on peut exprimer X^6/A_5b comme un regroupement. Soit $H = \langle (1, 2, 5)(3, 6, 4), (1, 4)(2, 3) \rangle$ et $K = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4) \rangle$. On a que $H \approx A_4b$, où A_4b est défini dans l'exemple 2.1.17 et que $X^6/K \cong X\mathcal{P}_5$. De plus, $H, K \leq A_5b$ et $HK = KH = A_5b$. On peut donc faire un regroupement de l'espèce $X\mathcal{P}_5$ de telle sorte que $X^6/A_5b \cong X\mathcal{P}_5//H$. La figure 2.7 représente une X^6/A_5b -structure sur l'ensemble $\{1, 2, \dots, 6\}$.

Par ailleurs, on calcule que $|H \cap K| = 2$, $|H| = 12$ et $|[1]_H| = 6$. Donc, on a bien $|[1]_H| = |H| / |H \cap K| = 2$, en accord avec la proposition 2.2.5.

Il y a une autre façon de trouver les $X\mathcal{P}_5$ -structures faisant partie d'une classe de $X\mathcal{P}_5//H$. Avec $s = K$, on obtient les 5 autres structures de $H.s$ en effectuant les deux rotations indiquées par la figure 2.8 et ce pour toutes les faces (a, b, c, d et e). On représente s par un graphe dans cette figure. Toutefois, cette action n'est pas naturelle car il n'y a pas de façon de distinguer les 5 faces du graphe sans en étiquetter les sommets.

Figure 2.7: Une (X^6/A_5b) -structure.Figure 2.8: Une façon d'obtenir une classe de $X\mathcal{P}_5//H$.

2.3 Espèces moléculaires sur 6 points

On utilise ici les techniques et résultats des sections précédentes pour donner une interprétation combinatoire aux espèces moléculaires de degré 6 (voir l'appendice A.1). Il est bien connu que toute espèce moléculaire est isomorphe à une espèce de la forme X^n/K où $K \leq S_n$. De plus, deux espèces X^n/K_1 et X^n/K_2 sont isomorphes si et seulement si $K_1 \approx K_2$. Il y a donc autant d'espèces moléculaires (à isomorphisme près) sur n points qu'il y a de classes de conjugaison de sous-groupes dans S_n . On trouvera dans [We] une liste de représentants de ces classes pour $n = 6$. C'est à partir de cette liste que nous avons travaillé. Nous y avons aussi emprunté les noms des représentants des classes de conjugaison.

Nous allons donner une interprétation aux espèces qui n'ont pas été décrites dans les sections 2.1 et 2.2. Notons que nous avons écrit un ensemble de procédures en *Maple* qui nous ont facilité la tâche. Certaines des méthodes employées en *Maple* sont illustrées à l'appendice A.7. On trouvera aussi en appendice des tables donnant la liste complète des espèces ainsi qu'un renvoi à l'exemple où l'on en donne une interprétation, si l'espèce est atomique.

Parmi les espèces sur 6 points, certaines sont obtenues de celles sur 2 et 3 points par substitution (en effet, $6 = 2 \times 3$). Ces espèces ont été identifiées en calculant le stabilisateur d'une structure et en trouvant le représentant de sa classe de conjugaison. Par exemple, le stabilisateur de $\{(1, 3, 4), (2, 5, 6)\}$, une $(E_2 \circ X^3)$ -structure sur $\{1, 2, \dots, 6\}$ est $K = \langle (1, 2)(3, 5)(4, 6) \rangle$. En trouvant le représentant de la classe de conjugaison de K , on identifie cette espèce. Les autres espèces identifiables de cette façon sont

$$E_2(XE_2), C_3(X^2), E_3(X^2), C_3(E_2), E_3(E_2), E_2(C_3), E_2(E_3).$$

Certaines espèces sur 6 points sont obtenues par produit d'espèces sur des cardinalités

plus petites, on retrouve

$$E_2 E_2(X^2), E_2^3, C_4 E_2, \mathcal{P}_4^{\text{bic}} E_2, \mathcal{P}_4 E_2, E_4^\pm E_2, E_4 E_2, C_3^2, E_3 C_3, E_3^2.$$

De plus, d'autres espèces ont la forme $X^r M_s$ où M_s est de degré $s \geq 1$, $r \geq 1$ et $r + s = 6$.

Par inspection, on trouvera que les espèces ci-dessus sont les seules qui sont non-atomiques ou non-primitives. Remarquons aussi que certaines espèces sont obtenues à la fois des deux façons mentionnées ci-dessus: Par exemple, $E_3^2 = X^2 \circ E_3$.

Notons aussi que certaines espèces vivent sur toutes les cardinalités ou sur les cardinalités paires. On retrouve ainsi

$$C_6, \mathcal{P}_6^{\text{bic}}, \mathcal{P}_6, E_6^\pm, E_6.$$

Nous allons maintenant entreprendre la description des espèces qui n'ont pas encore été mentionnées.

Exemple 2.3.1 Parmis celles-ci, on retrouve l'espèce $X^6/C_4 b$, où

$$C_4 b = \langle (1, 2, 3, 4)(5, 6) \rangle.$$

C'est l'espèce des graphes (orientés) isomorphes à celui qu'on voit dans la figure 2.9. On peut plonger ce graphe dans un octaèdre comme l'illustre la figure.

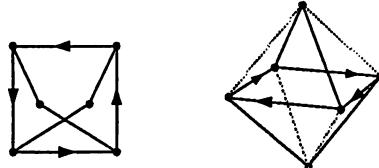


Figure 2.9: Une $(X^6/C_4 b)$ -structure.

Exemple 2.3.2 Soit $Ke = \langle (1, 2)(3, 4)(5, 6), (1, 5)(2, 6) \rangle$. Les trois graphes de la figure 2.10 représentent tous des X^6/Ke -structures. Le premier est un graphe simple. En ce qui concerne le deuxième, on a affaire à un hexagone dont deux arêtes opposées sont d'une autre couleur. Le troisième est un hexagone muni d'un diamètre. Il est facile de voir que le stabilisateur de

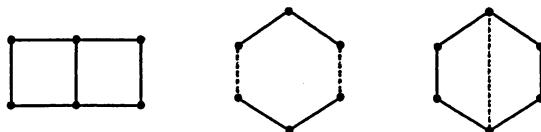


Figure 2.10: Une (X^6/Ke) -structure.

chacun de ces graphes est conjugué à Ke , les espèces correspondantes sont donc isomorphes.

Comme l'illustre la figure 2.11, cette espèce est aussi isomorphe au quotient de $X^2 E_2(X^2)$ par Z_2 qui consiste à inverser tous les 2-ordres linéaires simultanément. Il est facile de voir que l'espèce obtenue de cette façon est bien isomorphe à celle obtenue avec les graphes ci-dessus. ■

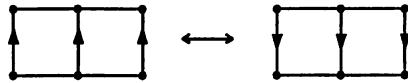


Figure 2.11: Autre interprétation pour (X^6/Ke) .

Exemple 2.3.3 Le groupe $D_{4d} = \langle (1, 3, 2, 4)(5, 6), (1, 2)(5, 6) \rangle$ est le produit semi-direct de C_4b avec $\langle (1, 2)(5, 6) \rangle \cong Z_2$. L'espèce X^6/D_{4d} est le quotient de X^6/C_4b par Z_2 . L'action de Z_2 est représentée par la figure 2.12.

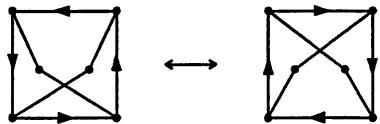


Figure 2.12: Action de Z_2 sur X^6/C_4b .

Exemple 2.3.4 Il y a deux façons de représenter l'espèce X^6/D_{4b} . D'une part, on calcule que $D_{4b} = \langle (1, 3, 2, 4) \rangle \rtimes \langle (1, 2)(5, 6) \rangle$, il y a donc une action de Z_2 sur l'espèce X^2C_4 telle que $X^6/D_{4b} = X^2C_4/Z_2$. Cette action consiste à inverser simultanément l'ordre linéaire (sur 2 points) et le cycle d'une X^2C_4 -structure. D'autre part, il est facile de voir que D_{4b} est le groupe des automorphismes de l'octaèdre.

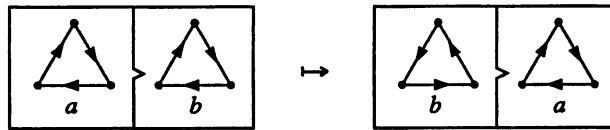
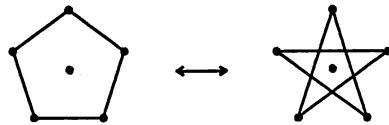
Exemple 2.3.5 Le groupe $S_4b = \langle (1, 2, 3), (1, 2)(3, 4), (1, 2), (5, 6) \rangle$ est le produit semi-direct de $\langle (1, 2, 3), (1, 2)(3, 4) \rangle \approx A_4a$ par le groupe $\langle (1, 2), (5, 6) \rangle \cong Z_2$. On en déduit l'action de Z_2 sur l'espèce $E_2^\pm E_4^\pm \cong X^2E_4^\pm$ qui consiste à changer les deux orientations simultanément. Sous cette action on a $X^6/S_4b \cong (X^2E_4^\pm)/Z_2$.

Exemple 2.3.6 Soit $S_3^2a^+$ le groupe $\langle (1, 2, 3), (4, 5, 6), (1, 2)(4, 5) \rangle$ isomorphe à l'intersection de $S_3 \times S_3$ avec A_6 . On calcule $S_3^2a^+ = \langle (1, 2, 3), (4, 5, 6) \rangle \rtimes \langle (1, 2)(5, 6) \rangle$, d'où l'action de Z_2 sur l'espèce C_3^2 qui consiste à changer l'orientation des deux cycles d'une C_3^2 -structure. On a alors $X^6/S_3^2a^+ \cong C_3^2/Z_2$.

Exemple 2.3.7 Le groupe $C_2[S_3]a^+ = \langle (1, 2, 3), (4, 5, 6), (1, 4)(2, 6, 3, 5) \rangle$ est le produit semi-direct de $\langle (1, 2, 3), (4, 5, 6) \rangle$ par $\langle (1, 4)(2, 6, 3, 5) \rangle \approx C_4b \cong Z_4$. On a donc une action de Z_4 sur l'espèce C_3^2 . L'action est illustrée par la figure 2.13, où on voit l'effet du générateur de Z_4 sur une C_3^2 -structure.

Exemple 2.3.8 Finalement, l'espèce X^6/S_5b , où

$$S_5b = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 3, 5, 4), (1, 2, 5)(3, 6, 4) \rangle$$

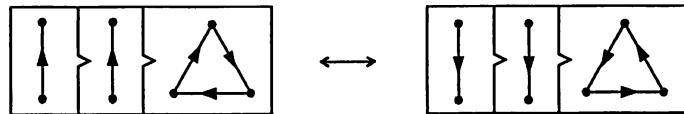
Figure 2.13: Quotient de C_3^2 par Z_4 .Figure 2.14: Action induite sur les X^6/S_5b -structures.

est le quotient de X^6/A_5b par Z_2 dont l'action est induite par la complémentation du polygone à 5 côtés comme l'illustre la figure 2.14.

2.4 Espèces moléculaires sur 7 points

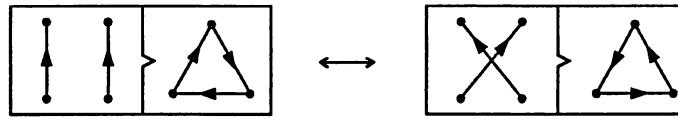
Nous allons étudier ici quelques-unes des espèces moléculaires vivant sur 7 points obtenues par quotient. Pour une interprétation des autres espèces sur 7 points, on pourra consulter l'appendice A.1.

Exemple 2.4.1 Parmi les espèces sur 7 points, quelques-unes sont obtenues par un quotient de l'espèce $X^7/\langle(1, 2, 3)\rangle = X^2X^2C_3$ par certains groupes. Par exemple, on a $S_3e = \langle(1, 2, 3)\rangle \rtimes \langle(1, 2)(4, 5)(6, 7)\rangle$. L'espèce X^7/S_3e est donc un quotient de $X^2X^2C_3$ par Z_2 où l'action consiste à changer l'orientation des deux ordres linéaires et du cycle simultanément (voir la figure 2.15).

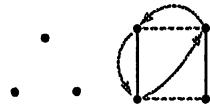
Figure 2.15: X^6/S_3e .

L'espèce $E_2(X^2)C_3$ est le quotient de $X^2X^2C_3$ obtenu en échangeant les deux ordres linéaires. On peut par la suite quotienter $E_2(X^2)C_3$ par Z_2 en changeant l'orientation du cycle. On a alors $E_2(X^2)E_3 \cong X^7/D_6c$, où $D_6c = \langle(1, 2, 3)(4, 5)(6, 7)\rangle \rtimes \langle(1, 2)\rangle$.

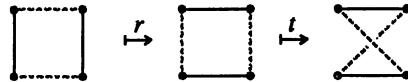
Exemple 2.4.2 Considérons le groupe $D_6e = \langle(1, 2, 3)(4, 5)(6, 7)\rangle \rtimes \langle(1, 2)(4, 5)\rangle$. On a ici une action de Z_2 sur l'espèce $E_2(X^2)C_3$ décrite par la figure 2.16.

Figure 2.16: X^6/D_6e .

Exemple 2.4.3 Le groupe Z_3 agit sur l'espèce $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ comme illustré par la figure 2.17. L'action consiste à choisir une couleur d'arête et à effectuer une rotation des trois points comme indiqué après avoir placé les arêtes de la couleur choisie verticalement et celles de l'autre couleur horizontalement. On vérifiera qu'il y a quatre façons de représenter un polygone bicoloré de la sorte et dans tous les cas, l'effet de la rotation est le même (en d'autres mots, cette action sur la $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ -structure est naturelle en ce sens que peu importe la façon d'effectuer la rotation (il y en a 4), le résultat est le même).

Figure 2.17: X^7/A_4c .

La figure 2.18 donne une autre façon de voir cette action. On fait subir à la structure une rotation r de $\pi/2$ et ensuite on effectue une transposition t des deux points reliés par une arête en trait plein. Remarquons entre autre que $(t \circ r)^3 = 1$. Soit le groupe $A_4c =$

Figure 2.18: X^7/A_4c .

$\langle (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7) \rangle \times \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6) \rangle$. L'espèce X^7/A_4c est donc le quotient de $X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ par Z_3 où l'action sur une structure consiste à permuter cycliquement les trois points de l'ordre linéaire et à effectuer la rotation indiquée ci-dessus sur la $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ -structure. ■

Exemple 2.4.4 Le groupe Z_2 agit sur l'espèce $E_2(X^2)$ en effectuant la transformation illustrée par la figure 2.19. On vérifiera que cette action est naturelle. Soit

$$Q_{6a} = \langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7), (1, 2)(4, 6, 5, 7) \rangle.$$

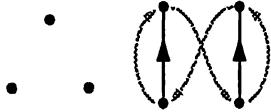
Un calcul montre que

$$\langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7) \rangle \triangleleft Q_{6a}.$$

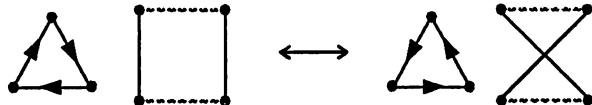
On a donc une action de $Q_{6a}/\langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7) \rangle \cong Z_2$ sur l'espèce $C_3E_2(X^2)$. Cette action est obtenue en appliquant l'action de Z_2 sur $E_2(X^2)$ décrite ci-dessus et en changeant l'orientation du cycle. ■

Exemple 2.4.5 Considérons le groupe

$$G = \langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7) \rangle \times \langle (1, 2)(4, 6) \rangle \cong D_4S_3 \cap A_7.$$

Figure 2.19: X^7/Q_6a .

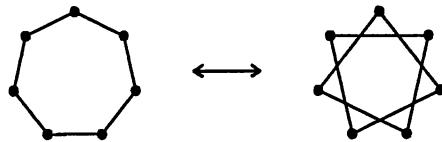
L'espèce X^7/G est le quotient de $C_3\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ par Z_2 obtenu en changeant l'orientation du cycle et en effectuant la transformation indiquée par la figure 2.20 sur $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$.

Figure 2.20: $X^7/(D_4S_3 \cap A_7)$.

Exemple 2.4.6 Soit

$$H_7a = \langle (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7), (2, 7)(3, 6)(4, 5), (2, 3, 5)(4, 7, 6) \rangle \rtimes \langle (2, 3, 5)(4, 7, 6) \rangle.$$

On a ici un quotient de \mathcal{P}_7 par Z_3 , l'action étant illustrée par la figure 2.21.

Figure 2.21: X^7/H_7a .

Exemple 2.4.7 En utilisant l'action de Z_2 sur l'espèce \mathcal{P}_5 décrite dans la figure 2.14, on peut faire un quotient de l'espèce $X^2\mathcal{P}_5$ par Z_2 en changeant l'orientation de l'ordre linéaire et en complémentant le polygone en même temps. Sur les stabilisateurs, ceci se traduit par le fait que $D_5a = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4) \rangle \triangleleft \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4), (2, 3, 5, 4)(6, 7) \rangle = H_5b$. On a que $X^2\mathcal{P}_5 \cong X^7/D_5a$, donc $X^7/H_5b \cong (X^2\mathcal{P}_5)/Z_2$, le quotient est celui décrit ci-dessus. Remarquons qu'ici, H_5b n'est pas le produit semi-direct de D_5a par Z_2 car $\langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4) \rangle \cap \langle (2, 3, 5, 4)(6, 7) \rangle = \langle (2, 5)(3, 4) \rangle \neq \langle 1 \rangle$. Par contre, $H_5b/D_5a \cong Z_2$ (voir la proposition 2.1.5). ■

Exemple 2.4.8 Le groupe

$$S_4e = \langle (1, 3, 2)(4, 5, 6), (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7), (1, 2)(4, 6) \rangle$$

est le produit semi-direct de $A_4c \cong \langle (1, 3, 2)(4, 5, 6), (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7) \rangle$ par $\langle (1, 2)(4, 6) \rangle \cong Z_2$. De plus, on a vu que $X^7/A_4c \cong (X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$. L'action de Z_2 sur une $(X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$ -structure se fait en appliquant la transformation décrite dans la figure 2.20.

2.5 Critère d'atomicité

Nous donnons ici une condition nécessaire et suffisante pour déterminer si une espèce X^n/H est atomique. Cette condition est une adaptation du critère de Yeh (voir [Ye1], chap. I § 2) à notre contexte, c.-à-d. au cas où H est donné sous la forme $\langle g_1, g_2, \dots, g_r \rangle$, g_i étant un élément de S_n pour $i = 1, 2, \dots, r$.

On trouvera à l'appendice A.9.6 le code Maple implémentant notre méthode. Ces programmes peuvent servir à déterminer si l'espèce moléculaire à laquelle appartient une structure s est atomique ou non après avoir calculé le groupe des automorphismes de s (voir l'exemple 2.5.6).

Établissons quelques notations. Soit G un groupe. Nous dénoterons par (G, E) le G -ensemble E . Soit $H \leq S_n$ et $U \subset n$. Supposons que (H, U) soit un H -ensemble. Soit $V \subset U$ tel que $HV \subset V$. Si $h \in H$, on définit la *restriction* de h à V , noté h_V , par $h_V(u) = h(u)$, $\forall u \in V$. De même, si $U \subset W$ on définit l'*extension* de h à W , notée h^W , par

$$h^W(w) = \begin{cases} h(w) & \text{si } w \in U \\ w & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous désignerons par H_V l'ensemble $\{h_V : h \in H\}$ et par H^W l'ensemble $\{h^W : h \in H\}$.

Définition 2.5.1 Soit H , U et V comme ci-dessus. On dira que (H_V, V) est un facteur de (H, U) si $(H_V)^U \subset H$.

Le lemme suivant est dû à Yeh (voir [Ye1]).

Lemme 2.5.2 Si X^n/H est une espèce moléculaire et s'il existe $U \subset n$ tel que $U \neq \emptyset$, $U \neq n$ et que (H_U, U) est un facteur de (H, n) , alors on a un isomorphisme d'espèce s

$$\frac{X^n}{H} \cong \frac{X^{|U|}}{H_U} \cdot \frac{X^{|n \setminus U|}}{H_{n \setminus U}}.$$

■

Ainsi pour déterminer que $H \leq S_n$ est le stabilisateur d'une espèce non-atomique, il suffit de trouver un sous-ensemble propre U de n tel que $HU \subset U$ et (H_U, U) soit un facteur de (H, n) . Le lemme suivant facilitera la recherche d'un tel U et nous permettra d'énoncer un algorithme d'atomicité. Nous dénoterons par $\mathcal{O}(H)$ l'ensemble des orbites de (H, n) .

Lemme 2.5.3 Si (H_U, U) est un facteur de (H, n) , alors il existe un sous-ensemble Θ de $\mathcal{O}(H)$ tel que

$$U = \bigcup_{Q \in \Theta} Q.$$

Démonstration: Il suffit de montrer que si $Q \in \mathcal{O}(H)$ alors $U \cap Q \neq \emptyset \Rightarrow Q \subset U$. Ceci est clair car si $q \in Q$ et $q \in U$, alors $Q = Hq \subset HU \subset U$. ■

Le choix d'un facteur est donc limité par le choix de l'ensemble U qui doit être précisément la réunion de certaines orbites de H . Par ailleurs, si on connaît des générateurs de H (ce qui est notre cas dans le contexte de la classification des espèces moléculaires), la condition $(H_V)^U \subset H$ de facteur est facilement vérifiée à partir des générateurs. Il est en effet évident que si $V \subset U \subset \mathbf{n}$, alors

$$\forall h, k \in H, h_V k_V = (hk)_V \text{ et } h^U k^U = (hk)^U.$$

Il s'en suit le résultat suivant

Lemme 2.5.4 Si $H = \langle h_1, h_2, \dots, h_r \rangle$ alors

$$(H_V)^U \subset H \iff \forall h \in \{h_1, h_2, \dots, h_r\}, (h_V)^U \in H.$$

Nous avons tous les outils en main pour énoncer l'algorithme. Nous utilisons la notation $\mathcal{P}_k(\Theta)$ pour désigner l'ensemble des parties à k éléments de Θ .

Algorithme 2.5.5 (Critère d'atomicité)

Soit $H = \langle h_1, h_2, \dots, h_r \rangle \leq S_n$;

Soit $m := |\mathcal{O}(H)|$;

Pour $k = 1$ à $m - 1$ faire

Pour chaque $\{O_1, O_2, \dots, O_k\} \in \mathcal{P}_k(\mathcal{O}(H))$ faire

$U := \bigcup_{1 \leq i \leq k} O_i$;

Si $\forall h \in \{h_1, h_2, \dots, h_r\}$, on a $hU \subset U$ et $(h_U)^n \in H$

alors retourner (H_U, U) ;

fin;

Retourner \emptyset ;

Exemple 2.5.6 Il est facile de voir que le stabilisateur de toute $C_n(X^2)$ -structure est conjugué au groupe engendré par la permutation

$$h = (1, 2, \dots, n)(n+1, n+2, \dots, 2n).$$

Par ailleurs il est clair que

$$\mathcal{O}(\langle h \rangle) = \{\{1, 2, \dots, n\}, \{n+1, n+2, \dots, 2n\}\}.$$

Les seuls choix pour l'ensemble U d'un éventuel facteur sont donc

$$\{1, 2, \dots, n\}$$

ou

$$\{n+1, n+2, \dots, 2n\}.$$

Dans un cas comme dans l'autre, la condition sur $(h_U)^{\{1, 2, \dots, 2n\}}$ n'est pas vérifiée. Par conséquent, $C_n(X^2)$ est atomique. ■

L'algorithme précédent a été utilisé pour classer les espèces de l'appendice A.1 comme atomiques ou non.

2.6 Calcul de dérivées.

La dérivée d'une espèce M est la nouvelle espèce M' définie par

$$M'[U] \stackrel{\text{def}}{=} M[U + \{*\}],$$

où $* \notin U$. Nous nommerons *M-structure dérivée* un élément de $M'[U]$; notons que bien qu'une telle structure dérivée soit une construction sur $U + \{*\}$, son ensemble sous-jacent est U .

La dérivée d'une espèce moléculaire peut être calculée à partir des interprétations combinatoires telles que trouvées aux sections 2.3 et 2.4. Une première approche consiste, grossièrement, à exhiber un isomorphisme naturel à partir de l'objet qui décrit l'espèce moléculaire (voir entre autre [LJ2]).

On peut aussi utiliser la formule suivante, due à Yeh ([Ye1, LY]),

$$(X^n/K)' = \sum_{x \in \mathcal{O}_K} \frac{X^{n-1}}{K \cap S_{\{1, 2, \dots, n\} - \{x\}}},$$

où \mathcal{O}_K est un système de représentants des orbites de K . L'appendice A.9.4 donne le code Maple pour effectuer ce calcul de façon automatique.

Nous utiliserons une méthode combinant les deux précédentes. Cette façon de procéder nous permet d'une certaine façon de "voir" la dérivée sur la structure comme c'est le cas lorsque l'on cherche un isomorphisme naturel. Il s'agit de trouver les types d'isomorphisme d'une structure sur l'ensemble $U + \{*\}$ et ensuite de calculer le stabilisateur de chaque type d'isomorphisme. Notons qu'ici la notion d'isomorphisme doit tenir compte du point $*$. Par exemple, les structures de la figure 2.22 ne sont pas isomorphes, le point $*$ n'occupant pas la même position dans l'ordre linéaire. Par contre, la figure 2.23 illustre deux structures dérivées



Figure 2.22: Structures dérivées non-isomorphes.

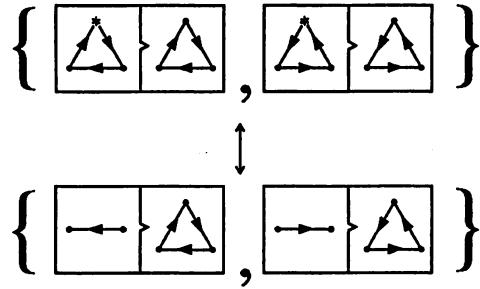
isomorphes.



Figure 2.23: Structures dérivées isomorphes.

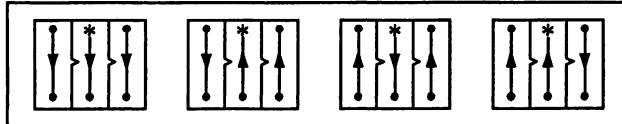
Notons que si la structure dérivée s est obtenue du quotient d'une espèce, le point $*$ doit se retrouver dans chaque structure formant s .

Nous utiliserons ici cette méthode pour calculer la dérivée de quelques unes des espèces sur 6 et 7 points trouvées dans les sections précédentes.

Figure 2.24: Dérivée de C_3^2/Z_2 .

Exemple 2.6.1 Tout d'abord, considérons l'espèce C_3^2/Z_2 . Il est facile de voir que $(C_3^2/Z_2)' = 2(X^2C_3/Z_2)$. En effet, l'ajout du point peut se faire dans le premier ou le deuxième cycle. La figure 2.24 montre une structure dérivée du premier type. ■

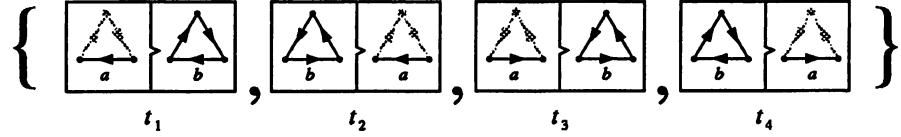
Exemple 2.6.2 Considérons maintenant l'espèce X^6/Kd . Une structure dérivée est obtenue en choisissant un des couples (une des X^2 -structures) d'une (X^6/Kd) -structure s et en y placant le point * comme l'illustre la figure 2.25. Le choix du couple n'est a priori pas suffisant

Figure 2.25: Dérivée de (X^6/Kd) .

car chacun des trois couples est aussi muni d'un ordre linéaire. Une fois le couple choisi, il faut choisir où se place le point * dans celui-ci. Cette fois, le choix est arbitraire car l'action de Kd "symétrise" s . En d'autre mots, il est équivalent de mettre * sur une position ou l'autre dans le couple choisi, puisque l'action de Kd échange ces deux positions. Une fois le choix du couple fait et le point * placé dans le couple, on constate que le seul automorphisme (de structure) possible pour s est d'inverser simultanément les deux couples de s qui ne contiennent pas * (on pourrait penser qu'un autre automorphisme consiste à échanger ces deux couples entre eux, mais ce n'est pas le cas car les trois couples sont ordonnés linéairement).

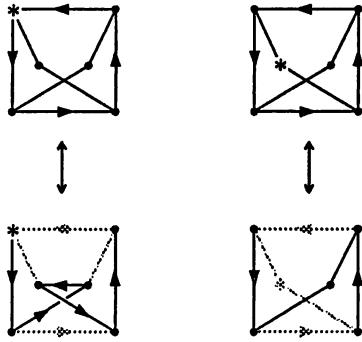
Remarquons que l'automorphisme doit agir simultanément sur toutes les $X^3 \circ X^2$ formant s . Cet automorphisme échange les $X^3 \circ X^2$ structures composant s entre elles. On conclut que le stabilisateur de s est conjugué à C_2b , d'où $(X^6/Kd)' \cong 3XE_2(X^2)$. ■

Exemple 2.6.3 L'espèce X^6/A_4b est isomorphe au quotient de X^6/Kd par Z_3 tel que décrit à l'exemple 2.1.17. L'action de Z_3 consiste à permuter cycliquement les trois couples simultanément dans chacune des quatre structures qui forment la structure quotient. Cette action rend indifférent le choix du couple dans lequel ira le point *. De plus, on voit que le seul automorphisme de la structure dérivée obtenue consiste à inverser chacun des deux couples ne comportant pas le point *, d'où $(X^6/A_4b)' = XE_2(X^2)$. ■

Figure 2.26: Dérivée de C_3^2/Z_4 .

