# ARBRES, ARBORESCENCES ET RACINES CARRÉES SYMÉTRIQUES.

PIERRE BOUCHARD, YVES CHIRICOTA, ET GILBERT LABELLE

31 mars 1992

## 1. Introduction

Soit $\mathbf{C}$ le corps des nombres complexes et $\mathcal{A}$ l'ensemble des espèces atomiques (à isomorphisme près). Étant 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 1.1.** *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 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.

## 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 $\leq 4$:

$$\begin{aligned} 1 < X < E_2 < X^2 < E_3 < C_3 < XE_2 < X^3 \\ < E_4 < E_4^{\pm} < E_2(E_2) < XE_3 < E_2^2 \\ < P_4^{\mathrm{bic}} < C_4 < XC_3 < X^2E_2 < E_2(X^2) < X^4. \end{aligned}$$

Nous noterons $\mathcal{M}$ l'ensemble des espèces moléculaires muni d'un ordre total qui prolonge l'ordre ci-dessus.

Nous utiliserons la proposition suivante qui est une généralisation d'une formule de substitution de Yeh [15],[16] au cas où l'espèce substituée est à terme constant quelconque.

**Proposition 2.1.** *Soit* $G = \sum_{M \in \mathcal{M}} g_M M$, *alors*

$$E_2(G) = \sum_{M \in \mathcal{M}} g_M E_2(M) + \sum_{M \in \mathcal{M}} \binom{2}{g_M} M^2 + \sum_{\substack{P,Q \in \mathcal{M} \\ P<Q}} g_P g_Q PQ. \tag{1}$$

Notons que puisque l'espèce $E_2(X)$ est polynomiale, il est possible d'y substituer une espèce à coefficient constant non nul [7]. En particulier, on a que $E_2(1) = 1$.

## 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 $F \in \mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$.

**Proposition 3.1.** *soit* $F \in \mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$ *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* $\mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$ *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* $\mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$ *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* $\mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$ *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* $\mathbb{C}[[\mathcal{A}]]$ *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 2.1, on trouve

$$\begin{aligned}
E_2(G) &= E_2\Big(\sum_{N \in \mathcal{M}} g_N N\Big) \\
&= \sum_{N \in \mathcal{M}} g_N E_2(N) + \sum_{N \in \mathcal{M}} \binom{g_N}{2} N^2 + \sum_{\substack{P,Q \in \mathcal{M} \\ P<Q}} g_P g_Q PQ \\
&= g_1 + g_X E_2(X) + g_{E_2} E_2(E_2(X)) + g_{X^2} E_2(X^2) + \ldots \\
&\quad + \binom{g_1}{2} + \binom{g_X}{2} X^2 + \binom{g_{E_2(X)}}{2} E_2(X)^2 + \binom{g_{X^2}}{2} X^4 + \ldots \\
&\quad + g_1 g_X X + g_1 g_{X^2} X^2 + g_1 g_{E_2} E_2(X) + \ldots \\
&\quad + g_X g_{E_2} X E_2(X) + g_X g_{X^2} X^3 + \ldots \\
&\quad + \ldots \\
&= \sum_{M \in \mathcal{M}} f_M M \qquad (2)
\end{aligned}$$

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 (2) 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 $g_X = f_X/g_1$.

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 2, 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 celà d'isoler $g_M$ ci-dessus. On trouve

$$g_M = \frac{\phi_1}{g_1},$$

où $\phi_1$ 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 $\phi_2$ 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 (2) nous permet de conclure que

$$g_M = f_{E_2(M)}, \tag{3}$$

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 3, d'autres relations possiblement contradictoires avec 3, 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

$$-1 - X - E_2(X) + X^2 + XE_2(X) - X^3 - E_2(E_2(X))$$
$$+E_2(X)^2 - 2X^2E_2(X) + E_2(X^2) + \cdots .$$

## 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 [14] et Leroux-Miloudi [3] énoncée plus bas. Notons $\mathbb{A}$ l'espèce des arbres et $A$ celle des arborescences. Les premiers termes de la décomposition moléculaire de l'espèce des arbres sont les suivants

$$\mathbb{A} = X + E_2 + XE_2 + E_2(X^2) + XE_3 + XE_2(X^2) + X^3E_2 + XE_4 + \cdots .$$

L'espèce des arborescences quant à elle se décompose comme suit:

$$A = X + X^2 + X^3 + XE_2 + 2X^4 + X^2E_2 + XE_3 + \cdots .$$

**Définition 4.1.** *Soit $F \in \mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$. 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 4.2.** *On a évidemment $A = \mathbb{A}^\bullet$ puisque les arborescences sont précisément les arbres pointés.*

On trouvera la démonstration de la formule suivante dans [14],[3]. Elle a été étendue par G. Labelle dans [10] au cas des arborescences et arbres enrichis (voir aussi [11],[8]).

**Proposition 4.3.** *On a l'identité suivante (formule de dissymétrie pour les arbres):*

$$\mathbb{A} + A^2 = A + E_2(A). \tag{4}$$

∎

En fait, dans $\mathbf{C}[[\mathcal{A}]]$, on peut écrire cette formule sous une forme équivalente comme le dit la proposition suivante.