Exemple 2.6.4 Considérons l'espèce C_3^2/Z_4 (ce quotient est décrit à l'exemple 2.3.7). Une structure dérivée est donnée dans la figure 2.26. On voit, en calculant le stabilisateur, qu'une telle structure est en fait une $(X^2C_3)/Z_2$ -structure. On se convaincra en effet que $\text{stab}(\{t_1, t_3\}) = \text{stab}(\{t_2, t_4\}) = \text{stab}(\{t_1, t_2, t_3, t_4\})$. ■

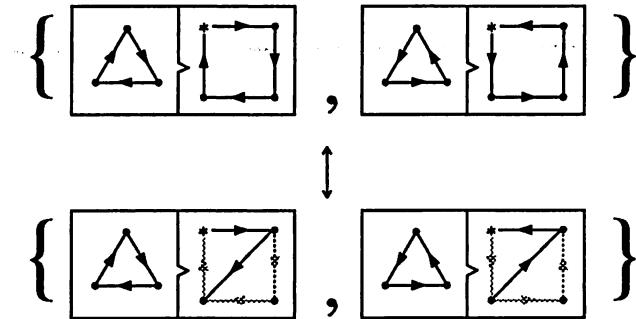
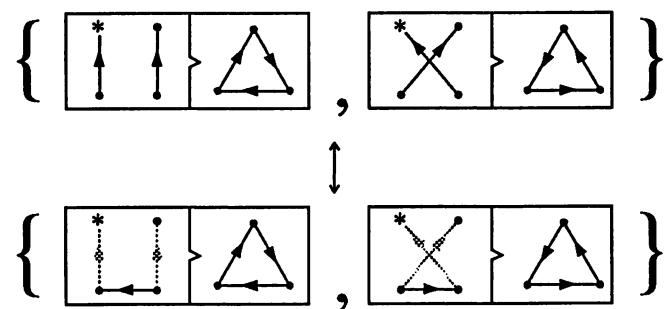
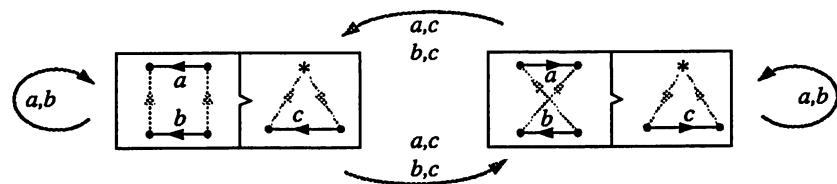
Exemple 2.6.5 La dérivée de l'espèce X^6/C_{4b} est $X^5 + XE_2(X^2)$ (l'espèce X^6/C_{4b} est décrite à l'exemple 2.3.1). La figure 2.27 illustre ce fait. On voit qu'il y a deux choix pour l'emplacement du point *. Le premier donnant lieu à une X^5 -structure et le second à une $XE_2(X^2)$ -structure. ■

Figure 2.27: Dérivée de X^7/C_{4b} .

Exemple 2.6.6 Une $(C_3C_4)/Z_2$ -structure dérivée est obtenue en placant le point * dans l'un des deux cycles. Si on le place dans le 3-cycle, il est facile de voir que l'on obtient une $(X^2C_4)/Z_2$ -structure. Dans l'autre cas, la figure 2.28 illustre le fait que l'on obtient une $X((X^2C_3)/Z_2)$ -structure. D'où

$$((C_3C_4)/Z_2)' = (X^2C_4)/Z_2 + X((X^2C_3)/Z_2).$$

Exemple 2.6.7 Une D_{6e} -structure dérivée (section 2.4) est obtenue en placant le point * dans l'un des deux ordres linéaires (au début ou à la fin, d'où deux cas) ou dans le 3-cycle. La première éventualité est illustrée par la figure 2.29. On obtient dans ce cas une structure appartenant à l'espèce $X((X^2C_3)/Z_2)$. Si le point * est dans le cycle, la structure correspond à une X^6/Kd -structure comme l'illustre la figure 2.30. En effet, on constate que les automorphismes de cette structure consistent à échanger deux des paires de points a, b, c simultanément. On conclut que $(X^7/D_{6e})' = 2X((X^2C_3)/Z_2) + X^6/Kd$. ■

Figure 2.28: Dérivée de $(C_3C_4)/Z_2$.Figure 2.29: Dérivée de X^7/D_6e (1).Figure 2.30: Dérivée de X^7/D_6e (2).

Chapitre 3

Équations différentielles combinatoires.

3.1 Introduction

Ce chapitre se veut une suite pour une théorie des équations différentielles combinatoires dans le cadre de la théorie des espèces de structures. Il poursuit le travail entrepris par G. Labelle et A. Joyal dans [Ja2, LG2]. Un des principaux résultats donne la solution générale dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ à l'équation différentielle autonome $Y' = F(Y), F(0) \neq 0; Y(0) = Y_0$ dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. Nous étudions plus particulièrement les équations $Y' = 1 + Y^2; Y(0) = 0$ et $Y' = 1 + E_2(Y); Y(0) = 0$ ainsi qu'une généralisation de ces deux équations. Le chapitre se termine par une étude du noyau de l'opérateur dérivée sur certains sous-modules de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Le contexte des espèces linéaires et celui des espèces ordinaires sont deux terrains où l'on peut faire une étude fertile des équations différentielles combinatoires. Dans le premier cas, les ensembles sous-jacents aux structures sont préalablement munis d'un ordre total et une équation différentielle avec conditions initiales du type

$$Y' = F(X, Y) ; Y(0) = 0 \quad (3.1)$$

possède toujours une solution unique (sous certaines conditions minimales [LV]). C'est une conséquence du fait que toute espèce linéaire possède une intégrale unique à constante additive près. Par exemple l'équation

$$Y' = 1 + Y^2 ; Y(0) = 0 \quad (3.2)$$

qui a pour solution analytique $y(x) = \tan x$, fournit une interprétation combinatoire aux nombres d'Euler dans le contexte des espèces linéaires (voir [LV]). Cette interprétation est liée aux permutations alternantes de André (voir [An]).

La situation est différente dans le cas des espèces ordinaires: le nombre de solutions non-isomorphes possibles pour (3.1) est $0, 1, 2, \dots$ ou 2^{\aleph_0} selon le choix de F et de la condition initiale. Dans ce contexte, les ensembles finis sous-jacents aux structures sont tout-à-fait arbitraires et l'intégration est en général définie de façon multiple, même à constante additive près [LG2]. Nous verrons en particulier que le nombre de solutions à l'équation (3.2) en espèces ordinaires est 0.

Les espèces virtuelles et les espèces rationnelles nous serviront aussi de cadre pour résoudre des équations différentielles. Grâce au théorème de Yeh (voir [Ye1, LY]), les espèces

virtuelles (resp. rationnelles) sont en fait les éléments de l'anneau des séries formelles à coefficients dans \mathbf{Z} (resp. \mathbf{Q}) dont l'ensemble des variables est l'ensemble \mathcal{A} des espèces atomiques. On dénotera l'anneau des espèces virtuelles par $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ et celui des espèces rationnelles par $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. Les espèces ordinaires, quant à elles, seront considérées comme éléments du demi-anneau $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. Une espèce $F \in \mathbf{Q}[\mathcal{A}]$ sera dite *polynomiale*. Notons aussi que $\mathbf{N} \subset \mathbf{N}[\mathcal{A}] \subset \mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. De même on a $\mathbf{Z} \subset \mathbf{Z}[\mathcal{A}] \subset \mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbf{Q} \subset \mathbf{Q}[\mathcal{A}] \subset \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Nous montrerons qu'en plus de (3.2), l'équation

$$Y' = 1 + 2E_2(Y) ; Y(0) = 0 \quad (3.3)$$

n'a pas de solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. Pour ce faire nous utiliserons la technique des approximations successives ([LG2]). Notons que la série génératrice de toute solution dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ de (3.2) ou (3.3) satisfait nécessairement l'équation $y'(x) = 1 + y(x)^2$; $y(0) = 0$ et est donc égale à $\tan x$.

Nous exposerons aussi une méthode systématique pour trouver dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ la solution générale d'équations différentielles autonomes $Y' = F(Y)$ avec condition initiale $Y(0) = 0$ et satisfaisant $F(0) \neq 0$. Cette méthode est basée sur l'inversion dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ ([Ja3, LG1, LG3]) et sur l'intégrale de Joyal dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ (voir [Ja2]). Comme application de cette méthode, nous donnerons la solution générale de (3.2) et (3.3) dans l'anneau $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Définition 3.1.1 Soit $F \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. On définit une nouvelle espèce que l'on note F^\bullet en posant $F^\bullet = XF'$. On dit que F^\bullet est obtenue de F en pointant les F -structures.

Remarque 3.1.2 Les espèces virtuelles et rationnelles (resp. ordinaires) munies du produit cartésien d'espèce forment un anneau (resp. semi-anneau). Par définition, la dérivée d'une espèce F satisfait l'équation $F^\bullet = XF'$. D'autre part, on a l'équation $F^\bullet = E^\bullet \times F$. On en déduit $XF' = E^\bullet \times F$. Intégrer F revient donc à résoudre pour G dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ ou $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ (resp. dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$), muni de cette multiplication, l'équation

$$XF = E^\bullet \times G.$$

On pourrait donc, en changeant l'équation, avoir d'autres sortes d'"intégrales". Par exemple, une C -intégrale de F pourrait être une solution en G de l'équation $XF = C^\bullet \times G$. Cette étude reste à faire. ■

Notons que le programme de calcul symbolique *Maple* [CG] est bien adapté au genre de calculs rencontrés dans notre travail. Nous l'avons utilisé pour en effectuer quelques-uns.

3.2 Généralités

Nous retrouvons ici des définitions et notions préliminaires de la théorie combinatoire des espèces de structures. Pour plus de détails, on pourra consulter les travaux de Joyal, Labelle ou Yeh [Ja1, LJ1, Ye1].

Si F est une espèce et U un ensemble fini, rappelons que la dérivée de F , notée dF ou encore F' , est définie par $dF[U] = F'[U] \stackrel{\text{déf}}{=} F[U + \{*\}]$, où $* \notin U$. On définit l'intégrale normalisée dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$, $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ ou $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ d'une espèce F de la manière suivante

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

Les éléments de cet ensemble s'appellent les *primitives* ou *intégrales* de F et si cet ensemble est vide, on dit que F n'est pas *intégrable*.

Remarque 3.2.1 Notons que cette définition dépend de l'ensemble des coefficients. Par exemple, une espèce F a toujours une intégrale dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ (voir [Ja2]). Nous verrons que $2XC_3$ n'est pas intégrable dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. Cette définition d'intégrale d'une espèce est motivée par le fait que dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$, $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ ou $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ une espèce peut avoir plus d'une primitive normalisée. Par exemple, dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$, on a que $\int X^3 = \{P_4^{bic}, C_4\}$ (voir les tables dans l'appendice A.2). Notons aussi que si M est une espèce moléculaire sur n points alors chaque espèce appartenant à $\int M$ vivra sur $n + 1$ points lorsque l'on travaille dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. ■

Remarque 3.2.2 En général, l'intégrale ne préserve pas la somme:

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

Par contre, si deux espèces ordinaires F et G vivent sur des cardinalités différentes alors $\int(F + G) = \int F + \int G$. Cette observation nous servira à la section 3.3. ■

Soit m_n le nombre d'espèces moléculaires vivant sur la cardinalité n . Nous dénoterons par $M_n^{(i)}$ la i^e espèce moléculaire vivant sur n points. Il est bien connu que toute espèce T se décompose de la façon suivante:

$$\sum_{\substack{n \geq 0 \\ 1 \leq i \leq m_n}} c_n^{(i)}(T) M_n^{(i)}$$

Cette somme est appelée *décomposition moléculaire* de T . Les coefficients $c_n^{(i)}(T)$ proviendront de \mathbf{N} , \mathbf{Z} ou \mathbf{Q} respectivement selon que T est une espèce ordinaire, virtuelle ou rationnelle. Rappelons que la décomposition moléculaire d'une espèce est unique et caractérise l'espèce à isomorphisme près (voir [Ye1]). En écrivant chaque espèce moléculaire comme produit (unique à l'ordre des facteurs près) d'espèces atomiques, on obtient la décomposition dite *atomique* de l'espèce donnée. L'espèce est alors vue comme élément de $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$ (ou $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$, ou $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ selon le cas).

Définition 3.2.3 Soit $T = T_0 + T_1 + T_2 + \dots$ une espèce rationnelle où T_n est la restriction de T à la cardinalité n . On définit l'opération prendre la restriction aux cardinalités $\leq n$ de T par $[T]_{\leq n} = T_0 + T_1 + T_2 + \dots + T_n$. On pose aussi $[T]_{=n} = T_n$.

On a évidemment

$$T_n = \sum_{1 \leq i \leq m_n} c_n^{(i)}(T) M_n^{(i)}.$$

Les notations $[T]_{\leq n}$ et $[T]_{=n}$ sont étendues aux ensembles $\{T, S, \dots\}$ d'espèces comme suit:

$$[\{T, S, \dots\}]_{\leq n} = \{[T]_{\leq n}, [S]_{\leq n}, \dots\},$$

$$[\{T, S, \dots\}]_{=n} = \{[T]_{=n}, [S]_{=n}, \dots\}.$$

3.3 Les équations $Y' = 1 + Y^2$ et $Y' = 1 + 2E_2(Y)$

On sait depuis [LG2] qu'il existe, dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ une infinité non-dénombrable de solutions à chacun des deux problèmes différentiels avec conditions initiales

$$Y' = 1 + Y^2 ; Y(0) = 0 , \quad Y' = 1 + 2E_2(Y) ; Y(0) = 0.$$

Ces solutions seront analysées à la section 3.4. Cependant, la résolubilité de ces équations dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$ était demeurée ouverte. Nous montrons dans la présente section qu'elles sont en fait toutes les deux non-résolubles dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$.

La méthode des approximations successives (voir [LG2]) est utilisée pour arriver à cette fin. Nous aurons besoin d'intégrer des espèces dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. Le lemme qui suit facilite la tâche lorsque l'on désire intégrer un multiple d'une espèce moléculaire sur une petite cardinalité à partir des tables (voir l'appendice A.2). Notons qu'il découle de la définition de la dérivée que si une espèce moléculaire M vit sur n points, alors dM vivra sur $n - 1$ points.

Lemme 3.3.1 Soit $\alpha \in \mathbf{N} \setminus \{0\}$ et M une espèce moléculaire vivant sur n points. Si on veut trouver l'intégrale de αM par coefficients indéterminés dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$, il suffit de considérer les combinaisons linéaires des espèces $M_{n+1}^{(i)}$ telles que $dM_{n+1}^{(i)}$ est de la forme $\alpha_i M$, avec $\alpha_i \in \mathbf{N} \setminus \{0\}$ et $\alpha_i \leq \alpha$.

Démonstration: Supposons que $M = M_n^{(i_0)}$. On est amené à résoudre pour les b_j le système d'équations obtenu de

$$\begin{aligned} \alpha M &= d\left(\sum_{j=1}^{m_{n+1}} b_j M_{n+1}^{(j)}\right) \\ &= \sum_{j=1}^{m_{n+1}} \sum_{i=1}^{m_n} b_j c_{i,j} M_n^{(i)}, \end{aligned}$$

où $c_{i,j}$ est le coefficient de $M_n^{(i)}$ dans $dM_{n+1}^{(j)}$. Si $M_{n+1}^{(j_0)}$ est telle que $c_{i_1, j_0} \neq 0$ avec $i_1 \neq i_0$, alors en comparant les deux côtés de l'identité précédente on aura

$$0 = b_{j_0} c_{i_1, j_0} + \sum_{\substack{1 \leq j \leq m_{n+1} \\ j \neq j_0}} b_j c_{i_1, j}.$$

Or

$$\sum_{\substack{1 \leq j \leq m_{n+1} \\ j \neq j_0}} b_j c_{i_1, j} \geq 0,$$

donc $b_{j_0} c_{i_1, j_0} = 0$ et par conséquent $b_{j_0} = 0$ car $c_{i_1, j_0} \neq 0$ par hypothèse. Donc on peut supposer à priori que l'intégrale de αM est une combinaison linéaire (à coefficients dans \mathbf{N}) d'espèces moléculaire $M_{n+1}^{(j)}$ telles que $dM_{n+1}^{(j)} = c_j M$.

De même, si $M_{n+1}^{(j_0)}$ est telle que $c_{j_0} > \alpha$, l'identité précédente donne alors l'équation

$$\alpha = b_{j_0} c_{j_0} + \sum_{\substack{j \neq j_0 \\ dM_{n+1}^{(j)} = c_j M}} b_j c_j,$$

le terme de droite la somme étant ≥ 0 . On déduit de cette égalité que $b_{j_0} < 1$, donc $b_{j_0} = 0$. ■

Exemple 3.3.2 Supposons que l'on cherche toutes les primitives dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$ de $M = 2X^3$. D'après la table donnée dans l'appendice A.2, les espèces sur la cardinalité 4 qu'il suffit de considérer sont $E_2 \circ X^2$, C_4 et P_4^{bic} , on pose alors

$$2X^3 = d(aE_2 \circ X^2 + bC_4 + cP_4^{bic}) = 2aX^3 + bX^3 + cX^3.$$

Donc les coefficients doivent satisfaire $2 = 2a + b + c$ avec $a, b, c \in \mathbf{N}$. On en déduit

$$\int X^3 = \{E_2 \circ X^2, 2C_4, 2P_4^{bic}, C_4 + P_4^{bic}\}.$$

■

Remarque 3.3.3 Ce lemme n'est plus vrai si on prend les coefficients dans \mathbf{Z} . On a $X^2 = d(XE_2 - E_3)$ mais le coefficient de X^2 dans dE_3 est nul. ■

Le lemme 3.3.1 se généralise de la façon suivante. On trouvera une application de cette généralisation à la section 3.7 où il est question d'un algorithme d'intégration dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$.

Lemme 3.3.4 Soit $I \subset \{1, 2, \dots, m_n\}$, pour trouver $\int \sum_{i \in I} a_i M_n^{(i)}$ par coefficients indéterminés, il suffit de considérer les espèces sur $n+1$ points $M_{n+1}^{(j)}$ telles que $0 < c_{i,j} \leq a_i$, pour tout $i \in I$. ■

La proposition suivante, inspirée de [LG2], est une version combinatoire de la méthode d'itération de Picard. Elle nous permet de trouver toutes les amorces de solutions potentielles à une équation différentielle.

Proposition 3.3.5 (Approximations successives) Soient $Y_0 \in \mathbf{N}$ et $F(X, Y)$ une espèce à deux sortes polynomiale¹ en Y . On suppose que le problème différentiel combinatoire

$$Y' = F(X, Y) ; Y(0) = Y_0 \quad (3.4)$$

¹La polynomialité en Y n'est pas nécessaire lorsque $Y_0 = 0$ (*polynomiale en Y* veut dire qu'il existe $n \in \mathbf{N}$ tel que $F[U, V] = \emptyset$ lorsque $|V| > n$).

possède au moins une solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. Soit $[H]_{\leq n}$ la restriction d'une solution jusqu'à la cardinalité n . Alors toutes les extensions de cette solution aux cardinalités $\leq n+1$ sont obtenues en choisissant

$$H_{n+1} \in \left[\int F(X, [H]_{\leq n}) \right]_{=n+1}.$$

■

Pour trouver les amorces $A_{\langle n \rangle}$ de solutions éventuelles à l'équation (3.4) il suffit donc d'utiliser la règle:

- $A_{\langle 0 \rangle} = H_0 = Y_0$,
- $A_{\langle n+1 \rangle} = A_{\langle n \rangle} + H_{n+1}$ où $H_{n+1} \in \left[\int F(X, A_{\langle n \rangle}) \right]_{=n+1}$.

On peut déduire de cette règle une arborescence définie somme suit.

Définition 3.3.6 Étant donnée une équation différentielle du type (3.4), on appelle arborescence des amorces de solutions de l'équation, l'arborescence construite de la manière suivante:

- Les sommets sont étiquetés par les amorces de solutions $A_{\langle n \rangle}$.
- La racine reçoit l'étiquette $A_{\langle 0 \rangle}$.
- Le sommet correspondant à l'amorce $A_{\langle n \rangle}$ aura pour descendant le sommet correspondant à l'amorce $B_{\langle m \rangle}$ si et seulement si $m = n+1$ et $B_{\langle m \rangle} = A_{\langle n \rangle} + H$ avec $H \in \left[\int F(X, A_{\langle n \rangle}) \right]_{=n+1}$.
- Par économie d'écriture, on remplacera parfois le sommet correspondant à l'amorce de solution $B_{\langle m \rangle}$ par H , où $B_{\langle m \rangle}$ et H sont comme ci-dessus (il se peut que deux sommets reçoivent la même étiquette).

Le nombre n sera appelé niveau d'un sommet étiqueté $A_{\langle n \rangle}$.

Remarque 3.3.7 Si pour chaque feuille de l'arborescence des amorces de solutions, l'étiquette (disons $A_{\langle n \rangle}$) est telle que $F(X, A_{\langle n \rangle})$ n'est pas intégrable, alors l'équation 3.4 n'a pas de solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$. Cette assertion est vraie *a fortiori* dans le cas d'une arborescence qui se réduit à une chaîne. Ce sera le cas dans les propositions 3.3.11 et 3.3.12.

■

Exemple 3.3.8 L'arborescence des amorces de solutions de l'équation différentielle

$$Y'(X) = 1 + X + Y(X); Y(0) = 0$$

est représentée par la figure 3.1.

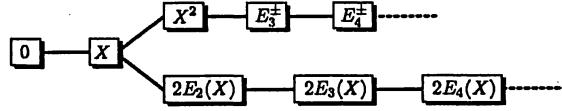


Figure 3.1: Amorces de solutions de $Y' = 1 + X + Y$, $Y(0) = 0$.

On en déduit deux solutions *canoniques*

$$Y(X) = X + X^2 + \sum_{n \geq 3} E_n^\pm(X)$$

et

$$Y(X) = X + \sum_{n \geq 2} 2E_n(X),$$

où E^\pm désigne l'espèce des ensembles orientés et E l'espèce des ensembles.

Exemple 3.3.9 Considérons l'équation

$$Y'(X) = E(X) + Y(X) ; Y(0) = 0.$$

La figure 3.2 représente l'arborescence des amorce de solutions. On utilise le symbole \emptyset dans les illustrations lorsqu'une amorce ne peut être prolongée.

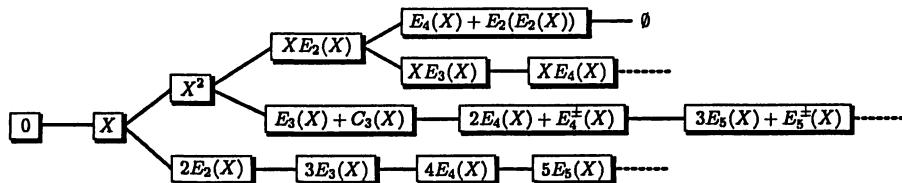


Figure 3.2: Amorces de solutions de $Y'(X) = E(X) + Y(X)$, $Y(0) = 0$.

En plus de la solution usuelle $Y(X) = XE(X)$, qui est l'espèce des ensembles pointés, on voit que cette équation admet deux autres solutions trouvées par approximations successives. Ces solutions sont

$$Y(X) = \sum_{n \geq 1} nE_n(X)$$

et

$$Y(X) = (E^\pm(X) - 1) + \sum_{n \geq 3} (n - 2)E_n(X).$$

Exemple 3.3.10 Soit \mathbf{A} l'espèce des arborescences. En dérivant l'équation fonctionnelle bien connue

$$\mathbf{A}(X) = XE(\mathbf{A}(X))$$

on trouve que cette espèce satisfait l'équation différentielle

$$Y' = E(Y)L(Y); Y(0) = 0$$

où $L(Y) = \frac{1}{1-Y}$ est l'espèce des ordres linéaires.

Remarquons que $A' = E(A)L(A)$ se démontre facilement combinatoirement en établissant un isomorphisme naturel entre A' et $E(A)L(A)$.

Nous avons utilisé Maple pour calculer l'arborescences des amorce de solutions de la figure 3.3. L'algorithme utilisé est décrit dans la section 3.7. Noter que la branche en gras correspond à l'amorce de solution de A et que les sommets en pâle contiennent le nombre de descendants d'un sommet donné. ■

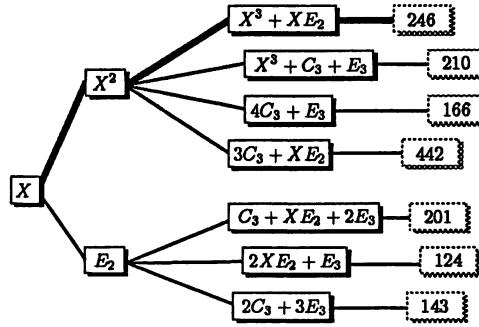


Figure 3.3: Amorce de solutions de $Y'(X) = E(Y)L(Y)$, $Y(0) = 0$.

Proposition 3.3.11 *L'équation $Y' = 1 + Y^2$; $Y(0) = 0$ n'a pas de solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$.*

Démonstration: Dans le cas qui nous occupe, $F(X, Y) = F(Y) = 1 + Y^2$. Supposons que A est une solution. La condition initiale entraîne que $A_{(0)} = 0$. La première approximation $A_{(1)}$ est donnée par

$$A_{(1)} = A_{(0)} + H_1 \text{ où } H_1 \in \left[\int F(A_{(0)}) \right]_{=1} = [\int 1]_{=1} = \{X\}.$$

Donc $A_{(1)} = X$. En poursuivant ainsi, on a (en utilisant les remarques 3.2.1 et 3.2.2),

$$\left[\int F(A_{(1)}) \right]_{=2} = [\int F(X)]_{=2} = [\int (1 + X^2)]_{=2} = \{0\},$$

donc $A_{(2)} = X + 0 = X$. Pour $A_{(3)}$, on trouve

$$\left[\int F(A_{(2)}) \right]_{=3} = [\int (1 + X^2)]_{=3} = [\int 1 + \int X^2]_{=3} = \int X^2.$$

Ici le lemme 3.3.1 entraîne que $\int X^2 = \{C_3\}$, donc $A_{(3)} = X + C_3$. Par suite, on trouve que $\left[\int F(A_{(3)}) \right]_{=4} = \{0\}$. Ainsi $A_{(4)} = A_{(3)}$. Finalement,

$$\left[\int F(A_{(4)}) \right]_{=5} = [\int (1 + (X + C_3)^2)]_{=5} = \int 2XC_3.$$

En consultant la table des dérivées des espèces moléculaires contenue dans l'appendice on constate qu'aucune n'est de la forme αXC_3 avec $\alpha \in \mathbf{N}$. Donc le lemme 3.3.1 entraîne que $\int 2XC_3 = \emptyset$. Par conséquent l'équation (3.2) n'a pas de solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$, puisque $A_{(5)}$ est la seule approximation possible de cette équation. ■



Figure 3.4: Amorces de solutions de $Y' = 1 + Y^2$, $Y(0) = 0$.

Proposition 3.3.12 *L'équation $Y' = 1 + 2E_2(Y)$; $Y(0) = 0$ n'a pas de solution dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$.*

Démonstration: Dans ce cas-ci, en calculant les approximations, on constate qu'il nous faut une primitive de $4XE_3(X)$. En utilisant le lemme 3.3.1 on conclut que $\int 4XE_3(X) = \emptyset$, l'équation différentielle n'a donc pas de solution. ■

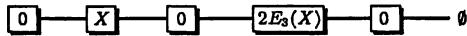


Figure 3.5: Amorces de solutions de $Y' = 1 + 2E_2(Y)$, $Y(0) = 0$.

3.4 Équations différentielles autonomes dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Comme nous l'avons souligné dans ce qui précède, l'équation différentielle

$$Y'(X) = F(Y) \quad ; \quad Y(0) = 0, \quad F(0) \neq 0 \quad (3.5)$$

possède toujours une infinité de solutions dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$. Il en est de même dans l'anneau $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. En fait nous verrons que toutes ces solutions dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ sont de la forme $A(X + W(X))$, où $A(X)$ est une solution particulière de (3.5) et $W(X)$ est une solution (dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$) de l'équation différentielle $Y'(X) = 0$ et est telle que $W(0) = 0$. Avant d'exposer la méthode systématique pour résoudre l'équation (3.5), nous nous étendrons d'abord sur l'équation $Y'(X) = 0$.

Définition 3.4.1 *On dénote par Ω l'ensemble $\{W \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]] : W' = 0\}$. De la même façon, Ω_0 désigne $\{W \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]] : W' = 0, W(0) = 0\}$*

Remarque 3.4.2 Il est facile de vérifier que Ω et Ω_0 sont des \mathbf{Q} -algèbres. De plus, si $F \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$, $F(0) = 0$ et $W \in \Omega_0$, alors $F(W) \in \Omega$. En effet, $(F(W(X)))' = F'(W)W'(X) = 0$. Enfin, si F est inversible sous la substitution, alors la transformation $W \mapsto F \circ W$ constitue une bijection de Ω_0 dans Ω_0 . ■

Le logiciel de calcul symbolique *Maple* nous a donné les solutions suivantes de l'équation $Y'(X) = 0$; $Y_0 = c_1$. Ces résultats ont été obtenus en résolvant les équations

$$d\left(\sum_{i=1}^{m_n} r_{n,i} M_n^{(i)}\right) = 0 \text{ pour } n = 1, \dots, 5, \text{ avec } r_{n,i} \in \mathbf{Q}.$$

Notons que $Y'(X) = 0 \Leftrightarrow d([Y(X)]_{=n}) = 0$, pour tout $n \in \mathbf{N}$. Soit W_i la restriction à la cardinalité i de la solution trouvée avec *Maple*. Après avoir renommé les paramètres $r_{n,i}$,

on obtient une base de Ω restreinte aux cardinalités ≤ 5 :

$$\begin{aligned}
W_0 &= c_1 \\
W_1 &= 0 \\
W_2 &= c_{2,1}(X^2 - 2E_2(X)) \\
W_3 &= c_{3,1}(C_3(X) - XE_2(X) + E_3(X)) + c_{3,2}(X^3 - 3C_3(X)) \\
W_4 &= c_{4,1}(E_4(X) + E_2(E_2(X)) - XE_3(X)) + c_{4,2}(E_2(X)^2 - 2E_2(X^2)) \\
&\quad + c_{4,3}(2E_4(X) + E_4^\pm(X) - 2XE_3(X) - XC_3(X) + X^2E_2(X)) \\
&\quad + c_{4,4}(-2E_4(X) + 2XE_3(X) + P_4^{bic}(X) - X^2E_2(X)) \\
&\quad + c_{4,5}(-2E_4(X) + 2XE_3(X) + C_4(X) - X^2E_2(X)) \\
&\quad + c_{4,6}(-4E_4(X) + 4XE_3(X) + E_2(X^2) - 2X^2E_2(X)) \\
&\quad + c_{4,7}(X^4 - 4C_4(X)) \\
W_5 &= c_{5,1}(-P_5(X) + E_5^\pm(X) + \frac{X^2C_3}{Z_2}(X) - XE_4^\pm(X)) \\
&\quad + c_{5,2}(-E_5(X) + XE_4(X) - 2E_5^\pm(X) + 2XE_4^\pm(X) \\
&\quad \quad - E_2(X)E_3(X) - 2E_2(X)C_3(X) + XE_2(X)^2) \\
&\quad + c_{5,3}(2E_5(X) - E_5^\pm(X) + XE_4^\pm(X) \\
&\quad \quad - E_2(X)C_3(X) + X^2E_3(X) - 2XE_4(X)) \\
&\quad + c_{5,4}(-2C_5(X) - P_5(X) + XE_2(X^2)) \\
&\quad + c_{5,5}(2E_5^\pm(X) - C_5(X) + X^2C_3(X) - 2XE_4^\pm(X)) \\
&\quad + c_{5,6}(-3E_2(X)C_3(X) - 3E_5^\pm(X) - C_5(X) + X^3E_2(X) + 3XE_4^\pm(X)) \\
&\quad + c_{5,7}(XC_4(X) - \frac{P_5}{Z_2}(X) - C_5(X)) + c_{5,8}(X^5 - 5C_5(X))
\end{aligned}$$

Une espèce $F \in \mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ est toujours intégrable. En effet, l'intégrale de Joyal (voir [Ja2]) donne une primitive virtuelle à toute espèce virtuelle F . Cette intégrale est définie par

$$\int_J F = \sum_{n \geq 0} (-1)^n E_{n+1} F^{(n)}. \quad (3.6)$$

La formule (3.6) est évidemment aussi valable pour $F \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Comme le montre la proposition suivante, les solutions à l'équation $Y' = 0$ ont une importance fondamentale dans la résolution générale d'équations différentielles autonomes du type (3.5).