**Proposition 4.4.** *L'identité (4) est équivalente à*

$$E_2(1 - A) = 1 - \mathbb{A}. \tag{5}$$

*En d'autres termes, l'espèce (virtuelle) $1 - A$ est une racine carrée symétrique de l'espèce $1 - \mathbb{A}$. Plus explicitement, on peut écrire*

$$1 - A \in \sqrt{1 - \mathbb{A}}^{(S)}.$$

**Démonstration:** En utilisant la proposition 2.1, on a que

$$E_2(1 - A) = 1 - (A - A^2 + E_2(A)),$$

donc, en utilisant (4), on trouve

$$E_2(1 - A) = 1 - \mathbb{A}.$$

∎

**Remarque 4.5.** *Notons que l'espèce $1-\mathbb{A}$ 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:*

$$-2 + \frac{1}{2}X + \frac{3}{4}E_2(X) + \frac{1}{16}X^2 + \cdots.$$

*On ne connaît pas encore d'interprétation combinatoire évidente pour cette racine.*

**Remarque 4.6.** *La proposition 4.4 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 4.7.** *On a $A = \mathbb{A}^\bullet = X\mathbb{A}'$ et $A = XE(A)$. D'où $\mathbb{A}' = E(A)$. Il s'en suit que $\mathbb{A} \in \int E(A)$, ou encore que $\mathbb{A} = \int_J E(A) + W$ où $W$ est tel que $W' = 0$ (voir [2]) où $\int_J$ désigne l'intégrale virtuelle de Joyal [5]. On a donc d'une part,*

$$\begin{aligned}
\mathbb{A} &= \int_J E(A) + W \\
&= XE(A) - E_2(X)E(A)' + E_3(X)E(A)'' - E_4(X)E(A)''' + \cdots + W \\
&= A - E_2(X)E(A)' + E_3(X)E(A)'' - E_4(X)E(A)''' + \cdots + W.
\end{aligned}$$

*D'autre part en utilisant (4), on trouve que*

$$W = E_2(A) - A^2 + E_2(X)E(A)' - E_3(X)E(A)'' + E_4(X)E(A)''' + \cdots.$$

*On vérifiera que l'on a bien $W' = 0$.* ∎

## 5. CONCLUSION

Il est possible d'écrire des formules du type (1) pour les espèces $E_n$ et $C_n$ ($n = 3, 4, 5, \cdots$) (cf [11]). 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 $\sqrt[n]{1-\mathbb{A}}^{(S)}$ ou de $\sqrt[n]{1-\mathbb{A}}^{(C)}$ 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 a analyser ces types de problèmes.

## BIBLIOGRAPHIE


1. Yves Chiricota, *Classification des espèces moléculaires de degré 6 et 7*, Rapport de recherche du département de mathématiques et d'informatique.
2. Yves Chiricota et Gilbert Labelle, *Familles de solutions combinatoires de l'équation différentielle $y' = 1 + y^2$, $y(0) = 0$, et d'équations différentielles autonomes*, À paraître dans Discrete Mathematics, North-Holland 19 pages.
3. Pierre Leroux et Brahim Miloudi, *Généralisations de la formule d'Otter*, À paraître dans les Annales des sciences mathématiques du Québec, 1991.
4. André Joyal, *Une théorie combinatoire des séries formelles*, Advances in Mathematics 42 (1981), 1–82.
5. ———, *Calcul intégral combinatoire et homologie des groupes symétriques*, Comptes rendus mathématiques de l'Academie des sciences du Canada **VII** (1985), no. 6, 337–342.
6. ———, *Règle des signes en algèbre combinatoire*, Comptes rendus mathématiques de l'Academie des sciences du Canada **VII** (1985), 285–290.
7. ———, *Foncteurs analytiques et espèces de structures*, In Labelle et Leroux [12], pp. 126–159.
8. Gilbert Labelle, *Sur la symétrie et l'asymétrie des structures combinatoires*, Actes de Colloque, LaBRI, Université de Bordeaux I, Maylis Delest, Gérard Jacob et Pierre Leroux eds., 3–19.
9. ———, *On combinatorial differential equations*, Journal of Mathematical Analysis and Applications **113** (1986), no. 2, 344–381.
10. ———, *Counting asymmetric enriched trees*, À paraître dans Journal of Symbolic Computation, 36 pages, 1991.
11. ———, *On asymmetric structures*, À paraître dans Discrete Mathematics, North-Holland 30 pages, 1991.
12. Gilbert Labelle et Pierre Leroux, eds., , Lecture Notes in Mathematics, no. 1234, Montréal, Québec, 1986, Université du Québec à Montréal, 1985, Springer-Verlag, Berlin.
13. Jacques Labelle, *Applications diverses de la théorie combinatoire des espèces de structures*, Annales des sciences mathématiques du Québec **7** (1983), no. 1, 59–94.
14. Pierre Leroux, *Methoden der Anzahlbestimmung für einige Klassen von Graphen*, Bayreuther Mathematische Schriften (1988), 1–36, Heft 26.
15. Yeong-Nan Yeh, *On the combinatorial species of Joyal*, Ph.D. thesis, State University of New-York at Buffalo, 1985.
16. ———, *The calculus of virtual species and $\mathbb{K}$-species*, In Labelle et Leroux [12], pp. 351–369.


DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET D'INFORMATIQUE, UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL (UQAM), CASE POSTALE 8888, SUCCURSALE A, MONTRÉAL (QUÉBEC), CANADA H3C 3P8