Proposition 3.4.3 *Soit $F \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ telle que $F(0) \neq 0$. La solution générale de*

$$Y' = F(Y) ; Y(0) = 0$$

dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ est de la forme $Y(X) = A(X + W(X))$ où $A(X)$ est une solution particulière quelconque de l'équation et $W \in \Omega_0$.

Démonstration: Supposons que $A = A(X)$ est une solution et soit $B = B(X)$ une autre solution. On a $A' = F(A)$ et $B' = F(B)$. De plus $F(0) \neq 0$, donc F possède un inverse multiplicatif dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ et

$$\frac{A'}{F(A)} = 1 = \frac{B'}{F(B)}.$$

Posons $\Psi(X) = \int_J \frac{1}{F(X)}$, alors $\Psi'(A) = \frac{1}{F(A)}$. Donc

$$1 = \frac{A'}{F(A)} = A'\Psi'(A) = (\Psi(A))',$$

d'où

$$\Psi(A(X)) = X + V(X) \text{ avec } V \in \Omega_0. \quad (3.7)$$

De la même façon

$$\Psi(B(X)) = X + V^*(X) \text{ avec } V^* \in \Omega_0. \quad (3.8)$$

Par ailleurs, on a $V(0) = 0$ donc $X + V(X)$ possède un inverse substitutionnel. Une façon de calculer cet inverse est d'utiliser l'opérateur Δ introduit par Joyal (voir [Ja3]) ainsi que G. Labelle (voir [LG1, LG3]). L'inverse d'une espèce $\Theta = X + \dots$ est donné par

$$\Theta^{(-1)} = X - \Delta_\Theta X + \Delta_\Theta^2 X - \Delta_\Theta^3 X + \dots + (-1)^n \Delta_\Theta^n X + \dots \quad (3.9)$$

où l'opérateur $\Delta_\Theta: \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]] \rightarrow \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ est défini par

$$\Delta_\Theta G = G \circ \Theta - G. \quad (3.10)$$

L'inverse de $X + V(X)$ est trouvé en posant $\Theta = X + V(X)$ dans l'équation (3.9).

Soit $Z := (X + V(X))^{(-1)} \circ (X + V^*(X))$, un calcul montre que Z est de la forme $X + W(X)$ où $W \in \Omega_0$.

En posant $X := Z$ dans (3.7), on trouve

$$\begin{aligned} \Psi(A(Z)) &= \Psi(A(X + W(X))) \\ &= (X + V(X))|_{X:=Z} \\ &= (X + V(X))|_{X:=(X+V)^{(-1)} \circ (X+V^*)} \\ &= X + V^* \\ &= \Psi(B(X)). \end{aligned}$$

Donc il existe $W \in \Omega_0$ tel que

$$\Psi(A(X + W(X))) = \Psi(B(X)). \quad (3.11)$$

Puisque $\Psi(X) = \frac{1}{F(0)}X + \dots$ et que $F(0) \neq 0$, on a que l'inverse $\Psi^{(-1)}$ de Ψ sous la substitution existe. Dans ce cas-ci, l'inverse est trouvé en posant $\Theta(X) = F(0)\Psi(X)$ dans (3.9). On obtient alors $\Psi^{(-1)}(X) = \Theta^{(-1)}(F(0)X)$.

En composant à gauche par $\Psi^{\langle -1 \rangle}$ les deux membres de (3.11), on obtient $A(X + W(X)) = B(X)$. Donc B est de la forme voulue.

Inversement, pour tout $W \in \Omega_0$, la règle de dérivation en chaîne montre que $A(X + W)$ est une solution de $Y' = F(Y)$, $Y(0) = 0$. ■

Exemple 3.4.4 Soit $E^* = E - 1$, l'espèce des ensembles non-vides. On définit [LG3] l'espèce des *pseudo-singletons* par

$$\begin{aligned}\hat{X} &= \log(1 + E^*) \\ &= E^* - \frac{1}{2}(E^*)^2 + \frac{1}{3}(E^*)^3 + \dots\end{aligned}\tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}&= X + (E_2 - \frac{1}{2}X^2) + (E_3 - XE_2 + \frac{1}{3}X^3) \\ &\quad + (E_4 - \frac{1}{2}E_2^2 - XE_3 + X^2E_2 - \frac{1}{4}X^4) + \dots\end{aligned}\tag{3.13}$$

On a donc $e^{\hat{X}} = e^{\log(1+E^*)} = 1 + E^* = E(X)$. Or $A = e^X - 1 = \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} X^k$ et $B = E^*(X)$ sont deux solutions dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ de l'équation différentielle $Y' = Y + 1$, $Y(0) = 0$. Donc la proposition (3.4.3) nous permet de conclure qu'il existe $W \in \Omega_0$ tel que $E(X) = e^{X+W}$. En particulier $\hat{X} = X + W$ où $W \in \Omega_0$. C'est ce qu'on constate en examinant le développement de \hat{X} ci-haut. Pour chaque $n \geq 2$, on a $d[\hat{X}]_{=n} = 0$. Le lecteur averti aura reconnu les fonctions symétriques $\frac{1}{n}p_n$ dans le développement de \hat{X} donné en 3.12. En effet, soit h_i la i^e fonction symétrique homogène. Si on remplace chaque E_i par h_i ($i \geq 1$) dans $[\hat{X}]_{=n}$, on obtient $\frac{1}{n}p_n$ exprimée dans la base des fonctions homogènes. Nous utiliserons, à la section 3.5, les fonctions symétriques pour trouver une base de $\ker d$ dans certains contextes. ■

La proposition 3.4.3 nous permet d'énoncer un théorème nous donnant une méthode systématique pour trouver toutes les solutions à l'équation (3.5).

Théorème 3.4.5 Soit $F \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ telle que $F(0) \neq 0$. Toutes les solutions de l'équation

$$Y' = F(Y) ; Y(0) = 0\tag{3.14}$$

sont trouvées en appliquant la méthode suivante:

- On calcule $\frac{1}{F(Y)}$. Soit $\Phi_k(Y) \stackrel{\text{déf}}{=} \left[\frac{1}{F(Y)} \right]_{=k}$, alors

$$\frac{1}{F(Y)} = \sum_{k \geq 0} \Phi_k(Y).$$

- Par suite, $1 = \frac{Y'}{F(Y)} = \sum_{k \geq 0} \Phi_k(Y)Y'$. Soit $\Psi_{k+1}(X)$ telle que $\Psi'_{k+1}(X) = \Phi_k(X)$ trouvée avec \int_J ou une autre intégrale normalisée. Posons

$$\Psi(Y) = \sum_{k \geq 0} \Psi_{k+1}(Y).$$

- Finalement, $\{\Psi^{(-1)}(X + W) : W \in \Omega_0\}$ est l'ensemble des solutions de l'équation (3.5).

Démonstration: La condition $F(0) \neq 0$ entraîne que l'inverse multiplicatif de F existe. On a donc successivement

$$\begin{aligned} Y' = F(Y) &\Leftrightarrow \frac{Y'}{F(Y)} = 1 \\ &\Leftrightarrow (\Psi(Y))' = 1 \\ &\Leftrightarrow \Psi(Y) = X + W \text{ (avec } W \in \Omega_0\text{).} \end{aligned}$$

D'autre part,

$$\Psi(Y) = \frac{1}{F(0)}Y + (\text{termes d'ordres supérieurs});$$

par conséquent l'inverse substitutionnel $\Psi^{(-1)}$ existe et on obtient

$$Y = \Psi^{(-1)}(X + W).$$

Remarque 3.4.6 Les solutions de l'équation (3.5) ont donc pour paramètres les solutions de $Y' = 0$ avec $Y(0) = 0$. C'est ce que les exemples qui suivent illustreront. Notons que les solutions de $Y' = 0$ ont elles-mêmes comme paramètres les $c_{n,i}$ donnés ci-dessus.

Corollaire 3.4.7 Dans l'anneau $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$, la solution générale de l'équation différentielle $Y' = 1 + Y^2$, $Y(0) = 0$ est donnée par

$$\begin{aligned} Y(X) &= \frac{\tan X + V}{1 - V \tan X} \\ &= X + V_2 + \frac{1}{3}X^3 + V_3 + V_2X^2 + V_4 \\ &\quad + \frac{2}{15}X^5 + V_3X^2 + V_2^2X + V_5 \\ &\quad + \frac{2}{3}V_2X^4 + V_4X^2 + 2V_2V_3X + V_6 \\ &\quad + \frac{17}{315}X^7 + \frac{2}{3}V_3X^4 + \frac{4}{3}V_2^2X^3 + V_5X^2 + V_3^2X + 2V_2V_4X + V_7 \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

où $V = V_2 + V_3 + \dots$ parcourt Ω_0 .

Démonstration: Soit $F(Y) = 1 + Y^2$. On a $F(0) = 1 \neq 0$. Le théorème (3.4.5) s'applique donc à l'équation (3.2). Ici on trouve

$$\frac{1}{F(Y)} = \frac{1}{(1 + Y^2)} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k Y^{2k}.$$

Donc $\Phi_{2k}(Y) = (-1)^k Y^{2k}$ et $\Phi_{2k+1}(Y) = 0$. On peut donc choisir les primitives

$$\Psi_{2k+1}(Y) = (-1)^k \frac{Y^{2k+1}}{2k+1}, k \geq 0.$$

On trouve $X + W = \Psi(Y) = \arctan(Y)$ et on obtient finalement $Y = \tan(X + W)$ avec $W \in \Omega_0$ comme solution. En effectuant la substitution $\tan W := V$ dans l'identité

$$\tan(X + W) = \frac{\tan X + \tan W}{1 - \tan W \tan X} \quad (3.15)$$

on obtient une forme plus pratique pour les solutions. Puisque la \mathbf{Q} -espèce $\tan X$ est inversible sous la substitution, la remarque (3.4.2) s'applique et l'application $W \mapsto V = \tan W$ est ici une bijection de Ω_0 sur lui-même.

Si $V_k = [V]_{=k}$ alors en développant l'équation (3.15) (en ayant pris soin d'effectuer la substitution $\tan W := V$) on trouve

$$Y = X + V_2 + V_3 + \frac{1}{3}X^3 + V_4 + V_2X^2 + \frac{2}{15}X^5 + V_3X^2 + V_2^2X + V_5 + \dots$$

■

Remarque 3.4.8 Un calcul montre que la condition nécessaire et suffisante sous laquelle une solution $T(X) = \tan(X + W)$, $W \in \Omega_0$, satisfait la formule d'addition usuelle de la tangente

$$T(X_1 + X_2) = \frac{T(X_1) + T(X_2)}{1 - T(X_1)T(X_2)},$$

est que $W(X_1 + X_2) = W(X_1) + W(X_2)$. Il est facile de voir que cette condition est satisfaite par une infinité de $W \in \Omega_0$.

Corollaire 3.4.9 Dans l'anneau $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$, la solution générale de l'équation différentielle $Y' = 1 + 2E_2(X)$, $Y(0) = 0$ est donnée par $Y(X) = \Psi^{(-1)}(X + V)$ où V parcourt Ω_0 et

$$\Psi(Y) = \frac{1}{\sqrt{1 + 2E_2(Y) - Y^2}} \arctan\left(\frac{Y}{\sqrt{1 + 2E_2(Y) - Y^2}}\right).$$

Démonstration: Posons $F(Y) = 1 + 2E_2(Y)$. Ici aussi on a $F(0) \neq 0$. Donc le théorème 3.4.5 s'applique à l'équation (3.3). De plus

$$\frac{1}{F(Y)} = \frac{1}{1 + 2E_2(Y)} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k 2^k E_2^k(Y).$$

Conséquemment

$$1 = \frac{Y'}{F(Y)} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k 2^k E_2^k(Y) Y', \quad (3.16)$$

il faut donc intégrer $E_2^k(Y)Y'$. Il s'avère qu'il est difficile d'obtenir une formule élégante pour une primitive cette espèce avec \int_J . Nous allons plutôt utiliser la formule d'intégration suivante obtenue en appliquant de façon heuristique l'intégration par parties¹:

$$\int_* F dY = YF - \int_* Y \frac{dF}{dY} dY.$$

En utilisant ce procédé avec $F = Y^{2i} E_2^{k-i}(Y)$, on trouve

$$\int_* Y^{2i} E_2^{k-i} dY = Y^{2i+1} E_2^{k-i} - \int_* (2iY^{2i} E_2^{k-i} + (k-i)Y^{2i+2} E_2^{k-i-1}) dY.$$

Ce qui permet d'isoler le membre de gauche comme suit:

$$\int_* Y^{2i} E_2^{k-i} dY = \frac{1}{2i+1} Y^{2i+1} E_2^{k-i} - \frac{k-i}{2i+1} \int_* Y^{2i+2} E_2^{k-i-1} dY.$$

D'où, posant successivement $i = 0, 1, 2, 3, \dots$, on conclut que

$$\begin{aligned} \int_* E_2^k dY &= YE_2^k - \frac{k}{3} Y^3 E_2^{k-1} + \frac{k(k-1)}{1 \cdot 3 \cdot 5} Y^5 E_2^{k-2} \\ &\quad - \frac{k(k-1)(k-2)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 7} Y^7 E_2^{k-3} + \dots \\ &= \sum_{n \geq 0} \frac{(-1)^n Y^{2n+1}}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)} \frac{d^n T^k}{dT^n} |_{T:=E_2(Y)}. \end{aligned}$$

Étant donné que $E_2^k = T^k |_{T:=E_2}$, il est permis de se demander si la définition suivante de primitive est valable:

$$\int_* H(E_2(Y)) dY = \sum_{n \geq 0} \frac{(-1)^n Y^{2n+1}}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)} \frac{d^n H(T)}{dT^n} |_{T:=E_2(Y)}. \quad (3.17)$$

C'est effectivement le cas, il suffit de dériver le membre de droite pour le constater. Utilisons donc (3.17) avec $H(T) = \frac{1}{1+2T}$. On trouve, par induction

$$\frac{d^n H(T)}{dT^n} = \frac{(-1)^n 2^n n!}{(1+2T)^{n+1}}. \quad (3.18)$$

Reportant (3.18) dans (3.17) et intégrant par rapport à X , on obtient

$$\int_* \frac{Y'}{1+2E_2(Y)} dX = \sum_{n \geq 0} \frac{2^n n!}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)} \frac{Y(X)^{2n+1}}{(1+2E_2(Y(X)))^{n+1}}. \quad (3.19)$$

¹ L'astérisque sous le signe d'intégration sert à distinguer cette primitive de celle de Joyal.

Par suite, l'équation (3.16) nous permet de conclure que

$$\begin{aligned} X + W &= \int_* \frac{Y'}{1 + 2E_2(Y)} dX \\ &= \sum_{n \geq 0} \frac{2^n n!}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)} \frac{Y(X)^{2n+1}}{(1 + 2E_2(Y(X)))^{n+1}}, \end{aligned}$$

avec $W \in \Omega_0$. Par ailleurs, si on pose

$$\Lambda(T) = \sum_{n \geq 0} \frac{2^n n!}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n+1)} T^{n+1},$$

alors on a

$$X + W = \frac{1}{Y} \Lambda\left(\frac{Y^2}{1 + 2E_2(Y)}\right).$$

Maintenant posons

$$U(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Lambda(x^2)}{x}.$$

On vérifie que cette fonction satisfait l'équation différentielle analytique

$$(1 - x^2)U'(x) - xU(x) - 1 = 0, \quad U(0) = 0.$$

En résolvant l'équation homogène $(1 - x^2)U'(x) - xU(x) = 0$, on trouve comme solution: $U_0(x) = C \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$. Ensuite, on obtient $U(x) = \frac{\arcsin x}{\sqrt{1-x^2}}$ en faisant varier le paramètre C (posant $C = C(x)$). Finalement, $\Lambda(x) = \frac{\sqrt{x} \arcsin(\sqrt{x})}{\sqrt{1-x}}$.

Par suite,

$$\begin{aligned} \Psi(Y) &= \frac{1}{Y} \Lambda\left(\frac{Y^2}{1 + 2E_2(Y)}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + 2E_2(Y) - Y^2}} \arcsin\left(\frac{Y}{\sqrt{1 + 2E_2(Y)}}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 + 2E_2(Y) - Y^2}} \arctan\left(\frac{Y}{\sqrt{1 + 2E_2(Y) - Y^2}}\right). \end{aligned}$$

On conclut. ■

Considérons maintenant l'équation différentielle

$$Y' = F(Y, t) \stackrel{\text{def}}{=} 1 + 2tE_2(Y) + (1-t)Y^2 \quad ; \quad Y(0) = 0 \quad \text{avec } t \in \mathbf{Q}. \quad (3.20)$$

L'espèce $F(Y, t)$ généralise en quelque sorte les espèces $1 + Y^2$ et $1 + 2E_2(Y)$ puisque $F(Y, 0) = 1 + Y^2$ et $F(Y, 1) = 1 + 2E_2(Y)$. Par ailleurs, $F(0, t) = 1$, donc le théorème (3.4.5) s'applique. On constate que

$$\Psi_t(Y) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{1 + t(2E_2(Y) - Y^2)}} \arctan\left(\frac{Y}{\sqrt{1 + t(2E_2(Y) - Y^2)}}\right)$$

est une primitive de $Y'/F(Y, t)$. Donc la solution générale de l'équation (3.20) est donnée par $\Psi_t^{(-1)}(X + W)$ où W parcourt Ω_0 . Il suffira de calculer $(\Psi_t(Y))'$ en remarquant que $(1/\sqrt{1+t(2E_2(Y)-Y^2)})'=0$ pour voir que $\Psi_t(Y)$ est effectivement une primitive de $Y'/F(Y, t)$.

Il est facile de vérifier que les méthodes développées plus haut peuvent être adaptées au cas des équations différentielles à variables “séparables” de la forme $Y'(X) = G(X)F(Y)$, $Y(0) = 0$, $F(0) \neq 0$.

3.5 Sous-modules différentiels de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

L'anneau des espèces rationnelles est muni d'une structure de module sur \mathbf{Q} de façon naturelle. Certains sous-modules de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ sont stables sous l'opération de dérivation. Tout sous-module \mathbf{V} de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ contient quant à lui un sous-module $\Omega(\mathbf{V})$ qui est le noyau de l'opérateur dérivée. Notons \mathbf{V}_n la composante de degré homogène n de \mathbf{V} , c.-à-d. $\mathbf{V}_n = \{F \in \mathbf{V} : F \text{ vit sur } n \text{ points}\}$. Nous calculerons ici la dimension du noyau de la dérivée sur ces sous-modules \mathbf{V}_n . Nous verrons que, dans certains cas, les fonctions symétriques interviennent dans le calcul d'une base pour $\Omega(\mathbf{V})$. On trouvera dans [Ma] toute la théorie dont nous avons besoin concernant les fonctions symétriques. On y trouvera une définition du module des fonctions symétriques Λ et des fonctions symétriques h_λ et p_λ que nous utilisons ici. L'intégrale de Joyal et des variantes de celle-ci nous serviront aussi dans nos calculs. Rappelons que nous notons d l'opérateur dérivée.

Proposition 3.5.1 Soit \mathbf{V} un sous-module de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. Si $d : \mathbf{V}_n \rightarrow \mathbf{V}_{n-1}$ est surjectif alors $\dim \Omega(\mathbf{V}_n) = \dim \mathbf{V}_n - \dim \mathbf{V}_{n-1}$.

Démonstration: On a $\dim \mathbf{V}_n = \dim \ker d + \dim \mathbf{V}_{n-1}$ et $\ker d = \Omega(\mathbf{V}_n)$. ■

Remarque 3.5.2 Pour montrer que d est surjectif, il suffit de montrer que tout élément de \mathbf{V}_{n-1} possède une primitive dans \mathbf{V} .

Exemple 3.5.3 Soit c_n le nombre de classes de conjugaison de sous-groupes dans S_n . On a évidemment $\dim \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]_n = c_n$. De plus, toute espèce dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ est intégrable, donc $\dim \Omega(\mathcal{A})_n = c_n - c_{n-1}$.

Exemple 3.5.4 Soit $\mathbf{V} = \mathbf{Q}[[E_1, E_2, E_3, \dots]]_n$ où E_i est l'espèce des ensembles de cardinalité i . Si λ est un partage, notons $m_i(\lambda)$ le nombre de parts de cardinalité i dans λ . Dénotons par E^λ le monôme $E_1^{m_1(\lambda)} E_2^{m_2(\lambda)} E_3^{m_3(\lambda)} \dots$. Il est clair que l'ensemble $\{E^\lambda : |\lambda| = n\}$ est une base de \mathbf{V} . Donc

$$\dim \mathbf{Q}[[E_1, E_2, E_3, \dots]]_n = p(n)$$

où $p(n)$ est le nombre de partages de l'entier n . De plus, il est clair que si $F \in \mathbf{V}_{n-1}$ alors $\int_F F \in \mathbf{V}_n$. Ainsi $\dim \Omega(\mathbf{V}_n) = p(n) - p(n-1)$. On peut aussi montrer que F est intégrable en utilisant l'isomorphisme de modules qui consiste à associer à E^λ la fonction symétrique homogène $h_\lambda \in \Lambda_n$. On vérifie facilement que d s'exprime dans Λ_n sous la forme de l'opérateur

différentiel $\sum_{r \geq 0} h_r \frac{\partial}{\partial h_{r+1}}$ appliqué à un élément f de Λ_n exprimé avec la base $\{h_\lambda : |\lambda| = n\}$. On montre (cf. [Ma]) que si on exprime f dans la base des p_λ , alors l'opérateur devient $\frac{\partial}{\partial p_1}$. Ce dernier opérateur est surjectif car si

$$g = \sum_{s \geq 1} (-1)^{s-1} \frac{p_1^s}{s!} \frac{\partial^{s-1} f}{\partial p_1^{s-1}},$$

alors $\frac{\partial g}{\partial p_1} = f$. Remarquons que g est une variante dans l'anneau Λ_n de l'intégrale de Joyal $\int_J f$.

On trouve une base de $\ker d$ en utilisant l'application $\psi : E^\lambda \mapsto h_\lambda$. La dérivée qui correspond à d dans Λ_n est $\frac{\partial}{\partial p_1}$ dont une base du noyau est $B_n = \{p_\lambda : |\lambda| = n \text{ et } m_1(\lambda) = 0\}$. Il est facile de voir que la cardinalité de cet ensemble est effectivement $p(n) - p(n-1)$. Une base de $\Omega(Q[[E_1, E_2, \dots]])_n$ est donnée en prenant l'image inverse par ψ des éléments de B exprimés en terme des h_λ . Par exemple, $B_4 = \{p_4, p_{2^2}\}$. On a $p_4 = 4h_4 - 4h_{31} - 2h_{2^2} + 4h_{21^2} - h_{1^4}$ et $p_{2^2} = 4h_{2^2} - 4h_{21^2} + h_{1^4}$. En prenant l'inverse de ψ on trouve

$$\{4E_4 - 4E_3E_1 - 2E_2^2 + 4E_2E_1^2 - E_1^4, 4E_2^2 - 4E_2E_1^2 + E_1^4\}$$

comme base de $\Omega(Q[[E_1, E_2, \dots]])_4$.

Notons que l'application ψ est naturelle en ce sens que si on exprime h_r en terme des p_λ , on retrouve $Z_{E_r}(p_1, p_2, \dots)$. De plus,

$$Z_{F'}(p_1, p_2, \dots) = \frac{\partial}{\partial p_1} Z_F(p_1, p_2, \dots).$$

■

Exemple 3.5.5 Soit $V = Q[[C_1, C_2, C_3, \dots]]$ où C_i est l'espèce des cycles sur i points. Ici aussi $\dim V_n = p(n)$ car $\{C^\lambda : |\lambda| = n\}$ est une base de V_n . La dérivée correspond à l'opérateur $\sum_{r \geq 0} C_1^r \frac{\partial}{\partial C_{r+1}}$. Cet opérateur est surjectif. En effet, si $F \in V_{n-1}$ alors $F = d \sum_{s \geq 0} (-1)^s \frac{X^{s+1}}{(s+1)!} d^s F$. Ainsi $\dim \Omega(Q[[C_1, C_2, C_3, \dots]])_n = p(n) - p(n-1)$.

Ici aussi, on peut passer par les fonctions symétriques pour trouver une base du sous-module $\Omega(Q[[C_1, C_2, C_3, \dots]])_n$. Soit

$$\zeta_k \stackrel{\text{déf}}{=} Z_{C_k}(p_1, p_2, \dots) = \sum_{d|k} \frac{\varphi(d)}{k} p_d^{k/d} \in \Lambda.$$

Il est facile de montrer que $\{\zeta_\lambda : |\lambda| = n\}$ est une base de Λ_n (où $\zeta_\lambda = \prod_i \zeta_{\lambda_i}$). Le noyau de $\frac{\partial}{\partial p_1}$ sur Λ_n ayant pour base $\{p_\lambda : |\lambda| = n, m_1(\lambda) = 0\}$, on trouve une base de $\Omega(Q[[C_1, C_2, C_3, \dots]])_n$ en calculant les inverses pour l'application $C_k \mapsto \zeta_k$ des éléments de cet ensemble. On calcule récursivement: $p_1 = \zeta_1$, $p_2 = 2\zeta_2 - \zeta_1^2$, $p_3 = \frac{3}{2}\zeta_3 - \frac{1}{2}\zeta_1^3$, $p_4 = 2\zeta_4 - 2\zeta_2^2 + 2\zeta_2\zeta_1^2 - \zeta_1^4$. On trouve donc

$$\{(2C_2 - C_1^2)^2, 2C_4 - 2C_2^2 + 2C_2C_1^2 - C_1^4\}$$

comme base de $\Omega(Q[[C_1, C_2, C_3, \dots]])_4$.

■

Les exemples précédents suggèrent une méthode pour trouver une base canonique du noyau de d restreint à certains sous-modules de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. Elle consiste à “passer” aux fonctions symétriques via Z et calculer le noyau de $\frac{\partial}{\partial p_1}$. Malheureusement, on ne peut pas toujours utiliser $Z(p_1, p_2, \dots)$ comme le montre l'exemple qui suit.

Exemple 3.5.6 Cette fois-ci, on considère

$$\mathbf{V} = \mathbf{Q}[[X, E_2(X), E_2(X^2), E_2(X^3), \dots]].$$

Notons que $X = E_1$. Ce module est stable sous d car $dE_2(X^k) = X^{2k-1}$. De plus, on a que $Z_{E_2(X^k)}(p_1, p_2, \dots) = \frac{1}{2}(p_1^{2k} + p_2^k)$. Or il est clair que

$$E_2(X^k) \mapsto \frac{1}{2}(p_1^{2k} + p_2^k)$$

n'est pas inversible. Par contre, l'application

$$E_2(X^k) \mapsto \frac{1}{2}(p_1^{2k} + p_{2k})$$

est inversible sur le sous-module M de Λ engendré par $p_1, p_2, p_4, p_6, \dots$. L'inverse de p_{2k} est $2E_2(X^k) - X^{2k}$.

On voit facilement que $\dim \Omega(\mathbf{V}_{2k}) = \dim \Omega(\mathbf{V}_{2k+1})$. On peut donc restreindre notre calcul de dimensions aux puissances paires. Le noyau de $\frac{\partial}{\partial p_1}$ sur M_{2k} est de dimension $p(k)$. En effet, il est clair que l'ensemble

$$\{p_\lambda : |\lambda| = 2k, \forall i \text{ } \lambda_i \text{ est pair}\}$$

est une base de ce noyau sur M_{2k} . Or le nombre de partages de $2k$ en parts de longueur paire est $p(k)$. Il s'en suit que la dimension du noyau de la restriction de $\frac{\partial}{\partial p_1}$ à M_{2k} est $p(k)$.

Par ailleurs, tout monôme de \mathbf{V}_{2k} est de la forme

$$X^{2i} \prod_j E_2(X^j)^{m_j} \text{ où } m_j \in \mathbf{N},$$

donc $\dim \mathbf{V}_{2k} = \sum_{i=0}^k p(i)$. On en tire $\dim \mathbf{V}_{2k} - \dim \mathbf{V}_{2k-1} = p(k)$. Donc, d'après notre calcul ci-dessus, d est surjectif. En d'autres mots, les éléments de \mathbf{V} sont intégrables. Si $F \in \mathbf{V}$, il suffit en effet de prendre l'intégrale $\sum_{s \geq 0} \frac{(-1)^s X^{s+1}}{(s+1)!} d^s F$ rencontrée plus haut. ■

L'exemple précédent nous amène à formuler la proposition suivante qui nous donne une condition pour calculer une base du noyau de d sur un sous-module de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ à l'aide des fonctions symétriques.

Proposition 3.5.7 Soient \mathbf{V} et M des sous-modules de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ et Λ respectivement et supposons que $\Theta: \mathbf{V} \rightarrow M$ soit isomorphisme qui préserve le degré. Si que le diagramme suivant commute,

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{V}_n & \xrightarrow{\Theta} & M_n \\ d \downarrow & & \downarrow \frac{\partial}{\partial p_1} \\ \mathbf{V}_{n-1} & \xrightarrow{\Theta} & M_{n-1} \end{array}$$

alors $\dim \ker \frac{\partial}{\partial p_1}|_{M_n} = \dim \Omega(\mathbf{V}_n)$. De plus, une base de $\Omega(\mathbf{V}_n)$ est donnée par l'image inverse par Θ d'une base de $\ker \frac{\partial}{\partial p_1}|_{M_n}$. ■

Exemple 3.5.8 Notons $p_{\geq 3}(n)$ le nombre de partages d'un entier n en parts ≥ 3 . Considérons le module $\mathbf{V} = \mathbb{Q}[[E_1, E_2, E_3, C_3, E_4, C_4, \dots]]$. Tout monôme de ce module s'écrit sous la forme

$$E^\lambda C^\mu = E_1^{m_1(\lambda)} E_2^{m_2(\lambda)} \cdots C_1^{m_1(\mu)} C_2^{m_2(\mu)} \cdots,$$

où $\mu = 0$ ou $\mu_i \geq 3$ pour tout i et $|\lambda| + |\mu| = n$. On en déduit que

$$\dim \mathbf{V} = p(n) + \sum_{k=3}^n p_{\geq 3}(k)p(n-k),$$

Il est facile de montrer que

$$\sum_{n \geq 0} (\dim \mathbf{V}_n) q^n = \prod_{i \geq 1} \frac{1}{1 - q^i} \prod_{j \geq 3} \frac{1}{1 - q^j}.$$

L'opérateur d étant de toute évidence surjectif dans ce module (il suffit d'utiliser l'intégrale de Joyal), on en conclut que $\dim \Omega(\mathbf{V}_n) = \dim \mathbf{V}_n - \dim \mathbf{V}_{n-1}$.

Nous utiliserons ici une généralisation naturelle de la proposition 3.5.7 pour trouver une base du noyau de d . Si $p_\lambda \otimes p_\mu \in \Lambda \otimes \Lambda$, soit $|\lambda| + |\mu|$ son degré. Dénons par $(\Lambda \otimes \Lambda)_n$ le sous-module de $\Lambda \otimes \Lambda$ engendré par les éléments de degré n . Considérons le module \mathbf{V}_1 obtenu en considérant formellement $C_1 \neq E_1$ et $C_2 \neq E_2$ avec $dC_1 = 1$ et $dC_2 = C_1$. L'application $\varphi: (\mathbf{V}_1)_n \rightarrow (\Lambda \otimes \Lambda)_n$ définie par $E^\lambda C^\rho \mapsto h_\lambda \otimes \zeta_\rho$ est un isomorphisme de module (voir l'exemple 3.5.5 pour une définition de ζ_ρ). Ici, il se peut que ρ ait des parts égales à 1 ou 2. Considérons l'opérateur différentiel $\varsigma_n = \left(\left(\frac{\partial}{\partial p_1} \right) \otimes 1 + 1 \otimes \left(\frac{\partial}{\partial p_1} \right) \right) |_{(\Lambda \otimes \Lambda)_n}$. Il se trouve que le diagramme suivant est commutatif:

$$\begin{array}{ccc} (\mathbf{V}_1)_n & \xrightarrow{\varphi} & (\Lambda \otimes \Lambda)_n \\ d \downarrow & & \downarrow \varsigma_n \\ (\mathbf{V}_1)_{n-1} & \xrightarrow{\varphi} & (\Lambda \otimes \Lambda)_{n-1} \end{array} .$$

On trouvera une base de $\ker d$ sur $(\mathbf{V}_1)_n$ en prenant l'image inverse par φ d'une base B de $\ker \varsigma_n$. Pour récupérer une base de $\ker d$ sur \mathbf{V}_n , il faut effectuer le quotient de B par le sous-module engendré par

$$\{p_\lambda \otimes p_i p_\mu - p_i p_\lambda \otimes p_\mu : i = 1, 2; \forall \lambda, \forall \mu\}.$$

Puisque la relation qui relie les p_λ et les h_λ (resp. les ζ_λ) est inversible, ce quotient revient à poser $E_1 = C_1$ et $E_2 = C_2$ dans \mathbf{V}_1 . Le choix de B se fait de façon canonique en choisissant les $p_\lambda \otimes p_\mu$ tels que ni λ , ni μ ne contiennent de part égale à 1. Ensuite, en utilisant le quotient décrit ci-dessus (e.g. en mettant les p_2 à gauche dans les tenseurs) on obtient une base canonique de $\ker d$ sur \mathbf{V}_n .

Par exemple, pour $n = 5$,

$$\ker \varsigma_5 = \{p_5 \otimes 1, p_2 p_3 \otimes 1, 1 \otimes p_5, 1 \otimes p_2 p_3, p_2 \otimes p_3, p_3 \otimes p_2\}.$$

En effectuant le quotient on trouve $\{p_5 \otimes 1, p_2 p_3 \otimes 1, 1 \otimes p_5, p_2 \otimes p_3\}$. Pour obtenir notre base de $\ker d$ (sur \mathbf{V}_5), il suffit de calculer l'inverse (par φ) des éléments de cet ensemble. D'une part on a

$$\begin{aligned} p_5 &= h_1^5 - 5h_2h_1^3 + 5h_3h_1^2 + 5h_1h_2^2 - 5h_4h_1 - 5h_2h_3 + 5h_5, \\ p_3 &= h_1^3 - 3h_2h_1 + 3h_3, \\ p_2 &= h_1^2 - 2h_2, \end{aligned}$$

et d'autre part,

$$\begin{aligned} p_5 &= \frac{5}{4}\zeta_5 - \frac{1}{4}\zeta_1^5, \\ p_3 &= \frac{3}{2}\zeta_3 - \frac{1}{2}\zeta_1^3, \end{aligned}$$

d'où la base

$$\begin{aligned} &\{h_1^5 - 5h_2h_1^3 + 5h_3h_1^2 + 5h_1h_2^2 - 5h_4h_1 - 5h_2h_3 + 5h_5, \\ &\quad \frac{5}{4}\zeta_5 - \frac{1}{4}\zeta_1^5, (h_1^2 - 2h_2)(h_1^3 - 3h_2h_1 + 3h_3), \\ &\quad (h_1^2 - 2h_2)(\frac{3}{2}\zeta_3 - \frac{1}{2}\zeta_1^3)\}. \end{aligned}$$

Finalement, il suffit de remplacer ζ_i par C_i et h_i par E_i dans l'ensemble ci-dessus pour avoir la base canonique de \mathbf{V}_5 cherchée. ■

Aucun des exemples vus jusqu'à présent ne demandaient aux espèces d'être stables sous la substitution d'espèces, contrairement à l'exemple suivant.

Exemple 3.5.9 Soit \mathbf{V} le plus petit sous-module de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ contenant le module $\mathbf{Q}[[X, E_2(X)]]$ et stable sous la substitution d'espèces. Il est facile de voir que l'ensemble \mathcal{B} défini récursivement comme suit, forme une base de \mathbf{V} .

- $1 \in \mathcal{B}$,
- $X \in \mathcal{B}$,
- $\forall s \geq 0 \forall n_i \geq 0, (i = 1, 2, \dots, r), P_1, P_2, \dots, P_r \in \mathcal{B} \Rightarrow X^s \prod_{i=1}^r E_2^{n_i} (P_i) \in \mathcal{B}$.

Voici une base de \mathbf{V} jusqu'au degré 6 (\mathcal{B}_i est la restriction de cette base au degré i):

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_1 &= \{X\}, \\ \mathcal{B}_2 &= \{X^2, E_2(X)\}, \\ \mathcal{B}_4 &= \{X^4, X^2E_2(X), E_2(X)^2, E_2(X^2), E_2(E_2(X))\}, \\ \mathcal{B}_6 &= \{X^6, X^4E_2(X), X^2E_2(X)^2, E_2(X)^3, E_2(X^2)X^2, E_2(E_2(X))X^2, \\ &\quad E_2(E_2(X))E_2(X), E_2(X^2)E_2(X), E_2(XE_2(X)), E_2(X^3)\}. \end{aligned}$$

Il est facile de voir que pour $k \leq 2$, on a $\mathcal{B}_{2k} = X\mathcal{B}_{2k-1}$. Aussi, en plus de \mathcal{B}_1 , nous n'avons donné que les bases de degré pair (pour $2 \leq k \leq 6$). Il découle de cette remarque que $\dim \mathbf{V}_{2k+1} = \dim \mathbf{V}_{2k}$,

La base de \mathbf{V} est en bijection avec l'ensemble $\bigcup_{n \geq 1} \mathbf{A}[n]$ des types d'arborescences sur toutes les cardinalités. La bijection est évidente et est illustrée par la figure 3.6. Soit α une arborescence, $\mathcal{F}(\alpha)$ l'ensemble de ses feuilles, c.-à-d. l'ensemble des sommets de degré 1 de α et $p(s)$ la profondeur du sommet s (c.-à-d. le nombre d'arêtes entre s et la racine de α). On

définit un poids v pour α en posant $v(\alpha) = \sum_{f \in \mathcal{F}(\alpha)} 2^{p(f)-1}$. Il est facile de voir que si un monôme est de degré n , alors le poids de l'arborescence correspondante sera lui aussi n . Par conséquent, énumérer les arborescences selon le poids v nous donne la dimension de V_n . À notre connaissance il n'existe pas de formule close pour énumérer les arborescences de poids donné, il n'y a donc pas de formule connue pour $\dim V_n$. Nous avons implémenté en Maple une procédure qui calcule les monômes de V_n pour un n donné. Voici les premiers monômes:

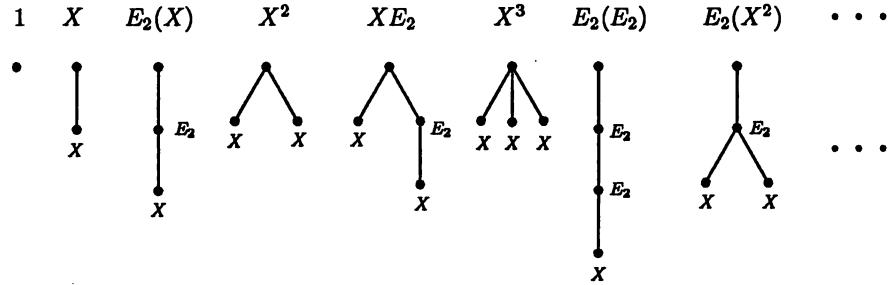


Figure 3.6: Codage des monômes par des arborescences.

Dans ce module, on peut utiliser la variante de \int_J rencontrée aux exemples 3.5.4 et 3.5.5 pour intégrer. On a donc $\dim \Omega(V_n) = \dim V_n - \dim V_{n-1}$.

Notons que l'arborescence qui correspond au monôme obtenu par des produits de monômes et des substitutions d'un monôme dans un autre est facile à construire comme l'illustrent les figures 3.7 et 3.8. ■

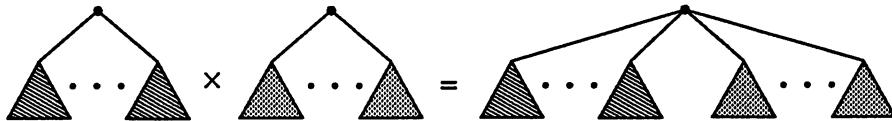


Figure 3.7: Produit de monômes.

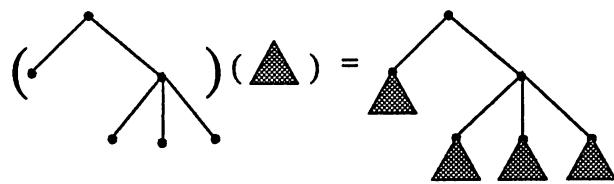


Figure 3.8: Substitution de monômes.

3.6 Intégration dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$.

Notons \mathcal{E} l'ensemble $\{E_1, E_2, E_3, \dots\}$. Pour intégrer dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$, nous utiliserons ici des méthodes voisines de celles utilisées dans la section 3.5 pour calculer le noyau de la dérivée dans certains sous-modules de $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$.

Un élément F typique de $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$ s'écrit de la manière suivante

$$F = \sum_{\lambda \in \mathcal{P}} a_\lambda E^\lambda,$$

où $a_\lambda \in \mathbf{Q}$, \mathcal{P} est l'ensemble des partages et $E^\lambda = E_1^{m_1(\lambda)} E_2^{m_2(\lambda)} \dots$. L'intégrale dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$ se ramène donc à l'intégrale d'un monôme E^λ .

L'intégrale de Joyal \int_J nous donne un primitive pour les éléments de $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$. Nous avons calculé $\int_J E^\lambda$ pour $\lambda = 1^{n-2}2$ et $\lambda = 1^{n-4}4$. Dans un premier temps, un calcul montre que

$$d^k E_1^{n-2} E_2 = (n-2)_k E_1^{n-k-2} E_2 + \left[(n-2)_{k-2} \left[kn - \frac{k(k+1)}{2} \right] \right] E_1^{n-k},$$

où $(n)_k = n(n-1)(n-2) \cdots (n-k+1)$. Il s'en suit que $\int_J E_1^{n-2} E_2$ est égal à

$$\sum_{k=0}^n (-1)^k (n-2)_k E_{k+1} E_1^{n-k-2} E_2 + \left[(n-2)_{k-2} \left[kn - \frac{k(k+1)}{2} \right] \right] E_1^{n-k}.$$

On montre aussi que $\int_J E_1^{n-4} E_2^2$ est égal à

$$\sum_{k=0}^n (-1)^k E_{k+1} \left[\left[2 \sum_{r=1}^k (n-r-3)_{k-r} \right] E_1^{n-k-2} E_2 + (n-2)_k E_1^{n-(k+4)} E_2^2 \right].$$

Il serait intéressant d'avoir une formule pour λ quelconque, bien que les calculs effectués pour trouver \int_J ci-dessus laissent présager que les formules obtenues peuvent vite devenir volumineuses.

Voici une autre intégrale dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{E}]]$ qui fait appel à Λ , l'anneau des fonctions symétriques. Dénotons par ζ l'isomorphisme qui associe à la fonction symétrique homogène h_λ l'espèce E^λ . Nommons p l'isomorphisme qui donne l'écriture d'une fonction de Λ en terme des p_λ .

Proposition 3.6.1 *Quel que soit $\lambda \in \mathcal{P}$,*

$$\int_{\circ} E^\lambda \stackrel{\text{déf}}{=} \zeta^{-1} \left(\int p(h_\lambda) dp_1 \right)$$

est une primitive de E^λ , où $\int f dp_1$ désigne l'intégration d'une fonction symétrique $f = \sum_\lambda p_\lambda$ par rapport à p_1 . ■

Exemple 3.6.2 Nous avons utilisé la librairie SF développée en Maple par J. Stembridge (voir [St]) pour calculer les changements de base h et p dans l'exemple suivant. On a

$$\begin{aligned} \int_{\circ} E_3^2 E_4 &= \frac{115 E_1^9 E_2}{5184} - \frac{115 E_1^{11}}{57024} - \frac{149 E_1^8 E_3}{4032} - \frac{41 E_1^7 E_2^2}{504} + \frac{11 E_1^7 E_4}{420} \\ &+ \frac{97 E_1^6 E_2 E_3}{360} + \frac{E_1^5 E_2^3}{10} - \frac{11 E_1^5 E_2 E_4}{60} - \frac{13 E_1^5 E_3^2}{60} - \frac{E_1^4 E_2^2 E_3}{2} \\ &+ \frac{E_1^4 E_3 E_4}{4} + \frac{E_1^3 E_2^2 E_4}{3} + \frac{5 E_1^3 E_2 E_3^2}{6} - E_1^2 E_2 E_3 E_4 \\ &- \frac{E_1^2 E_3^3}{2} + E_1 E_3^2 E_4. \end{aligned}$$

3.7 Algorithme pour intégrer dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$

Nous décrivons ici l'algorithme que nous avons utilisé pour calculer

$$\int F = \{G \in \mathbf{N}[[\mathcal{A}]] : dG = F, G(0) = 0\}$$

pour $F \in \mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$ vivant sur une cardinalité donnée (c.-à-d. qu'il existe un et un seul $n \in \mathbf{N}$ tel que $F = [F]_{=n}$). Cet algorithme est implémenté en Maple et listé à l'appendice A.10.5 (voir la procédure `intc`). Il consiste essentiellement à chercher dans \mathbf{N} les éventuelles solutions à un système d'équations affines obtenues par la méthode des coefficients indéterminés.

Soit $F = \sum_{i \in I} a_i M_n^{(i)}$ (avec $a_i \in \mathbf{N} \setminus \{0\}$). Comme nous l'avons vu à la section 3.3, résoudre $\int F$ par coefficients indéterminés donne lieu au système d'équations affines suivant:

$$\{0 = \sum_{j \in J} b_j c_{i,j} - a_i : i \in I\}, \quad (3.21)$$

où les b_j sont les indéterminés et $a_i, c_{i,j} \in \mathbf{N} \setminus \{0\}$, $c_{i,j}$ étant le coefficient de $M_n^{(i)}$ dans $dM_{n+1}^{(j)}$. Le lemme 3.3.4 nous permet de restreindre l'ensemble $J \subset \{1, 2, \dots, m_{n+1}\}$ aux indices j tels que $0 < c_{i,j} \leq a_i$.

Considérons l'ordre total naturel sur $J = \{j_1 < j_2 < \dots < j_p\}$. La solution \mathcal{S} de (3.21) est constituée de vecteurs de la forme $\mathbf{b} = (b_{j_1}, b_{j_2}, \dots, b_{j_p}) \in \mathbf{N}^p \setminus \{0\}$. Notons que la solution de ce système dans \mathbf{N} correspond à l'intersection de l'espace discret $(\mathbf{N} \setminus \{0\})^{|J|}$ avec la solution du même système (un hyperplan) dans $\mathbf{R}^{|J|}$.

L'algorithme pour résoudre ce système consiste à trouver toutes les valeurs prises par la première coordonnée (b_{j_1}) et pour chaque valeur possible, faire de même pour la deuxième coordonnées, etc. Plus formellement, soit

$$V_{i,j} = \{k \in \mathbf{N} : kc_{i,j} - a_i \geq 0\} = \left\{0, 1, \dots, \left\lfloor \frac{a_i}{c_{i,j}} \right\rfloor\right\}.$$

On définit

$$\mathcal{V}_1 = \{k \in \mathbf{N} : (\exists \mathbf{b} \in \mathcal{S})(b_{j_1} = k)\}.$$

Lemme 3.7.1 *Avec les notations précédentes, on a*

$$\mathcal{V}_1 = \bigcap_{i \in I} V_{i,j_1}.$$

■

En particulier, si $\mathcal{V}_1 = \emptyset$ alors le système n'a pas de solution.

Voici quelques notations qui seront utiles pour la suite. Si $k \in \mathbf{N}$, $\Sigma|_{b_j=k}$ désigne le système obtenu de Σ en remplaçant l'indéterminée b_j par k . Si $k \in \mathbf{N}$ et $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_{p-1}) \in \mathbf{N}^{p-1}$, on notera $\text{concat}(k, \mathbf{b})$ le vecteur $(k, b_1, b_2, \dots, b_{p-1}) \in \mathbf{N}^p$. Par abus de notation, nous parlerons aussi de $\text{concat}(k, S)$ où $S \subset \mathbf{N}^{p-1}$.

Algorithme 3.7.2 La solution $\Phi(\Sigma) \subset \mathbb{N}^p$ d'un système Σ de la forme 3.21 est trouvée de la façon suivante (on utilise le lemme 3.7.1 pour calculer \mathcal{V}_1).

1. Si $|J| = 1$ alors $\mathcal{S} := \Phi(\Sigma) := \mathcal{V}_1$.
2. Sinon $\mathcal{S} := \Phi(\Sigma) := \bigcup_{k \in \mathcal{V}_1} \text{concat}(k, \Phi(\Sigma |_{b_{j_1}=k}))$.

■

L'exemple suivant illustre la méthode.

Exemple 3.7.3 Considérons le système Σ formé des équations $2b_1 + 2b_3 + b_4 - 4 = 0$ et $b_1 + b_2 + b_3 - 2 = 0$. On calcule $V_{1,1} = \{0, 1\}$ et $V_{1,2} = \{0, 1, 2\}$, donc $\mathcal{V}_1 = \{0, 1\}$. Par suite, en calculant récursivement on trouve (1) que $\Sigma |_{b_1=0}$ a pour solution les vecteurs $(0, 2, 0), (1, 1, 2)$ et $(2, 0, 4)$, et (2) que $\Sigma |_{b_1=1}$ admet les vecteurs $(0, 1, 0)$ et $(1, 0, 2)$ comme solution. Donc la solution au système précédent est $\{(0, 0, 2, 0), (0, 1, 1, 2), (0, 2, 0, 4), (1, 0, 1, 0), (1, 1, 0, 2)\}$.

Pour intégrer, il suffit donc d'utiliser le lemme 3.3.4 pour obtenir un système d'équations de la forme 3.21 dont la solution sera trouvée en appliquant l'algorithme 3.7.2.

Exemple 3.7.4 L'intégrale $\int(2E_3 + 3XE_2)$ donne lieu au système $b_1 + b_2 - 3, b_2 + b_3 + 2b_4 - 2$ dont la solution est $\{(1, 0, 2, 0), (2, 1, 1, 0), (3, 0, 0, 1), (3, 2, 0, 0)\}$. Cette intégrale est donc égale à

$$\{3E_4 + E_2^2, 3E_4 + 2E_2(E_2), E_4 + 2XE_3, 2E_4 + XE_3 + E_2(E_2)\}.$$

■

Chapitre 4

Inversion dans $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Ce chapitre traite de quelques problèmes d'inversion pour la substitution dans $\mathbf{Z}[[\mathcal{A}]]$ et $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$. Dans un premier temps nous étudions l'inverse pour la substitution de l'espèce virtuelle polynomiale $X + X^2 - 2E_2(X)$. Nous verrons que son inverse n'est pas polynomial. En particulier ceci implique qu'un analogue de la conjecture jacobienne dans le contexte des \mathbf{Q} -espèces est faux. La deuxième partie du chapitre introduit la notion de racine carré symétrique. Il s'agit des solutions $F \in \mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$ de l'équation $E_2(F) = G$.

4.1 Inversion d'espèces polynomiales et conjecture jacobienne.

Nous abordons ici le problème suivant: étant donnée une espèce polynomiale F telle que $dF = 1$, est-ce que l'inverse substitutionnel $F^{(-1)}$ est aussi polynomial? Nous verrons que ce n'est pas le cas en général. Nous utiliserons ce résultat pour voir qu'un analogue de la conjecture jacobienne dans le contexte des espèces est faux.

L'inverse $F^{<-1>}$ est calculée à l'aide de l'opérateur de différence Δ_F introduit par André Joyal et Gilbert Labelle [LG1], [Ja3], [LG3]. Nous utilisons les notations $F^{(k)}$ pour

$$\underbrace{F \circ F \circ \cdots \circ F}_{k \text{ fois}}.$$

Nous aurons besoin de substituer dans E_2 pour inverser F .

4.1.1 Substitution dans E_2 et inversion dans $\mathbf{N}[[\mathcal{A}]]$.

La formule qui suit découle d'un résultat de Yeh (voir [Ye1]), elle décrit la substitution d'une espèce virtuelle polynomiale à deux sortes dans E_2 .

Proposition 4.1.1 *Soit $M_i(X)$ ($i = 1, 2, \dots, n$), des espèces moléculaires $\neq 1$ et $a_i \in \mathbf{Z}$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Alors*

$$E_2 \left(\sum_{i=1}^n a_i M_i(X) \right) = \sum_{i=1}^n a_i E_2(M_i(X))$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^n \binom{a_i}{2} M_i(X)^2 \\
& + \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_i a_j M_i(X) M_j(X)
\end{aligned}$$

Les résultats suivants sont démontrés dans [LG3] et [Ja3].

Définition 4.1.2 Soit $F(X)$ et $G(X)$ des espèces virtuelles telles que $F(X) = X + H(X)$, où H vit sur au moins 2 points. On définit l'opérateur delta par

$$\Delta_F(G) = G(F) - G$$

Proposition 4.1.3 Soit $F = X + H(X)$ (où H vit sur au moins deux points) une espèce virtuelle et $G = \text{Id}$ (où $\text{Id}(X) = X$). Alors $F^{\langle -1 \rangle}$, l'inverse de F sous la composition, est égal à

$$F^{\langle -1 \rangle} = \sum_{k \geq 0} (-1)^k \Delta_F^k \text{Id}(X).$$

4.1.2 Inverse substitutionnel.

Nous pouvons trouver toutes les espèces polynomiales F vivant sur moins de 2 points telles que $dF = 1$ en résolvant l'équations obtenues de $d(X + aE_2(X) + bX^2) = 1$ en a et b . On trouve $2a + b = 0$. En particulier, si $a = -1$ et $b = 2$, on a

$$F(X) = X + X^2 - 2E_2(X)$$

telle que $dF = 1$.

Dans un premier temps, nous montrerons par contradiction que $F^{\langle -1 \rangle}$ n'est pas une espèce polynomiale (voir [CS]). Dans un deuxième temps, nous expliciterons l'inverse, ce qui fournira une seconde preuve de l'assertion. Il découlera de ce calcul que la conjecture jacobienne" reformulée dans le cadre de la théorie des espèces de structures à $n \geq 1$ sortes n'est pas vraie. Cette conjecture se lit comme suit (avec $n = 2$) . Si $\mathcal{F} = (F_1(X, Y), F_2(X, Y))$ est un vecteur d'espèces à deux sortes tel que

$$|d\mathcal{F}| = \begin{vmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial X} & \frac{\partial F_1}{\partial Y} \\ \frac{\partial F_2}{\partial X} & \frac{\partial F_2}{\partial Y} \end{vmatrix} = \frac{\partial F_1}{\partial X} \frac{\partial F_2}{\partial Y} - \frac{\partial F_2}{\partial X} \frac{\partial F_1}{\partial Y} = 1,$$

alors l'inverse substitutionnel de \mathcal{F} est un vecteur d'espèces virtuelles polynomiales. Remarquons que pour que l'inverse existe, on peut supposer que $F_1 = X + H_1(X, Y)$ et $F_2 = Y + H_2(X, Y)$ où H_1 et H_2 sont des espèces virtuelles à deux sortes vivant sur au moins 2 points. Il est clair que le vecteur $(F(X), Y)$ où $F(X) = X + X^2 - 2E_2(X)$ fournira un contre-exemple.

Remarque 4.1.4 À cause de la proposition 4.1.1, on vérifie que l'espèce $F(X) = X + X^2 - 2E_2(X)$ est "linéaire" au sens suivant

$$F\left(\sum_{i=1}^k a_i X_i\right) = \sum_{i=1}^k a_i F(X_i)$$

Nous utiliserons cette observation pour démontrer le lemme suivant. ■

L'inverse de $X + X^2 - 2E_2(X)$ n'est pas polynomial.

D'une part, notons qu'un inverse existe comme nous le verrons après cette preuve. Supposons que cet inverse soit polynomial. Soit $G = \sum_{i=1}^k a_i M_i$ sa décomposition moléculaire (de degré disons n). On aura $n \geq 2$, sinon $G = a + bX$ et il est alors impossible que $F \circ G$ soit égal à X .

En utilisant la remarque 4.1.4 on a

$$X = F \circ G = G + \sum_{i=1}^k a_i M_i^2 - 2 \sum_{i=1}^k a_i E_2(M_i).$$

Remarquons que

$$\sum_{i=1}^k a_i M_i^2 - 2 \sum_{i=1}^k a_i E_2(M_i) \tag{4.1}$$

est la décomposition moléculaire de $F \circ G - G = X - G$ (aucune annulation ne survient). En effet, si M est une espèce moléculaire, alors M^2 et $E_2(M)$ le sont aussi. De plus, M^2 n'est pas isomorphe à $E_2(M)$. Par suite, le degré de $X - G$ est n , or le degré de la décomposition (4.1) est $2n$, une contradiction.

Calcul de l'inverse de $X + X^2 - 2E_2(X)$.

Nous aurons besoin du lemme suivant.

Lemme 4.1.5 Avec F comme ci-dessus, on a

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

où $b_i^{(k)} \in \mathbf{Z}$ et les espèces $P_{i,j}^{(k)}$ sont moléculaires.

Démonstration: Nous procéderons par récurrence sur k . Si $k = 1$, on a

$$F^{(1)}(X) = F(X) = X^{2^0} + X^{2^1} - 2E_2(X).$$

Supposons maintenant l'hypothèse vérifiée pour k . On a alors

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

où $P_{i,j}^{(k)}$ est moléculaire.

En utilisant la remarque 4.1.4, on trouve que le membre de droite de cette expression s'écrit

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} F(X^{2^i}) + \sum_{i=1}^{n_k} b_i^{(k)} F\left(\prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)})\right) \\ = & \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} (X^{2^i} + X^{2^{i+1}}) + \sum_{i=0}^k (-2) \binom{k}{i} E_2(X^{2^i}) \\ & + \sum_{i=1}^{n_k} b_i^{(k)} \left(\prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)}) + \left(\prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)}) \right)^2 - 2E_2\left(\prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)})\right) \right). \end{aligned}$$

Puisque P est une espèce moléculaire, alors $E_2(P)$ l'est aussi. Le dernier membre de cette somme est donc égal, après avoir renommé les termes, à

$$\sum_{i=0}^k \left(\binom{k}{i} X^{2^i} + \binom{k}{i} X^{2^{i+1}} \right) + \sum_{i=1}^{n_{k+1}} b_i^{(k+1)} E_2\left(\prod_{j=1}^{q_{k+1}} E_2(P_{i,j}^{(k+1)})\right)$$

où les $P_{i,j}^{(k+1)}$ sont des espèces moléculaires. Le lemme suit en remarquant que

$$\sum_{i=0}^k \left(\binom{k}{i} X^{2^i} + \binom{k}{i} X^{2^{i+1}} \right) = \sum_{i=0}^{k+1} \binom{k+1}{i} X^{2^i}.$$

■

Lemme 4.1.6 Soit H une espèce virtuelle, alors

$$\Delta_H^k(X) = \sum_{i=0}^k (-1)^{k-i} \binom{k}{i} H^{\langle i \rangle}(X).$$

Démonstration: Se fait par récurrence sur k . ■

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

Proposition 4.1.7 On a $\Delta_F^n(X) = X^{2^n} + \Xi_n$, où Ξ_n ne contient aucune puissance de X .

Démonstration: Développons $\Delta_F^n(X)$:

$$\begin{aligned} \Delta_F^n &= \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \binom{n}{k} F_1^{\langle k \rangle}(X) \quad (\text{lemme 4.1.6}) \\ &= \sum_{k=0}^n (-1)^{n-k} \binom{n}{k} \left[\sum_{i=0}^k \binom{k}{i} X^{2^i} + \sum_{i=1}^{n_k} b_i^{(k)} \prod_{j=1}^{q_k} E_2(P_{i,j}^{(k)}) \right] \quad (\text{lemme 4.1.5}) \end{aligned}$$

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

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 binomiale montre que la dernière expression est égale à

$$X^{2^n} + \Xi_n.$$

■

Corollaire 4.1.8 $F^{(-1)}$ n'est pas une espèce polynomiale.

Démonstration: En effet, en posant $F = X + X^2 - 2E_2(X)$, on a, en utilisant les propositions 4.1.3 et 4.1.7,

$$F^{(-1)}(X) = \sum_{n \geq 0} (-1)^n X^{2^n} + \sum_{n \geq 0} (-1)^n \Xi_n(X),$$

où Ξ_n ne contient aucune puissance de X .

■

4.2 Racines carrées symétriques

4.2.1 Introduction

Soit \mathbf{C} le corps des nombres complexes et \mathcal{A} l'ensemble des espèces atomiques (à isomorphisme près). Etant donnée une espèce $F \in \mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$, l'équation $G^2 = F$ n'a pas toujours de solution G dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$. Par exemple, l'équation $G^2 = X$ n'en a pas dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$. Si toutefois il existe une espèce G qui satisfait l'équation, on l'appelle une *racine carrée* de F . Le contexte des espèces nous permet de généraliser la notion de racine carrée en introduisant la *racine carrée symétrique* d'une espèce qui se définit comme suit:

Définition 4.2.1 Soit $G \in \mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$. On dira que F est une racine carrée symétrique de G si l'équation suivante est vérifiée:

$$E_2(G) = F.$$

Dans le cas d'une racine carrée symétrique, on trouve toujours une solution comme nous le verrons à la section 4.2.3. Cette notion trouve une belle application en nous permettant de montrer qu'à une transformation affine près, l'espèce des arborescences est la racine carrée symétrique de l'espèce des arbres.

Nous terminerons en donnant quelques généralisations et directions pour des recherches ultérieures.

4.2.2 Substitution générale dans l'espèce E_2

Il est possible de munir l'ensemble des espèces moléculaires (à isomorphisme près) d'un ordre total. Dans un premier temps on peut ordonner ces dernières par degré et ensuite décréter un ordre total sur les espèces de même degré. Par exemple, voici l'ordre total que nous utiliserons pour les espèces moléculaires de degré ≤ 4 :

$$\begin{aligned} 1 < X < E_2 < X^2 < E_3 < C_3 < XE_2 < X^3 \\ &< E_4 < E_4^+ < E_2(E_2) < XE_3 < E_2^2 \\ &< P_4^{\text{bic}} < C_4 < XC_3 < X^2E_2 < E_2(X^2) < X^4. \end{aligned}$$

Nous noterons \mathcal{M} l'ensemble des espèces moléculaires muni d'un ordre total qui prolonge l'ordre ci-dessus.

Nous généralisons la proposition 4.1.1 au cas où l'espèce substituée est à terme constant quelconque.

Proposition 4.2.2 Soit $G = \sum_{M \in \mathcal{M}} g_M M$, alors

$$E_2(G) = \sum_{M \in \mathcal{M}} g_M E_2(M) + \sum_{M \in \mathcal{M}} \binom{g_M}{2} M^2 + \sum_{\substack{P, Q \in \mathcal{M} \\ P < Q}} g_P g_Q PQ. \quad (4.2)$$

Notons que puisque l'espèce $E_2(X)$ est polynomiale, il est possible d'y substituer une espèce à coefficient constant non nul [Ja3]. En particulier, on a que $E_2(1) = 1$.

4.2.3 Racine carrée symétrique

Nous débutons avec la proposition centrale qui nous renseigne sur l'existence de solutions G de $E_2(G) = F$ étant donnée $F \in \mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$.

Proposition 4.2.3 Soit $F \in \mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$ dont la décomposition en espèces moléculaires est $F = \sum_{M \in \mathcal{M}} f_M M$. Alors

1. Si le terme constant f_1 de F est différent de 0 ou de $-1/8$, alors il existe dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$ deux solutions G de l'équation $E_2(G) = F$.
2. Si le terme constant f_1 de F est $-1/8$, alors il existe dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$ une seule solution G de l'équation $E_2(G) = F$.
3. Si le terme constant f_1 de F est 0, alors
 - il existe dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$ une seule solution G de l'équation $E_2(G) = F$ dont le terme constant g_1 soit non-nul: ce terme constant est alors $g_1 = -1$;
 - il existe dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$ au plus une solution G de l'équation $E_2(G) = F$ dont le terme constant g_1 soit nul.

Démonstration: Cherchons les coefficients g_M (pour tout $M \in \mathcal{M}$) tels que si on pose $G = \sum_{M \in \mathcal{M}} g_M M$, alors $E_2(G) = F$.

En utilisant la proposition 4.2.2, on trouve

$$\begin{aligned}
 E_2(G) &= E_2\left(\sum_{N \in \mathcal{M}} g_N N\right) \\
 &= \sum_{N \in \mathcal{M}} g_N E_2(N) + \sum_{N \in \mathcal{M}} \binom{g_N}{2} N^2 + \sum_{\substack{P, Q \in \mathcal{M} \\ P < Q}} g_P g_Q P Q \\
 &= g_1 + g_X E_2(X) + g_{E_2} E_2(E_2(X)) + g_{X^2} E_2(X^2) + \dots \\
 &\quad + \binom{g_1}{2} + \binom{g_X}{2} X^2 + \binom{g_{E_2(X)}}{2} E_2(X)^2 + \binom{g_{X^2}}{2} X^4 + \dots \\
 &\quad + g_1 g_X X + g_1 g_{X^2} X^2 + g_1 g_{E_2} E_2(X) + \dots \\
 &\quad + g_X g_{E_2} X E_2(X) + g_X g_{X^2} X^3 + \dots \\
 &\quad + \dots \\
 &= \sum_{M \in \mathcal{M}} f_M M
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Montrons par récurrence (en considérant l'ordre sur \mathcal{M} décrit plus haut) que la donnée des f_M détermine les solutions en les g_M . En comparant les coefficients constants de chaque membre de (4.3) et en isolant g_1 , on trouve

$$g_1 = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 8f_1}}{2},$$

donc à priori g_1 peut prendre deux valeurs distinctes sauf dans le cas où $f_1 = -1/8$ où g_1 ne peut prendre que la valeur $-1/2$. Supposons pour le moment $f_1 \neq 0$, alors $g_1 \neq 0$. En comparant cette fois les coefficients de X on trouve $g_X g_1 = f_X$. Ce qui permet de trouver $g_X = f_X/g_1$. Si f_X est non-nul, il faut donc imposer la condition $g_1 \neq 0$. Or le seul cas où g_1 peut être nul est lorsque $f_1 = 0$. Dans ce cas, g_1 pourra prendre uniquement la valeur -1 .

Fixons maintenant $M \in \mathcal{M}$ et supposons que si $M_1 < M$ alors la valeur de M_1 est complètement déterminée pour une valeur choisie (ou imposée si aucun autre choix n'est possible) pour g_1 . Il faut calculer g_M . Trois cas se présentent.

Premièrement, M est de la forme $M = E_2(N)$. Dans ce cas, il est clair que $N < M$ car le degré de N est plus petit que celui de M et l'ordre total se fait en premier lieu d'après le degré. Donc g_N est complètement déterminé et en comparant les coefficients de M dans l'équation 4.3, on trouve que $g_N + g_1 g_M = f_M$. Ainsi,

$$g_M = \frac{f_M - g_N}{g_1}.$$

Deuxièmement, M est de la forme $M = N^2$. Dans ce cas on trouve

$$f_M = \binom{g_N}{2} + g_1 g_M + \sum_{\substack{PQ=N^2 \\ 1 < P < Q < N^2}} g_P g_Q.$$

Ici aussi on peut utiliser l'hypothèse d'induction pour conclure que g_M est complètement déterminé. Il suffit pour cela d'isoler g_M ci-dessus. On trouve

$$g_M = \frac{\phi_1}{g_1},$$

où ϕ_1 ne dépend que des T tels que $T < M$.

Troisièmement, si M n'est pas de l'une des deux formes précédentes, alors

$$f_M = g_1 g_M + \sum_{\substack{1 < P < Q \\ PQ=M}} g_P g_Q,$$

ce qui nous permet d'écrire $g_M = \frac{\phi_2}{g_1}$, où ϕ_2 ne dépend que des T tels que $T < M$.

Dans le cas $f_1 = 0$, la seule possibilité non-nulle pour g_1 est $g_1 = -1$ et le raisonnement ci-dessus nous conduit à une unique solution G . Par contre, si on cherche une solution avec $g_1 = 0$, la comparaison des coefficients dans (4.3) nous permet de conclure que

$$g_M = f_{E_2(M)}, \quad (4.4)$$

le choix des g_M est donc forcé, ce qui montre qu'il y a au plus une solution G de $E_2(F) = G$. En plus de la relation (4.4), d'autres relations possiblement contradictoires avec (4.4), peuvent s'ajouter, ce qui fait qu'il peut ne pas y avoir de solution. C'est le cas par exemple si $F = X$.

■

Étant donnée F , il est donc facile de calculer explicitement les valeurs de g_M en fonction des f_M et de g_1 , si $g_1 \neq 0$. Remarquons que si M est atomique et n'est pas de la forme $E_2(N)$, alors $g_M = f_M/g_1$. Quelques calculs montrent que

$$g_{E_2} = \frac{g_1 f_{E_2} - f_X}{g_1^2},$$

$$g_{X^2} = \frac{2g_1^2 f_{X^2} - f_X^2 + g_1 f_X}{2g_1^3},$$

$$g_{E_3} = \frac{f_{E_3}}{g_1},$$

$$g_{XE_2} = \frac{g_1^3 f_{XE_2} - g_1 f_X f_{E_2} + f_X^2}{g_1^4},$$

$$g_{C_3} = \frac{f_{C_3}}{g_1},$$

$$g_{X^3} = \frac{2g_1^4 f_{X^3} - 2g_1^2 f_X f_{X^2} - g_1 f_X^2 + f_X^3}{2g_1^5}.$$

Nous noterons $\sqrt{F^{(S)}}$ l'ensemble des racines carrées symétriques de F . Il est intéressant de noter que l'espèce X des singletons admet une unique racine carrée symétrique dont les premiers termes sont donnés par

$$\begin{aligned} & -1 - X - E_2(X) + X^2 + XE_2(X) - X^3 - E_2(E_2(X)) \\ & + E_2(X)^2 - 2X^2 E_2(X) + E_2(X^2) + \dots. \end{aligned}$$

4.2.4 Arbres et arborescences

Nous allons maintenant voir comment la racine carrée symétrique permet de relier les arborescences et les arbres. Pour ce faire nous utiliserons la formule de dissymétrie pour les arbres due à Leroux [Le] (voir aussi Leroux-Miloudi [LM]) énoncée plus bas. Notons α l'espèce des arbres et \mathbf{A} celle des arborescences. Les premiers termes de la décomposition moléculaire de l'espèce des arbres sont les suivants

$$\alpha = X + E_2 + XE_2 + E_2(X^2) + XE_3 + XE_2(X^2) + X^3 E_2 + XE_4 + \dots.$$

L'espèce des arborescences, quant à elle, se décompose comme suit:

$$\mathbf{A} = X + X^2 + X^3 + XE_2 + 2X^4 + X^2 E_2 + XE_3 + \dots.$$

Remarque 4.2.4 On a évidemment $\mathbf{A} = \alpha^\bullet$ puisque les arborescences sont précisément les arbres pointés.

On trouvera la démonstration de la formule suivante dans [Le],[LM]. Elle a été étendue par G. Labelle dans [LG6] au cas des arborescences et arbres enrichis (voir aussi [LG4],[LG5]).

Proposition 4.2.5 *On a l'identité suivante (formule de dissymétrie pour les arbres):*

$$\alpha + \mathbf{A}^2 = \mathbf{A} + E_2(\mathbf{A}). \quad (4.5)$$

■

En fait, dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$, on peut écrire cette formule sous une forme équivalente comme le dit la proposition suivante.

Proposition 4.2.6 *L'identité (4.5) est équivalente à*

$$E_2(1 - \mathbf{A}) = 1 - \alpha. \quad (4.6)$$

En d'autres termes, l'espèce (virtuelle) $1 - \mathbf{A}$ est une racine carrée symétrique de l'espèce $1 - \alpha$. Plus explicitement, on peut écrire

$$1 - \mathbf{A} \in \sqrt{1 - \alpha^{(S)}}.$$

Démonstration: En utilisant la proposition 4.2.2, on a que

$$E_2(1 - \mathbf{A}) = 1 - (\mathbf{A} - \mathbf{A}^2 + E_2(\mathbf{A})),$$

donc, en utilisant (4.5), on trouve

$$E_2(1 - \mathbf{A}) = 1 - \alpha.$$

■

Remarque 4.2.7 Notons que l'espèce $1 - \alpha$ possède deux racines carrées symétriques, car dans ce cas le coefficient constant est non nul. Toutefois un calcul montre que la seconde racine est en fait une espèce rationnelle:

$$-2 + \frac{1}{2}X + \frac{3}{4}E_2(X) + \frac{1}{16}X^2 + \dots$$

On ne connaît pas encore d'interprétation combinatoire évidente pour cette racine.

Remarque 4.2.8 La proposition 4.2.6 montre qu'on peut pointer algébriquement l'espèce des arbres sans utiliser la formule différentielle usuelle: $F^\bullet = XF'$. Elle permet aussi d'exprimer la décomposition moléculaire des arbres en fonction des arborescences.

Remarque 4.2.9 On a $\mathbf{A} = \alpha^\bullet = X\alpha'$ et $\mathbf{A} = XE(\mathbf{A})$. D'où $\alpha' = E(\mathbf{A})$. Il s'en suit que $\alpha \in \int E(\mathbf{A})$, ou encore que $\alpha = \int_J E(\mathbf{A}) + W$ où W est tel que $W' = 0$ (voir [CL]) où \int_J désigne l'intégrale virtuelle de Joyal [Ja2]. On a donc d'une part,

$$\begin{aligned} \alpha &= \int_J E(\mathbf{A}) + W \\ &= XE(\mathbf{A}) - E_2(X)E(\mathbf{A})' + E_3(X)E(\mathbf{A})'' - E_4(X)E(\mathbf{A})''' + \dots + W \\ &= \mathbf{A} - E_2(X)E(\mathbf{A})' + E_3(X)E(\mathbf{A})'' - E_4(X)E(\mathbf{A})''' + \dots + W. \end{aligned}$$

D'autre part en utilisant (4.5), on trouve que

$$W = E_2(\mathbf{A}) - \mathbf{A}^2 + E_2(X)E(\mathbf{A})' - E_3(X)E(\mathbf{A})'' + E_4(X)E(\mathbf{A})''' + \dots.$$

On vérifiera que l'on a bien $W' = 0$.

■

4.2.5 Remarques

Il est possible d'écrire des formules du type (4.2) pour les espèces E_n et C_n ($n = 3, 4, 5, \dots$) (cf [LG5]). Ceci permet de généraliser la notion de racine carrée symétrique. Dans le premier cas on parlera de *racine n^e symétrique*, dans le deuxième cas de *racine n^e cyclique*. Dénotons par $\sqrt[n]{F^{(S)}}$ l'ensemble des solutions de $E_n(G) = F$ et par $\sqrt[n]{F^{(C)}}$ l'ensemble des solutions de $C_n(G) = F$. Un prolongement naturel du présent travail serait de chercher si certains éléments de $\sqrt[3]{1 - \alpha^{(S)}}$ ou de $\sqrt[3]{1 - \alpha^{(C)}}$ ont une interprétation combinatoire pour $n > 2$. Un autre prolongement naturel serait d'étudier les racines n^e moléculaires d'une espèce F , c'est-à-dire les solutions G de l'équation $M(G) = F$ où M est une espèce moléculaire vivant sur la cardinalité n . L'utilisation de logiciels de calcul symbolique aidera certainement à analyser ces types de problèmes.

4.3 Décomposition moléculaire de l'espèce **A**.

Nous décrivons ici la méthode utilisée pour calculer la décomposition moléculaire de l'espèce des arborescences **A** et celle des arbres α . On trouvera aux appendices A.5 et A.6 des tables donnant la restriction de ces décompositions aux cardinalités $1, 2, \dots, 10$. Nous avons utilisé Maple pour effectuer les calculs.

Pour calculer la décomposition moléculaire de **A**, nous avons utilisé l'équation fonctionnelle déjà rencontrée à l'exemple 3.3.10

$$\mathbf{A}(X) = XE(\mathbf{A}(X)) \quad (4.7)$$

pour effectuer un calcul récursif. Supposons la décomposition calculée jusqu'au degré n et soit $\sum_{M \in \mathcal{M}_n} a_M M$ cette décomposition (l'ensemble \mathcal{M}_n étant constitué des espèces moléculaires de degré $\leq n$). Pour calculer la décomposition jusqu'au degré $n + 1$, il suffit d'utiliser l'équation (4.7)

$$\begin{aligned} \sum_{M \in \mathcal{M}_{n+1}} a_M M &= [\mathbf{A}]_{\leq n+1} \\ &= [XE(\mathbf{A})]_{\leq n+1} \\ &= X \left[E \left(\sum_{M \in \mathcal{M}_n} a_M M \right) \right]_{\leq n} \\ &= X \left[\prod_{M \in \mathcal{M}_n} E(M)^{a_M} \right]_{\leq n} \\ &= X \left[\prod_{M \in \mathcal{M}_n} (1 + M + E_2(M) + \cdots + E_{\lceil \frac{n}{|M|} \rceil}(M))^{a_M} \right]_{\leq n}. \end{aligned}$$

On trouvera à l'appendice A.10.6 le code Maple implémentant cette règle de récurrence, la procédure en question se nomme Arbo. Notons que le problème étant de complexité exponentielle, nous effectuons des restrictions aux cardinalités $\leq n$ à presque toutes les étapes du calcul dans cette procédure. Par exemple, au lieu de faire le calcul $(1 + M + E_2(M) + \cdots +$

$E_{\lceil \frac{n}{M} \rceil}(M)^{a_M}$ directement, nous multiplions a_M fois $(1 + M + E_2(M) + \cdots + E_{\lceil \frac{n}{M} \rceil}(M))$ avec lui-même en prenant la restriction au cardinalités $\leq n$ à chaque fois.

L'identité 4.2.6 nous a servi à calculer la décomposition moléculaire de l'espèce des arbres en fonction de celle des arborescences, on obtient la formule

$$\alpha = 1 - E_2(1 - \mathbf{A}).$$

Conclusion.

Une extension directe de ce travail sera de poursuivre la recherche d'une interprétation combinatoire pour les espèces sur les cardinalités ≥ 8 . Les résultats du chapitre 2 seront sûrement profitables pour réaliser ce travail. En effet, certaines de ces espèces ne peuvent être obtenues que par quotient ou regroupement (et non par produit ou substitution). Les propositions 2.1.5 et 2.1.11 nous muniront des instruments nécessaires pour accomplir cette tâche. Il est fort probable que cette recherche mènera à la découverte de nouveaux quotients tels que ceux trouvés aux sections 2.1, 2.3 et 2.4. À la lumière de ce travail, il est facile d'imaginer une multitude de quotients par divers groupes. Pour n'en citer que quelques-uns, pensons aux quotients de la forme $(C_n C_m)/Z_2$, où l'action consiste à échanger les deux orientations à la fois. Ou encore $C_n(X^k)/Z_k$, où l'on fait subir aux ordres linéaires des rotations cycliques de façon simultanée.

Par ailleurs, il serait intéressant d'obtenir une formule permettant de calculer la série indicatrice d'un quotient $(X^n/K)/G$. Cette formule devrait idéalement dépendre de G et la série indicatrice de cycle de l'espèce X^n/K . De même, une formule pour la série indicatrice d'un regroupement quelconque reste à trouver. Le calcul systématique des séries indicatrices permettrait de faire une étude complète de nouvelles espèces telles que l'espèce $B \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n \geq 2} (X^k C_n)/Z_2$, où l'action de Z_2 consiste à inverser l'ordre linéaire sur les k points, ainsi que le cycle.

Le travail se poursuit dans la deuxième partie par l'étude d'équations différentielles et de problèmes reliés à l'inversion dans l'anneau des espèces rationnelles. Nous y élaborons une technique pour résoudre les équations différentielles autonomes de la forme $Y' = F(Y)$, $F(0) \neq 0$, $Y(0) = Y_0$. Cette technique pourra éventuellement être modifiée et étendue à d'autres types d'équations différentielles dans un travail ultérieur.

Signalons aussi que la connaissance d'autres familles génériques d'espèces (telles B ci-dessus) suggère l'étude d'autres sous-modules différentiels de $\mathbf{Q}[[\mathcal{A}]]$.

Il reste aussi du travail à accomplir concernant la racine carrée symétrique (quelques problèmes ont été soulevés dans la section 4.2.5 à ce sujet).

Bibliographie

- [An] André, D., Sur les permutations alternées, *J. math. Pures et Appl.*, **5** 1879, 31-46.
- [Ar] Artin, E., Theory of braids, *Annal of Mathematics*, **48**, 1947, 101-126.
- [CG] Benton, L.L., Char, B. W., Geddes, K. O., Gonnet, G. H., Monagan, M. B., Watt S. M., *Maple V Langage Manual*, Springer-Verlag, New-York, 1991.
- [Bi] Birman, J.S., *Braids, links and mapping class groups*, Princeton Univ. Press, 1974.
- [BM] Bousquet-Melou, M., q-Énumération de polyominos convexes, *Publications du LACIM*, Univ. du Québec à Montréal, Montréal, **9**, 1991.
- [Ca] Cartier, P., Développements récents sur les groupes de tresses, applications à la topologie et à l'algèbre, *Séminaire BOURBAKI*, no. 716, Nov. 1989.
- [Ch] Chiricota,Y., Représentation des structures en Maple, Rapport de recherche, *Département de math. et info.*, UQAM, no. 138, 1990.
- [CL] Chiricota,Y., Labelle G., Familles de solutions combinatoires de l'équation différentielle $y' = 1+y^2$ et d'équations différentielles autonomes, 1991, à paraître dans *Discrete Math.*, North-Holland.
- [CS] Chiricota,Y., Strehl V., Inversion d'espèces polynomiales, 1992, en préparation.
- [Ga] Garside, F.A., The braid group and other groups, *Quart. J. Math., Oxford (2)*, **20**, 1969, 235-254.
- [Ha] Hansen, V.L., Braids ans Covering, *London Math. Soc., Student Texts*, Cambridge Univ. Press, New York, 1989.
- [Ja1] Joyal, A., Une théorie combinatoire des séries formelles, *Adv. in Math.*, **42**, 1981, 1-82.
- [Ja2] Joyal, A., Calcul intégral combinatoire et homologie du groupe symétrique, *C. R. Math. Acad. Sci. Canada*, **7**, no. 1, 1983, 58-94.
- [Ja3] 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.
- [LG1] Labelle, G., Sur l'inversion et l'itération continue des séries formelles, *Europ. J. Comb.*, no. 1, 1980, 113-138.
- [LG2] Labelle, G., On combinatorial differential equations, *J. of Math. Analysis and Appl.*, Vol. 113, no. 2, 1986, 334-381.
- [LG3] Labelle, G., On the generalized iterates of Yeh's combinatorial K-species, *J. of Comb. Th.*, Series A, **50**, no. 2, 1989, 235-258.

- [LG4] Labelle, G., Sur la symétrie et l'asymétrie des structures Combinatoires, Actes de Colloque, LaBRI, Université Bordeaux I, Maylis Delest, Gérard Jacob et Pierre Leroux ed., 1991, 3-19 (à paraître dans *J. of Theoretical Comp. Sc.*)
- [LG5] Labelle, G., On asymmetric structures, *Discrete Math.* **99**, North-Holland, 1992, 141-164.
- [LG6] Labelle, G., Counting asymmetric enriched trees, *Journal of Symbolic Comp.*, 1991 (à paraître).
- [LJ1] Labelle, J., Applications diverses de la théorie des espèces de structures, *Ann. Sc. Math. Québec*, **7**, no. 1, 1983, 59-94.
- [LJ2] Labelle, J., Quelques espèces sur les ensembles de petite cardinalité, *Ann. Sc. Math. Québec*, **9**, no. 1, 1985, 31-58.
- [LY] Labelle, J., Yeh, Y.N., The relation between Burnside rings and combinatorial species, *J. of Comb. Th., Series A*, vol 50, no. 2, 1989, 269-284.
- [Le] Leroux, P., Methoden der Anzahlbestimmung für einige Klassen von Graphen, *Bayreuther Mathematische Schriften*, Heft 26, 1988, 1-36.
- [LM] Leroux, P., Miloudi, B., Généralisations de la formule d'Otter, *Ann. Sc. Math. Québec*, **16**, no. 1, 1992.
- [LV] Leroux, P., Viennot, G.X., Combinatorial resolution of systems of differential equations I: 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] MacDonald, I.G., Symmetric functions and Hall polynomials, Oxford University Press, London, 1979.
- [Mo] Moran, S., The mathematics of knots and braids, North-Holland mathematics studies, New-York, 1983.
- [Ro] Rotman, J.J., An introduction to the theory of groups, Allyn and Bacon, 3^e éd., Boston, 1984.
- [St] Stembridge, J., SF, librairie Maple, logiciel disponible par le réseau internet à l'adresse daisy.math.uwaterloo.ca.
- [We] Wensley, C. D., The supercharacter table of the symmetric group S_7 , *U.C.N.W. Pure Maths Preprint (preliminary version)*, Bangor (U.K.) 1983.
- [Ye1] Yeh, Y.-N., On the combinatorial species of Joyal, *Ph. D. Thesis*, State Univ. of New York at Buffalo (1985).
- [Ye2] Yeh, Y.-N., The calculus of virtual species and K-species, (G. Labelle et P. Leroux, Ed.), Lectures Notes in Math., Vol. 1234, pp.351-369, Springer-Verlag, New-York/Berlin, 1986.

Notations.

\mathbb{N}	Entiers naturels.
\mathbb{Z}	Entiers relatifs.
\mathbb{Q}	Nombres rationnels.
\mathbb{R}	Nombres réels.
\mathbb{C}	Nombres complexes.
\mathcal{A}	Espèces atomiques.
\mathcal{M}	Espèces moléculaires.
\mathcal{M}_n	Espèces moléculaires de degré $\leq n$.
\mathcal{E}	$\{E_1, E_2, E_3, \dots\}$
$\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$	Espèces ordinaires.
$\mathbb{Z}[[\mathcal{A}]]$	Espèces virtuelles.
$\mathbb{Q}[[\mathcal{A}]]$	Espèces rationnelles.
$\mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$	Espèces complexes.
$\mathbb{Q}[[\mathcal{E}]]$	Espèces ensemblistes.
Ω	$\{G : G' = 0\}$
Ω_0	$\{G : G' = 0, G(0) = 0\}$
S_n	Groupe symétrique.
$[T]_{\leq n}$	Restriction aux cardinalités $\leq n$.
$[T]_n$	Restriction à la cardinalité n .
$T_{\langle n \rangle}$	n^e amorce de solution à une équation différentielle.
$\int_J F$	Intégrale de Joyal.
$\int_o F$	Intégrale dans $\mathbb{Q}[[\mathcal{E}]]$.
\mathcal{P}_n	Ensemble des partages de n .
p_n	Nombre de partages de n .
$ U $	Cardinalité de U .
\mathbf{n}	$\{1, 2, \dots, n\}$
$\text{Aut}(T)$	Groupe des automorphismes de T .
T/G	Quotient de T par G .
$T//H$	Regroupement de T relativement à H .
$[f]_H$	Classe de f dans un regroupement rel. à H
$\text{Bij}(U, V)$	Ensemble des bijections de U dans V .
$H \approx K$	H est conjugué à K .
$H \rtimes K$	Produit semi-direct.
$\langle X \rangle$	Groupe engendré par X .
$\text{stab}(s)$	Groupe des automorphismes de s .
C	Espèce des cycles.
\mathcal{P}	Espèce des polygones.
\mathcal{P}^{bic}	Espèce des polygones bi-colorés.
E^\pm	Espèce des ensembles orientés.
α	Espèce des arbres.
\mathbf{A}	Espèce des arborescences

F^\bullet	Espèce F pointée.
\mathbf{Z}_F	Série indicatrice de F .
(G, U)	G -ensemble U .
$\mathcal{O}(H)$	Orbites de H agissant sur \mathbf{n} .
$\sqrt{F}^{(S)}$	Racine carrée symétrique.
$\sqrt[n]{F}^{(S)}$	Racine n^e symétrique.
$\sqrt[n]{F}^{(C)}$	Racine cyclique n^e .

Appendix A

Tables concernant les espèces moléculaires.

A.1 Espèces moléculaires de degrés 6 et 7.

On trouvera ici deux tables qui regroupent les espèces moléculaires rencontrées dans les sections 2.1, 2.2, 2.3 et 2.4.

Notations:

- K^+ signifie $K \cap A_6$ ou $K \cap A_7$, selon le cas.
- $K[H]$ signifie le produit en couronne de K par H .

Remarques:

- Le tableau 1 ne contient pas les espèces moléculaires de degré 6 de la forme $X^i M_k$ où $1 \leq i \leq 5$. Ces dernières se retrouvent en consultant une table des espèces moléculaires de degré < 6 .
- Le tableau 2 ne contient pas les espèces moléculaires de degré 7 de la forme $X^i M_k$ où $1 \leq i \leq 6$. Ces dernières se retrouvent en consultant une table des espèces moléculaires de degré < 7 .
- Le nom du stabilisateur est déterminé par la classe d'isomorphisme de celui-ci. Par exemple, $A_4 C_2 a$ et $A_4 C_2 b$ sont des groupes isomorphes au produit cartésien $A_4 \times C_2$, mais dans des classes de conjugaison différentes. Il en va de même pour les 3 sous-groupes de S_6 isomorphes à S_4 qui sont $S_4 b$, $S_4 c$ et $S_4 d$. Cette dénomination est empruntée à [We].
- Dans la table des espèces sur 7 points, lorsqu'un quotient par Z_2 n'a pas de référence, c'est que l'action consiste à changer l'orientation des structures.

Espèces moléculaires de degré 6.					
Stab	Générateurs	Card.	Espèce	At.	Réf.
I_6	$\langle 1 \rangle$	720	X^6		
C_{2c}	$\langle (12)(34)(56) \rangle$	360	$E_2(X^3)$	\times	
Kc	$\langle (12), (34)(56) \rangle$	180	$E_2E_2(X^2)$		
Kd	$\langle (14)(25), (14)(36) \rangle$	180	$(X^2E2(X^2))/Z_2$	\times	ex. 2.1.16
C_2^3a	$\langle (12), (34), (56) \rangle$	90	E_2^3		
C_{4b}	$\langle (1234)(56) \rangle$	180	X^6/C_{4b}	\times	ex. 2.3.1
C_4C_2a	$\langle (1234), (56) \rangle$	90	C_4E_2		
Ke	$\langle (12)(34), (13)(24)(56) \rangle$	180	$(X^2E2(X^2))/Z_2$	\times	ex. 2.3.2
C_2^3b	$\langle (12)(34), (13)(24), (56) \rangle$	90	$P_4^{\text{bic}}E_2$		
D_4b	$\langle (1324), (12)(56) \rangle$	90	$(X^2C_4)/Z_2$	\times	ex. 2.3.4
D_4c	$\langle (1324)(56), (12) \rangle$	90	$E_2(XE_2)$	\times	
D_4d	$\langle (1324)(56), (12)(56) \rangle$	90	$(X^6/C_{4b})/Z_2$	\times	ex. 2.3.3
D_4C_2a	$\langle (1324), (12), (56) \rangle$	45	P_4E_2		
A_4C_2a	$\langle (123), (12)(34), (56) \rangle$	30	$E_4^\pm E_2$		
S_4b	$\langle (1234)(56), (123) \rangle$	30	$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2$	\times	ex. 2.3.5
S_4C_2a	$\langle (1234), (123), (56) \rangle$	15	E_4E_2		
C_3b	$\langle (123)(456) \rangle$	240	$C_3(X^2)$	\times	
C_3^2a	$\langle (123), (456) \rangle$	80	C_3^2		
S_3C_3a	$\langle 12, (13), (456) \rangle$	40	E_3C_3		
S_3c	$\langle (12)(45), (13)(46) \rangle$	120	$E_3(X^2)$	\times	
$S_3^2a^+$	$\langle (123), (456), (12)(45) \rangle$	40	$(E_3^\pm E_3^\pm)/Z_2$	\times	ex. 2.3.6
S_3^2a	$\langle (12), (13), (45), (46) \rangle$	20	E_3E_3		
C_6b	$\langle (123456) \rangle$	120	C_6	\times	
S_3d	$\langle (14)(26)(35), (15)(24)(36) \rangle$	120	P_6^{bic}	\times	
D_6b	$\langle (123456), (26)(35) \rangle$	60	P_6	\times	
A_4b	$\langle (123)(456), (14)(25) \rangle$	60	$(X^6/Kd)/Z_3$	\times	ex. 2.1.17
A_4C_2b	$\langle (123)(456), (14)(25), (14)(25)(36) \rangle$	30	$C_3(E_2)$	\times	
S_4c	$\langle (123)(456), (14)(25), (14)(23)(56) \rangle$	30	$(X^6/A_4b)/Z_2$	\times	ex. 2.1.17
S_4d	$\langle (123)(456), (14)(25), (23)(56) \rangle$	30	$(X^6/A_4b)/Z_2$	\times	ex. 2.1.17
S_4C_2b	$\langle (1542), (123)(456), (14)(25)(36) \rangle$	15	$E_3(E_2)$	\times	
S_3C_3b	$\langle (163425), (123) \rangle$	40	$E_2(C_3)$	\times	ex. 2.1.18
S_3^2b	$\langle (163425), (123), (23)(56) \rangle$	20	$E_2(E_3^\pm)/Z_2$	\times	ex. 2.1.18
$C_2[S_3]a^+$	$\langle (123), (456), (14)(2635) \rangle$	20	C_3^2/Z_4	\times	ex. 2.3.7
$C_2[S_3]a$	$\langle (12), (13), (14)(25)(36) \rangle$	10	$E_2(E_3)$	\times	
A_5b	$\langle (12345), (125)(364) \rangle$	12	$X\mathcal{P}_5//A_4$	\times	ex. 2.2.10
S_5b	$\langle (12345), (125)(364), (2354) \rangle$	6	$(X^6/A_5b)/Z_2$	\times	ex. 2.3.8
A_6a	$\langle (12345), (1234)(56) \rangle$	2	E_6^\pm	\times	
S_6a	$\langle (123456), (16) \rangle$	1	E_6	\times	

Espèces moléculaires de degré 7.					
Stab	Générateurs	Card.	Espèce	At.	Réf.
I_7	$\langle 1 \rangle$	5040	X^7		
C_6c	$\langle (123)(45)(67) \rangle$	840	$C_3E_2(X^2)$		
C_6C_2a	$\langle (123)(45),(67) \rangle$	420	$C_3E_2E_2$		
S_3e	$\langle (123),(12)(45)(67) \rangle$	840	$(C_3X^2X^2)/Z_2$	x	ex. 2.4.1
D_6c	$\langle (123),(12),(45)(67) \rangle$	420	$E_3E_2(X^2)$		
D_6d	$\langle (123)(67),(12)(45) \rangle$	420	$((X^2C_3)/Z_2)E_2$		
D_6e	$\langle (123)(45)(67),(12)(45) \rangle$	420	$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	x	ex. 2.4.2
S_3Ka	$\langle (12),(13),(45),(67) \rangle$	210	$E_3E_2E_2$		
$C_{10}a$	$\langle (12345)(67) \rangle$	504	C_5E_2		
D_5b	$\langle (12345),(25)(34)(67) \rangle$	504	$(X^2C_5)/Z_2$	x	
$D_{10}a$	$\langle (12345),(25)(34),(67) \rangle$	252	X^2P_5		
H_5b	$\langle (12345),(2354)(67) \rangle$	252	$(X^2P_5)/Z_2$	x	ex. 2.4.7
H_5C_2a	$\langle (12345),(2354),(67) \rangle$	126	$E_2(P_5/Z_2)$		
A_5C_2a	$\langle (12345),(123),(67) \rangle$	42	$E_2E_5^\pm$		
S_5c	$\langle (12345),(1234)(67) \rangle$	42	$(E_2^\pm E_5^\pm)/Z_2$	x	
S_5C_2a	$\langle (12345),(1234),(67) \rangle$	21	E_5E_2		
$C_{12}a$	$\langle (123)(4567) \rangle$	420	C_3C_4		
C_6C_2b	$\langle (123)(45)(67),(46)(57) \rangle$	420	$P_4^{\text{bic}}C_3$		
D_4C_3a	$\langle (123)(4567),(46) \rangle$	210	P_4C_3		
A_4c	$\langle (123)(456),(45)(67) \rangle$	420	$(X^3P_4^{\text{bic}})/Z_3$	x	ex. 2.4.3
A_4C_3a	$\langle (123),(456),(45)(67) \rangle$	140	$C_3E_4^\pm$		
S_4C_3a	$\langle (123)(4567),(456) \rangle$	70	C_3E_4		
Q_6a	$\langle (123),(45)(67),(12)(4657) \rangle$	420	$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	x	ex. 2.4.4
C_4S_3a	$\langle (123)(4567),(12) \rangle$	210	E_3C_4		
D_6f	$\langle (123),(45)(67) \rangle$	420	$(X^2X^2C_3)/Z_2$	x	
S_3Kb	$\langle (123),(12),(45)(67),(46)(57) \rangle$	420	$E_3P_4^{\text{bic}}$		
$D_{12}a$	$\langle (123)(4567),(12)(46) \rangle$	210	$(C_3C_4)/Z_2$	x	
$D_4S_3a^+$	$\langle (123),(45)(67),(46)(57),(12)(46) \rangle$	210	$(C_3P_4^{\text{bic}})/Z_2$	x	ex. 2.4.5
$D_4S_3b^+$	$\langle (123),(45),(67),(12)(46)(57) \rangle$	210	$(C_3E_2^2)/Z_2$	x	
D_4S_3a	$\langle (123),(12),(4567),(46) \rangle$	105	$E_3E_2(E_2)$		
A_4S_3a	$\langle (123)(45)(67),(12)(456) \rangle$	70	$E_3E_4^\pm$		
S_4e	$\langle (132)(456),(45)(67),(46)(57),(12)(46) \rangle$	210	$(X^3P_4^{\text{bic}})/Z_3$	x	ex. 2.4.8
$S_4S_3a^+$	$\langle (123),(45)(67),(456),(12)(45) \rangle$	70	$(E_3^\pm E_4^\pm)/Z_2$	x	
S_4S_3a	$\langle (123),(12),(4567),(45) \rangle$	35	E_3E_4		
C_7a	$\langle (1234567) \rangle$	720	C_7	x	
D_7a	$\langle (1234567),(27)(36)(45) \rangle$	360	P_7	x	
H_7a^+	$\langle (1234567),(235)(476) \rangle$	240	C_7/Z_3	x	
H_7a	$\langle (1234567),(27)(36)(45),(235)(476) \rangle$	120	P_7/Z_3	x	ex. 2.4.6
$PSL(27)a$	$\langle (1234567),(1237645) \rangle$	30	Pl. proj.	x	
A_7a	$\langle (1234567),(12)(34) \rangle$	2	E_7^\pm	x	
S_7a	$\langle (1234567),(17) \rangle$	1	E_7	x	

A.2 Dérivée des espèces moléculaires de degrés 1 à 5.

n	Espèce	Dérivée
0	1	0
1	X	1
2	E_2	X
	X^2	$2X$
3	E_3	E_2
	C_3	X^2
	XE_2	$E_2 + X^2$
	X^3	$3X^2$
4	E_4	E_3
	E_4^\pm	C_3
	$E_2 \circ E_2$	XE_2
	XE_3	$E_3 + XE_2$
	E_2^2	$2XE_2$
	P_4^{bic}	X^3
	C_4	X^3
	XC_3	$C_3 + X^3$
	X^2E_2	$2XE_2 + X^3$
	$E_2(X^2)$	$2X^3$
	X^4	$4X^3$

n	Espèce	Dérivée
5	E_5	E_4
	E_5^\pm	E_4^\pm
	XE_4	$E_4 + XE_3$
	$\frac{P_5}{Z_2}$	C_4
	XE_4^\pm	$E_4^\pm + XC_3$
	E_2E_3	$XE_3 + E_2^2$
	P_5	$E_2(X^2)$
	$XE_2(E_2)$	$E_2(E_2) + X^2E_2$
	X^2E_3	$2XE_3 + X^2E_2$
	E_2C_3	$XC_3 + X^2E_2$
	$\frac{X^2C_3}{Z_2}$	$XC_3 + E_2(X^2)$
	C_5	X^4
	XE_2^2	$E_2^2 + 2X^2E_2$
	XP_4^{bic}	$X^4 + P_4^{bic}$
	XC_4	$X^4 + C_4$
	X^2C_3	$X^4 + 2XC_3$
	X^3E_2	$X^4 + 3X^2E_2$
	$XE_2(X^2)$	$2X^4 + E_2(X^2)$
	X^5	$5X^4$

A.3 Dérivées des espèces atomiques de degrés 6 et 7.

Dérivées des espèces atomiques de degré 6.	
Espèce	Dérivée
X^6/Kd	$3XE_2(X^2)$
X^6/C_4b	$X^5 + XE_2(X^2)$
X^6/Ke	$X^5 + XE_2(X^2)$
$(X^2C_4)/Z_2$	$XC_4 + XE_2(X^2)$
$(X^6/C_4b)/Z_2$	$X\mathcal{P}_4^{\text{bic}} + XE_2(X^2)$
$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2$	$XE_4^\pm + (E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
$(E_3^\pm E_3^\pm)/Z_2$	$2(E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
C_6	X^5
$\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$	X^5
\mathcal{P}_6	$XE_2(X^2)$
$(X^6/Kd)/Z_3$	$XE_2(X^2)$
$(X^6/A_4b)/Z_2 \cong X^6/S_4c$	XC_4
$(X^6/A_4b)/Z_2 \cong X^6/S_4d$	$X\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$
$E_2(E_3^\pm)/Z_2$	$(E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
C_3^2/Z_4	$(E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
$X\mathcal{P}_5//A_4$	\mathcal{P}_5
$(X^6/A_5b)/Z_2$	\mathcal{P}_5/Z_2
E_6^\pm	E_5^\pm
E_6	E_5

Dérivées des espèces atomiques de degré 7.	
Espèce	Dérivée
$(C_3X^2X^2)/Z_2$	$E_2(X^3) + 2X^3C_3$
$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	$X^6/Kd + 2X((E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2)$
$(X^2C_5)/Z_2$	$E_2(X^3) + XC_5$
$(X^2P_5)/Z_2$	$X^6/C_4b + X\mathcal{P}_5$
$(E_2^\pm E_5^\pm)/Z_2$	$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2 + XE_5^\pm$
$(X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$	$X^2\mathcal{P}_4^{\text{bic}} + C_3(X^2)$
$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	$X^6/C_4b + X^3C_3$
$(X^2X^2C_3)/Z_2$	$X^6/Ke + X^3C_3$
$(C_3C_4)/Z_2$	$X^2C_4/Z_2 + X((E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2)$
$(C_3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_2$	$(X^6/C_4b)/Z_2 + X((E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2)$
$(C_3E_2^2)/Z_2$	$E_2(XE_2) + C_6$
$((X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3)/Z_2$	$(X^6/C_4b)/Z_2 + E_3(X^2)$
$(E_3^\pm E_4^\pm)/Z_2$	$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2 + (E_3^\pm E_3^\pm)/Z_2$
C_7	X^6
\mathcal{P}_7	$E_2(X^3)$
C_7/Z_3	$C_3(X^2)$
\mathcal{P}_7/Z_3	C_6
$X^7/PSL(2, 7)a$	$(X^6/A_4b)/Z_2 \cong X^6/S_4d$
E_7^\pm	E_6^\pm
E_7	E_6

A.4 Polynôme indicateur de cycles (degré 6 et 7).

Polynôme indicateur de cycles des espèces moléculaires de degré 6.

H	$Z_{X^6/H}$
$[I]$	$\frac{x_1^6}{720}$
$[C_2c]$	$\frac{x_1^6}{2} + \frac{x_2^3}{2}$
$[Kc]$	$\frac{x_1^6}{4} + \frac{x_1^4x_2}{4} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{x_2^3}{4}$
$[Kd]$	$\frac{x_1^6}{4} + \frac{3x_1^2x_2^2}{4}$
$[C_2^3a]$	$\frac{x_1^6}{8} + \frac{3x_1^4x_2}{8} + \frac{3x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_2^3}{8}$
$[C_4b]$	$\frac{x_1^6}{4} + \frac{x_1^4x_2^2}{4} + \frac{x_2x_4}{2}$
$[C_4C_2a]$	$\frac{x_1^6}{8} + \frac{x_1^4x_2}{8} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_1^2x_4}{4} + \frac{x_2^3}{8} + \frac{x_2x_4}{4}$
$[Ke]$	$\frac{x_1^6}{4} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{x_2^3}{2}$
$[C_2^3b]$	$\frac{x_1^6}{8} + \frac{x_1^4x_2}{8} + \frac{3x_1^2x_2^2}{8} + \frac{3x_2^3}{8}$
$[D_4b]$	$\frac{x_1^6}{8} + \frac{3x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_1^2x_4}{4} + \frac{x_2^3}{4}$
$[D_4c]$	$\frac{x_1^6}{8} + \frac{x_1^4x_2}{4} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_2^3}{4} + \frac{x_2x_4}{4}$
$[D_4d]$	$\frac{x_1^6}{8} + \frac{5x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_2x_4}{4}$
$[D_4C_2a]$	$\frac{x_1^6}{16} + \frac{3x_1^4x_2}{16} + \frac{5x_1^2x_2^2}{16} + \frac{x_1^2x_4}{8} + \frac{3x_2^3}{16} + \frac{x_2x_4}{8}$
$[A_4C_2a]$	$\frac{x_1^6}{24} + \frac{x_1^4x_2}{24} + \frac{x_1^3x_3}{3} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_1x_2x_3}{3} + \frac{x_2^3}{8}$
$[S_4b]$	$\frac{x_1^6}{24} + \frac{x_1^3x_3}{3} + \frac{3x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_2x_4}{4}$
$[S_4C_2a]$	$\frac{x_1^6}{48} + \frac{7x_1^4x_2}{48} + \frac{x_1^3x_3}{6} + \frac{3x_1^2x_2^2}{16} + \frac{x_1^2x_4}{8} + \frac{x_1x_2x_3}{6} + \frac{x_2^3}{16} + \frac{x_2x_4}{8}$
$[C_3b]$	$\frac{x_1^6}{3} + \frac{2x_2^3}{3}$
$[C_3^2a]$	$\frac{x_1^6}{9} + \frac{4x_1^3x_3}{9} + \frac{4x_2^3}{9}$
$[S_3C_3a]$	$\frac{x_1^6}{18} + \frac{x_1^4x_2}{6} + \frac{2x_1^3x_3}{9} + \frac{x_1x_2x_3}{3} + \frac{2x_2^3}{9}$

Polynôme indicateur de cycles des espèces moléculaires de degré 6 (suite).

$[S_3c]$	$\frac{x_1^6}{6} + \frac{x_1^2x_2^2}{2} + \frac{x_3^2}{3}$
$[S_3^2a^+]$	$\frac{x_1^6}{18} + \frac{2x_1^3x_3}{9} + \frac{x_1^2x_2^2}{2} + \frac{2x_3^2}{9}$
$[S_3^2a]$	$\frac{x_1^6}{36} + \frac{x_1^4x_2}{6} + \frac{x_1^3x_3}{9} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{x_1x_2x_3}{3} + \frac{x_3^2}{9}$
$[C_6b]$	$\frac{x_1^6}{6} + \frac{x_2^3}{6} + \frac{x_3^2}{3} + \frac{x_6}{3}$
$[S_3d]$	$\frac{x_1^6}{6} + \frac{x_2^3}{2} + \frac{x_3^2}{3}$
$[D_6b]$	$\frac{x_1^6}{12} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{x_2^3}{3} + \frac{x_3^2}{6} + \frac{x_6}{6}$
$[A_4b]$	$\frac{x_1^6}{12} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{2x_3^2}{3}$
$[A_4C_2b]$	$\frac{x_1^6}{24} + \frac{x_1^4x_2}{8} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_2^3}{24} + \frac{x_3^2}{3} + \frac{x_6}{3}$
$[S_4c]$	$\frac{x_1^6}{24} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_1x_4}{4} + \frac{x_2^2}{4} + \frac{x_3^2}{3}$
$[S_4d]$	$\frac{x_1^6}{24} + \frac{3x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_2x_4}{4} + \frac{x_3^2}{3}$
$[S_4C_2b]$	$\frac{x_1^6}{48} + \frac{x_1^4x_2}{16} + \frac{3x_1^2x_2^2}{16} + \frac{x_1x_4}{8} + \frac{7x_2^3}{48} + \frac{x_2x_4}{8} + \frac{x_3^2}{6} + \frac{x_6}{6}$
$[S_3C_3b]$	$\frac{x_1^6}{18} + \frac{2x_1^3x_3}{9} + \frac{x_2^3}{6} + \frac{2x_3^2}{9} + \frac{x_6}{3}$
$[S_3^2b]$	$\frac{x_1^6}{36} + \frac{x_1^3x_3}{9} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{x_2^3}{6} + \frac{x_3^2}{9} + \frac{x_6}{3}$
$[C_2[S_3]a^+]$	$\frac{x_1^6}{36} + \frac{x_1^3x_3}{9} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{x_2x_4}{2} + \frac{x_3^2}{9}$
$[C_2[S_3]a]$	$\frac{x_1^6}{72} + \frac{x_1^4x_2}{12} + \frac{x_1^3x_3}{18} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_1x_2x_3}{6} + \frac{x_2^3}{12} + \frac{x_2x_4}{4} + \frac{x_3^2}{18} + \frac{x_6}{6}$
$[A_5b]$	$\frac{x_1^6}{60} + \frac{x_1^2x_2^2}{4} + \frac{2x_1x_5}{5} + \frac{x_3^2}{3}$
$[S_5b]$	$\frac{x_1^6}{120} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{x_1^2x_4}{4} + \frac{x_2^3}{12} + \frac{x_1x_5}{5} + \frac{x_3^2}{6} + \frac{x_6}{6}$
$[A_6a]$	$\frac{x_1^6}{360} + \frac{x_1^3x_3}{9} + \frac{x_1^2x_2^2}{8} + \frac{2x_1x_5}{5} + \frac{x_2x_4}{4} + \frac{x_3^2}{9}$
$[S_6a]$	$\frac{x_1^6}{720} + \frac{x_1^4x_2}{48} + \frac{x_1^3x_3}{18} + \frac{x_1^2x_2^2}{16} + \frac{x_1^2x_4}{8} + \frac{x_1x_2x_3}{6} + \frac{x_2^3}{48} + \frac{x_1x_5}{5} + \frac{x_2x_4}{8} + \frac{x_3^2}{18} + \frac{x_6}{6}$

Polynôme indicateur de cycles des espèces moléculaires de degré 7.

H	$Z_{X^7/H}$
[I]	$\frac{x_1^7}{5040}$
[C ₆ c]	$\frac{x_1^7}{6} + \frac{x_1^4x_3}{3} + \frac{x_1^3x_2^2}{6} + \frac{x_2^2x_3}{3}$
[C ₆ C ₂ a]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^5x_2}{6} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{12} + \frac{x_1^2x_2x_3}{3} + \frac{x_2^2x_3}{6}$
[S ₃ e]	$\frac{x_1^7}{6} + \frac{x_1^4x_3}{3} + \frac{x_1x_2^3}{2}$
[D ₆ c]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^5x_2}{3} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{4} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6}$
[D ₆ d]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^5x_2}{12} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{4} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6} + \frac{x_1x_2^3}{4}$
[D ₆ e]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{7x_1^3x_2^2}{12} + \frac{x_2^2x_3}{6}$
[S ₃ Ka]	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{5x_1^5x_2}{24} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{7x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6} + \frac{x_1x_2^3}{8} + \frac{x_2^2x_3}{12}$
[C ₁₀ a]	$\frac{x_1^7}{10} + \frac{x_1^5x_2}{10} + \frac{2x_1^2x_5}{5} + \frac{2x_2x_5}{5}$
[D ₅ b]	$\frac{x_1^7}{10} + \frac{x_1x_2^3}{2} + \frac{2x_1^2x_5}{5}$
[D ₁₀ a]	$\frac{x_1^7}{20} + \frac{x_1^5x_2}{20} + \frac{x_1^3x_2^2}{4} + \frac{x_1x_2^3}{4} + \frac{x_1^2x_5}{5} + \frac{x_2x_5}{5}$
[H ₅ b]	$\frac{x_1^7}{20} + \frac{x_1^3x_2^2}{4} + \frac{x_1x_5}{5} + \frac{x_1x_2x_4}{2}$
[H ₅ C ₂ a]	$\frac{x_1^7}{40} + \frac{x_1^5x_2}{40} + \frac{x_1^3x_2^2}{8} + \frac{x_1^3x_4}{4} + \frac{x_1x_2^3}{8} + \frac{x_1^2x_5}{10} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_2x_5}{10}$
[A ₅ C ₂ a]	$\frac{x_1^7}{120} + \frac{x_1^5x_2}{120} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{8} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6} + \frac{x_1x_2^3}{8} + \frac{x_1^2x_5}{5} + \frac{x_2x_5}{5}$
[S ₅ c]	$\frac{x_1^7}{120} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{5x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1^2x_5}{5} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_2x_3}{6}$
[S ₅ C ₂ a]	$\frac{x_1^7}{240} + \frac{11x_1^5x_2}{240} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{5x_1^3x_2^2}{48} + \frac{x_1^3x_4}{8} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6} + \frac{x_1x_2^3}{16} + \frac{x_1^2x_5}{10} + \frac{x_1x_2x_4}{8} + \frac{x_2x_3}{12} + \frac{x_2x_5}{10}$
[C ₁₂ a]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{12} + \frac{x_1^3x_4}{6} + \frac{x_1^2x_3}{6} + \frac{x_3x_4}{3}$
[C ₆ C ₂ b]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{4} + \frac{x_2^2x_3}{2}$
[D ₄ C ₃ a]	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{x_1^5x_2}{12} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{x_1^3x_2^2}{8} + \frac{x_1^3x_4}{12} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6} + \frac{x_1^2x_3}{4} + \frac{x_3x_4}{6}$
[A ₄ c]	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^3x_2^2}{4} + \frac{2x_1x_3}{3}$

Polynôme indicateur de cycles des espèces moléculaires de degré 7 (suite).

$[A_4C_{3a}]$	$\frac{x_1^7}{36} + \frac{5x_1^4x_3}{18} + \frac{x_1^3x_2^2}{12} + \frac{4x_1x_3^2}{9} + \frac{x_2^2x_3}{6}$
$[S_4C_{3a}]$	$\frac{x_1^7}{72} + \frac{x_1^5x_2}{12} + \frac{5x_1^4x_3}{36} + \frac{x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1^3x_4}{12} + \frac{x_1^2x_2x_3}{6} + \frac{2x_1x_3^2}{9} + \frac{x_2^2x_3}{12} + \frac{x_3x_4}{6}$
$[Q_6a]$	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{12} + \frac{x_1x_2x_4}{2} + \frac{x_2^2x_3}{6}$
$[C_4S_{3a}]$	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{x_1^5x_2}{8} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1^3x_4}{12} + \frac{x_1x_2^3}{8} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_2^2x_3}{12} + \frac{x_3x_4}{6}$
$[D_6f]$	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{12} + \frac{x_1x_2^3}{2} + \frac{x_2^2x_3}{6}$
$[S_3Kb]$	$\frac{x_1^7}{12} + \frac{x_1^5x_2}{4} + \frac{x_1^4x_3}{6} + \frac{x_1^3x_2^2}{12} + \frac{x_1x_2^3}{4} + \frac{x_2^2x_3}{6}$
$[D_{12a}]$	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{7x_1^3x_2}{24} + \frac{x_1^3x_4}{12} + \frac{x_1x_2^3}{4} + \frac{x_2^2x_3}{12} + \frac{x_3x_4}{6}$
$[D_4S_{3a^+}]$	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{3x_1^3x_2^2}{8} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_2^2x_3}{4}$
$[D_4S_{3b^+}]$	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{x_1^5x_2}{12} + \frac{x_1^4x_3}{12} + \frac{x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1x_2x_3}{6} + \frac{x_1x_2^3}{4} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_2^2x_3}{12}$
$[D_4S_{3a}]$	$\frac{x_1^7}{48} + \frac{5x_1^5x_2}{48} + \frac{x_1^4x_3}{24} + \frac{3x_1^3x_2^2}{16} + \frac{x_1^3x_4}{24} + \frac{x_1^2x_2x_3}{12} + \frac{3x_1x_2^3}{16} + \frac{x_1x_2x_4}{8} + \frac{x_2^2x_3}{8} + \frac{x_3x_4}{12}$
$[A_4S_{3a}]$	$\frac{x_1^7}{72} + \frac{x_1^5x_2}{24} + \frac{5x_1^4x_3}{36} + \frac{x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1^2x_2x_3}{3} + \frac{x_1x_2^3}{8} + \frac{2x_1x_3^2}{9} + \frac{x_2^2x_3}{12}$
$[S_4e]$	$\frac{x_1^7}{24} + \frac{3x_1^3x_2^2}{8} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_1x_3^2}{3}$
$[S_4S_{3a^+}]$	$\frac{x_1^7}{72} + \frac{5x_1^4x_3}{36} + \frac{7x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{2x_1x_3^2}{9} + \frac{x_2^2x_3}{12}$
$[S_4S_{3a}]$	$\frac{x_1^7}{144} + \frac{x_1^5x_2}{16} + \frac{5x_1^4x_3}{72} + \frac{7x_1^3x_2^2}{48} + \frac{x_1^3x_4}{24} + \frac{x_1^2x_2x_3}{4} + \frac{x_1x_2^3}{16} + \frac{x_1x_2x_4}{8} + \frac{x_1x_3^2}{9} + \frac{x_2^2x_3}{24} + \frac{x_3x_4}{12}$
$[C_7a]$	$\frac{x_1^7}{7} + \frac{6x_7}{7}$
$[D_7a]$	$\frac{x_1^7}{14} + \frac{x_1x_2^3}{2} + \frac{3x_7}{7}$
$[H_7a^+]$	$\frac{x_1^7}{21} + \frac{2x_1x_3^2}{3} + \frac{2x_7}{7}$
$[H_7a]$	$\frac{x_1^7}{42} + \frac{x_1x_2^3}{6} + \frac{x_1x_3^2}{3} + \frac{x_1x_6}{3} + \frac{x_7}{7}$
$[PSL(2, 7)a]$	$\frac{x_1^7}{168} + \frac{x_1^5x_2}{8} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_1x_3^2}{3} + \frac{2x_7}{7}$
$[A_7a]$	$\frac{x_1^7}{2520} + \frac{x_1^4x_3}{36} + \frac{x_1^3x_2^2}{24} + \frac{x_1^2x_5}{5} + \frac{x_1x_2x_4}{4} + \frac{x_1x_3^2}{9} + \frac{x_2^2x_3}{12} + \frac{2x_7}{7}$
$[S_7a]$	$\frac{x_1^7}{5040} + \frac{x_1^5x_2}{240} + \frac{x_1^4x_3}{72} + \frac{x_1^3x_2^2}{48} + \frac{x_1^3x_4}{24} + \frac{x_1^2x_2x_3}{12} + \frac{x_1x_2^3}{48} + \frac{x_1^2x_5}{10} + \frac{x_1x_2x_4}{8} + \frac{x_1x_3^2}{18} + \frac{x_2^2x_3}{24} + \frac{x_1x_6}{6} + \frac{x_2x_5}{10} + \frac{x_3x_4}{12} + \frac{x_7}{7}$

A.5 Décomposition moléculaire de l'espèce des arborescences sur $n \leq 10$ points.

Décomposition moléculaire de l'espèce A ($n \leq 10$).	
n	$[A]_{=n}$
1	X
2	X^2
3	$X^3 + XE_2(X)$
4	$2X^4 + X^2E_2(X) + XE_3(X)$
5	$3X^5 + 3X^3E_2(X) + X^2E_3(X) + XE_4(X) + XE_2(X^2)$
6	$6X^6 + 6X^4E_2(X) + 3X^3E_3(X) + X^2E_2(X)^2 + X^2E_4(X) + 2X^2E_2(X^2) + XE_5(X)$
7	$12X^7 + 14X^5E_2(X) + 6X^4E_3(X) + 2X^3E_2(X)^2 + 3X^3E_4(X) + 3X^3E_2(X^2) + 2X^2E_2(X)E_3(X) + X^2E_5(X) + XE_2(X)E_2(X^2) + XE_2(XE_2(X)) + XE_6(X) + XE_3(X^2) + XE_2(X^3)$
8	$25X^8 + 32X^6E_2(X) + 14X^5E_3(X) + 8X^4E_2(X)^2 + 6X^4E_4(X) + 7X^4E_2(X^2) + 5X^3E_2(X)E_3(X) + 3X^3E_5(X) + 2X^2E_2(X)E_4(X) + 3X^2E_2(X)E_2(X^2) + X^2E_3(X)^2 + 2X^2E_2(XE_2(X)) + X^2E_6(X) + 2X^2E_3(X^2) + 2X^2E_2(X^3) + XE_3(X)E_2(X^2) + XE_7(X)$
9	$52X^9 + 75X^7E_2(X) + 32X^6E_3(X) + 23X^5E_2(X)^2 + 14X^5E_4(X) + 17X^5E_2(X^2) + 18X^4E_2(X)E_3(X) + 6X^4E_5(X) + X^3E_2(X)^3 + 5X^3E_2(X)E_4(X) + 9X^3E_2(X)E_2(X^2) + 2X^3E_3(X)^2 + 4X^3E_2(XE_2(X)) + 3X^3E_6(X) + 3X^3E_3(X^2) + 4X^3E_2(X^3) + 2X^2E_2(X)E_5(X) + 2X^2E_3(X)E_4(X) + 3X^2E_3(X)E_2(X^2) + X^2E_7(X) + XE_2(X)E_2(XE_2(X)) + XE_2(X)E_3(X^2) + XE_2(X)E_2(X^3) + XE_4(X)E_2(X^2) + XE_2(XE_3(X)) + XE_2(X^2E_2(X)) + XE_8(X) + 2XE_2(X^4) + XE_4(X^2)$
10	$113X^{10} + 177X^8E_2(X) + 75X^7E_3(X) + 68X^6E_2(X)^2 + 32X^6E_4(X) + 39X^6E_2(X^2) + 51X^5E_2(X)E_3(X) + 14X^5E_5(X) + 5X^4E_2(X)^3 + 18X^4E_2(X)E_4(X) + 26X^4E_2(X)E_2(X^2) + 8X^4E_3(X)^2 + 9X^4E_2(XE_2(X)) + 6X^4E_6(X) + 7X^4E_3(X^2) + 8X^4E_2(X^3) + 4X^3E_2(X)^2E_3(X) + 5X^3E_2(X)E_5(X) + 5X^3E_3(X)E_4(X) + 9X^3E_3(X)E_2(X^2) + 2X^2E_2(X)^2E_2(X^2) + 3X^3E_7(X) + 2X^2E_2(X)E_2(XE_2(X)) + 2X^2E_2(X)E_6(X) + 3X^2E_2(X)E_3(X^2) + 3X^2E_2(X)E_2(X^3) + 2X^2E_3(X)E_5(X) + X^2E_4(X)^2 + 3X^2E_4(X)E_2(X^2) + X^2E_2(X^2)^2 + 2X^2E_2(XE_3(X)) + 2X^2E_2(X^2E_2(X)) + X^2E_8(X) + 4X^2E_2(X^4) + 2X^2E_4(X^2) + XE_3(X)E_2(XE_2(X)) + XE_3(X)E_3(X^2) + XE_3(X)E_2(X^3) + XE_2(X^2)E_5(X) + XE_3(X^3) + XE_3(XE_2(X)) + XE_9(X)$

A.6 Décomposition moléculaire de l'espèce des arbres sur $n \leq 10$ points.

Décomposition moléculaire de l'espèce α ($n \leq 10$).	
n	$[\alpha]_{=n}$
1	X
2	$E_2(X)$
3	$XE_2(X)$
4	$XE_3(X) + E_2(X^2)$
5	$X^3E_2(X) + XE_4(X) + XE_2(X^2)$
6	$X^4E_2(X) + X^3E_3(X) + E_2(X^2)X^2 + XE_5(X) + E_2(XE_2(X)) + E_2(X^3)$
7	$X^7 + 2X^5E_2(X) + X^4E_3(X) + X^3E_4(X) + X^2E_2(X)E_3(X) + E_2(X^2)XE_2(X) + XE_6(X) + E_3(X^2)X + E_2(X^3)X + E_2(XE_2(X))X$
8	$X^8 + 4X^6E_2(X) + 2X^5E_3(X) + X^4E_2(X)^2 + X^4E_4(X) + X^4E_2(X^2) + X^3E_2(X)E_3(X) + X^3E_5(X) + X^2E_2(X)E_4(X) + E_2(X^2)X^2E_2(X) + E_2(XE_2(X))X^2 + E_3(X^2)X^2 + E_2(X^3)X^2 + E_2(X^2)XE_3(X) + XE_7(X) + E_2(XE_3(X)) + 2E_2(X^4) + E_2(X^2E_2(X))$
9	$3X^9 + 8X^7E_2(X) + 4X^6E_3(X) + 3X^5E_2(X)^2 + 2X^5E_4(X) + 3X^5E_2(X^2) + 4X^4E_2(X)E_3(X) + X^4E_5(X) + X^3E_2(X)E_4(X) + 2X^3E_2(X^2)E_2(X) + X^3E_6(X) + X^3E_2(XE_2(X)) + X^3E_2(X^3) + X^2E_2(X)E_5(X) + X^2E_3(X)E_4(X) + X^2E_2(X^2)E_3(X) + XE_2(X^3)E_2(X) + XE_2(XE_2(X))E_2(X) + XE_3(X^2)E_2(X) + XE_2(X^2)E_4(X) + XE_8(X) + XE_4(X^2) + XE_2(X^2E_2(X)) + 2XE_2(X^4) + XE_2(XE_3(X))$
10	$6X^{10} + 17X^8E_2(X) + 8X^7E_3(X) + 7X^6E_2(X)^2 + 4X^6E_4(X) + 5X^6E_2(X^2) + 8X^5E_2(X)E_3(X) + 2X^5E_5(X) + X^4E_2(X)^3 + 4X^4E_2(X)E_4(X) + X^4E_3(X)^2 + 5X^4E_2(X^2)E_2(X) + X^4E_6(X) + X^4E_3(X^2) + X^4E_2(X^3) + 2X^4E_2(XE_2(X)) + X^3E_2(X)^2E_3(X) + X^3E_2(X)E_5(X) + X^3E_3(X)E_4(X) + 2X^3E_2(X^2)E_3(X) + X^3E_7(X) + X^2E_2(X^2)E_2(X)^2 + X^2E_2(X)E_6(X) + X^2E_3(X)E_5(X) + X^2E_3(X^2)E_2(X) + X^2E_2(X^3)E_2(X) + X^2E_2(X^2)E_4(X) + X^2E_2(X^2E_2(X)) + 2X^2E_2(X^4) + X^2E_2(XE_3(X)) + X^2E_4(X^2) + XE_3(X^2)E_3(X) + XE_2(XE_2(X))E_3(X) + XE_2(X^3)E_3(X) + XE_2(X^2)E_5(X) + XE_3(XE_2(X)) + XE_3(X^3) + XE_9(X) + E_2(XE_2(X^2)) + E_2(X^2E_3(X)) + E_2(XE_4(X)) + 3E_2(X^5) + 3E_2(X^3E_2(X))$

A.7 Exemple d'utilisation de la librairie Struct.

Cet exemple illustre comment on peut trouver quelle est la classe de conjugaison du stabilisateur d'une structure. La structure donnée ici est obtenue par regroupement de l'espèce $X\mathcal{P}_5$ relativement au groupe alterné A_4 (voir l'exemple 2.2.10). La table `tabSG` contient les représentants des classes de conjugaisons de sous-groupes de S_6 .

```

|\\^|      MAPLE V
.-\\|  /|_. Copyright (c) 1981-1990 by the Univ. of Waterloo.
\ MAPLE / All rights reserved.
<____ ____> MAPLE is a registered trademark of
               Waterloo Maple Software.

> rsta(); # Chargement de l'environnement.

> s:=[1,{ {2,3}, {3,4}, {4,5}, {5,6}, {6,1}}];
      s := [1, {{1, 6}, {5, 6}, {4, 5}, {3, 4}, {2, 3}}]

> H:=genSG([[2,5,6,3,1,4],[4,3,2,1,5,6]],6);
H := {[4, 3, 2, 1, 5, 6], [2, 5, 6, 3, 1, 4], [1, 2, 3, 4, 5, 6],
       [3, 5, 6, 2, 4, 1], [6, 4, 1, 5, 2, 3], [2, 6, 5, 3, 4, 1],
       [4, 2, 3, 1, 6, 5], [5, 4, 1, 6, 3, 2], [1, 3, 2, 4, 6, 5],
       [6, 1, 4, 5, 3, 2], [3, 6, 5, 2, 1, 4], [5, 1, 4, 6, 2, 3]}

> t:=regroupe(H,s);
      {[1, {{5, 6}, {3, 4}, {2, 4}, {3, 5}, {2, 6}}], 
       [4, {{5, 6}, {1, 3}, {2, 5}, {1, 2}, {3, 6}}], 
       [5, {{1, 6}, {2, 3}, {1, 3}, {2, 4}, {4, 6}}], 
       [6, {{4, 5}, {3, 4}, {2, 3}, {1, 5}, {1, 2}}], 
       [3, {{2, 5}, {4, 6}, {1, 5}, {2, 6}, {1, 4}}], 
       [2, {{1, 6}, {4, 5}, {3, 5}, {1, 4}, {3, 6}}]}

> Q:=stab(t);

> classe(Q,tabSG);
[A5b]

> quit;

```

A.8 Exemple d'utilisation de la librairie EqDiff.

L'exemple donné ici concerne les équations différentielles. La variable `W3` est prédéfinie; c'est le polynôme à coefficients indéterminés (ces coefficients sont les variables indicées `A[i,j]`) comportant les espèces jusqu'à la cardinalité 3. L'instruction `solve(coeffM(diff(W3,X)))` retourne les conditions sur les coefficients pour que $(W3)' = 0$. Après avoir fait `assign("")`; on obtient les éléments de Ω jusqu'à la cardinalité 3 paramétrés par `A[1]`, `A[2,2]`, `A[3,2]` et `A[3,4]`. On trouvera ensuite un exemple d'utilisation de la procédure `intc` qui implémente l'intégrale dans `N[[A]]`.

```

| \^/|      MAPLE V
.-| \| | /|_. Copyright (c) 1981-1990 by the Univ. of Waterloo.
\  MAPLE / All rights reserved.
<---- ____> MAPLE is a registered trademark of
| Waterloo Maple Software.

```

```

> reqd(); # Chargement de l'environnement.
> W3;

$$\begin{aligned} & A[1] + A[1, 1] X + A[2, 1] E2(X) + A[2, 2] X^2 + A[3, 1] E3(X) \\ & + A[3, 2] C3(X) + A[3, 3] X E2(X) + A[3, 4] X^3 \end{aligned}$$

> solve(coeffM(diff(W3,X)));

$$\begin{aligned} & \{A[2, 2] = A[2, 2], A[3, 2] = A[3, 2], A[3, 4] = A[3, 4], \\ & A[3, 3] = -3 A[3, 4] - A[3, 2], \\ & A[3, 1] = 3 A[3, 4] + A[3, 2], \\ & A[2, 1] = -2 A[2, 2], A[1, 1] = 0\} \end{aligned}$$

> assign("");
> expand(W3);

$$\begin{aligned} & A[1] - 2 A[2, 2] E2(X) + A[2, 2] X^2 + 3 A[3, 4] E3(X) \\ & + A[3, 2] E3(X) + A[3, 2] C3(X) - 3 A[3, 4] X E2(X) \\ & - A[3, 2] X E2(X) + A[3, 4] X^3 \end{aligned}$$

> diff(" ,X);

$$0$$

> restri("",2,'=');

$$- 2 A[2, 2] E2(X) + A[2, 2] X^2$$

> diff(E5(X)+X^5+X*E4(X),X);

$$2 E4(X) + 5 X^4 + X E3(X)$$

> intc("");

$$\{5 C5(X) + X E4(X) + E5(X), E5(X) + X^5 + X E4(X)\}$$

> quit;

```

A.9 Procédures pour manipuler les structures combinatoires.

A.9.1 Fichier struct.

Ce fichier contient les procédures pour définir les structures, calculer la matrice d'adjacence du graphe du type d'une espèce moléculaire et calculer le stabilisateur d'une structure.

Note: Nous n'avons mis que les entêtes des procédures dont le rôle est évident et dont la programmation ne pose pas de problème.

r et *t* doivent être indéterminées, ces variables sont utilisées par la procédure MatAdj.

```
r:='r';
t:='t';
```

Travail sur les permutations.

Retourne la permutation (sur {1,2,...,n}) inverse de *p* (sous la forme d'une liste).
inv := proc(*p*)

Produit de deux permutations (*p* et *q* sous la forme de listes).
prod := proc(*p,q*)

Signature (*p* sous la forme d'une liste).
sgn := proc(*p*)

Compare deux permutations (listes) dans l'ordre lexicographique.
plpet := proc(*p,q*)

Retourne la permutation la plus petite dans la liste.
pmin := proc(*lPerm*)

Calcul de la classe latérale *gK*.
cLat := proc(*g,K*)

Calcul de la permutation suivante dans l'ordre lexicographique.
permsucc := proc(*p*)

Les fonctions *action_1* et *action* font agir une permutation sur une structure. La variable *sigma* est une permutation donnée sous la forme d'une liste sur {1,2,...,n} et *struct* est la structure.

action := proc(*sigma,struct*)

```
    eval(action_1(inv(sigma),struct))
```

end;

action_1 := proc(*sigma,struct*)

```
    map('proc(fact,sigma)
```

```
        if type(fact,integer)
```

```
            then RETURN(sigma[fact])
```

```
            else RETURN(action_1(sigma,fact)) fi
```

```
        end',
```

```
        struct,sigma);
```

end;

Retourne l'ensemble sur lequel vit la structure *s*.

ensSJ := proc(*s*)

```
    RETURN({ epluche(s) } )
```

```
end;
```

La fonction suivante retourne la cardinalité de l'ensemble sur lequel vit la structure *s*.

```
cardSJ :=proc(s)
```

```
    RETURN(nops(ensSJ(s)))
```

```
end;
```

Si on fournit une structure d'un type donnée à la procédure suivante celle-ci nous retourne l'ensemble des structures de l'espèce moléculaire à laquelle appartient cette structure.

```
genStruct := proc(s)
```

```
    local E,Sn,i;
```

```
    Sn:=permute(cardSJ(s));
```

```
    E:={};
```

```
    for i from 1 to nops(Sn) do
```

```
        E:=E union {action(Sn[i],s)}; od;
```

```
    RETURN(E);
```

```
end;
```

Action d'un sous-groupe sur une structure. Cette procédure permet de construire des structures par regroupement. Par exemple, l'appel

```
regroupe({[1,2,3,4,5,6],[2,1,4,3,5,6]},{Eor(1,2),Eor(3,4,5,6)});
```

définit une $(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2$ -structure.

```
regroupe:=proc(H,s)
```

```
    map('proc(g,s) action(g,s) end',convert(H,set),s)
```

```
end;
```

Cette fonction épingle une structure, c.-à-d. retourne la suite des entiers sur lesquels vit la structure.

```
epluche := proc(s)
```

```
    if type(s,numeric)
```

```
        then RETURN(s)
```

```
        else RETURN(op(map('epluche',s)) fi)
```

```
end;
```

Retourne la position de l'élément minimum d'une liste. Ce dernier est celui qui contient ou est le plus petit entier. Par exemple, dans $[\{ 2,3 \} , 4 , \{ \{ 1 \} , 5 \}]$ c'est $\{ \{ 1 \} , 5 \}$, la valeur 3 est retournée.

```
posmin := proc(liste)
```

La procédure suivante trouve la permutation *sigma* induite par les arguments passés à une structure. La variable *sigma* est une permutation des entiers \$1..nargs.

```
permInd := proc()
```

```
    local i,m,f,g;
```

```
    m:=[${'min(epluche(args[i]))',i=1..nargs}];
```

```
    f:=sort(m);
```

```
    for i from 1 to nargs do
```

```
        g[f[i]]:=i od;
```

```
    RETURN([${'g[m[i]]',i=1..nargs}]);
```

```
end;
```

Retourne la permutation identité sur [n].

```
Id := proc(n)
```

Quelques structures.

La procédure C représente une structure de type "cycle".

```

C := proc()
  local sigma,tau,i,K;
  sigma:=permInd(args);
  K est le groupe cyclique d'ordre nargs.
  K:=genSG([rho(nargs)],nargs);
  tau:=pmin(clLat(sigma,K));
  sigma:=prod(inv(sigma),tau);
  RETURN(evaln(C(`$('args[sigma[i]]','i'=1..nargs))))))
end;

La fonction Eor représente l'espèce "ensemble orienté".
Eor := proc()
  local sigma,i;
  sigma := inv(permInd(args));
  Note: sgn(sigma)=sgn(inv(sigma)).
  if sgn(sigma)=1
    then RETURN(evaln(Eor(`$('args[sigma[i]]','i'=1..nargs)))))
    else RETURN(evaln(Eor(`$('args[sigma[i]]','i'=1..(nargs-2)),
      args[sigma[nargs]],
      args[sigma[nargs-1]]))))
  fi
end;

Structure  $S_n/S_2$ . Ici,  $S_2 = \langle (1, 2) \rangle$ .
SS2 := proc()
  local sigma,tau,i,K;
  sigma:=permInd(args);
  K est le sous-groupe  $S_2 < S_k$ .
  K:={[$1..nargs],[2,1,$3..nargs] };
  tau:=pmin(clLat(sigma,K));
  sigma:=prod(inv(sigma),tau);
  RETURN(evaln(SS2(`$('args[sigma[i]]','i'=1..nargs)))))
end;

Structure polygone.
P := proc()
  local sigma,tau,i,D;
  sigma:=permInd(args);
  D est le sous-groupe diédral d'ordre nargs.
  D:=genSG([rho(nargs),tau(nargs)],nargs);
  tau:=pmin(clLat(sigma,D));
  sigma:=prod(inv(sigma),tau);
  RETURN(evaln(P(`$('args[sigma[i]]','i'=1..nargs)))))
end;

Permutation cyclique 1->n, 2->1, 3->2, ..., n->(n-1).
rho := proc(n)

```

Transposition de 1 et 2 dans S_n .

tau := proc(n)

Procédures pour calculer la matrice d'adjacence codant le type d'une espèce moléculaire.

Fonction auxiliaire qui donne l'indice d'un item dans une liste. 0 est retourné sinon.
posit := proc(item,liste)

Procédure pour créer la matrice d'adjacence du graphe du type de l'espèce à laquelle appartient la structure s (voir [LJ2, LG2]). Les générateurs de S_n utilisés sont la transposition $(1,2)$ et le cycle $(1,2,\dots,n)$. Une liste de deux éléments est retournée: le premier est une liste des structures qui correspond à l'ordre des lignes et des colonnes de la matrice, le deuxième est la matrice elle-même.

MatAdj := proc(s)

```

local Mat,Lstruct,n,i,j,imtau,imrho;
# Lstruct est la liste des structures.
# n est la cardinalité de l'ensemble sous-jacent.
# Mat est la liste des ligne de la matrice.
Lstruct:=[op(genStruct(s))];
n:=cardSJ(s);
Mat:=array(1..nops(Lstruct),1..nops(Lstruct));
# On débute par remplir la matrice de 0.
for i from 1 to nops(Lstruct) do
    for j from 1 to nops(Lstruct) do
        Mat[i,j]:=0; od; od;
for i from 1 to nops(Lstruct) do
    imtau:=action(tau(n),Lstruct[i]);
    imrho:=action(rho(n),Lstruct[i]);
    Mat[i,posit(imtau,Lstruct)]:=Mat[i,posit(imtau,Lstruct)]+'t';
    Mat[i,posit(imrho,Lstruct)]:=Mat[i,posit(imrho,Lstruct)]+'r';
    od;
RETURN([Lstruct,op(Mat)]);
end;
```

La procédure suivante calcule (de façon systématique) le stabilisateur d'une structure.

stab := proc(s)

```

local i,Sn,ensStab;
Sn:=permute(cardSJ(s));
ensStab:={};
for i from 1 to nops(Sn) do
    if action(Sn[i],s)=s
        then ensStab:=ensStab union {Sn[i]} fi od;
RETURN(ensStab)
end;
```

Variante qui utilise moins de mémoire.

stab2 := proc(s)

```

local p,ident,ensStab;
ident:=Id(cardSJ(s));
ensStab:={ident};
p:=permsucc(ident);
while p<>ident do
    if action(p,s)=s
        then ensStab:=ensStab union {p} fi;
    p:=permsucc(p);
    od;
RETURN(ensStab)
```

```

end;

save r,t,inv,prod,sgn,plpet,pmin,clLat,action,action_1,ensSJ,
      cardSJ,genStruct,regroupe,epluche,posmin,permsucc,
      permInd,rho,tau,posit,MatAdj,stab,stab2,Id,
      P,C,Eor,SS2,
      ‘‘.YEsp.’/Struct/struct.m’;

```

A.9.2 Fichier Z.

Calcul du polynôme indicateur de cycles.

On utilise ici certaines fonctions du fichier **struct**.

Trouve les structures fixées par la permutation g . Les structures sont celles de l'espèce moléculaire à laquelle appartient la structure s . NOTE: si $n=ensSJ(s)$, il faut que g soit une permutation sur n points.

```

Fix := proc(s,g)
local E;
E:=genStruct(s);
RETURN(select('proc(s,g)
                  if action(g,s)=s then true else false fi
                  end',E,g))
end;

```

Variante de la procédure précédente (**fix**). Ici on donne l'espèce comme argument.

```

FixE := proc(g,Esp)
select('proc(s,g) if action(g,s)=s then true else false fi end',Esp,g)
end;

```

Nombre de structures fixées.

```

fix := proc(s,g)
fixE:=proc(g,Esp)

```

Engendre une permutation générique de type cyclique *part* (un partage). La permutation est retournée sous la forme de cycles disjoints. Exemple: `genPermCyc([2,2,1])` retourne `[[1,2],[3,4],[5]]`

```

genPermCyc := proc(part)
local i,p,sompart;
sompart:=part[1];
p:=[$1..sompart];
for i from 2 to nops(part) do
  p:=p,[$(sompart+1)..(sompart+part[i])];
  sompart:=sompart+part[i];
od;
RETURN([p]);
end;

```

Variation de la procédure `genPermCyc` où la permutation est retournée sous la forme de liste. Exemple: `genPerm([2,2,1])` retourne `[2,1,4,3,5]`

```

genPerm := proc(part)

```

Retourne le monôme dont les exposants sont ceux du partage *part*. Exemple: `expMon('x',[1,1,2,2,2,3])` retourne `x1^2*x2^3*x3`.

```

expMon := proc(var,part)

```

Calcul de $\prod i^{m_i(part)} m_i(part)!$, où $m_i(part)$ est le nombre de part égales à i dans $part$.
aut:=proc(part)

Polynôme indicateur de cycle de l'espèce à laquelle appartient la structure **s**.

Z := proc(s)

```
local Pn,i,E;
Pn:=[gPart(cardSJ(s))];
E:=genStruct(s);
RETURN(sum('fixE(genPerm(Pn[i]),E)*expMon('x',Pn[i])/aut(Pn[i]),
i=1..nops(Pn)));
end;
```

Calcul du **Z** d'une espèce moléculaire à l'aide du stabilisateur de la structure.

Zh:=proc(H)

```
local i;
RETURN(1/nops(H)*lsum(
map('proc(t) product('x.i`^t[i]',i=1..nops(t)) end',
map('pctype',map('decomp',convert(H,list))))));
end;
```

```
save imam,cycle,encycles,ctype,isom,isomsys,isomcl,
ordre,Fix,FixE,fix,fixE,genPermcyc,genPerm,expMon,aut,Z,Zh,
‘‘.YStr.’/Z.m’;
```

A.9.3 Fichier grconj.

Isomorphisme d'espèces moléculaires. Utilise certaines fonction du fichier **struct**.

Retourne l'image d'un entier par une permutation p .
ima := proc(i,p)

Retourne le cycle dont fait partie i dans p .

cyc := proc(i,p)

Retourne la décomposition cyclique d'une permutation donnée sous la forme d'une liste. Les cycles sont représentés par des listes écrites avec l'élément maximal en premier et placés en ordre croissant. On peut aussi donner une liste, un ensemble ou une table de permutations comme argument.

decomp := proc(liste)

Retourne la longueur du plus grand cycle dans une suite.
cycleMax := proc()

Retourne le type cyclique d'une permutation donnée sous forme d'une liste de cycles. Par exemple, **pc-type([[3],[2,3,7],[4,6,5]])** retournera [1, 0, 2].

pctype := proc(p)

Type cyclique d'une permutation donnée sous la forme d'une liste.
mctype := proc(liste) pctype(decomp(liste)) end;

La procédure suivante retourne un tableau indicé par les types cycliques des permutations du sous-groupe H donné comme argument. Notation: $t(g)$ = type cyclique de la permutation g , c'est un vecteur tel que $t(g)[i]$ = nombre de cycles de longueur i dans g . $\text{clConj}(H)[t(g)]$ contient toutes les permutations de H qui ont le même type que g . H est donné sous la forme d'un ensemble de permutations. Les permutations sont données et retournées sous la forme de listes.

```
clConj :=proc(H)
    local C,types,i;
    #  $C$  = tableau indicé par les types:  $C[t(g)] = \{\text{perm. de type } t(g)\}$ .
    # Initialisation.
    types:=map('mctype',H);
    C:=table();
    for i from 1 to nops(types) do
        C[op(types[i])]:= {};
    od;
    # Ou encore: map(proc(t) C[op(t)]:={}) end,types;
    for i from 1 to nops(H) do
        C[op(mctype(H[i]))]:=C[op(mctype(H[i]))] union {H[i]};
    od;
    # Ou encore: map(proc(g) C[op(mctype(g))]:=C[op(mctype(g))] union {g}) end,H);
    RETURN(op(C));
end;
```

Prend un ensemble de classes de conjugaison et retourne l'ensemble des couples $[t(C),|C|]$ pour chaque classe. Cl est une table indicée par les types cycliques.

```
indcard := proc(Cl)
```

$I1$ et $I2$ sont des couples de la forme $[t(C),|C|]$, où C est une classe de conjugaison de permutations d'un sous-groupe de S_n . Les classes sont ordonnées 1) selon leur cardinalité et ensuite 2) par ordre lexicographique inverse du type cyclique. Cette fonction met un ordre total sur les couples $[t(C),|C|]$.

```
cplpet := proc(I1,I2)
    local t1,t2,maxl;
    if op(2,I1)<op(2,I2)
        then RETURN(true)
    elif op(2,I1)>op(2,I2)
        then RETURN(false)
    else
        # On compare les types par ordre lexicographique
        # inverse en prenant soin de compléter par des 0.
        maxl:=max(nops(op(1,I1)),nops(op(1,I2)));
        t1:=[op(op(1,I1)),0$(maxl-nops(op(1,I1)))];
        t2:=[op(op(1,I2)),0$(maxl-nops(op(1,I2)))];
        RETURN(not plpet(t1,t2));
    fi;
end;
```

Retourne l'indice de la plus petite classe. L'argument est une liste de couples (t,c) .

```
plpetCl := proc(lindcard)
```

Retourne gpg^{-1} .
 $\text{conj} := \text{proc}(p,g)$

Retourne $\{hgh^{-1} : h \in K\}$.
clconjG := proc(*g,K*)

Retourne la classe de conjugaison de *p* dans S_n .
clconjSn := proc(*p*)

Retourne gHg^{-1} .
conjSG := proc(*H,g*)

Retourne $\{gHg^{-1} : g \in S_n\}$ (où $H \leq S_n$).
clconjSG := proc(*H*)

Détermine si deux groupes (ou ensembles) de permutations sont conjugués par *g* en faisant une recherche systématique.

```
permconj := proc(H1,H2,g)
    local i;
    if nops(H1)<>nops(H2)
        then RETURN(false)
    else
        i:=1;
        while i<=nops(H1) do
            if not member(conj(H1[i],g),H2)
                then RETURN(false); fi;
            i:=i+1;
        od;
    RETURN(true);
    fi;
end;
```

Retourne true si *H1* et *H2* sont conjugués, faux sinon. On procède par la méthode systématique.
grconjsysp := proc(*H1,H2*)

```
local i,Sn;
if H1=H2 then RETURN(true) fi;
# Les orbites des deux groupes doivent être de même type.
if pctype(orbites(H1))<>pctype(orbites(H2))
    then RETURN(false) fi;
if nops(H1)<>nops(H2)
    then RETURN(false)
else
    Sn:=permute(nops(op(1,H1)));
    for i from 1 to nops(Sn) do
        if permconj(H1,H2,Sn[i])
            then RETURN(true) fi; od;
    RETURN(false);
fi;
end;
```

Détermine si les deux sous-groupes sont conjugués. On ne teste pas toutes les permutations. Dès qu'une permutation qui conjugue *H1* et *H2* est trouvée, on retourne true.
grconjclp := proc(*H1,H2*)

```

local Cl1,Cl2,i,j,indC,clmin,Sn,conjP;
if H1=H2 then RETURN(true) fi;
if nops(H1)<>nops(H2) then RETURN(false) fi;
# Les orbites des deux groupes doivent être de même type.
if pctype(orbites(H1))<>pctype(orbites(H2))
    then RETURN(false) fi;
Cl1:=clConj(H1);
Cl2:=clConj(H2);
# Si Cl1 et Cl2 n'ont pas les mêmes ensembles d'indices,
# c'est que certains types cycliques ne sont pas les mêmes
# dans H1 et H2 (dont H1 et H2 ne sont pas conj.).
indC:=indcard(op(Cl1));
if {indC}<>{indcard(op(Cl2))}
    then RETURN(false) fi;
# A ce stade, pour chaque type cyclique t, les classes dans H1 et H2 de type
# t ont le même nombre d'éléments, il faut maintenant travailler au niveau
# des classes elles-mêmes. On cherche les permutations qui conjuguent les classes
# en commençant par les plus grandes La ligne suivante ote le couple (t ,c)
# qui correspond à la classe de la permutation id.
indC:=indC minus { plpetCl(indC) };
Sn:=permute(nops(H1[1]));
clmin:=plpetCl(indC);
indC := convert(indC minus { plpetCl(indC) },list);
# On passe une à une toutes les permutations de Sn en vérifiant
# si elles conjuguent la plus petite classe de Cl1 et Cl2,
# ensuite si elles conjuguent toutes les autres classes.
for i from 1 to nops(Sn) do
    if permconj(Cl1[op(clmin[1])],Cl2[op(clmin[1])],Sn[i])
        then
            conjP:=true;
            j:=1;
            while (conjP and (j<=nops(indC))) do
                if not permconj(Cl1[op(op(1,indC[j]))],
                    Cl2[op(op(1,indC[j]))],Sn[i])
                    then conjP:=false fi;
                j:=j+1; od;
                # Si conjP est vrai, c'est que toutes les classes
                # sont conjuguées par la perm. Sn[i].
                if conjP then RETURN(true) fi;
            fi;
        od;
    RETURN(false);
end;
Détermine si deux structures appartiennent à des espèces isomorphes en vérifiant si leur stabilisateurs sont
conjugués. On fait une recherche systématique d'une permutation qui conjugue les deux stabilisateurs.
isomsys := proc(s1,s2)
    if grconjsysp(stab(s1),stab(s2))
        then RETURN(true)
    else RETURN(false)
    fi;
end;

```

```

    fi;
end;
Test d'isomorphisme procédant par comparaison des types cyclique.
isomcl := proc(s1,s2)
    if grconjclp(stab(s1),stab(s2))
        then RETURN(true)
        else RETURN(false)
    fi;
end;

save ima,cyc,decomp,decomp_1,cycleMax,pctype,mctype,clConj,
indcard,cplpet,plpetCl,conj,clconjG,clconjSn,conjSG,
clconjSG,permconj,grconjsys,grconjsysp,grconjcl,grconjclp,
isomcl,isomsys,
‘‘.YEsp.’/Struct/grconj.m’;

```

A.9.4 Fichier derivee.

Calcul de la dérivée à partir du stabilisateur (formule de Yeh).

Utilise le fichier **isom**.

Retourne l'ensemble des orbites de H sur $\{1, 2, \dots, |H|\}$.

```

orbites := proc(K)
    local reste,orbs,classe,H;
    H:=convert(K,set); # Au cas ou ...
    reste:={$1..nops(op(1,H))};
    orbs:={};
    while reste <> {} do
        classe:=map('proc(p,reste) action(p,op(1,reste)) end',H,reste);
        orbs:=orbs union {classe};
        reste:=reste minus classe;
    od;
    RETURN(orbs);
end;

```

Plonge $p \in S_k$ dans S_n (où $k \leq n$).

```

complete := proc(p,n)
    local i;
    RETURN([op(p),$nops(p)+1..n])
end;
grcomplete:=proc(K,n)
    RETURN(map('proc(p,n) complete(p,n) end',K,n));
end;

```

Sous-fonction de grder qui plonge p , une permutation de $X \stackrel{\text{déf}}{=} \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{e\}$, dans S_n (où $n = \text{nops}(p) + 1$).
Note.: Si on écrit $a_1 < a_2 < \dots < a_{n-1}$ les éléments de X (où $<$ est l'ordre habituel sur \mathbb{N}), alors p est donné sous la forme d'une liste $[a_{i_1}, a_{i_2}, \dots, a_{i_{n-1}}]$ telle que $a_k \mapsto a_{i_k}$ (pour $k = 1, 2, \dots, n - 1$).

```

plonge := proc(p,e)
    local i;
    RETURN([$(`p[i]`, `i'=1..e-1), e, $(`p[i]`, `i'=e..(nops(p)))])
end;

```

Soit $e \in \{1, 2, \dots, n\}$ et $X = \{1, 2, \dots, n\} \setminus \{e\}$. Soit H un ensemble de permutations de X . La procédure suivante plonge H dans S_n .

grplonge := proc(H,n)

RETURN(map('proc(g,n) plonge(g,n) end', H,n))

end;

La permutation p doit fixer le point k , la procédure fait alors la projection de p dans le groupe des permutations de $\{1, 2, \dots, n\} \setminus \{k\}$.

projete := proc(p,k)

local i;

RETURN([\$(p[i],i=1..k-1),\$(p[i],i=k+1..nops(p))])

end;

grpjete := proc(H,n)

RETURN(map('proc(g,n) projete(g,n) end', H,n))

end;

Transforme un ensemble de permutations X d'un sous-ensemble de $\{1, 2, \dots, n\}$ en un ensemble de permutations de S_k (où $k=nops(X)$).

sym := proc(X)

RETURN(map('proc(p) permInd(op(p)) end', X))

end;

Retourne un ensemble de représentants d'une famille d'ensembles d'entiers (disjoints).

repre := proc(classes)

RETURN(map('proc(CL) max(op(CL)) end',classes))

end;

Donne la liste des stabilisateurs qui quotientent X^{n-1} dans la décomposition moléculaire de la dérivée de X^n/H . Utilise la formule de Yeh (voir [Ye1]). Le résultat produit par cette procédure est une liste dont les éléments sont des sous-groupes du groupe des permutations de $\{1, 2, \dots, n-1\}$. Il se peut qu'il y ait plusieurs groupes identiques ou conjugués dans cette liste. Le nombre de fois qu'apparaît K (à conjugaison près) donne sa multiplicité dans la décomposition moléculaire de $(X^n/H)'$.

grder := proc(K)

local n,H;

$H:=convert(K,\text{set});$ # Au cas où ...

$n:=nops(\text{op}(1,H));$

map('proc(e,n,H)

sym(grpjete(H intersect

grplonge(convert(permute(

RETURN(maconvert({\$(1..n)} minus { e },list)),set), e), e))

end',

convert(repre(orbites(H)),list), n,H))

end;

save orbites,complete,grcomplete,plonge,grplonge,projete,

grpjete,sym,repre,grder,

‘‘.YStr.’/derivee.m’;

A.9.5 Fichier genSG.

Pour engendrer des groupes de permutations.

On retrouve ici des procédures pour calculer le groupe de permutations engendré par un ensemble X de permutations. On retrouve aussi des procédures pour calculer des tables de sous-groupes et de dérivées.

Ces tables peuvent ensuite être sauvées pour utilisation ultérieure. On termine par des procédures pour déterminer à quelle classe de conjugaison appartient un sous-groupe de S_n (pour $1 \leq n \leq 7$). L'utilisé de ces dernières étant de déterminer à quelle espèce moléculaire appartient une structure en trouvant la classe de conjugaison de son stabilisateur.

Calcul de $\langle X \rangle$ avec une pile, où $X \in S_n$.

```
genSG := proc(X,n)
    local Ident,pile,H,sigma,gamma,i,Xn;
    Ident:=Id(n);
    Xn:=map('proc(p,n) complete(p,n) end',X,n);
    H:={Ident,op(Xn)};
    pile:=Xn;
    while pile<>[] do
        # On dépile.
        sigma:=op(1,pile);
        pile:=cdr(pile);
        for i from 1 to nops(Xn) do
            gamma:=complete(prod(sigma,op(i,Xn)),n);
            if not member(gamma,H)
                then
                    # On empile gamma.
                    pile:=[gamma,op(pile)];
                    H:=H union {gamma};
                fi;
            od;
        od;
    RETURN(H);
end;
```

Procédure pour engendrer des sous-groupes de S_n à partir d'une table de générateurs. Chaque élément $T[gen]$ est une liste de générateurs. genTabSG retourne une table dont l'élément $[gen]$ est la liste des permutations du sous-groupe $\langle T[gen] \rangle$. Toutes les permutations apparaissant dans cette table sont des listes de longueur n .

```
genTabSG:=proc(T,n)
    local tabPerms;
    map('proc(gen,tabPerm,T,n)
        tabPerm[op(gen)]:=genSG(T[op(gen)],n) end',
        [indices(T)],tabPerms,T,n);
    RETURN(op(tabPerms));
end;
```

genTabder retourne une table dont l'élément $[gen]$ est la liste des sous-groupes dans la décomposition "moléculaire" de la dérivée de l'espèces dont le stabilisateur est $\langle T[gen] \rangle$. Chaque élément $T[gen]$ doit être une liste de générateurs.

```
genTabder:=proc(T,n)
    local tabder;
    map('proc(gen,tabder,T,n)
        tabder[op(gen)]:=grder(genSG(T[op(gen)]),n) end',
        [indices(T)],tabder,T,n);
    RETURN(op(tabder));
end;
```

Cette procédure retourne le nom de la classe de conjugaison de K parmi les sous-groupes de tSG . Les indices de tSG sont les nom de classes de conjugaison. Tous les sous-groupes de tSG doivent être plongés dans S_n , pour un certain n , en d'autres mots, toutes les permutations qui apparaissent sont de longueur n .

classe:=proc(K,tSG)

```

local memecard,i;
# op(1,tabcardi[cl]) contiendra la cardinalité d'un représentant de la classe cl.
# op(2,tabcardi[cl]) contiendra la cardinalité de l'ensemble sur lequel agit
# le représentant de la classe cl.
tabcardi:=map('proc(cl) [nops(cl),nops(op(1,cl))] end',
               op(tSG));
# memecard contiendra les indices des classes dont les sous-groupes ont
# la même cardinalité que  $K$  et agissent sur le même nombre de points.
memecard:=map('proc(ind,k,n,T)
                if (T[op(ind)][1]=k and T[op(ind)][2]=n)
                   then ind; fi;
                end',
               [indices(tabcardi)],
               nops(K),nops(op(1,K)),tabcardi);
i:=1;
while i<=nops(memecard) do
  if grconjlp(K,tSG[op(memecard[i])])
    then RETURN(memecard[i]) fi;
  i:=i+1;
od;
ERROR('classe inconnue...');
end;

save genSG,genTabSG,genTabder,genTabder2,carditab,
      classe,classes,
      ".YStr./genSG.m";
```

A.9.6 Fichier Yeh.

Critère de Yeh.

Retourne le sous-ensemble qui suit $A = [A[1], A[2], \dots]$ ($A \subset \mathbb{N}$ est fini) dans l'ordre lexicographique ($A[i]$ est un entier).

choixsuiv:=proc(A,n)

Cette procédure détermine si X^n/H est une espèce atomique en utilisant le critère de Yeh. La variable $genH$ doit contenir une liste de permutation qui engendent H .

critYeh:=proc($H,genH$)

```

local A,Q,k,i,OH,n;
n:=nops(op(1,H));
OH:=convert(orbites(H),list);
for k from 1 to nops(OH)-1 do
  Q:=uniOrb([$1..k],OH);
  A:=choixsuiv([$1..k],nops(OH));
  while A||[$1..k] do
    if stable(genH,Q) and ext(genH,Q,H)
```

```

# Si la ligne ci-dessus est vraie, H se factorise
# et Q est l'un des ensembles. Le groupe facteur est
# obtenu en prenant la restriction de genH à Q.
then RETURN(Q) fi;
Q:=uniOrb(A,OH);
A:=choixsuiv(A,nops(OH));
od;
od;
RETURN({}); # Dans ce cas, le groupe ne se factorise pas.
end;

```

Orbite d'une permutation donnée sous la forme d'une liste.
`orbperm:=proc(g)`

Fait l'union d'un certain nombre de sous-ensembles (des orbites) contenus dans une liste O . La variable A est une liste d'indice qui détermine quels sous-ensemble on réunit.

```

uniOrb:=proc(A,O)
convert(map('proc(i,O) op(O[i]) end',A,O),set); end;
```

Cette procédure retourne true si les éléments de gen (une liste de générateurs) sont tels que l'extension de leur restriction à Q est dans H . On suppose que les orbites des éléments de gen est un raffinement de Q .

```

ext:=proc(gen,Q,H)
local i;
for i from 1 to nops(gen) do
if not member(convert(map('proc(c,Q)
if op(c)=(op(c) intersect Q)
then c fi
end',
decomp(gen[i]),Q),
permlist,nops(op(1,H))),H)
then RETURN(false) fi; od;
RETURN(true);
end;
```

Vérifie si un ensemble $U \subset \{1, 2, \dots, n\}$ est stable sous X , un ensemble de permutations de S_n .

```

stable := proc(X,U)
local V;
V:=map('proc(u,X) op(map('proc(x,u) x[u] end',X,u)) end',U,X);
if V = (U intersect V) then RETURN(true) else RETURN(false) fi;
end;
```

A.9.7 Fichier divers.

Procédures diverses.

Utilise le fichier `grconj`.

Détermine si l'ensemble de permutations X fixe s .

```

fixep := proc(X,s)
if s=convert(map('proc(x,s) action(x,s) end',X,s),set)
then RETURN(true)
else RETURN(false)
fi;
end;
save fixep, ".YStr./fixep.m";
```

Fait le produit HK .

```
grprod := proc(H,K)
    RETURN(map('proc (k,H) op(map('proc(h,k) prod(h,k) end',
        convert(H,list),k)) end',
        maconvert(K,list),H))
    convert("set)
end;
save grprod,“.YStr./grprod.m“;
```

H est-il normal dans G ?

```
isn:=proc(H,G)
    local i,X;
    if not H = (H intersect G) then RETURN(false) fi;
    X:=convert(G minus H,list);
    for i from 1 to nops(X) do
        if H<>(H intersect conjSG(H,X[i])) then RETURN(false) fi; od;
    RETURN(true);
end;
save isn,“.YStr./isn.m“;
```

Détermine si le groupe $\langle X, Y \rangle$ est produit semi-direct de $\langle X \rangle$ par $\langle Y \rangle$ (la méthode utilisée est celle du lemme reflemmesemidir). Note: X et Y doivent être des ensembles disjoints de permutations.

```
semidirp := proc(X,Y)
    local K,n,x,y;
    n:=nops(op(1,X));
    K:=genSG(convert(X,list),n);
    if K intersect genSG(convert(Y,list),n) <> Id(n)
        then RETURN(false) fi;
    for x in X do
        for y in Y do
            if not member(conj(x,y),K)
                then RETURN(false)fi od;od;
    RETURN(true)
end;
save semidirp,“.YStr./semidirp.m“;
```

A.10 Appendice: Procédures pour traiter les équations différentielles

A.10.1 Fichier eqDiff.

On retrouve ici les outils de base pour résoudre des équations différentielles dans $Q[[\mathcal{A}]]$. Ceux-ci permettent de manipuler des espèces polynomiale dans $Q[[\mathcal{A}]]$. Les espèces moléculaires sont définies par le biais de procédures. Une espèce M vivant sur cardinalité k est représentée par la procédure qui a la forme suivante:

```
Mk := proc(X) <corps> end;
```

Cette façon de procéder permet de "lire" la cardinalité de M dans son nom (voir les procédures card et restri. De plus, cette méthode permet d'implémenter la substitution pour les petites cardinalités. Ceci permet aussi de travailler avec certaines espèces sans les définir s'il n'est pas nécessaire de faire la substitution dans celles-ci. La dérivée d'une espèce moléculaire M se fait en déclarant de façon usuelle une procédure 'diff/M'.

Note: 1) Certaines procédures permettent l'extraction de coefficients de monômes (et aussi de polynômes), les cefficients sont ici les entités de type numeric et indexed. 2) Ci-dessous, par "molécule" on entend un monôme avec coefficient 1.

On utilise ces deux indéterminées.

```
X:='X';
Y:='Y';
```

Coefficient du binôme redénini pour permettre $k < 0$.

```
bin := proc(n,k)
```

Extraction du coefficient d'un monôme.

```
exCoMon:=proc(m)
```

```
local mon;
mon:=m;
if type(m,numeric,indexed) then RETURN(m) fi;
if type(m,'^') then mon:=[ m ] fi;
map('proc(q)
    if type(q,{numeric,indexed})
        then q
        elif (type(q,'^') and type(op(1,q),indexed))
            then q fi
    end', [op(mon)]);
RETURN(lprod("))
```

```
end;
```

Extraction de la molécule.

```
exMolMon := proc(mon)
```

```
    RETURN(mon/exCoMon(mon))
end;
```

Autre forme de l'espèce singleton.

```
E1 := proc(X) X end;
```

Substitution d'espèces moléculaires dans E_2 . Z est un polynôme dont les monômes sont des produits et composition d'espèces moléculaires.

E2 := proc(Z)

Les procédures suivantes servent à l'extraction des coefficients d'un polynôme dont les variables sont des espèces. Les coefficients doivent avoir pour type indexed. Le polynôme doit être une somme de monômes de la forme $a[i]*Mi(X,Y,...)$ où $a[i]$ est le coefficient (possiblement =1) et $Mi(X,Y,...)$ est une espèce moléculaire.

La procédure suivante effectue l'extraction les molécules de poly. IMP.: poly doit être "filtré" par la proc. "expand".

mole := proc(poly)

```
local p;
if type(poly, numeric,indexed )) then RETURN(1) fi;
if type(poly,'^')
    then if type((op(1,poly)), { numeric,indexed })
        then RETURN(1)
    else RETURN(poly) fi fi;
if not type(poly,'+') then p:=[poly] else p:=poly fi;
RETURN(map('exMolMon',op(p)))
```

end;

Retourne l'ensemble des atomes formant un monôme. Dans le contexte présent, un atome est un appel de procédure. Par exemple dans

$$A(X)^2*B(C(X))*D(X),$$

les atomes sont: A(X), B(C(X)), D(X).

Note: 1) la variable mon doit être sans coefficient i.e. exCoMon(mon) retourne 1. 2) mon doit être moléculaire ($mon=M(F1+F2)$ ne l'est pas). Il faut donc que la procédure qui définit l'espèce moléculaire soit évaluée totalement.

atom := proc(p)

```
local poly;
poly:=expand(p);
if type(poly,{ indexed, numeric}) then RETURN({1}) fi;
RETURN(map('atomMon',mole(poly)))
```

end;

Sous-procédure de atom.

atomMon := proc(mon)

```
if type(mon,function) then RETURN(mon) fi;
if type(mon,'^')
    then RETURN(op(1, mon))
    else RETURN(op(map('proc(q)
        if type(q,'^') then op(1,q) else(q)fi end',
        {op(mon)})))
fi
```

end;

Enlève les nombres (type numeric) d'une liste ou d'un ensemble.

filNum := proc(l)

Retourne les coefficients. Il faut que p soit "filtré" par la procédure expand.

coeffM := proc(p)

```
RETURN({coeffs(expand(p),filNum(atom(p))))}
end;
```

```
save X,Y,bin,exCoMon,exMolMon,E1,E2,
      mole,atom,atomMon,filNum,coeffM,
      ".EQD./eqDiff.m";
```

A.10.2 Fichier indices.

La principale procédure de ce fichier est `ind` qui extrait l'indice d'un monôme composé de variables de forme `AAA``nnn` où `AAA` est une chaîne de caractères alphabétiques et `nnn` un nombre (ne débutant pas par 0). Par exemple `ind(E23^2*C4)` retourne `23,4`.

Le corps des procédures n'est pas décrit, les méthodes utilisées n'étant pas reliées directement aux travaux de la thèse.

Table de conversion des caractères en entiers.

```
t_convCarEnt:=table(['0'=0,'1'=1,'2'=2,'3'=3,'4'=4,
                     '5'=5,'6'=6,'7'=7,'8'=8,'9'=9]);
```

Retourne les indices des variables d'un polynôme. Par ex.: `ind(E3^2)` retourne `3`, `ind(ab21+a34+a34)` retourne `21,34,34`.

`ind:= proc(poly)`

Retourne l'indice `nnn` d'une chaîne de la forme `aaannn`, où `nnn` est un entier. Note: Si `var` le contient pas de caractère 0–9, 0 est retourné

`indN := proc(var)`

Transforme en entier un caractère.

`convCarEnt := proc(car)`

Conversion d'une chaîne en entier.

`convEnt := proc()`

`save t_convCarEnt,ind,indN,convCarEnt,convEnt,`

`".EQD./indices.m";`

A.10.3 Fichier cardi.

Cardinalité des ensemble sous-jacent à des espèces.

Cardinalité de l'ensemble sous-jacent à une molécule (coefficient =1).

`cardiMol := proc(mol)`

```
if type(mol, { numeric, indexed })
  then RETURN(0) fi;
# Les singltons sont X, Y, Z, T, W, U ou V
if member(mol,{X,Y,Z,T,W,U,V})
  then RETURN(1) fi;
if type(mol,'^')
  then RETURN(cardiMol(op(1,mol))*op(2,mol)) fi;
if type(mol,function)
  then RETURN(ind(op(0,mol))*cardiMol(op(1,mol))) fi;
if type(mol,'*')
  then RETURN(lsum(map('cardiMol',[op(mol)]))) fi;
end;
cardiMon:=proc(mon)
if mon=0
  then RETURN(0)
else RETURN(cardiMol(exMolMon(mon)))
fi;
```

```

    fi;
end;
Cardinalité d'une espèce polynomiale.
cardi:=proc(poly)
    local p;
    if type(poly,'+') then p:=poly else p:=[poly] fi;
    RETURN(max(op(map('cardiMon',[op(p)]))))
end;

Retourne la restriction d'un polynôme à la cardinalité  $n$ . Prend trois arguments: un polynôme, une valeur  $n$  et enfin un troisième argument optionnel qui est un des caractères suivants: '=' ou '<=' qui détermine quel termes seront filtrés. Si on ne fournit pas de troisième argument, c'est '<=' qui est utilisé.
restri := proc()
    local Q,p;
    p:=args[1];
    if p=0 then RETURN(0) fi;
    # On suppose que le troisième argument est absent ou est '<='.
    if not type(p,'+') then p:=[p] fi;
    if (nargs=3 and args[3]='=') then
        Q:=map('proc(mon,n) if cardimon(mon)=n
                then RETURN(mon) fi end',
                [op(expand(p))],args[2])
    else
        Q:=map('proc(mon,n) if cardimon(mon)<=n
                then RETURN(mon) fi end',
                [op(expand(p))],args[2])
    fi;
    RETURN(lsum(Q))
end;

save cardi,cardiMon,cardiMol,restri,
      '.EQD.'/cardi.m';

```

A.10.4 Fichier params.

Manipulation d'équations avec coefficients indéterminés.

Les procédures ici présentes ont pour but d'assigner des valeurs aux paramètres de solutions d'équations algébriques à coefficients indéterminés trouvées avec solve. Les variables doivent être les éléments d'un même tableau (ou d'une matrice) (elles doivent être de type indexed).

unap('a') efface les valeurs des "variables" $a[]$.

```

unap := proc(X)
    assign(X,table());
    RETURN()
end;

```

Retourne les paramètres d'un ensemble solution.
par := proc(sol)

```

RETURN(convert(map('proc(eq)
    if op(1,eq) = op(2,eq) then op(1,eq) fi
    end',sol),
list))

end;
Assigne les valeurs vals (une liste) aux variables contenues dans la liste lparams. Note.: lparams doit
contenir des noms qui ne sont pas ne doivent pas avoir de valeur au départ.
lAssign := proc(lparams,vals)
local i;
for i from 1 to nops(lparams) do
    eval(subs('xxx=lparams[i]',assign(xxx=vals[i])));
od;
RETURN(vals);
end;

ap donne des valeurs aux paramètres d'une solution. IMP.: elle utilise la variable globale solut.
ap:=proc()
local i,params;
unap(args[1]);
params:=par(solut);
assign(solut);
lAssign(params,[${'args[i]',i=2..nargs},0$(nops(params)-(nargs-1))]);
RETURN();
end;

save unap,par,lAssign,ap,
    ".EQD./params.m";

```

A.10.5 Fichier intc.

Intégrale dans $\mathbb{N}[[\mathcal{A}]]$ par coefficients indéterminés.

tD est une variable globale.

Nsolve sert à résoudre dans $\mathbb{N} \setminus \{0\}$ des équations affines. Ces équations sont de la forme $\sum(C[i,j]*X.i - u[j], i=0..k)$ pour $j=0,1,\dots,m$ avec $C[i,j]$ et $u[j]$ dans $\mathbb{N} \setminus \{0\}$. Le nombre de solutions est toujours fini.

intc sert à intégrer une espèce concentrée sur une cardinalité. L'intégrant doit dépendre de X . Ex.
 $\text{intc}(2*X*C3(X))=\{\}$.

Création d'une table de dérivées à partir d'une liste d'espèces moléculaires. *mols* est une liste de molécules. La table produite est indiquée 1) par la cardinalité, 2) par l'espèce. Ex. $T[3][X^*E2(X)]$ contient $E2(X)+X^2$.

```

tDer:=proc(mols)
local T;
T:=table();
map('proc(m,T) T[cardi(m)][m]:=diff(m,X) end',mols,T);
RETURN(op(T))
end;

```

La table tD est globale, elle contient les dérivées des espèces moléculaires. $molecules$ est défini dans ja-
COnj, c'est la liste des espèces moléculaires.

```
# tD:=tDer(molecules);
# save tD, ".EQD./Calculs/tD.m";
read ".EQD./Calculs/tD.m";
```

Vérifie l'inclusion ensembliste de A dans B.

```
inclus :=proc(A,B) if A=(A intersect B) then true else false fi end;
```

Intrégrale de P . Noter que P doit vivre sur une et une seule cardinalité.

```
intc:=proc(P)
```

```
local m,prim,n,Eq,sol;
if P=0 then RETURN(1) fi;
unap('C');
m:=mole(P);
n:=cardi(P)+1;
# Les seules espèces à considérer pour intégrer sont
# celles dont chaque monômes de  $P$  apparaît dans la dérivée.
prim:=map('proc(ind,m,T)
           if inclus(mole(T[op(ind)]),m)
           then op(ind) fi end',
           [indices(tD[n])],m,tD[n]);
prim:=map('proc(M,P,T)if plgco(P,T[M])then M fi end',
           prim,P,tD[n]);
```

```
if prim<>[]
```

```
then
```

```
Eq:=formeEq(prim);
sol:=Nsolve(convert(coeffM(diff(Eq,X)-P),list));
RETURN(map('proc(vals,vars,Eq) local i;
           subs($(vars[i] = vals[i],i = 1 .. nops(vals)), Eq) end',
           sol[2],sol[1],Eq))
```

```
else RETURN({})
```

```
fi
```

```
end;
```

Procédure auxiliaire de intc. On suppose que mole(Q) est inclus dans mole(P). Vérifie si les coefficients des monômes de Q sont \leq aux coefficients correspondant dans P . Si un seul des coefficient est $>$, Q n'a pas à être utilisé pour intégrer par coefficient indéterminés. P et Q doivent vivre sur la même cardinalité.

```
plgco:=proc(P,Q)
```

```
# Si  $P$  et  $Q$  sont des entiers (i.e. des multiples
```

```
# de l'espèce "1") on traite le cas à part.
```

```
if type(P,numeric)
```

```
then if P>=Q then RETURN(true) else RETURN(false) fi fi;
```

```
if =map('proc(N,P,Q)
```

```
if coeff(Q,N)>coeff(P,N)
```

```
then N fi end',
```

```
mole(P),P,Q)
```

```
then RETURN(true)
```

```
else RETURN(false)
```

```
fi
```

```
end;
```

Procédure auxiliaire de `intc`. Forme une équation à coefficient indéterminés avec les variables contenues dans `vars`. Les indéterminées sont $C[1]$, $C[2]$, etc.

```
formeEq:=proc(vars)
```

```
    local i;
```

```
    RETURN(sum('C[i]*vars[i]',i=1..nops(vars)))
```

```
end;
```

Retourne les valeurs possibles de X dans l'équation $E = 0$. E doit être de la forme $a * X + b * Y + \dots - u$ où a, b, \dots, X, Y, \dots sont soit indéterminées, soit des entiers ≥ 0 . Si E est de la forme $a * X - u$, et $u \bmod a \neq 0$ alors on retourne $\{\}$. Si X ne n'apparaît pas dans E , on ne retourne 0 (ce qui signifie que X est libre).

```
valposs:=proc(X,E)
```

```
    if not member(X,indets(E)) then RETURN(0) fi;
```

```
    #  $X$  est donc dans l'expression  $E$ .
```

```
    if ldegree(E)=1 then RETURN({0}) fi;
```

```
    if tcoeff(E)>1 then RETURN(0) fi;
```

```
    if {X}=indets(E)
```

```
        then if ((tcoeff(E) mod coeff(E,X))<>0)
```

```
            then RETURN({})
```

```
            else RETURN(-tcoeff(E)/coeff(E,X))
```

```
        fi
```

```
    fi;
```

```
    RETURN($0..trunc(-tcoeff(E)/coeff(E,X)))
```

```
end;
```

Valeurs possibles de X pour les expressions de la liste lE . On fait l'intersection des valeurs possibles pour chacune des expressions. Si une d'elle est incompatible, on ne retourne rien).

```
lvalposs:=proc(X,lE)
```

```
    local V,i,j,vals;
```

```
    # Si un des éléments de  $lE$  est un nombre  $<>0$ , le
```

```
    # système n'a pas de solution.
```

```
    if []<>select('proc(x) if (type(x,numERIC) and x<>0)
                    then true else false fi
                    end',lE)
```

```
        then RETURN({})
```

```
        fi;
```

```
    if not member(X,indets(lE))
```

```
        # Dans ce cas  $X$  est libre dans  $lE$ .
```

```
        then RETURN(0)
```

```
        fi;
```

```
    # On est ici certain que  $X$  n'est pas libre dans  $lE$ ,
```

```
    # i.e. une expression de  $lE$  "contient"  $X$ . On va la chercher.
```

```
j:=1;
```

```
while (j<nops(lE) and (not member(X,indets(lE[j])))) do
```

```
    j:=j+1 od;
```

```
    #  $j$  est la première position où  $X$  apparaît.
```

```
vals:=valposs(X,lE[j]);
```

```
if vals={} then RETURN(vals) fi;
```

```
for i from j+1 to nops(lE) do
```

```
    V:=valposs(X,lE[i]);
```

```
    if V={} then
```

```

then RETURN(V)
# Si  $V = 0$ , la variable est libre dans  $lE[i]$ .
elif  $V <> 0$ 
    then  $vals:=V$  intersect  $vals$ ;
fi;
od;
RETURN(vals);
end;

Donne la valeur  $var$  à la variable  $X$  de la liste  $vars$ .
fixevar:=proc( $X, var, vars$ )
    RETURN(subs( $X=var, vars$ ))
end;

Trouve les solutions en  $X_i$  dans  $N$  aux équations  $E[i] = 0$ , où  $E[i]$  est de la forme  $\text{sum}(A[i,j] * X[i] - U[i], i = 0..n_i), j = 0..k$  et  $A[i,j]$  et  $U[i]$  sont des entiers naturels  $> 0$ . On retourne une liste de deux éléments dont le premier est une liste ordonnée des indéterminées et la deuxième l'ensemble (possiblement vide) des valeurs possibles.
Nsolve:=proc( $E$ )
    local indeter;
    indeter:=convert(indets( $E$ ),list);
    if lvalposs(indeter[1], $E$ )=[indeter,]
        then RETURN({})
    else RETURN([indeter,Nsolve_1( $E,indeter$ )])
    fi;
end;

 $vars$  contient la liste des variables des expressions contenues dans  $E$ . Certaines de variables peuvent avoir reçue une valeur. Dans ce cas la liste contient cette valeur à la position qui correspond à la variable. Par exemple on peut avoir  $vars=[1,3,2,c[1].c[3]]$ .
Nsolve_1:=proc( $E, vars$ )
    local indeter, vp;
    Indétermines dans la liste  $vars$ .
    indeter:=convert(indets( $vars$ ),list);
    # S'il n'y a qu'une seule indéterminée et une seule expression, la solution
    # est celle retournée par la ligne suivante.
    if (nops(indeter)=1) and (nops(lE)=1)
        then
            vp:=lvalposs(indeter[1], $E$ );
            if vp<>{}
                # Dans ce cas, pas de solution.
                then RETURN(fixevar(indeter[1],op(vp),vars)) fi fi;
            # Si on ne peut résoudre pour l'indéterminée
            # indeter[1], alors il n'y a pas de solution.
            if lvalposs(indeter[1], $E$ )<>{}
                then
                    # Pour chaque valeur  $v$  possible de indeter[1].
                    # on tente de résoudre le système obtenu en posant
                    # indeter[1]:=v.
                    op(map('proc(v,X,E,vars)
                        Nsolve_1(fixevar(X,v,E),fixevar(X,v,vars)) end',
                        lvalposs(indeter[1], $E$ ),indeter[1], $E,vars$ ))

```

```

else RETURN()
fi;
end;

save tDer,inclus,intc,plgco,formeEq,valposs,
lvalposs,fixevar,Nsolve,Nsolve_1,
".EQD.'/intc.m';

```

A.10.6 Fichier decArbo.

Calcul de la décomposition moléculaire de l'espèces des arborescences.

```

exp_mon:=proc(mon,n)
local i,S,P; option remember;
S:=1+sum('E.i)(exMolMon(mon))',i=1..trunc(n/cardi(mon)));
P:=1;
for i from 1 to exCoMon(mon) do
P:=restri(expand(P*S),n);
od;
RETURN(P) end;

```

Retourne la décomposition moléculaire de l'espèces des arborescences jusqu'au degré n .

```

Arbo:=proc(n)
local lmon,i,P; option remember;
if n=0 then RETURN(0) fi;
if n=1 then RETURN(X) fi;
if type(Arbo(n-1),'+') then
lmon:=convert(Arbo(n-1),list)
else lmon:=[Arbo(n-1)]
fi;
P:=X;
for i from 1 to nops(lmon) do
P:=restri(expand(P*restri(expand(exp_mon(lmon[i],n-1)),n-1)),n);
od;
RETURN(P) end;

```

save decArbo,exp_mon, '/decArbo.m';